Bootcamp Data Science
Zajęcia 3

Przemysław Spurek

Regresja

czyli znamy przykładowe wartości (x_i, y_i),
ktoś nam podaje nowy punkt x_0
i
chcemy przewidzieć wartość y_0.

scikit-learn

`scikit-learn` jest prawdopodobnie najbardziej zaawansowanym pakietem przeznaczonym do nauczania maszynowego, który jest open source (`http://scikit-learn.org`). Zapewnia proste i wydajne narzędzia do wyszukiwania i analizy danych, obejmujące metody zarówno nadzorowane, jak i nienadzorowane.

Zadanie

Wykonajmy zadanie z poprzedniego zestawu w `scikit-learn`.

`https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D11_Z01.ipynb`

scikit-learn

Zadanie

Wykonajmy zadanie z poprzedniego zestawu (dane "Region Alcohol Tobacco") w `scikit-learn`.

`https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D11_Z02.ipynb`

bias-variance tradeoff (bias-variance dilemma)

Dla nauczonego modelu istnieje prawdziwa średnia wartość funkcji kosztu L. Chcemy, aby estymator zwrócił właśnie tę wartość dla dowolnych danych D. Niestety estymacja będzie różniła się od wartości prawdziwej, a błąd ma trzy składniki:

bias-variance tradeoff (bias-variance dilemma)

Dla nauczonego modelu istnieje prawdziwa średnia wartość funkcji kosztu L. Chcemy, aby estymator zwrócił właśnie tę wartość dla dowolnych danych D. Niestety estymacja będzie różniła się od wartości prawdziwej, a błąd ma trzy składniki:

- **bias** - jeśli dla różnych D estymator średnio estymuje nieprawdziwą wartość całkowitego kosztu, to odległość tej średniej od prawdziwego całkowitego kosztu nazywana jest biasem,

bias-variance tradeoff (bias-variance dilemma)

Dla nauczonego modelu istnieje prawdziwa średnia wartość funkcji kosztu L. Chcemy, aby estymator zwrócił właśnie tę wartość dla dowolnych danych D. Niestety estymacja będzie różniła się od wartości prawdziwej, a błąd ma trzy składniki:

- **bias** - jeśli dla różnych D estymator średnio estymuje nieprawdziwą wartość całkowitego kosztu, to odległość tej średniej od prawdziwego całkowitego kosztu nazywana jest biasem,
- **variance** - jeśli dla różnych D estymator zwraca bardzo podobne liczby, to variance jest mała, jeśli natomiast estymata bardzo zależy od konkretnego D, to variance jest duża,

bias-variance tradeoff (bias-variance dilemma)

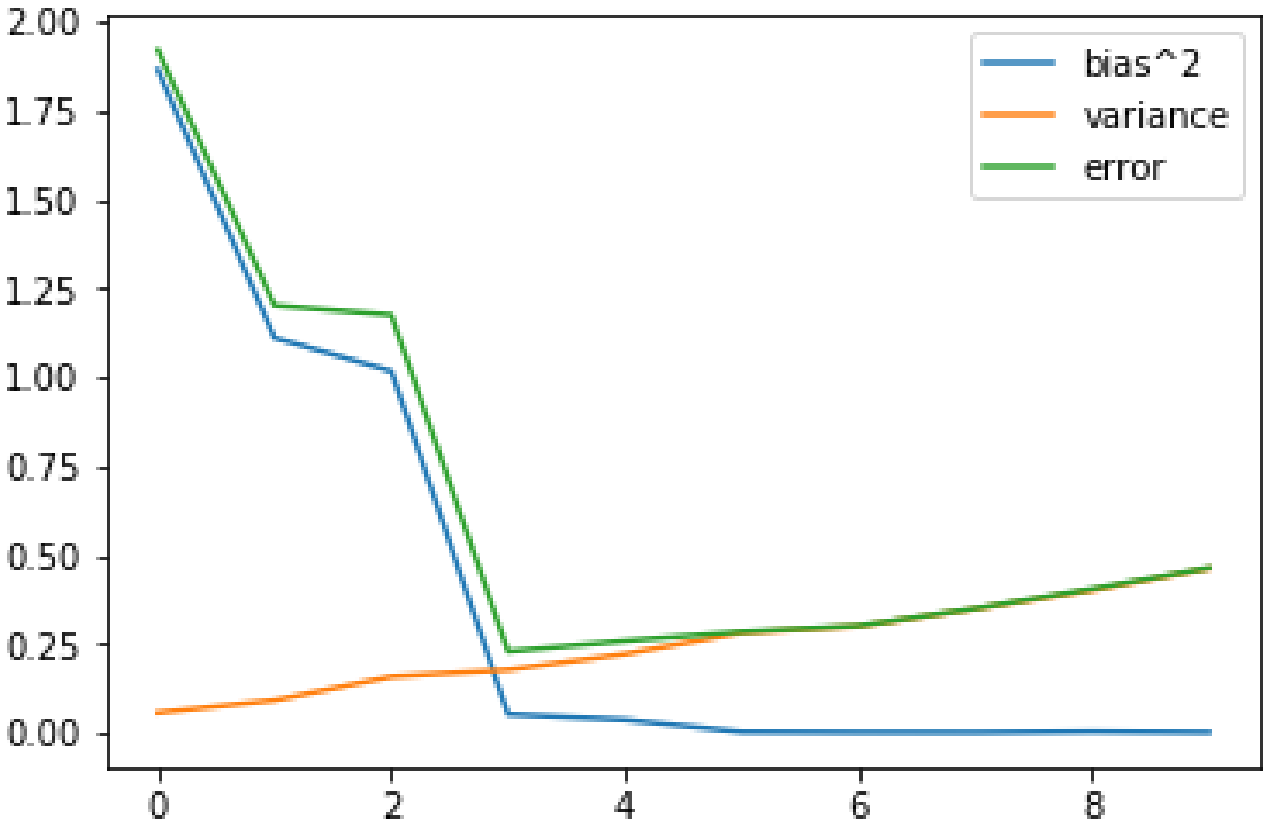
Dla nauczonego modelu istnieje prawdziwa średnia wartość funkcji kosztu L. Chcemy, aby estymator zwrócił właśnie tę wartość dla dowolnych danych D. Niestety estymacja będzie różniła się od wartości prawdziwej, a błąd ma trzy składniki:

- **bias** - jeśli dla różnych D estymator średnio estymuje nieprawdziwą wartość całkowitego kosztu, to odległość tej średniej od prawdziwego całkowitego kosztu nazywana jest biasem,
- **variance** - jeśli dla różnych D estymator zwraca bardzo podobne liczby, to variance jest mała, jeśli natomiast estymata bardzo zależy od konkretnego D, to variance jest duża,
- **noise** - szum zawarty w liczbach oznaczonych y_i^{true}; w y_i^{pred} oczywiście nie ma szumu, bo przypominam, że nauczony model jest deterministyczny.

Cała sztuka polega na znalezieniu złotego środka, gdzie suma bias + variance jest najmniejsza, a więc nasza predykcja najdokładniejsza.

bias-variance tradeoff (bias-variance dilemma)

https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/BV.ipynb



Underfitting vs. Overfitting

Mówiliśmy o błędzie modelu oraz estymatora całkowitego kosztu.
Bias-variance dilemma dotyczy dowolnej estymacji!
Przykłady:

- $mean(x_1, \ldots, x_n) = \overline{x} = \frac{1}{n} \sum x_i$ - estymacja średniej z próby,
- $s^2(x_1, \ldots, x_n) = \frac{1}{n-1} \sum (x_i - \overline{x})^2$ - estymacja wariancji z próby.

Wtedy także zachodzi ($\hat{\theta}$ - oznaczenie estymatora):

$$MSE(\hat{\theta}(X)) = var(\hat{\theta}) + (B(\hat{\theta}))^2$$

Underfitting vs. Overfitting

`https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D11_Z03.ipynb`

Uczenie parametrów funkcji predykcyjnej i testowanie jej na tych samych danych jest **błędem metodologicznym**:
model, który po prostu powtarzałby etykiety próbek, które właśnie widział, miałby doskonały wynik, ale nie przewidziałby niczego przydatnego na danych, których jeszcze nie widział.

Underfitting vs. Overfitting

`https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D11_Z03.ipynb`

Uczenie parametrów funkcji predykcyjnej i testowanie jej na tych samych danych jest **błędem metodologicznym**:
model, który po prostu powtarzałby etykiety próbek, które właśnie widział, miałby doskonały wynik, ale nie przewidziałby niczego przydatnego na danych, których jeszcze nie widział.

Sytuacja ta nazywana jest **Overfitting**. Aby tego uniknąć, podczas wykonywania eksperymentu (nadzorowanego) powinniśmy podzielić dane na dwie grupy X_train, X_test.

Underfitting vs. Overfitting

`https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D11_Z03.ipynb`

Uczenie parametrów funkcji predykcyjnej i testowanie jej na tych samych danych jest **błędem metodologicznym**:
model, który po prostu powtarzałby etykiety próbek, które właśnie widział, miałby doskonały wynik, ale nie przewidziałby niczego przydatnego na danych, których jeszcze nie widział.

Sytuacja ta nazywana jest **Overfitting**. Aby tego uniknąć, podczas wykonywania eksperymentu (nadzorowanego) powinniśmy podzielić dane na dwie grupy X_train, X_test.

Zauważ, że słowo "eksperyment" nie oznacza wyłącznie wykorzystania w celach akademickich, ponieważ nawet w komercyjnych warunkach uczenie maszyn rozpoczyna się eksperymentalnie.

Zbiór testowy i zbiór treningowy

https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/plot_underfitting_overfitting.ipynb.ipynb

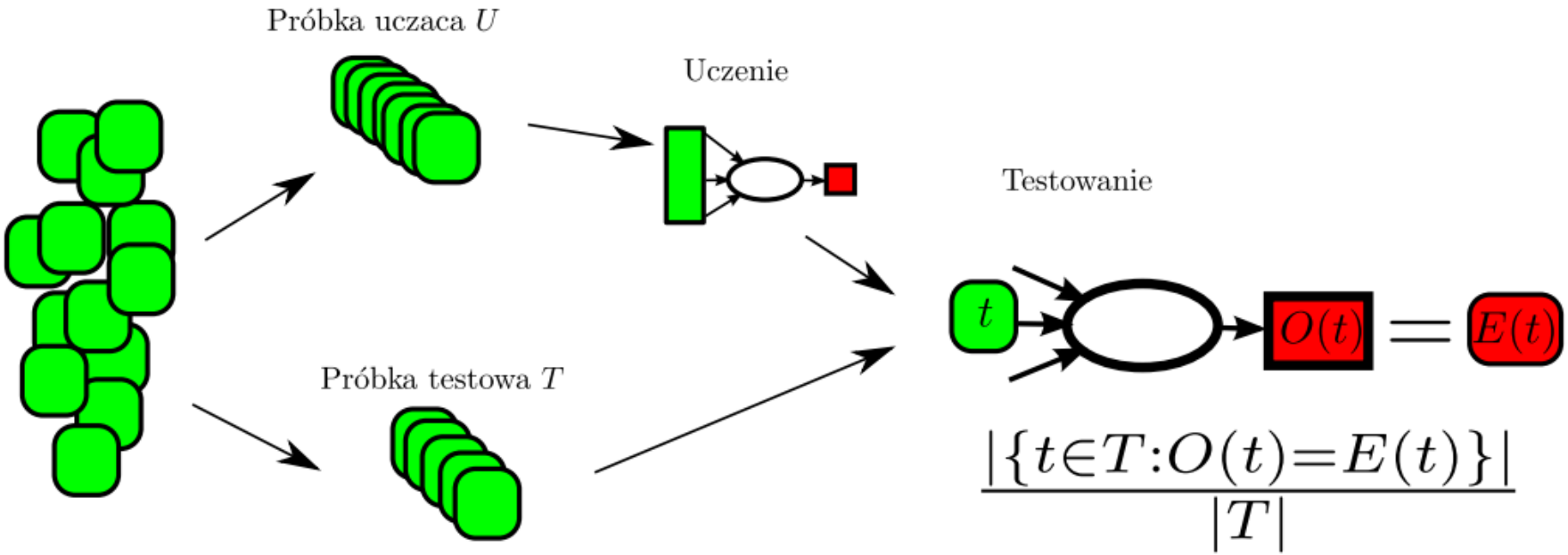
https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D11_Z04.ipynb

Dane uczące są losowo dzielone na dwa rozłączne zbiory:

- próbkę uczącą X_train,
- próbkę testową X_test.

Model jest uczony za pomocą próbki uczącej, natomiast jest oceniany na podstawie próbki testowej.

Zbiór testowy i zbiór treningowy



Zbiór testowy i zbiór treningowy

Uwagi i niebezpieczeństwa:

- czasami na wynik większy wpływ ma stosunek $\frac{|X\_train|}{|X\_train \cup X\_test|}$, niż zaimplementowany algorytm,
- rozsądnym minimum dla wielkości X_train jest około $\frac{1}{4}$ całego zbioru,
- z drugiej strony X_train nie powinno być większe niż $\frac{9}{10}$ całego zbioru,
- podając wynik walidacji zawsze należy podać proporcje w jakich podzielono zbiór.

k-fold cross-validation

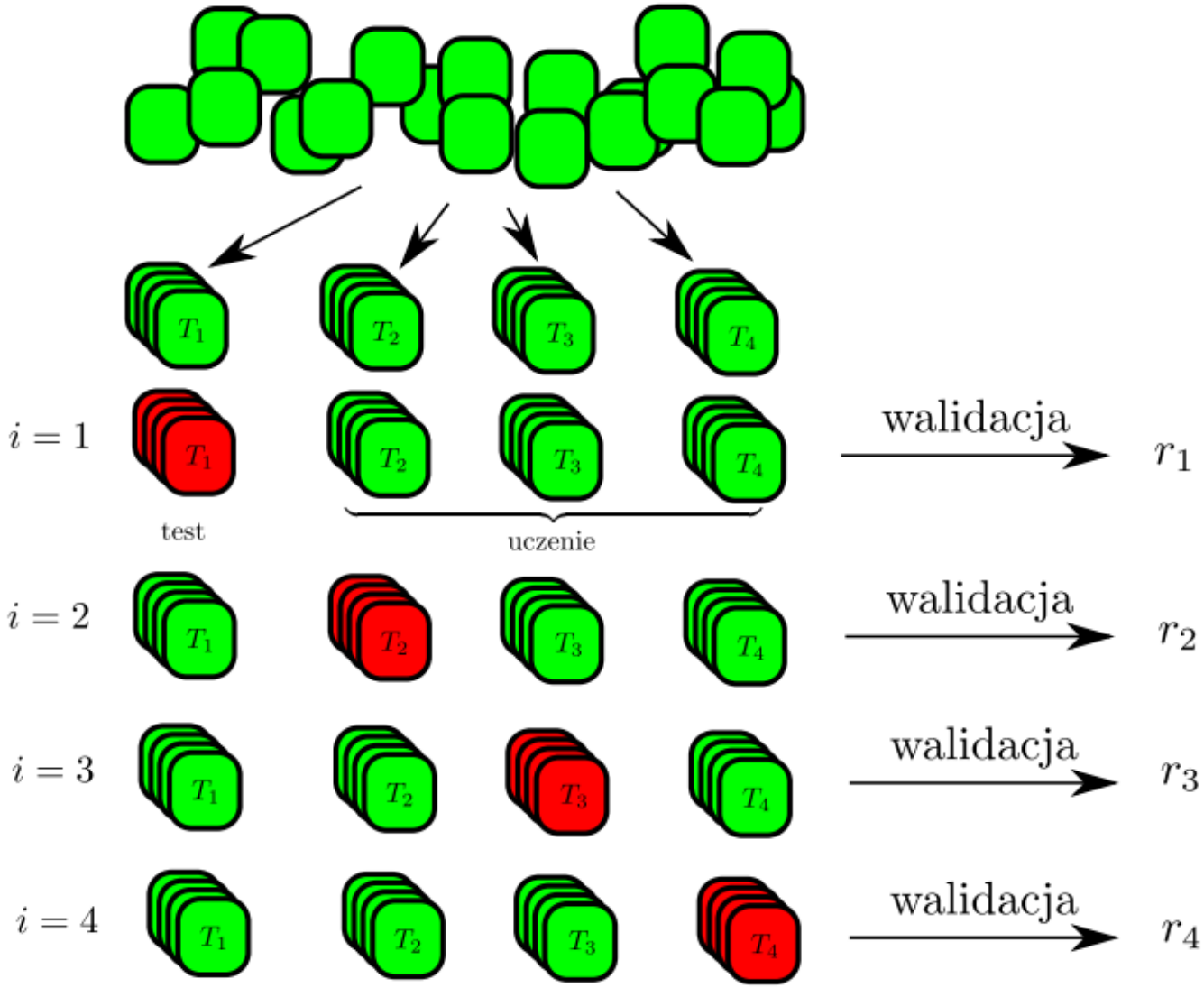
`https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D11_Z05.ipynb`

- dane uczące są losowo dzielone na k rozłącznych zbiorów: $T_1, \ldots, T_k$,
- zbiory powinny być równoliczne (lub różnić się o maksymalnie 1 element, jeżeli nie da się podzielić dokładnie),
- dla i = 1...k powtarzamy
  - uczymy sieć na zbiorze uczącym

$$T_1 \cup \ldots \cup T_{i-1} \cup T_{i+1} \cup T_{i-1} \cup \ldots T_k$$

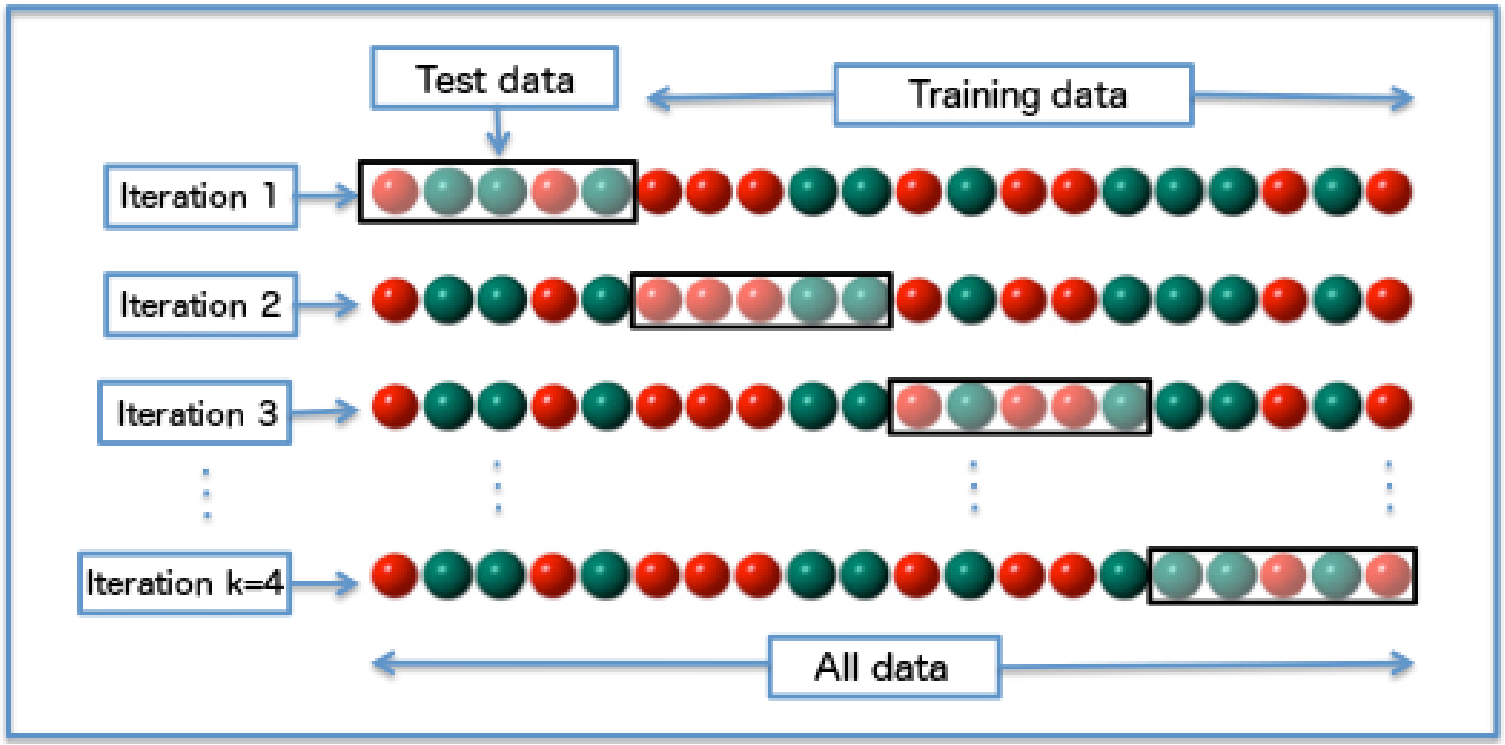
  - testujemy tak nauczony model na danych T_i (na tych danych model nie był uczony),
  - zapamiętujemy rezultat jako r_i
- zależnie od ilości miejsca podajemy wszystkie rezultaty r_i lub ich średnią medianę, minimum, maximum.

k-fold cross-validation



k-fold cross-validation

https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D11_Z06.ipynb



Leave One Out

Leave One Out to odmiana walidacji krzyżowej, w której k = ilość elementów w T

- dla $i = 1, \ldots, k$ powtarzamy
  - uczymy sieć na zbiorze uczącym

$$T \setminus T_i$$

  - testujemy tak nauczony model na pozostałym przykładzie T_i,
  - zapamiętujemy rezultat jako r_i
- podajemy średnią medianę, minimum, maximum z r_i.
- można stosować w przypadku małej ilości danych w zbiorze T

Regularyzacja

Regularyzacja

Przez regularyzację rozumiemy faworyzowanie "prostszych" hipotez w ramach danego zbioru hipotez (modelu). Mówiąc inaczej, regularyzacja zwiększa bias kosztem wariancji, a więc jej stosowanie ma sens tylko wtedy, gdy przypuszczamy, że to wariancja jest dominującym składnikiem błędu całkowitego.

Regularyzacja jest zgodna z wymaganiem, by zawsze wybierać **najprostszy model**, który wystarczająco **dobrze tłumaczy zjawiska**:

- **Brzytwa Ockhama** – Nie mnóż bytów ponad konieczność (przypisywane Williamowi of Ockham, c. 1287-1347)
- **Paul Dirac (1902-1984)** – Teoria, która jest piękna matematycznie, ma większą szansę by być prawdziwa od tej brzydkiej, która dobrze pasuje do danych

Regularyzacja

Celem regresji liniowej jest zminimalizowanie sumy kwadratów odległości:

$$\min_w \|Aw - y\|^2.$$

Wynikiem regresji liniowej jest model:

$$\hat{y} = w_0 + w_1 x_i + \ldots + w_p x_p.$$

Ridge Regression

https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D11_Z07.ipynb

Ridge regression próbuje rozwiązać niektóre problemy klasycznej regresji liniowej, nakładając kary za wykorzystanie większej ilości współrzędnych. Ridge regression minimalizuje:

$$\min_w ||Xw - y||_2{}^2 + \alpha ||w||_2{}^2,$$

gdzie:

$$\|w\|_2 = \sqrt{w_1^2 + \cdots + w_n^2}.$$

Parametr $\alpha \geq 0$ jest parametrem złożoności, który kontroluje wielkość kary; im większa jest wartość α, tym większa kara.

Lasso Regression

https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D11_Z09.ipynb

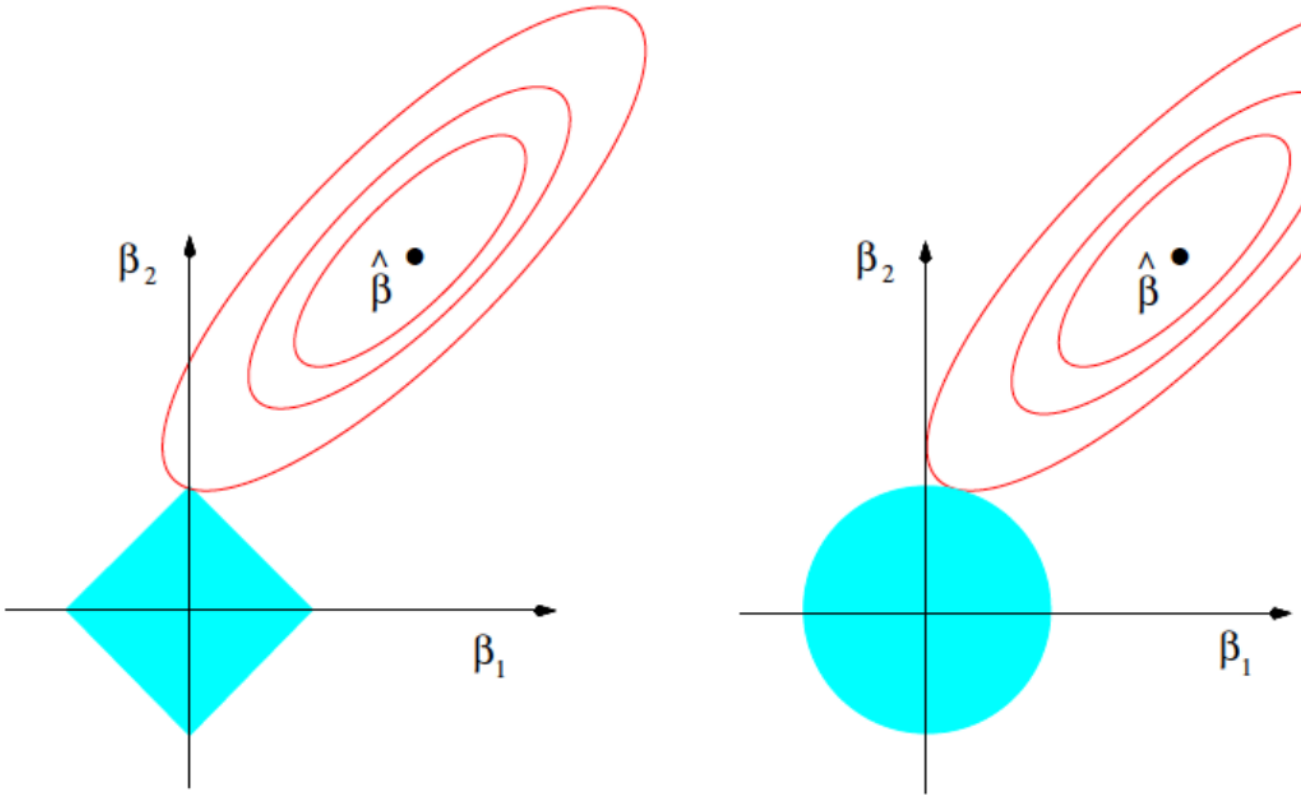
Lasso regression próbuje rozwiązać niektóre problemy klasycznej regresji liniowej, nakładając kary za wykorzystanie większej ilości współrzędnych. Lasso regression minimalizuje:

$$\min_{w} ||Xw - y||_2{}^2 + \alpha ||w||_1{}^2,$$

gdzie:

$$\|w\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |w_i| .$$

Lasso Regression



Elastic Net

https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D11_Z11.ipynb

Elastic Net próbuje rozwiązać niektóre problemy klasycznej regresji liniowej, nakładając kary za wykorzystanie większej ilości współrzędnych. Elastic Net minimalizuje:

$$\min_{w} \frac{1}{2n_{samples}} ||Xw - y||^2_{Fro} + \alpha ||w||_{21},$$

gdzie *Fro* oznacza Frobenius norm:

$$||A||_{Fro} = \sqrt{\sum_{ij} a_{ij}^2}$$

oraz $\ell_1 \ell_2$:

$$||A||_{21} = \sum_{i} \sqrt{\sum_{j} a_{ij}^2}$$

Parametr α można dobrać za pomocą procedury cross-validation.

Dane wielowymiarowe

Przykład

Praca z danymi wielowymiarowymi niesie ze sobą wiele niebezpieczeństw. Rozważmy następujący przykład: w golfa przeważnie grają bogaci ludzie i wiadomo, że przeciętnie liczba dzieci spada wraz ze wzrastającym dochodem.
Innymi słowy, mamy dość silną ujemną korelację pomiędzy grą w golfa, a liczbą dzieci, i można by się skusić (fałszywie) wyciągnąć wniosek, że gra w golfa zmniejsza płodność. Ale w rzeczywistości są to wyższe dochody, które powodują oba skutki.
Kaplan, D. (2009). Statistical modeling: A fresh approach. St Paul: Macalester College.

Regresja wielowymiarowa

Regresja wieloliniowa (lub regresja wielokrotna) jest prostym przedłużeniem prostej regresji liniowej.
Załóżmy, że dla dwóch zmiennych w_i i x_i chcemy nauczyć się przewidywać trzecią (y_i). W takiej sytuacji model wygląda tak:

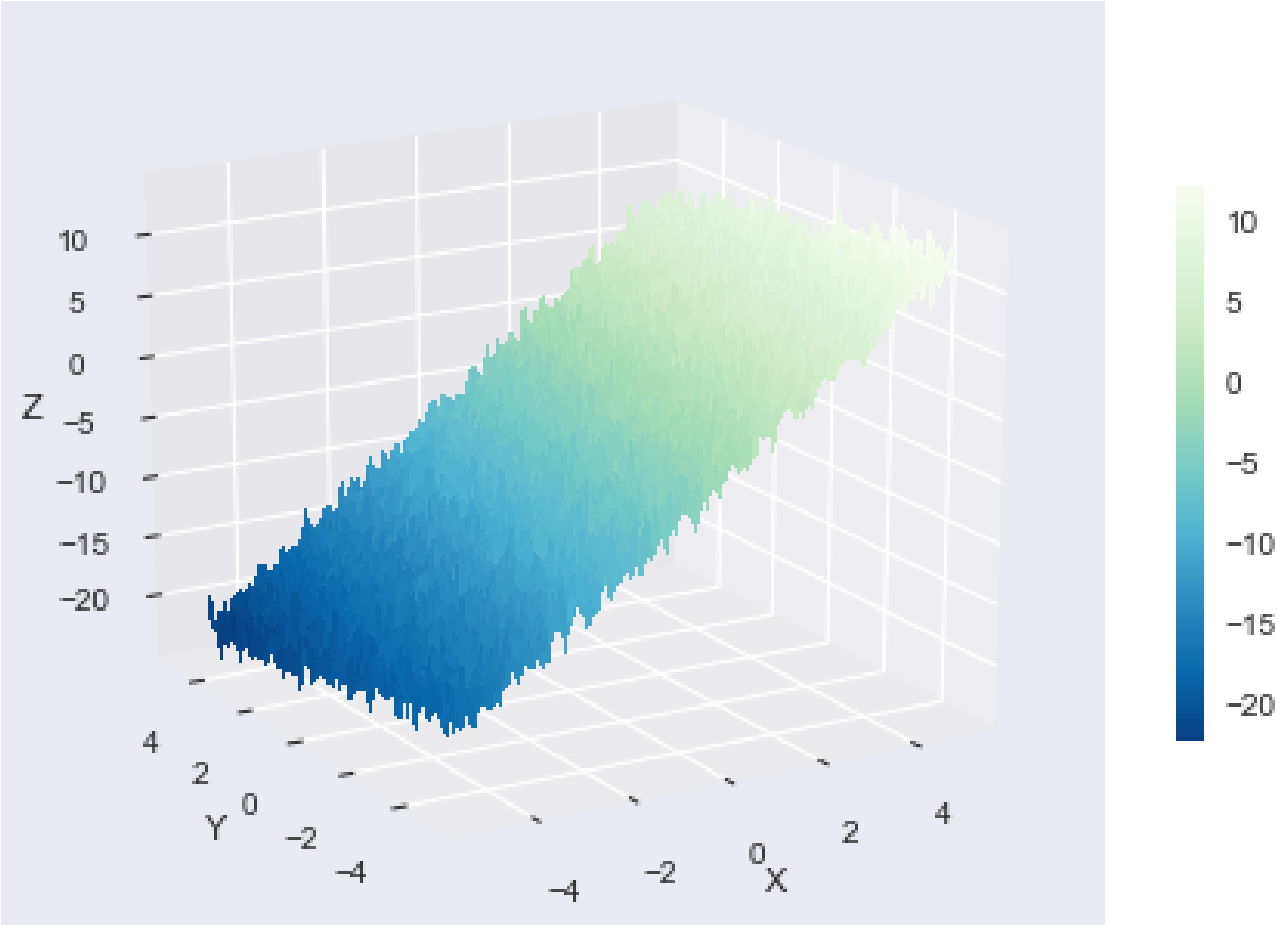
$$y_i = \beta_0 + \beta_1 w_i + \beta_2 x_i + \epsilon_i.$$

Dla 7 punktów mamy:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \\ y_7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & w_1 \\ 1 & x_2 & w_2 \\ 1 & x_3 & w_3 \\ 1 & x_4 & w_4 \\ 1 & x_5 & w_5 \\ 1 & x_6 & w_6 \\ 1 & x_7 & w_7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \\ \epsilon_5 \\ \epsilon_6 \\ \epsilon_7 \end{bmatrix},$$

Regresja wielowymiarowa

https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D11_Z12.ipynb



Zadania

https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D11_Z18.ipynb

https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D12_Z06.ipynb

https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D12_Z09.ipynb

https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D11_Z19.ipynb

https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/statistics/D11_Z19b.ipynb