Семинар 5. Линейная регрессия. Регуляризация. Кросс-валидация.

Даулбаев Талгат

1 марта 2017 г.

Обозначения

$\mathbb{X}$ — множество объектов, $\mathbb{Y} = \mathbb{R}$ — множество ответов

$\boldsymbol{X = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_\ell, y_\ell)\}}$ — обучающая выборка

$\boldsymbol{x_i} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{d}}$, $\boldsymbol{y_i} \in \mathbb{R}$

Считаем, что есть неизвестная зависимость $\boldsymbol{y} : \mathbb{X} \to \mathbb{Y}$, которую нужно восстановить по известным $\boldsymbol{y_i = y(x_i)}$.

Модель зависимости: $\boldsymbol{a(x) = f(x, w)}$, где $\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{p}}$ — параметр, $\boldsymbol{f}$ — некоторое выбранное нами семейство функций.

Предполагаем, что $\boldsymbol{y(x) \approx a(x)}$ при некотором $\boldsymbol{w}$.

Задача: найти $\boldsymbol{w}$.

Метод наименьших квадратов (МНК)

Выбираем w, чтобы минимизировать остаточную сумму квадратов (residual sum of squares, RSS), то есть решаем задачу оптимизации:

$$\boldsymbol{Q(w, X) = \sum_{i=1}^{\ell} (f(x_i, w) - y_i)^2 \to \min_{w}}$$

Линейная регрессия

Пусть

$$f(x, w) = \sum_{k=1}^{d} w_k x^k + w_0 = \langle w, x \rangle + w_0$$

$y = w_1 x^1 + w_0$ — прямая на плоскости;

$y = w_2 x^2 + w_1 x^1 + w_0$ — плоскость в трёхмерном пространстве;

$y = \langle w, x \rangle + w_0$ — *гиперплоскость* в d-мерном пространстве;

Трюк: добавляем константный признак

$$x \rightsquigarrow \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_d \end{bmatrix} \qquad w \rightsquigarrow \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_d \end{bmatrix}$$

$$\langle w, x \rangle + w_0 \rightsquigarrow \langle \tilde{w}, \tilde{x} \rangle$$

Линейная регрессия + МНК = Ordinary Least Squares (OLS)

$$Q(w, X) = \sum_{i=1}^{\ell} (\langle w, x_i \rangle - y_i)^2 \to \min_w$$

X — матрица «объекты×признаки», y — целевой вектор:

$$Q(w, X) = \|Xw - y\|_2^2 \to \min_w$$

$$\nabla_w Q(w, X) = 2X^T(Xw - y)$$

$$\nabla_w Q(w, X) = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{w = (X^T X)^{-1} X^T y}$$

В реальной жизни такой формулой никто не пользуется, но это уже совсем другая история...

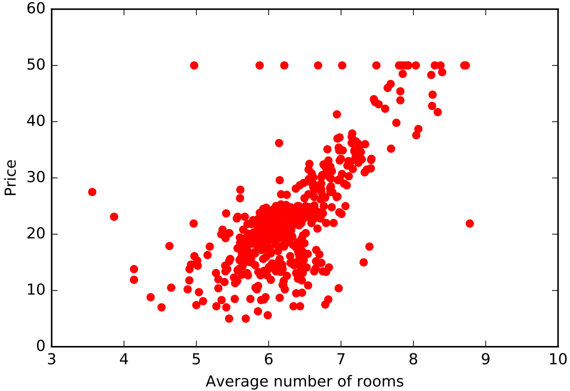
Данные

Далее будем исследовать средние цены на дома разных районов Бостона:

```
%matplotlib inline
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.datasets import load_boston
boston = load_boston()
print(boston.DESCR)
```

Среднее количество комнат

```
plt.scatter(boston.data[:, 5], boston.target, color='r')
plt.xlabel('Average number of rooms')
plt.ylabel('Price')
```



OLS в scikit-learn

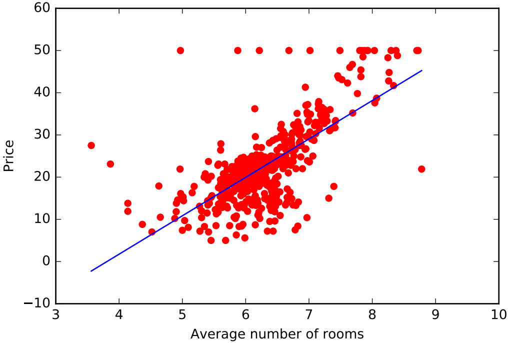
```
LinearRegression(self, fit_intercept=True,
        normalize=False, copy_X=True, n_jobs=1)
```

```
from sklearn.linear_model import LinearRegression

lr = LinearRegression()
lr.fit(boston.data[:, 5].reshape(-1, 1), boston.target)
# Строим равномерную сетку из 100 точек:
grid = np.linspace(boston.data[:, 5].min(),
    boston.data[:, 5].max(), 100)
# Строим предсказание в точках этой сетки:
best_line = lr.predict(grid.reshape(-1, 1))
```

Результат работы одномерной регресии

```
plt.scatter(boston.data[: , 5], boston.target, color='r')
plt.plot(grid, best_line)
plt.xlabel('Average number of rooms')
plt.ylabel('Price')
```



Как измерить качество? – I

Среднеквадратичная ошибка (Mean Squared Error):

$$\text{MSE} = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2$$

```
from sklearn.metrics import mean_squared_error

y_pred = lr.predict(boston.data[:, 5].reshape(-1, 1))
# Ошибка на обучающей выборке:
MSE = mean_squared_error(boston.target, y_pred)
print("MSE =", MSE)
```

Оказалось, что MSE $= \mathbf{43.6}$.

Хорошо это или плохо?

Как измерить качество? – II

Можно ввести «нормированный» MSE — так называемый *коэффициент детерминации* или R^2:

$$\mathrm{R}^2 = 1 - \frac{\sum\limits_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2}{\sum\limits_{i=1}^{\ell} (y_i - \overline{y})^2}, \quad \text{где} \quad \overline{y} = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} y_i.$$

$\mathrm{R}^2 \approx 1$ — отлично, $\mathrm{R}^2 \approx 0$ — плохо, $\mathrm{R}^2 < 0$ — ужасно!

```
from sklearn.metrics import r2_score
r2 = r2_score(boston.target, y_pred)
```

Оказалось, что $\mathrm{R}^2 = 0.48$.

Как измерить качество? – III

Mean Absolute Error:

$$\mathrm{MAE} = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} |a(x_i) - y_i|$$

Root Mean Squared Error:

$$\mathrm{RMSE} = \sqrt{\mathrm{MSE}}$$

И так далее...

Нормировка признаков

Отнормируем признаки так, чтобы среднее значения каждого было равно нулю, а среднеквадратичное отклонение — единице:

```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler

scaler = StandardScaler()
scaler.fit(boston.data)
X = scaler.transform(boston.data)

# Проверим, что всё действительно работает:
print("new mean =", np.mean(X, axis=0))
print("new std =", np.std(X, axis=0))
```

Многомерная регрессия

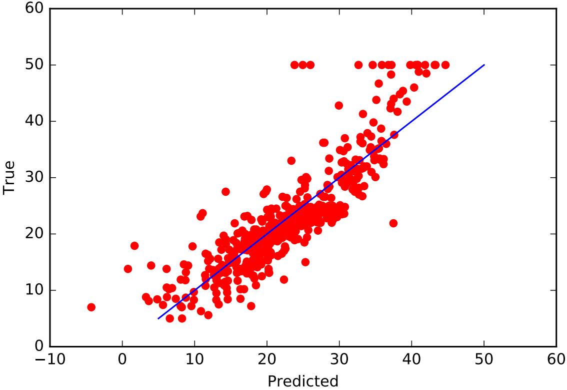
Обучим линейную регрессию на всех признаках:

```
y = boston.target
lr.fit(X, y)
```

Построим график того, насколько предсказание отличается от фактической цены:

```
y_pred = lr.predict(X)
plt.scatter(y_pred, y, color='r')
plt.xlabel('Predicted')
plt.ylabel('True')
plt.plot([y.min(), y.max()], [[y.min()], [y.max()]])
```

Многомерная регрессия



$$\text{MSE} = 21.9$$

$$\text{R}^{\mathbf{2}} = 0.74$$

Отбор признаков

Если признаки отнормированные, то коэффициенты регрессии отвечают за «важность признаков».

```
idx = np.argsort(-np.abs(lr.coef_))
idx * np.sign(lr.coef_[idx]).astype(int)
-12,  -7,   5,   8,  -9, -10,  -4,   1,   0,  11,   3,   2,   6
```

0. CRIM per capita crime rate by town
1. ZN proportion of residential land zoned for lots over 25,000 sq.ft.
2. INDUS proportion of non-retail business acres per town
3. CHAS Charles River dummy variable (= 1 if tract bounds river; 0 otherwise)
4. NOX nitric oxides concentration (parts per 10 million)
5. RM average number of rooms per dwelling
6. AGE proportion of owner-occupied units built prior to 1940
7. DIS weighted distances to five Boston employment centres
8. RAD index of accessibility to radial highways
9. TAX full-value property-tax rate per $10,000
10. PTRATIO pupil-teacher ratio by town
11. B 1000(Bk - 0.63)^2 where Bk is the proportion of blacks by town
12. LSTAT % lower status of the population

Что делать с категориальными признаками?

В этом датасете категориальных признаков нет, но в жизни они встречаются.

В sklearn‘е это:

```
sklearn.preprocessing.OneHotEncoder(n_values='auto',
    categorical_features='all',
    dtype=<class 'float'>,
    sparse=True,
    handle_unknown='error')
```

Признак, который принимает n значений, превращаем в вектор длины n, состоящий из одной единицы и $n-1$ нуля.

В pandas это функция pd.get_dummies(...)

5-fold Cross Validation

Обучаемся на 80% выборки, оцениваем на оставшихся 20%.

Получим более адекватную оценку ошибки на новых данных.

```
from sklearn.cross_validation import KFold
kf = KFold(X.shape[0], n_folds=5)
y_pred = np.zeros(y.shape)
for train, test in kf:
    lr.fit(X[train], y[train])
    y_pred[test] = lr.predict(X[test])

print("r2 =", r2_score(y, y_pred))
print("MSE =", mean_squared_error(y, y_pred))
print("RMSE =", np.sqrt(mean_squared_error(y, y_pred)))
```

$R^2 = 0.56$, MSE $= 37.17$, RMSE $= 6.10$

А не переобучаемся ли мы?

Наблюдение: очень большие веса признаков говорят о переобучении.

Идея: «штрафовать» большие веса признаков.

Гребневая (Ridge Regression) или L_2-регрессия

Пусть штраф — это квадрат $\mathbf{2}$-нормы весов, то есть

$$\|w\|_2^2 = w_1^2 + w_2^2 + \ldots + w_d^2$$

Задача:

$$Q(X, w) = \|Xw - y\|_2^2 + \alpha\|w\|_2^2 \to \min_w,$$

где α — это гиперпараметр.

Решение:

$$w = (X^T X + \alpha I)^{-1} X^T y$$

L_1-регрессия или LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator) [1]

Пусть штраф — это $\mathbf{1}$-норма весов, то есть

$$\|w\|_1 = |w_1| + |w_2| + \ldots + |w_d|$$

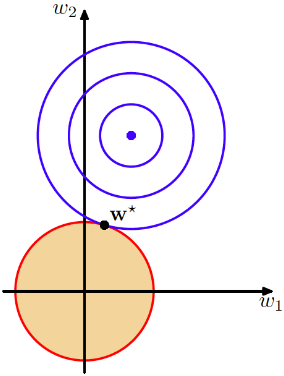
Задача:

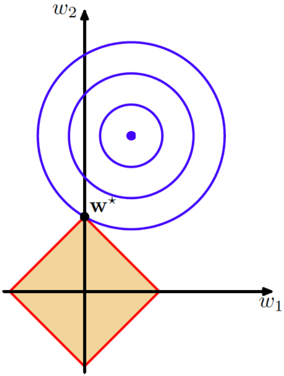
$$Q(X, w) = \|Xw - y\|_2^2 + \alpha \|w\|_1 \to \min_w,$$

Аналитического решения нет, считается итерационными методами оптимизации.

[1] Придумана в 1996 году

Геометрия L_1 и L_2 регуляризаторов





На картинке одно из объяснений, почему L_1-регуляризатор называется разреживающим.

Ridge regression в scikit-learn

```
from sklearn.linear_model import Ridge
# Сначала возьмём альфа с потолка:
lr = Ridge(alpha=0.1)
kf = KFold(X.shape[0], n_folds=5)
y_pred = np.zeros(y.shape)
for train, test in kf:
    lr.fit(X[train], y[train])
    y_pred[test] = lr.predict(X[test])

print("r2 =", r2_score(y, y_pred))
print("MSE =", mean_squared_error(y, y_pred))
print("RMSE =", np.sqrt(mean_squared_error(y, y_pred)))
```

$R^2 = 0.615$, MSE $= 32.472$, RMSE $= 5.698$

Получили решение с лучшей обобщающей способностью!

Сравнение методов

	kNN Regression	Ridge Regression
Параметры	вся обучающая выборка $(\ell \times d)$	$(d+1)$-мерный вектор весов w
Гиперпараметры	метрика ρ, число соседей k	Коэффициент регуляризации α
Обучение (fit)	запоминаем всю обучающую выборку (нет обучения)	$\lVert Xw - y\rVert_2^2 + \alpha\lVert w\rVert_2^2 \to \min\limits_{w}$
Построение прогноза (predict)	$a(x) = \dfrac{\sum\limits_{i=1}^{k} w_i y_{(i)}}{\sum\limits_{i=1}^{k} w_i}$	$a(x) = \langle w, x\rangle$

Ridge regression: как подбирать α?

Для выбора α для гребневой регрессии в scikit-learn написана эффективная процедура Leave-One-Out кросс-валидации[2]

```
from sklearn.linear_model import RidgeCV

# Переберём 100 точек от 1e-4 до 10 на логарифмической шкале:
cv = RidgeCV(alphas=np.logspace(-4, 1, 100, base=10))
cv.fit(X, y)
cv.alpha_
```

Вывод: L_2-регрессия имеет лучшую обобщающую способность, чем OLS, и очень быстро обучается.

[2] Обучаем алгоритм на всей выборке без одного объекта, а потом предсказываем ответ на этом объекте. И так для каждого объекта. А потом выбираем лучший результат.

LASSO в sklearn

```
from sklearn.linear_model import Lasso

# Опять возьмём alpha с потолка
lr = Lasso(alpha=0.01)
kf = KFold(X.shape[0], n_folds=5)
y_pred = np.zeros(y.shape)
for train, test in kf:
    lr.fit(X[train], y[train])
    y_pred[test] = lr.predict(X[test])

print("r2 =", r2_score(y, y_pred))
print("MSE =", mean_squared_error(y, y_pred))
print("RMSE =", np.sqrt(mean_squared_error(y, y_pred)))
```

$R^2 = 0.576$, $MSE = 35.750$, $RMSE = 5.980$

Обобщающая способность чуть лучше, но в этот раз наугад взятый коэффициент оказался не так хорош.

LASSO: как подбирать α?

Так же:

```
from sklearn.linear_model import LassoCV

cv = LassoCV(alphas=np.logspace(-4, 1, 100, base=10), n_jobs=-1)
cv.fit(X, y)
cv.alpha_
```

Библиотека scikit-learn хороша одинаковым интерфейсом к разным функциям.

LASSO: разреживание признаков – I

```
lr = Lasso(alpha=0.01)
lr.fit(X, y)
lr.coef_

array([ -6.91894958,   6.86587554,  -0.        ,  13.43981379,
       -22.31001393,  66.85016996,  -0.        , -35.17691333,
         0.        ,  -0.        , -39.84958238,  14.92602188,
       -83.60763445])
```

Отбросили признаки:

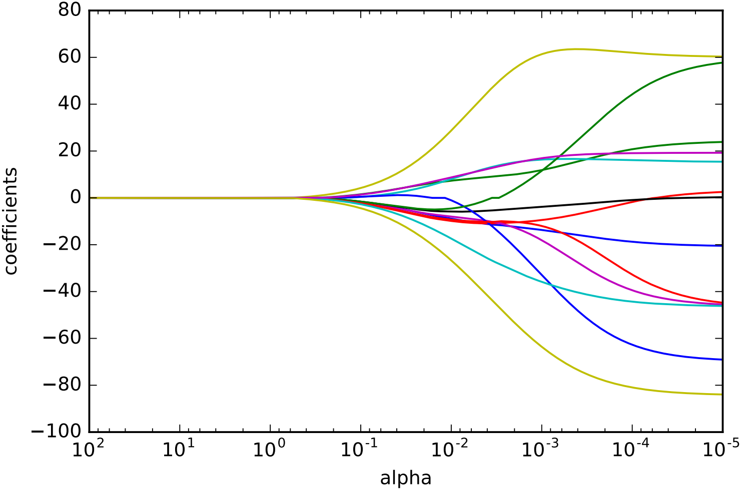
- proportion of non-retail business acres per town
- proportion of owner-occupied units built prior to 1940
- index of accessibility to radial highways
- full-value property-tax rate per $10,000

LASSO: отбор признаков – II

```
lr = Lasso()
alphas, coefs, _ = lr.path(X, y, alphas=np.logspace(-5, 2, 1000))

fig, ax = plt.subplots()
ax.plot(alphas, coefs.T)
# Логарифмическая шкала:
ax.set_xscale('log')
ax.set_xlim(alphas.max(), alphas.min())
plt.xlabel('alpha')
plt.ylabel('coefficients')
```

LASSO: отбор признаков – III



Ridge + LASSO = Elastic Net

$$Q(X, w) = \|Xw - y\|_2^2 + \alpha_1 \|w\|_1 + \alpha_2 \|w\|_2^2 \to \min_w$$

Функции с таким же интерфейсом:

```
from sklearn.linear_model import ElasticNet
from sklearn.linear_model import ElasticNetCV
```

Используется реже, потому что два гиперпараметра сложнее настраивать, чем один.

Вопросы?