

Bootcamp Data Science

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 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/statistic\_4/blob/master/D11\_Z01\_polynomial\_regression.ipynb
```

Zadanie

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

https://github.com/przem85/statistic_4/blob/master/D11_Z02_polynomial_regression.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)

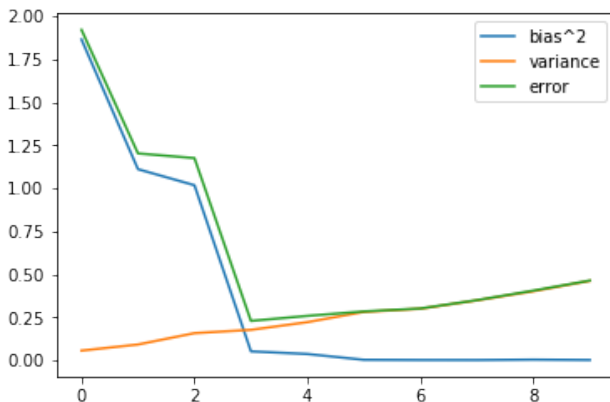
Dla nauczonego modelu istnieje prawdziwa średnia wartość funkcji kosztu L . Chcemy, aby estymator zwrócił właśnie tę wartość dla dowolnych danych D . Niestety estymacja będzie różniła się od wartości prawdziwej, a błąd ma trzy składniki:

- **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/statistic_4/blob/master/BV.ipynb



Underfitting vs. Overfitting

Mówiliśmy o błędzie modelu oraz estymatora całkowitego kosztu.

Bias-variance dilemma dotyczy dowolnej estymacji!

Przykłady:

- $mean(x_1, \dots, x_n) = \bar{x} = \frac{1}{n} \sum x_i$ - estymacja średniej z próby,
- $s^2(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{n-1} \sum (x_i - \bar{x})^2$ - 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/statistic_4/blob/master/D11_Z03_underfitting_vs_overfitting.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/statistic_4/blob/master/D11_Z03_underfitting_vs_overfitting.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/statistic_4/blob/master/D11_Z03_underfitting_vs_overfitting.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.

https://github.com/przem85/statistic_4/blob/master/plot_underfitting_overfitting.ipynb

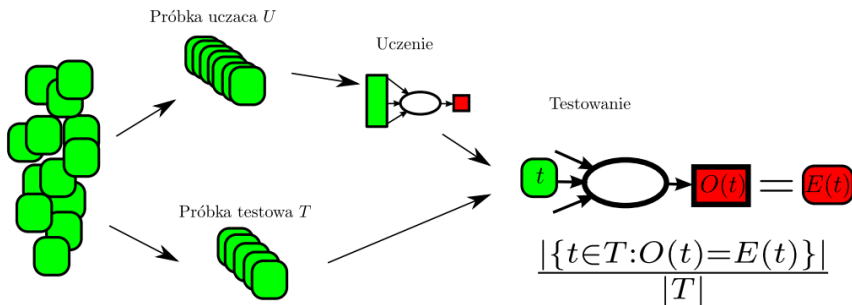
https://github.com/przem85/statistic_4/blob/master/D11_Z04_train_test_split.ipynb

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



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

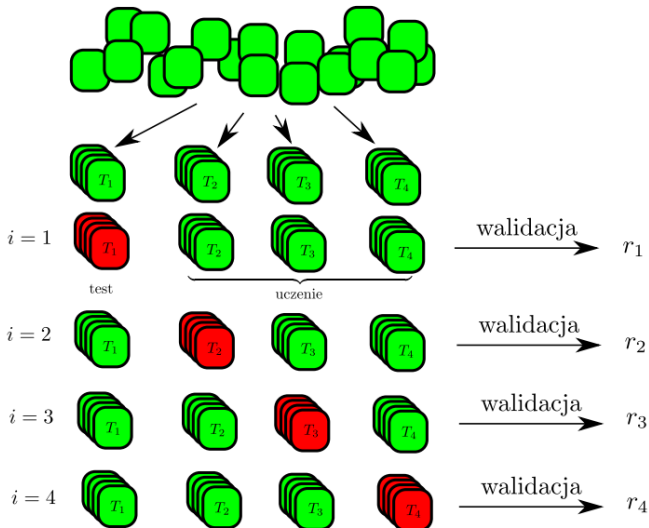
https://github.com/przem85/statistic_4/blob/master/D11_Z05_cross_val_score.ipynb

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

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

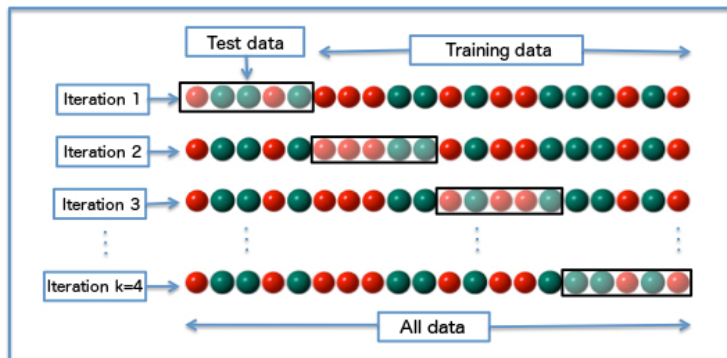
- testujemy tak nauczony model na danych T_i (na tych danych model nie był uczony),
 - zapamiętujemy rezultat jako r_i
- zależnie od ilości miejsca podajemy wszystkie rezultaty r_i lub ich średnią medianę, minimum, maximum.

k-fold cross-validation



k-fold cross-validation

https://github.com/przem85/statistic_4/blob/master/D11_Z06_GridSearchCV.ipynb



Leave One Out

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

- dla $i = 1, \dots, k$ 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

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 mnoż 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

Celem regresji liniowej jest zminimalizowanie sumy kwadratów odległości:

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

Wynikiem regresji liniowej jest model:

$$\hat{y} = w_0 + w_1x_i + \dots + w_px_p.$$

Ridge Regression

https://github.com/przem85/statistic_4/blob/master/D11_Z07_ridge_regression.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:

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

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/statistic_4/blob/master/D11_Z09_lasso_regression.ipynb

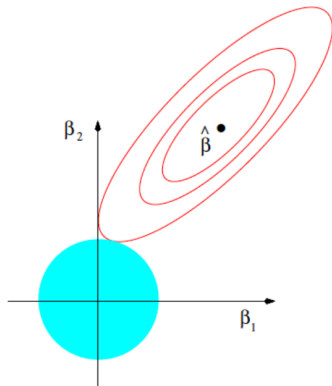
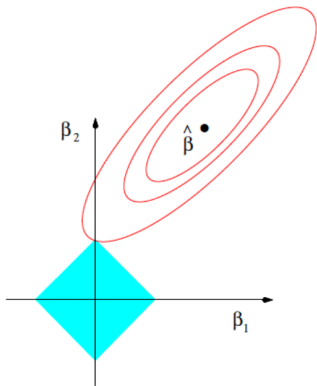
Lasso regression próbuje rozwiązać niektóre problemy klasycznej regresji liniowej, nakładając kary za wykorzystanie większej ilości współrzędnych. Lasso regression minimalizuje:

$$\min_w ||Xw - y||_2^2 + \alpha ||w||_1^2,$$

gdzie:

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

Lasso Regression



https://github.com/przem85/statistic_4/blob/master/D11_Z11_ElasticNet_regression.ipynb

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

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

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.

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.

Założmy, 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:

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

https://github.com/przem85/statistic_4/blob/master/D11_Z18_boston_data.ipynb

https://github.com/przem85/statistic_4/blob/master/D11_Z19_nested_cross_validation.ipynb