Занятие 2
Линейная регрессия

Елена Кантонистова

elena.kantonistova@yandex.ru

ВШЭ, 2023

ПЛАН ЗАНЯТИЯ

- Отложенная выборка и переобучение
- Линейная регрессия
- Метрики качества регрессии
- Практика: разведочный анализ данных

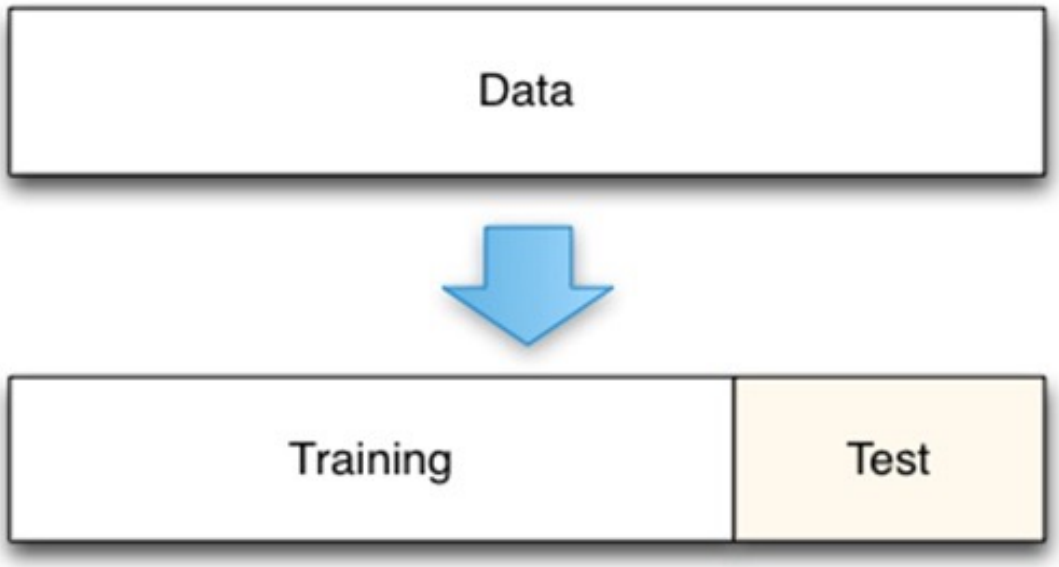
ОЦЕНКА ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ АЛГОРИТМА

- Пусть мы решаем задачу *предсказания стоимости дома* по его признакам.

- В обучающей выборке 1000 домов.
- Мы обучаем алгоритм по имеющимся 1000 домам. *На каких объектах будем проверять качество алгоритма?*

ОЦЕНКА ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ АЛГОРИТМА

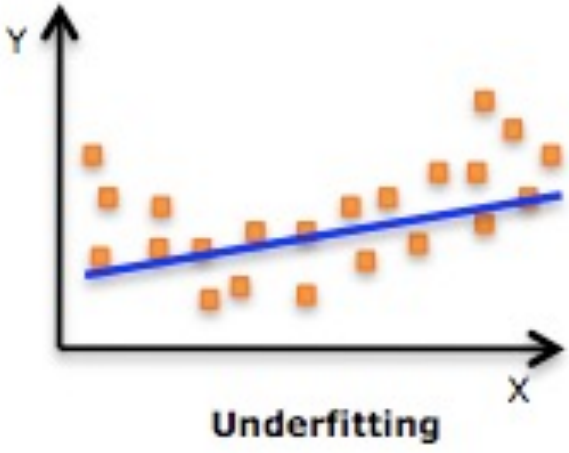
- Перед началом обучения отложим часть обучающих объектов и не будем использовать их для построения модели (отложенная выборка).

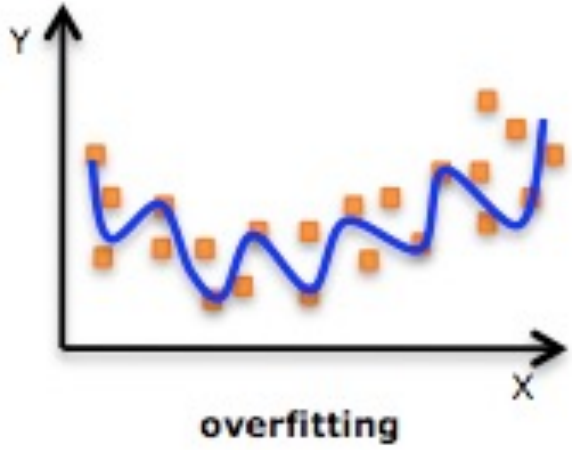


ОТЛОЖЕННАЯ ВЫБОРКА

- Перед началом обучения отложим часть обучающих объектов и не будем использовать их для построения модели (отложенная выборка).
- Тогда можно измерить качество построенной модели на отложенной выборке и оценить ее предсказательную силу.

ПЕРЕОБУЧЕНИЕ И НЕДООБУЧЕНИЕ

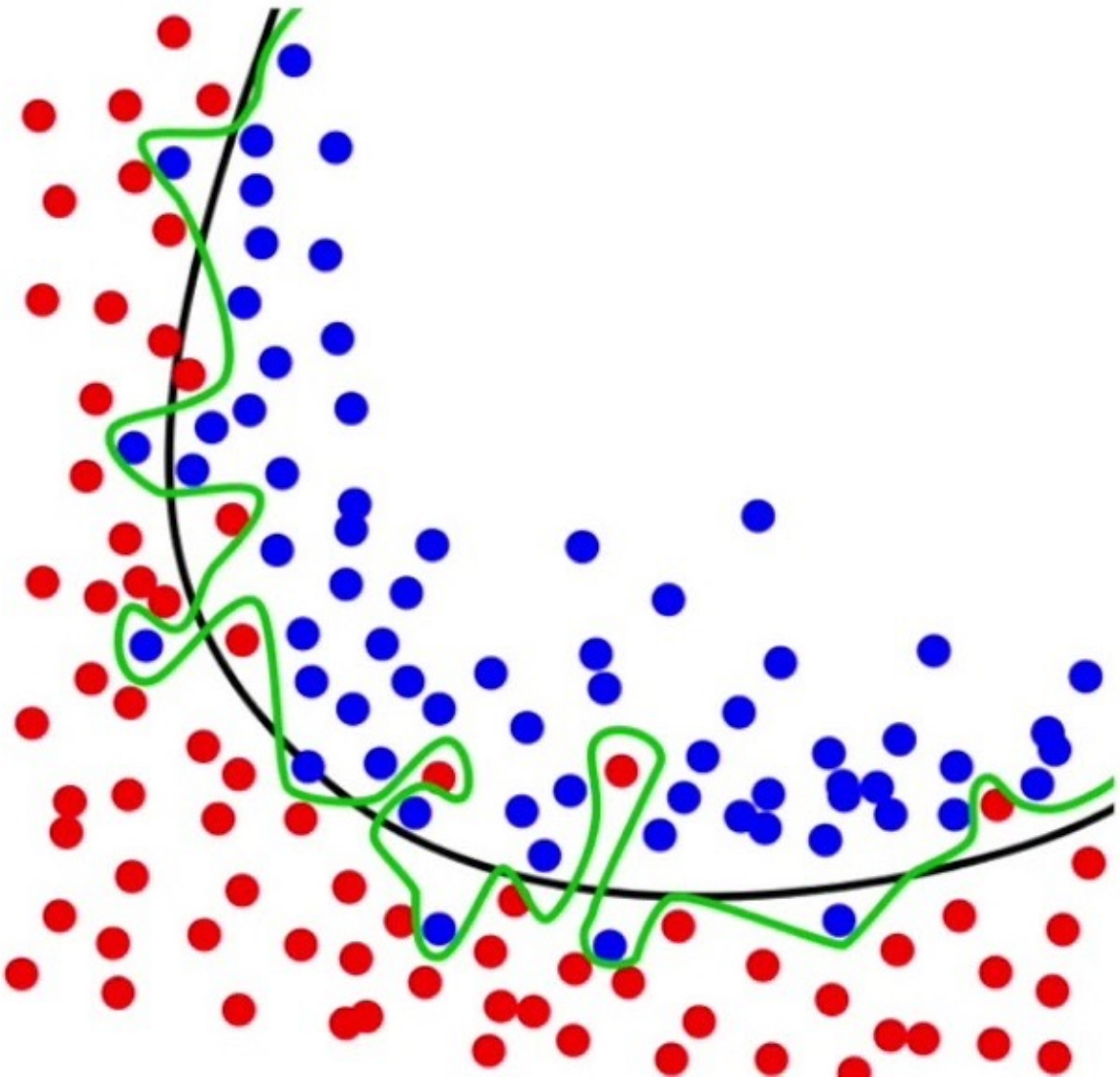




ИЗ-ЗА ЧЕГО ВОЗНИКАЕТ ПЕРЕОБУЧЕНИЕ

- Избыточная сложность модели (большое количество весов). В этом случае лишние степени свободы в модели “тратятся” на чрезмерно точную подгонку под обучающую выборку.
- Переобучение есть всегда, когда есть оптимизация параметров по конечной (заведомо неполной) выборке.

ПРИМЕР ПЕРЕОБУЧЕНИЯ В ЗАДАЧЕ КЛАССИФИКАЦИИ



ПРИЗНАК ПЕРЕОБУЧЕНИЯ

- *Если качество на отложенной выборке сильно ниже качества на обучающих данных, то происходит переобучение*

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Пример (напоминание):

Предположим, что мы хотим предсказать *стоимость дома* y по его *площади* (x_1) и *количеству комнат* (x_2).

Линейная модель для предсказания стоимости:

$$\boldsymbol{a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2},$$

где w_0, w_1, w_2 -

параметры модели (*веса*).

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Пример (напоминание):

Предположим, что мы хотим предсказать *стоимость дома* y

по его *площади* (x_1) и *количеству комнат* (x_2).

Линейная модель для предсказания стоимости:

$$\boldsymbol{a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2},$$

где w_0, w_1, w_2 -

параметры модели (*веса*).

Общий вид (линейная регрессия):

$$\boldsymbol{a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n},$$

где $x_1, \ldots, x_n$ - признаки объекта x.

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n$$

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n$$

- сокращенная запись:

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_j$$

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n$$

- сокращенная запись:

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_j$$

- запись через скалярное произведение (с добавлением признака $x_0 = 1$):

$$a(x) = w_0 \cdot 1 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_j = \sum_{j=0}^{n} w_j x_j = (w, x)$$

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n$$

- сокращенная запись:

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_j$$

- запись через скалярное произведение (с добавлением признака $x_0 = 1$):

$$a(x) = w_0 \cdot 1 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_J = \sum_{j=0}^{n} w_j x_j = (w, x) \leftrightarrow a(x) = (w, x)$$

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_j = (w, x)$$

Обучение линейной регрессии - минимизация среднеквадратичной ошибки:

$$\mathrm{Q}(a, X) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} (a(x_i) - y_i)^2 = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} ((w, x_i) - y_i)^2 \to \min_w$$

(здесь l – количество объектов)

О ПРИМЕНИМОСТИ ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ

Пример:

Предположим, что мы хотим предсказать *стоимость дома* y по его *площади* (x_1) и *количеству комнат* (x_2), *району* (x_3) и *удаленности от МКАД* (x_4).

$$\boldsymbol{a(x) = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + w_4x_4.}$$

О ПРИМЕНИМОСТИ ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ

Пример:

Предположим, что мы хотим предсказать *стоимость дома* y по его *площади* (x_1) и *количеству комнат* (x_2), *району* (x_3) и *удаленности от МКАД* (x_4).

$$a(x) = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + w_4x_4.$$

Проблема №1: район (x_3) – это не число, а название района. Например, Мамыри, Дудкино, Барвиха… Что с этим делать?

О ПРИМЕНИМОСТИ ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ

Пример:

Предположим, что мы хотим предсказать *стоимость дома* y по его *площади* (x_1) и *количеству комнат* (x_2), *району* (x_3) и *удаленности от МКАД* (x_4).

$$a(x) = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + w_4x_4.$$

Проблема №1: район (x_3) – это не число, а название района. Например, Мамыри, Дудкино, Барвиха… Что с этим делать?

Решение – one-hot encoding (OHE): создаем новые числовые столбцы, каждый из которых является индикатором района.

ONE-HOT ENCODING

Район
Дудкино
Барвиха
Мамыри
…
Барвиха

Мамыри	Дудкино	Барвиха
0	1	0
0	0	1
1	0	0
…	…	…
0	0	1

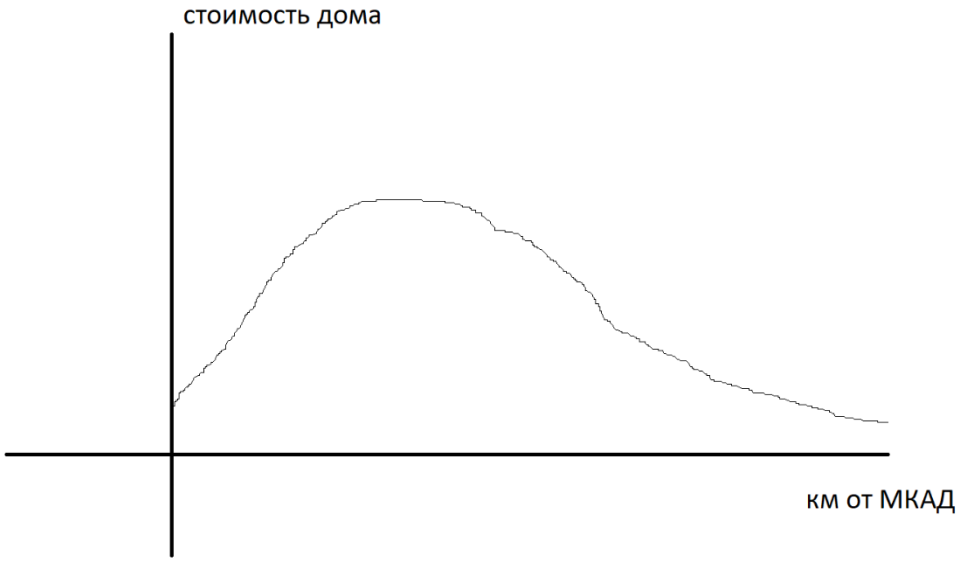
$$\boldsymbol{a(x)} =$$
$$= \boldsymbol{w_0} + \boldsymbol{w_1 x_1} + \boldsymbol{w_2 x_2} + \boldsymbol{w_{31}} \boldsymbol{x}_{\text{Мамыри}} + \boldsymbol{w_{32}} \boldsymbol{x}_{\text{Дудкино}} + \boldsymbol{w_{33}} \boldsymbol{x}_{\text{Барвиха}} + \boldsymbol{w_4}\, \boldsymbol{x_4}.$$

О ПРИМЕНИМОСТИ ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ

Пример:

Предположим, что мы хотим предсказать *стоимость дома* y по его *площади* (x_1) и *количеству комнат* (x_2), *району* (x_3) и *удаленности от МКАД* (x_4).

Проблема №2: удаленность от МКАД (x_4) не монотонно влияет на стоимость дома.



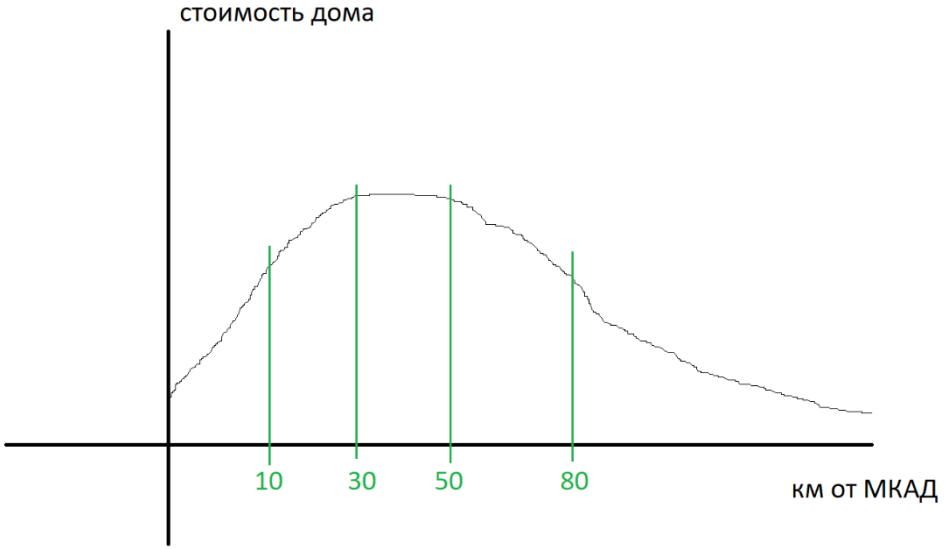
О ПРИМЕНИМОСТИ ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ

Проблема №2: удаленность от МКАД (x_4) не монотонно влияет на стоимость дома.

Решение – бинаризация (разбиение на бины).

Новые признаки:

- $x_{[0;10)}$ - равен 1, если дом находится в пределах 10 км от МКАД, и 0 иначе
- $x_{[10;30)}$ - равен 1, если дом находится в пределах от 10 км до 30 км МКАД, и 0 иначе. И т.д.



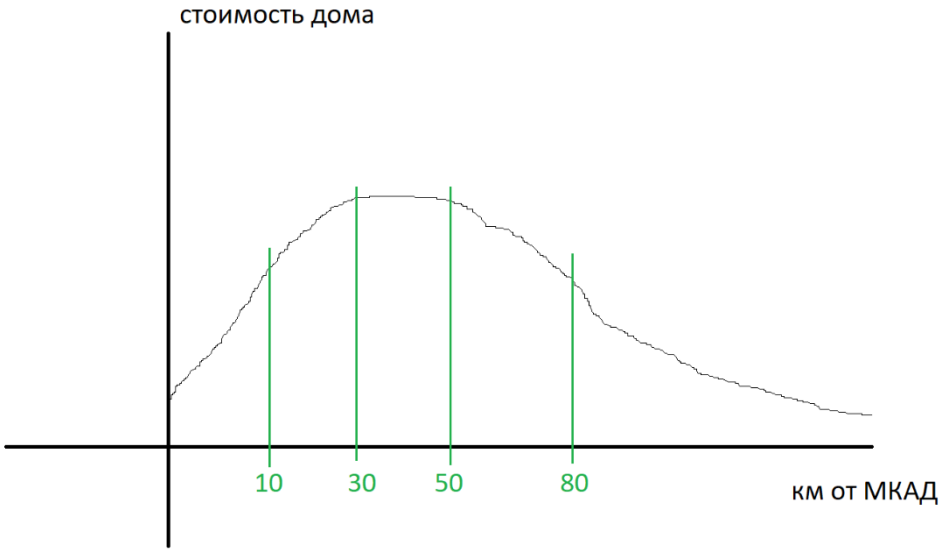
О ПРИМЕНИМОСТИ ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ

Проблема №2: удаленность от МКАД (x_4) не монотонно влияет на стоимость дома.

Решение – бинаризация (разбиение на бины).

Новые признаки:

- $x_{[0;10)}$ - равен 1, если дом находится в пределах 10 км от МКАД, и 0 иначе
- $x_{[10;30)}$ - равен 1, если дом находится в пределах от 10 км до 30 км МКАД, и 0 иначе. И т.д.



$$\boldsymbol{a(x) = } \\ \boldsymbol{= w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_{41} x_{[0;10)} + w_{42} x_{[10;30)} + w_{43} x_{[30;50)}} \\ \boldsymbol{+ w_{44} x_{\geq 50}}$$

МЕТРИКИ КАЧЕСТВА И ФУНКЦИОНАЛЫ ОШИБКИ В ЗАДАЧАХ РЕГРЕССИИ

МЕТРИКИ КАЧЕСТВА И ФУНКЦИИ ОШИБКИ

- **Функционал (функция) ошибки –** функция, которую минимизируют в процессе обучения модели для нахождения неизвестных параметров (весов).
- **Метрика качества –** функция, которую используют для оценки качества построенной (уже обученной) модели.

МЕТРИКИ КАЧЕСТВА И ФУНКЦИИ ОШИБКИ

- **Функционал (функция) ошибки –** функция, которую минимизируют в процессе обучения модели для нахождения неизвестных параметров (весов).
- **Метрика качества –** функция, которую используют для оценки качества построенной (уже обученной) модели.

Иногда одна и та же функция может использоваться и для обучения модели (функция ошибки), и для оценки качества модели (метрика качества).

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^{d} w_j x_j$$

Обучение линейной регрессии - минимизация среднеквадратичной ошибки:

$$\frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}(a(x_i) - y_i)^2 \to \min_w$$

СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ ОТКЛОНЕНИЕ: MSE (MEAN SQUARED ERROR)

Среднеквадратичное отклонение:

$$MSE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}(\boldsymbol{a(x_i) - y_i})^{\boldsymbol{2}}$$

СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ ОТКЛОНЕНИЕ: MSE (MEAN SQUARED ERROR)

Среднеквадратичное отклонение:

$$MSE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}(\boldsymbol{a(x_i) - y_i})^{\boldsymbol{2}}$$

Плюсы:

- Позволяет сравнивать модели
- Подходит для контроля качества во время обучения

СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ ОТКЛОНЕНИЕ: MSE

Среднеквадратичное отклонение:

$$MSE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}(\boldsymbol{a(x_i) - y_i})^2$$

Плюсы:

- Позволяет сравнивать модели
- Подходит для контроля качества во время обучения

Минусы:

- Плохо интерпретируется, т.к. не сохраняет единицы измерения (если целевая переменная – кг, то MSE измеряется в кг в квадрате)
- Тяжело понять, насколько хорошо данная модель решает задачу, так как MSE не ограничена сверху.

RMSE (ROOT MEAN SQUARED ERROR)

Корень из среднеквадратичной ошибки:

$$RMSE(a, X) = \sqrt{\frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}(a(x_i) - y_i)^2}$$

Плюсы:

- Все плюсы MSE
- **Сохраняет единицы измерения (в отличие от MSE)**

Минусы:

- Тяжело понять, насколько хорошо данная модель решает задачу, так как RMSE не ограничена сверху.

КОЭФФИЦИЕНТ ДЕТЕРМИНАЦИИ (R^2)

Коэффициент детерминации:

$$R^2(a, X) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{l}(a(x_i) - y_i)^2}{\sum_{i=1}^{l}(y_i - \overline{y})^2},$$

где $\overline{y} = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} y_i$.

КОЭФФИЦИЕНТ ДЕТЕРМИНАЦИИ (R^2)

Коэффициент детерминации:

$$R^2(a, X) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{l}(a(x_i) - y_i)^2}{\sum_{i=1}^{l}(y_i - \overline{y})^2},$$

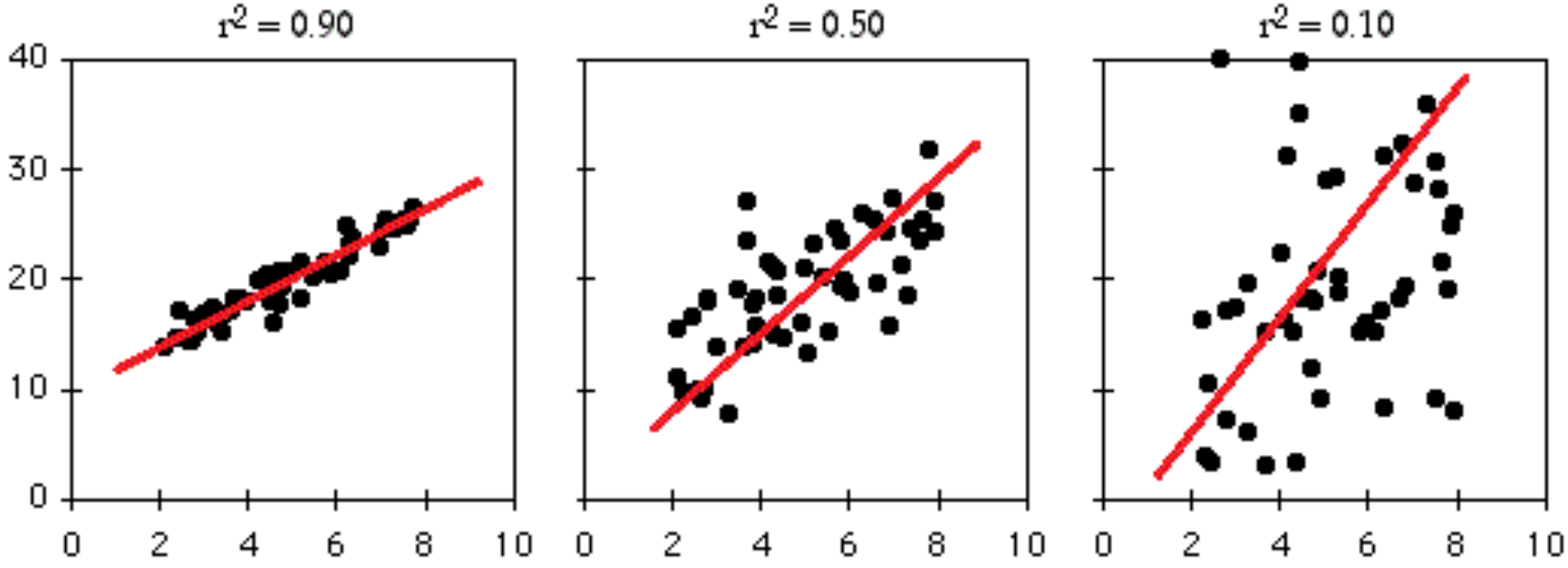
где $\overline{y} = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} y_i$.

Коэффициент детерминации это доля дисперсии целевой переменной, объясняемая моделью.

- Чем ближе R^2 к 1, тем лучше модель объясняет данные
- Чем ближе R^2 к 0, тем ближе модель к константному предсказанию
- Отрицательный R^2 говорит о том, что модель плохо решает задачу

КОЭФФИЦИЕНТ ДЕТЕРМИНАЦИИ (R^2)

$$\boldsymbol{R^2 \leq 1}$$



MAE (MEAN ABSOLUTE ERROR)

Средняя абсолютная ошибка:

$$MAE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} |\boldsymbol{a(x_i) - y_i}|$$

MAE (MEAN ABSOLUTE ERROR)

Средняя абсолютная ошибка:

$$MAE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} |\boldsymbol{a(x_i) - y_i}|$$

Плюсы:

- Менее чувствителен к выбросам, чем MSE

MAE (MEAN ABSOLUTE ERROR)

Средняя абсолютная ошибка:

$$MAE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} |\boldsymbol{a(x_i) - y_i}|$$

Плюсы:

- Менее чувствителен к выбросам, чем MSE

Минусы:

- MAE - не дифференцируемый функционал

MAPE

MAPE – Mean Absolute Percentage Error:

$$MAPE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\frac{|y_i - a(x_i)|}{|y_i|}$$

MAPE измеряет относительную ошибку.

MAPE

$$MAPE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\frac{|y_i - a(x_i)|}{|y_i|}$$

Плюсы:

- Ограничена: $0 \leq MAPE \leq 1$
- Хорошо интерпретируема: например, MAPE=0.16 означает, что ошибка модели в среднем составляет 16% от фактических значений.

MAPE

$$MAPE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\frac{|y_i - a(x_i)|}{|y_i|}$$

Плюсы:

- Ограничена: $0 \leq MAPE \leq 1$
- Хорошо интерпретируема: например, MAPE=0.16 означает, что ошибка модели в среднем составляет 16% от фактических значений.

Минусы:

- По-разному относится к недо- и перепрогнозу. Например, если правильный ответ $y = 10$, а прогноз $a(x) = 20$, то ошибка $\frac{|10-20|}{|10|} = \mathbf{1}$, а если ответ $y = 30$, то ошибка $\frac{|30-20|}{|30|} = \frac{1}{3} \approx \mathbf{0.33}$.

SMAPE

SMAPE – *Symmetric Mean Absolute Percentage Error* (симметричный вариант MAPE):

$$SMAPE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\frac{|\boldsymbol{y_i - a(x_i)}|}{(|\boldsymbol{y_i}| + |\boldsymbol{a(x_i)}|)/\boldsymbol{2}}$$

SMAPE – попытка сделать симметричным прогноз (то есть дать одинаковую ошибку для недо- и перепрогноза).

SMAPE

SMAPE – *Symmetric Mean Absolute Percentage Error* (симметричный вариант MAPE):

$$SMAPE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\frac{|y_i - a(x_i)|}{(|y_i| + |a(x_i)|)/2}$$

SMAPE – попытка сделать симметричным прогноз (то есть дать одинаковую ошибку для недо- и перепрогноза).

<u>Проверим:</u>

Пусть правильный ответ $y = 10$, а прогноз $a(x) = 20$, то ошибка $\frac{|10-20|}{|10+20|/2} = \frac{2}{3} \approx 0.67$, а если ответ $y = 30$, то ошибка $\frac{|30-20|}{|30+20|/2} = \frac{2}{5} = 0.4$.

SMAPE

SMAPE – попытка сделать симметричным прогноз (то есть дать одинаковую ошибку для недо- и перепрогноза).

Проверим:

Пусть правильный ответ $\boldsymbol{y = 10}$, а прогноз $\boldsymbol{a(x) = 20}$, то ошибка $\frac{|10-20|}{|10+20|/2} = \frac{2}{3} \approx \boldsymbol{0.67}$, а если ответ $\boldsymbol{y = 30}$, то ошибка $\frac{|30-20|}{|30+20|/2} = \frac{2}{5} = \boldsymbol{0.4}$.

Ошибки стали меньше отличаться друг от друга, но всё-таки не равны.

SMAPE

SMAPE – попытка сделать симметричным прогноз (то есть дать одинаковую ошибку для недо- и перепрогноза).

“Сейчас уже в среде прогнозистов сложилось более-менее устойчивое понимание, что SMAPE не является хорошей ошибкой. Тут дело не только в завышении прогнозов, но ещё и в том, что наличие прогноза в знаменателе позволяет манипулировать результатами оценки.” (см. источник)

MSLE (MEAN SQUARED LOGARITHMIC ERROR)

Среднеквадратичная логарифмическая ошибка:

$$\mathrm{M}SLE(a,X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\left(\mathbf{\log(a(x_i)+1) - \log(y+1)}\right)^{\mathbf{2}}$$

- Подходит для задач с неотрицательной целевой переменной ($y \geq 0$)
- Штрафует за отклонения в порядке величин
- Штрафует заниженные прогнозы сильнее, чем завышенные