Отчёт по лабораторной работе №3 "Переобучение и регуляризация"

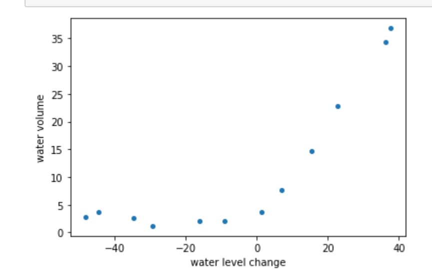
In [1]:
```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import warnings
warnings.filterwarnings('ignore')

%matplotlib inline
```

1. Загрузите данные ex3data1.mat из файла.

In [3]:
```python
from scipy.io import loadmat

def reshape(arr):
    return arr.reshape(arr.shape[0])

mat = loadmat('ex3data1.mat')
X_train, y_train = mat['X'], reshape(mat['y'])
X_val, y_val = mat['Xval'], reshape(mat['yval'])
X_test, y_test = mat['Xtest'], reshape(mat['ytest'])
```

2. Постройте график, где по осям откладываются X и y из обучающей выборки.

In [4]:
```python
plt.plot(X_train, y_train, 'o', markersize=4)
plt.xlabel('water level change')
plt.ylabel('water volume')
plt.show()
```



Реализация линейной регрессии с L2-регуляризацией представлена в классе `LinearRegressionRegularized`

In [5]:
```python
class LinearRegressionRegularized:
    THRESHOLD = 1e-6

    def __init__(self, max_steps=500000, learning_rate=0.01, reg_L=0.5, normalize=False, method=None
):
        self.weights = None
        self.normalize = normalize
        self.max_steps = max_steps
        self.learning_rate = learning_rate
        self.reg_L = reg_L
        self.method = method

    def predict(self, X):
        if self.weights is None:
            raise Exception("Model is not trained. Call `fit` method.")

        A = np.insert(X, 0, 1)
        return self.calculate_hypotesis(A)

    def fit(self, X, y):
        X = X.astype('float64')
        y = y.astype('float64')

        if self.normalize:
            X = self.normalize_features(X)

        X = np.column_stack((np.ones(X.shape[0]), X))

        if self.method == 'normal_equation':
            self.weights = self.normal_equation(X, y)
            return

        self.gradient_descent(X, y)

    def normalize_features(self, X):
        N = X.shape[1]
        copy_X = X.copy()
        for i in range(N):
            feature = X[:, i]
            mean = np.mean(feature)
            delta = np.max(feature) - np.min(feature)
            copy_X[:, i] -= mean
            copy_X[:, i] /= delta
        return copy_X

    def normal_equation(self, X, y):
        return np.linalg.inv(X.T.dot(X)).dot(X.T).dot(y)

    def cost_func(self, X, y, weights=None):
        if weights is None:
            weights = self.weights

        predictions = self.calculate_hypotesis(X, weights)
        sq_error = (predictions - y) ** 2

        weights_R = weights[1:]
        total_cost = sq_error.sum() + self.reg_L * np.dot(weights_R.T, weights_R)
        return total_cost / 2 / X.shape[0]

    def calculate_hypotesis(self, X, weights=None):
        if weights is None:
            weights = self.weights

        if len(X.shape) > 1 and X.shape[1] < weights.shape[0]:
            X = np.column_stack((np.ones(X.shape[0]), X))

        return X.dot(weights)

    def gradient_descent(self, X, y):
        self.cost_history = []
        self.weights = np.zeros(X.shape[1])
        cur_loss = self.cost_func(X, y)

        cur_step = 0
        while cur_step < self.max_steps:
            cur_step += 1
            self.gradient_descent_step(X, y)
            new_loss = self.cost_func(X, y)
            self.cost_history.append(new_loss)
            if abs(new_loss - cur_loss) < self.THRESHOLD:
                break

            cur_loss = new_loss

    def gradient_descent_step(self, X, y):
        predictions = self.calculate_hypotesis(X)
        diff = predictions - y
        gradient_first = np.dot(X.T[:1], diff)
        gradient_full = np.dot(X.T[1:], diff) + self.reg_L * self.weights[1:]
        gradient = np.insert(gradient_full, 0, gradient_first)
        gradient /= X.shape[0]
        gradient *= self.learning_rate
        self.weights -= gradient
```

3. Реализуйте функцию стоимости потерь для линейной регрессии с L2-регуляризацией.

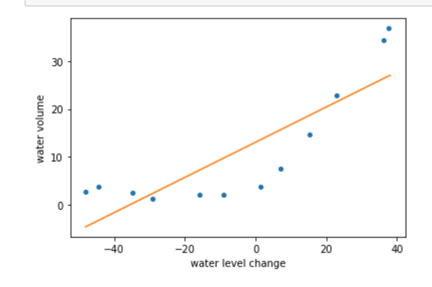
функцию стоимости потерь для линейной регрессии с L2-регуляризацией реализована в классе `LogisticRegressionRegularized` в методе `gradient_descent`.

4. Реализуйте функцию градиентного спуска для линейной регрессии с L2-регуляризацией.

Функция градиентного спуска для линейной регрессии с L2-регуляризацией реализована в классе `LogisticRegressionRegularized` в методах `gradient_descent` и `gradient_descent_step`.

5. Постройте модель линейной регрессии с коэффициентом регуляризации 0 и постройте график полученной функции совместно с графиком из пункта 2. Почему регуляризация в данном случае не сработает?

In [6]:
```python
lin = LinearRegressionRegularized(learning_rate=0.001, reg_L=0)
lin.fit(X_train, y_train)

min_x, max_x = int(min(X_train)), int(max(X_train)) + 1
xi = list(range(min_x, max_x + 1))
line = [lin.predict(np.array(i)) for i in xi]
plt.plot(X_train, y_train, 'o', xi, line, markersize=4)
plt.xlabel('water level change')
plt.ylabel('water volume')
plt.show()
```



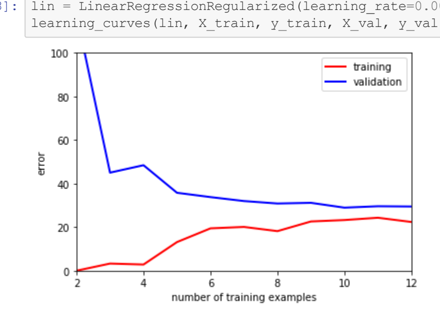
В данном случае регуляризация не работает, потому что при нулевом коэфиценте регуляризация функция стоимости потерь и функция градиента приобретает изначальный вид, как при обычной линейной регрессии, т.е. дополнительные слагаемые в этих функциях не играют никакой роли, так как они равны нулю.

График показывает, что простая линейная регрессия не подходит для этой задачи

6. Постройте график процесса обучения (learning curves) для обучающей и валидационной выборки. По оси абсцисс откладывается число элементов из обучающей выборки, а по оси ординат - ошибка (значение функции потерь) для обучающей выборки (первая кривая) и валидационной выборки (вторая кривая). Какой вывод можно сделать по построенному графику?

In [7]:
```python
def learning_curves(lin, X_train, y_train, X_val, y_val, max_axis=100):
    N = len(y_train)
    train_err = np.zeros(N)
    val_err = np.zeros(N)

    for i in range(1, N):
        lin.fit(X_train[0:i + 1, :], y_train[0:i + 1])
        train_err[i] = lin.cost_func(X_train[0:i + 1, :], y_train[0:i + 1])
        val_err[i] = lin.cost_func(X_val, y_val)

    plt.plot(range(2, N + 1), train_err[1:], c="r", linewidth=2)
    plt.plot(range(2, N + 1), val_err[1:], c="b", linewidth=2)
    plt.xlabel("number of training examples")
    plt.ylabel("error")
    plt.legend(["training", "validation"], loc="best")
    plt.axis([2, N, 0, max_axis])
    plt.show()
```

In [8]:
```python
lin = LinearRegressionRegularized(learning_rate=0.001, reg_L=0)
learning_curves(lin, X_train, y_train, X_val, y_val)
```



Исходя из графика можно сделать вывод, ошибка (значение функии потерь) ни обучающей выборки, ни тренировочной не смогла быть уменьшена в достаточной степени. Это значит, что модель недообучена (high bias problem).

7. Реализуйте функцию добавления p - 1 новых признаков в обучающую выборку (X^2, X^3, X^4, …, X^p).

In [10]:
```python
def poly_features(X, p):
    x = X.reshape(X.shape[0])
    X_res = np.array(x)

    for i in range(2, p + 1):
        X_res = np.column_stack((X_res, x ** i))

    return X_res
```

8. Поскольку в данной задаче будет использован полином высокой степени, то необходимо перед обучением произвести нормализацию признаков.

Нормализация реализована в классе `LinearRegressionRegularized` в методе `normalize_features`.

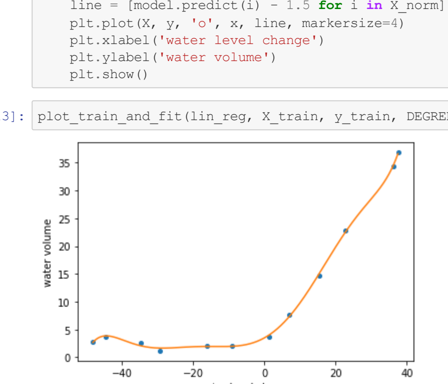
9. Обучите модель с коэффициентом регуляризации 0 и p = 8.

In [11]:
```python
DEGREE = 8
lin_reg = LinearRegressionRegularized(learning_rate=1.99999, reg_L=0)
X_train_poly = lin_reg.normalize_features(poly_features(X_train, DEGREE))
lin_reg.fit(X_train_poly, y_train)
```

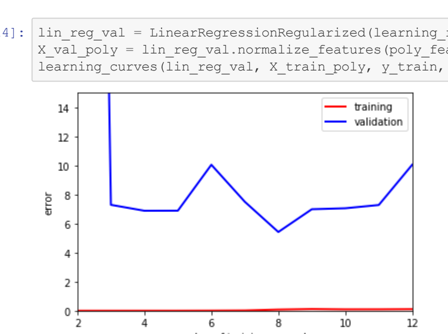
10. Постройте график модели, совмещенный с обучающей выборкой, а также график процесса обучения. Какой вывод можно сделать в данном случае?

In [12]:
```python
def plot_train_and_fit(model, X, y, degree):
    x = np.linspace(min(X), max(X), 1000)
    X_poly = poly_features(x, degree)
    X_norm = model.normalize_features(X_poly)
    line = [model.predict(i) - 1.5 for i in X_norm]
    plt.plot(X, y, 'o', x, line, markersize=4)
    plt.xlabel('water level change')
    plt.ylabel('water volume')
    plt.show()
```

In [13]:
```python
plot_train_and_fit(lin_reg, X_train, y_train, DEGREE)
```



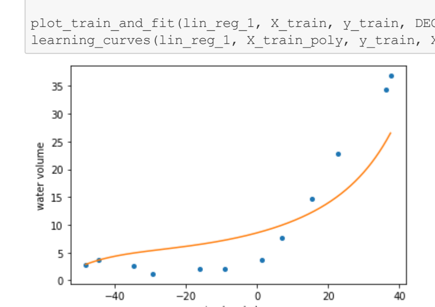
In [14]:
```python
lin_reg_val = LinearRegressionRegularized(learning_rate=1.7, reg_L=0)
X_val_poly = lin_reg_val.normalize_features(poly_features(X_val, DEGREE))
learning_curves(lin_reg_val, X_train_poly, y_train, X_val_poly, y_val, max_axis=15)
```

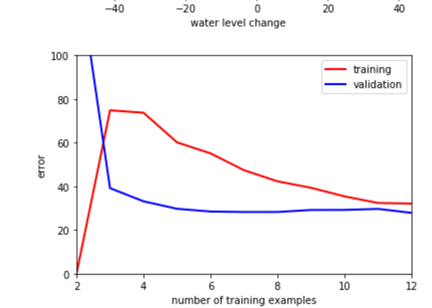


Ошибка на обучающей выборке приблизительно равна нулю, а на валидационной выборке не может сойтись. Это говорит о том, что в данном случае мы наблюдаем переобучение модели (high variance problem).

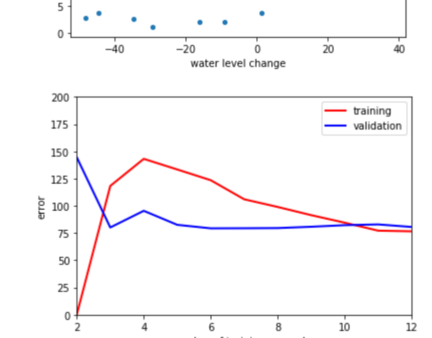
11. Постройте графики из пункта 10 для моделей с коэффициентами регуляризации 1 и 100. Какие выводы можно сделать?

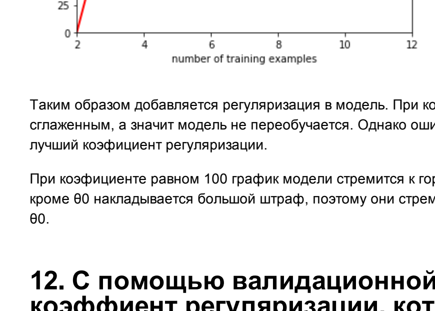
In [15]:
```python
lin_reg_1 = LinearRegressionRegularized(learning_rate=1.5, reg_L=1)
lin_reg_1.fit(X_train_poly, y_train)

plot_train_and_fit(lin_reg_1, X_train, y_train, DEGREE)
learning_curves(lin_reg_1, X_train_poly, y_train, X_val_poly, y_val)
```





In [16]:
```python
lin_reg_100 = LinearRegressionRegularized(learning_rate=0.001, reg_L=100)
lin_reg_100.fit(X_train_poly, y_train)

plot_train_and_fit(lin_reg_100, X_train, y_train, DEGREE)
learning_curves(lin_reg_100, X_train_poly, y_train, X_val_poly, y_val, max_axis=200)
```





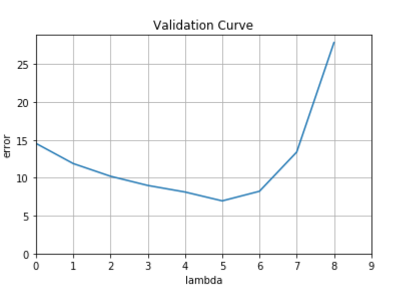
Таким образом добавляется регуляризация в модель. При коэфициенте равном 1 график модели стал более сглаженным, а значит модель не переобучается. Однако ошибка всё ещё большая. Это значит можно подобрать лучший коэфициент регуляризации.

При коэфициенте равном 100 график модели стремится к горизонтальной прямой. Это связано с тем что на все веса кроме θ0 накладывается большой штраф, поэтому они стремятся к нулю, а функция стоимости стоимости стремится к θ0.

12. С помощью валидационной выборки подберите коэффиент регуляризации, который позволяет достичь наименьшей ошибки. Процесс подбора отразите с помощью графика (графиков).

In [17]:
```python
lambda_values = [0, 0.001, 0.003, 0.006, 0.01, 0.03, 0.1, 0.3, 1]
validation_error = []

for lamb in lambda_values:
    lin_reg_lamb = LinearRegressionRegularized(learning_rate=0.5, reg_L=lamb)
    lin_reg_lamb.fit(X_train_poly, y_train)
    cost = lin_reg_lamb.cost_func(X_val_poly, y_val)
    validation_error.append(cost)

OPTIMAL_LAMBDA = lambda_values[np.argmin(np.array(validation_error))]
print(f"Minimum error is for lambda = {OPTIMAL_LAMBDA}")
plt.plot(list(range(len(lambda_values))), validation_error)
plt.axis([0, len(lambda_values), 0, max(validation_error) + 1])
plt.xlabel("lambda")
plt.ylabel("error")
plt.title("Validation Curve")
plt.grid()
```

```
Minimum error is for lambda = 0.03
```



13. Вычислите ошибку (потерю) на контрольной выборке.

In [18]:
```python
lin_test = LinearRegressionRegularized(learning_rate=1.99999, reg_L=OPTIMAL_LAMBDA)
lin_test.fit(X_train_poly, y_train)

X_test_poly = lin_test.normalize_features(poly_features(X_test, DEGREE))
final_cost = lin_test.cost_func(X_test_poly, y_test)
print(f"Error on test set is {final_cost}")
```

```
Error on test set is 11.898903992510654
```