

## Регрессия и использование библиотеки Scikit-learn в задачах обучения с учителем

#### Урок 3

На этой лекции вы узнаете:

- Что такое обучение с учителем.
- Что такое линейная регрессия
- Как считать метрики качества модели линейной регрессии.





#### Булгакова Татьяна

Преподаватель в GeekBrains, Нетология, Skillfactory

С 2010 года занимаюсь DataScience и NN. Фрилансер

- Участвовала в разработке программы по настройке оборудования для исследования пространственного слуха китообразных НИИ ИПЭЭ РАН
- Участвую в разработке рекомендательных систем по настройке нейростимуляторов для медицинских центров
- Работаю над курсом по нейронным сетям



#### План курса

1 Первичный и визуальный анализ данных

> Описательные статистики в контексте EDA. Корреляция и корреляционный анализ

Регрессия и использование библиотеки Scikit-learn в задачах обучения с учителем

4 Классификация и использование логистической регрессии в задачах классификации

5 Функционалы ошибки и поиск оптимальных параметров в задачах машинного обучения

6 Проблема переобучения и недообучения модели. Кросс-валидация и регуляризация.

Ансамблирование и использование деревьев решений в задачах машинного обучения

8

Генерация признаков. Методы отбора признаков. Подбор гиперпараметров. Обучение без учителя. Понижение размерности. Алгоритмы понижения размерности

10 Кластеризация и решение задачи группировки данных в машинном обучении



## Что будет на уроке сегодня

- **У** Что такое обучение с учителем.
- Что такое линейная регрессия
- 📌 Метрики задачи регрессии



### Задачи машинного обучения





### Задачи машинного обучения имеют много общего.



**Во-первых,** их решения можно описать как функции, которые отображают объекты или примеры (samples) в предсказании (target).



**Во-вторых,** эти задачи вряд ли имеют единственное идеальное решение.



#### В-третьих,

Функция, которая сопоставляет объекты с предсказаниями, называется моделью, а набор доступных примеров - обучающей выборкой или набором данных.



#### Виды машинного обучения

Большинство методов машинного обучения относят к обучению с учителем (supervised learning) и без учителя (unsupervised learning). «Учитель» здесь – это не конкретный человек, а сам факт вмешательства в процесс обработки данных.

#### С учителем

В идеальном случае у нас есть исходные данные, т. е. правильные ответы для системы.

#### Без учителя

Здесь готовых ответов нет, но менее интересно не становится, даже наоборот. Представьте, что мы знаем рост и вес большой группы людей, в соответствии с чем нужно пошить одежду трёх видов. Это кластеризация (строгого и единственно верного деления тут нет).



## Задача обучения с учителем - В зависимости от содержания обучающего множества задачи контролируемого обучения могут быть следующих типов:

#### Задача регрессии

предсказания вещественного значения: примерами задач регрессии является предсказание продолжительности поездки на каршеринге, спрос на конкретный товар в конкретный день

#### Задача классификации

- предсказания категориального ответа (метки класса) с конечным количеством вариантов

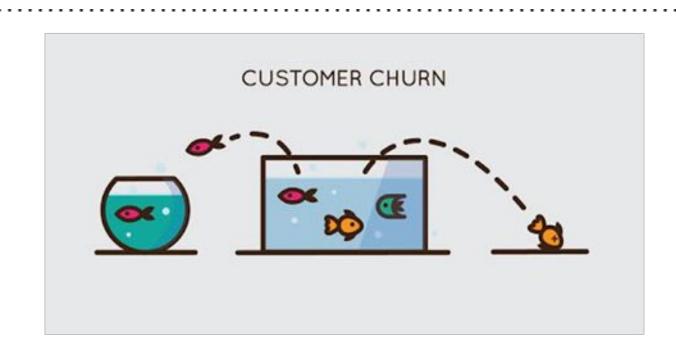
#### Ранжирование

Основным примером является задача ранжирования в поисковой системе. Здесь для любого заданного запроса все возможные документы должны быть ранжированы в соответствии с их релевантностью запросу.



## Классификация







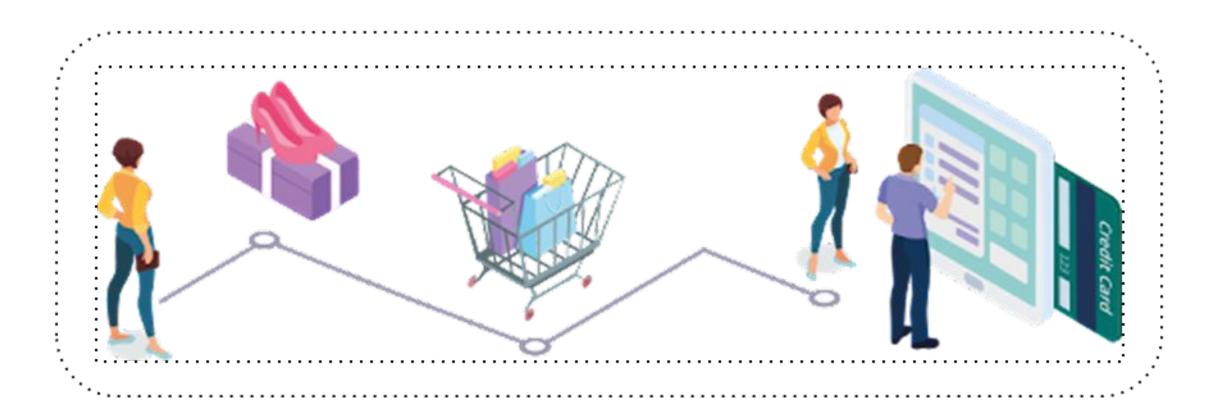




## Регрессия









#### Регрессия

#### Задание:

Определите тип задачи: Предсказание курса евро к доллару на следующий день.

Ответ: Это задача регрессии. Модель предсказывает вещественное число



#### Критерии качества.

**Числовые** - например, рост, доход и т.д. Можно выделить вещественные и целочисленные атрибуты.

**Категориальные** атрибуты принимают значения из дискретного набора. Например, профессия человека или день недели.

**Бинарные** атрибуты принимают два значения: 0 и 1 или "да" и "нет". Его можно рассматривать и как числовой, и как категориальный атрибут.

**Категориальный** атрибут иногда также называют порядковым атрибутом. Этот атрибут принимает значения из упорядоченного дискретного множества. Например, класс опасности химического вещества (1-4) или продолжительность обучения студента в магистратуре являются порядковыми атрибутами.



#### Критерии качества.

Создание информативных описаний признаков имеет решающее значение для дальнейшего анализа. Однако следует также обратить внимание на качество полученных данных.

- **Пропуски** (отсутствующие значения).
- Выбросы это объекты, которые значительно отличается от других.
- Ошибка разметки.
- Дрейф данных. Данные могут меняться с течением времени.



#### Обучение алгоритма машинного обучения

Модель можно представить как функцию с параметрами, где  $\theta$  - параметры алгоритма,  $\varepsilon$  - неустранимая ошибка

$$y = f(\theta) + \varepsilon$$

**Параметры алгоритма** можно разделить на обучаемые (просто параметры) и необучаемые (гиперпараметры). Параметры модели задают семейство функций



#### Линейные модели

Линейные модели предполагают, что определяемый критерий линейно зависит от признаков описывающих объект или процесс

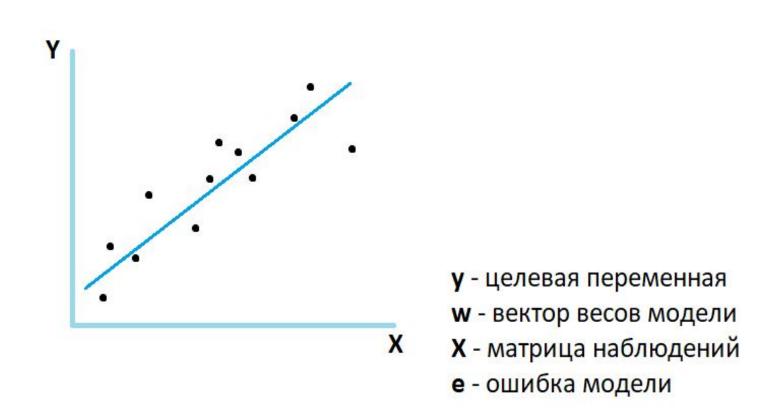
Линейная модель является прозрачной и понятной для аналитика. По полученным коэффициентам регрессии можно судить о том, как тот или иной фактор влияет на результат и сделать на этой основе дополнительные полезные выводы

Большое количество реальных процессов в экономике и бизнесе можно с достаточной точностью описать линейными моделями

Для линейной регрессии известны типичные проблемы (например, мультиколлинеарность) и их решения. Разработаны и реализованы тесты оценки статистической значимости получаемых моделей



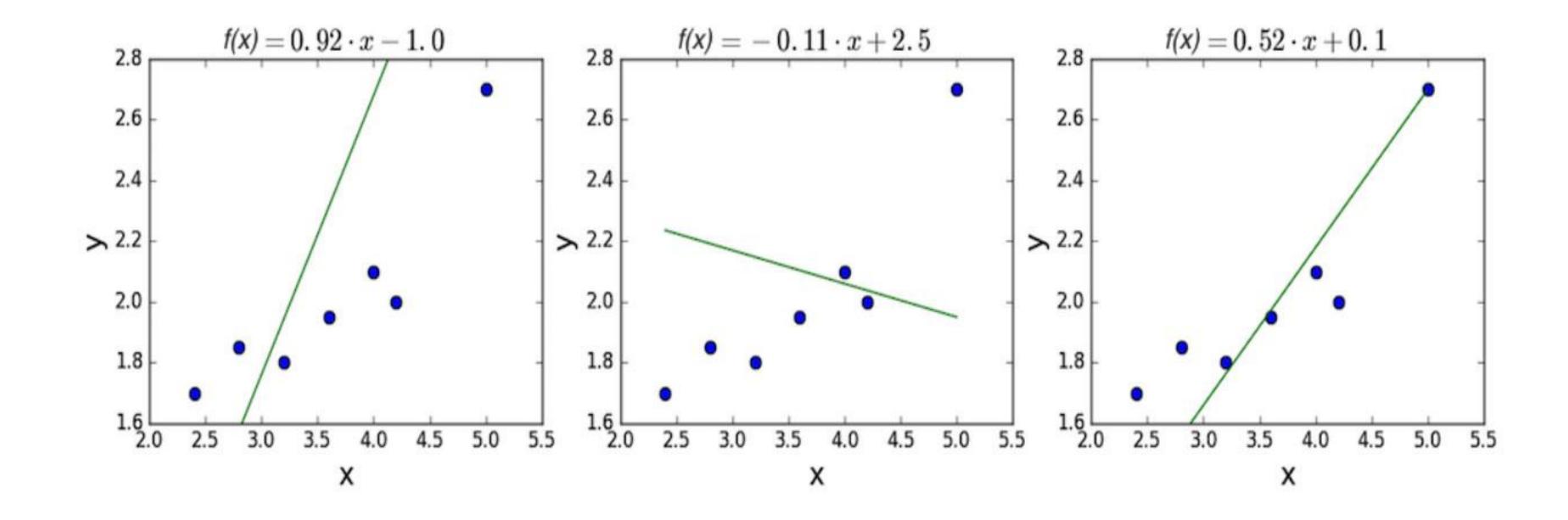
Регрессионная модель - это функция, которая принимает на вход значения атрибутов данного объекта и выдает на выходе ожидаемое значение целевой переменной.



$$y = w_1x_1 + \ldots + w_Dx_D + w_0$$
  $y_i = \sum_{j=1}^m w_jX_{ij} + e_i$ 

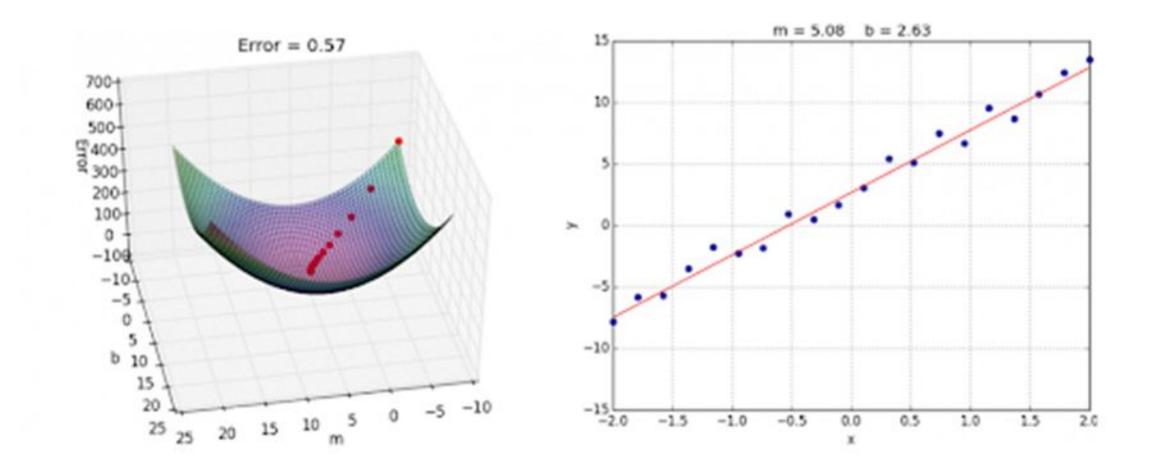


Цель линейной регрессии - найти линию, которая лучше всего подходит к этим точкам.



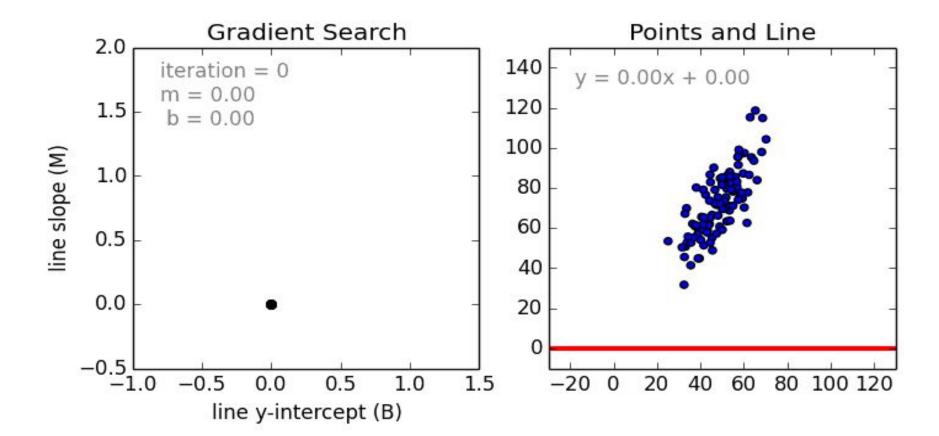


Цель линейной регрессии - найти линию, которая лучше всего подходит к этим точкам.





Парная (простая) линейная регрессия—это модель, позволяющая моделировать взаимосвязь между значениями одной входной независимой и одной выходной зависимой переменными с помощью линейной модели, например, прямой.



Более распространенной моделью является **множественная линейная регрессия**, которая предполагает установление линейной зависимости между множеством входных независимых и одной выходной зависимой переменных.



Несколько важных пунктов о линейной регрессии:

- Она легко моделируется и является особенно полезной при создании не очень сложной зависимости, а также при небольшом количестве данных.
- Обозначения интуитивно-понятны.
- Чувствительна к выбросам.



#### Полиномиальная регрессия

Для создания такой модели, которая подойдет для нелинейно разделяемых данных, можно использовать полиномиальную регрессию.

В данном методе проводится кривая линия, зависимая от точек плоскости. В полиномиальной регрессии степень некоторых независимых переменных превышает 1. Например, получится что-то подобное:

$$Y = a_1*X_1 + (a_2)^2*X_2 + (a_3)^4*X_3 ..... a_n*X_n + b$$



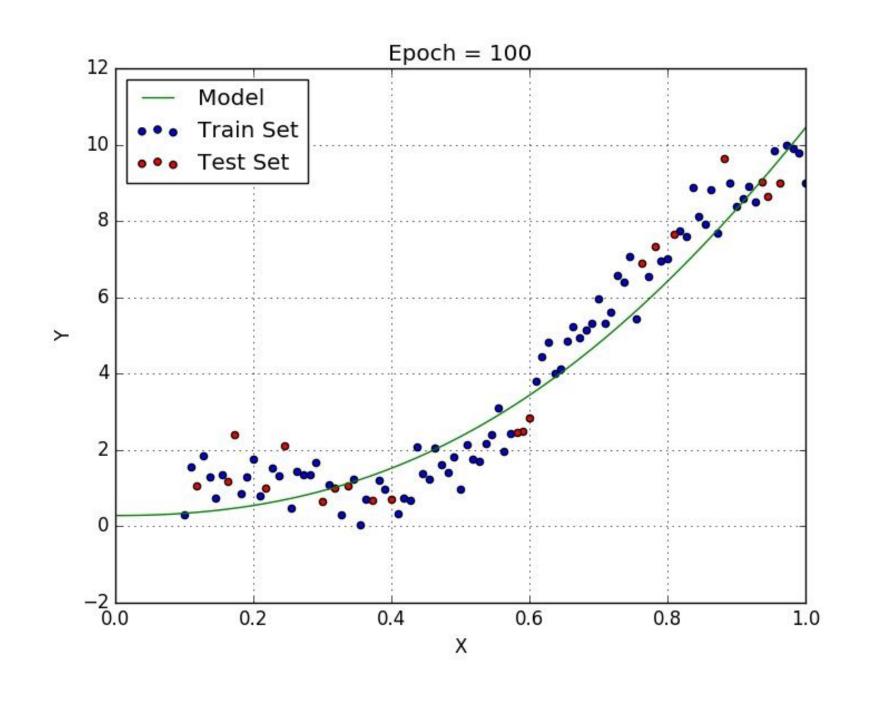
#### Полиномиальная регрессия

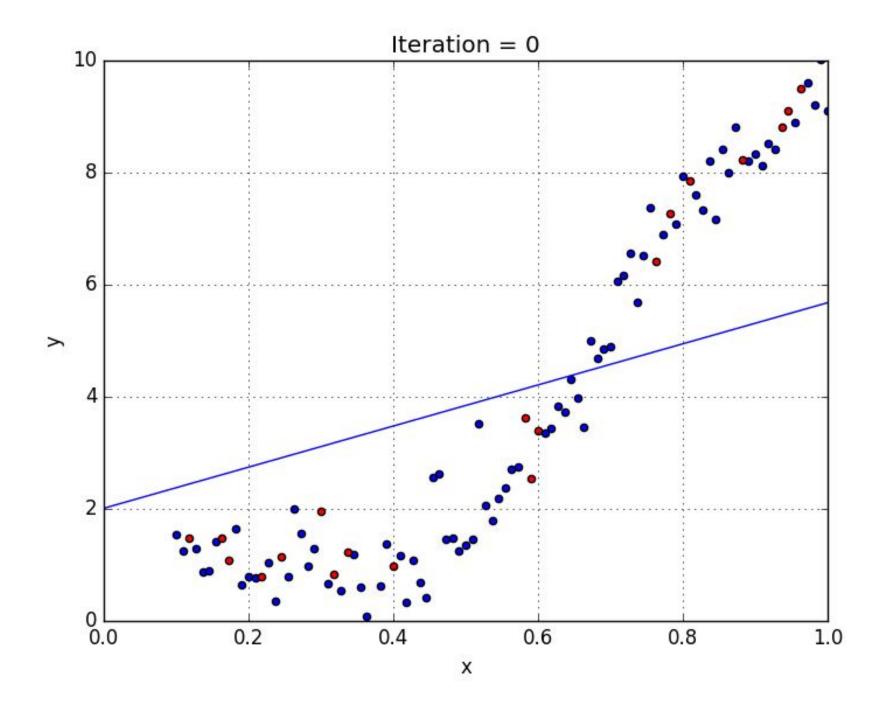
Несколько важных пунктов о полиномиальной регрессии:

- Моделирует нелинейно разделенные данные (чего не может линейная регрессия). Она более гибкая и может моделировать сложные взаимосвязи.
- Полный контроль над моделированием переменных объекта (выбор степени).
- Необходимо внимательно создавать модель.
- Необходимо обладать некоторыми знаниями о данных, для выбора наиболее подходящей степени
- При неправильном выборе степени, данная модель может быть перенасыщена.



## Сравнение Полиномиальная регрессия и Линейная регрессия



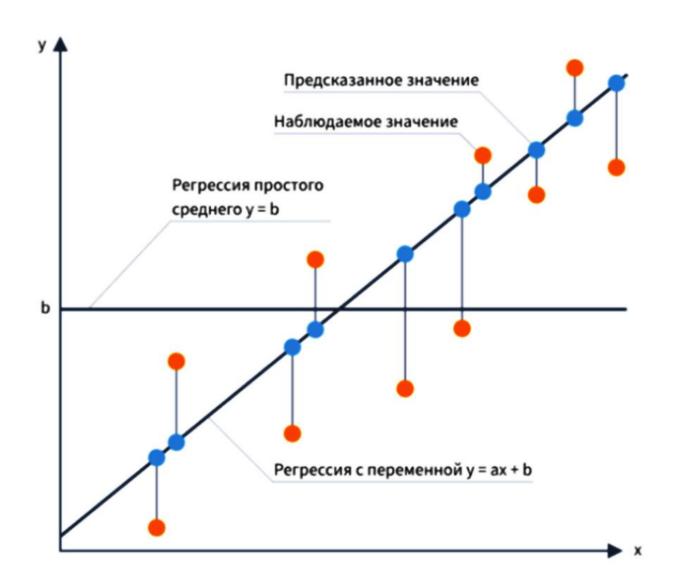




#### Метрики регрессии

Задача регрессии – предсказания вещественного значения.

Наклонная линия представляет собой линию регрессии с переменной, имеющей точки, соответствующие прогнозируемому значению выходной переменной (кружки синего цвета). Оранжевые кружки представляют фактические (наблюдаемые) значения у





## MSE - Среднеквадратичная ошибка (Mean Squared Error)

Используется, когда вы хотите подчеркнуть большие ошибки и хотите выбрать модель с точно меньшим количеством больших ошибок. Большие значения ошибок подчеркиваются изза квадратичной зависимости.

$$MSE = rac{1}{n} \sum_{i=0}^{n} \left(y_i - \widetilde{y_i}
ight)^2$$

Недостатки использования MSE является то, что если один или несколько случаев ошибок (возможно, включая выбросы) приводят к большим ошибкам, то их возведение в квадрат приводит к ошибочному выводу о низкой эффективности модели в целом. С другой стороны, если модель дает небольшие ошибки во многих случаях, это может иметь обратный эффект, т.е. недооценить слабость модели.



# RMSE - Корень из среднеквадратичной ошибки (Root Mean Squared Error)

$$RMSE = \sqrt{rac{1}{n}\sum_{i=0}^{n}\left(y_i - \widetilde{y_i}
ight)^2}$$

Влияние каждой ошибки на RMSE пропорционально размеру квадрата ошибки. Поэтому большие ошибки оказывают непропорционально большое влияние на RMSE. В результате RMSE можно считать чувствительным к выбросам.



#### MAE - Средняя абсолютная ошибка (Mean Absolute Error)

$$MAE = rac{1}{n} \sum_{i=0}^n |y_i - \widetilde{y_i}|$$

То есть, МАЕ рассчитывается как среднее абсолютных значений разницы между наблюдаемыми и предсказанными значениями; в отличие от MSE и RMSE, это линейная оценка, поэтому все ошибки в среднем имеют одинаковый вес.



# MAPE - Средняя абсолютная процентная ошибка (Mean Absolute Percentage Error)

$$MAPE = rac{100}{n} \sum_{i=0}^{n} rac{|y_i - \widetilde{y_i}|}{ ilde{y}}$$

Эта ошибка не имеет размерности и очень легко интерпретируется. Она может быть выражена в виде дроби или процента.



#### R-квадрат

Коэффициента детерминации, который указывает на долю дисперсии зависимой переменной, объясненную регрессионной моделью. Наиболее распространенные формулы, используемые для расчета коэффициента детерминации, следующие:

$$R^2 = 1 - rac{\sum_{i=1}^n (\widehat{y_i} - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (\overline{y_i} - y_i)^2}$$

- Основное преимущество коэффициента детерминации перед мерами, основанными на ошибках, заключается в том, что он инвариантен по отношению к масштабу данных
- Кроме того, он всегда находится в диапазоне от -∞ до 1. Значения, близкие к 1, указывают на то, что модель хорошо согласуется с данными.



#### Скорректированный R-квадрат

С коэффициентом детерминации связаны две проблемы.

Первая заключается в том, что не все переменные, добавленные в модель, делают точность модели значимой и всегда увеличивают ее сложность.

Вторая проблема заключается в том, что коэффициент детерминации нельзя использовать для сравнения моделей с разным количеством переменных.

Для преодоления этих проблем используются альтернативные показатели, одним из которых является скорректированный коэффициент детерминации .

$$R_{adj}^2 = 1 - rac{rac{\sum_{i=1}^n (\widehat{y_i} - y_i)}{n-k}}{rac{\sum_{i=1}^n (\overline{y_i} - y_i)}{n-k}}$$



#### Вывод:

- Обучение с учителем является одним из наиболее распространенных методов машинного обучения. В процессе обучения модели, аналитик использует данные, которые уже имеют определенную разметку для того, чтобы научиться прогнозировать новые значения.
- Одной из задач обучения с учителем является задача регрессии, которая заключается в прогнозировании непрерывной переменной на основе заданных входных данных.
- Линейная регрессия является одной из наиболее популярных и простых моделей регрессии,
   которую мы рассмотрим в данной лекции.
- Эта тема является важной для обучения, поскольку многие реальные задачи данных связаны
  с прогнозированием непрерывных переменных, таких как доход или цена на недвижимость.
- Поэтому, понимание линейной регрессии является необходимым для успеха в области машинного обучения и анализе данных.



#### Итоги урока:

- Линейная регрессия это статистический метод, используемый для определения отношения между независимой и зависимой переменными.
- Пинейная регрессия может быть однофакторной (когда есть только одна независимая переменная) и множественной (когда несколько переменных влияют на зависимую переменную)..
- Цель линейной регрессии найти уравнение линии, которая наилучшим образом соответствует наблюдаемым данным.
- Линейная регрессия также может быть расширена до нелинейных моделей, применением полиномиальной регрессии или других нелинейных методов
- Линейная регрессия это мощный и универсальный инструмент для анализа данных, который может быть применен в широком спектре задач, требующих анализа зависимостей между переменными.







## Спасибо за внимание

