Задача регрессии. Линейная регрессия

Цель занятия

В результате обучения на этой неделе вы:

- узнаете, в каких задачах машинного обучения используются линейные модели
- сможете формально поставить задачу линейной регрессии
- познакомитесь с теоремой Гаусса-Маркова
- научитесь использовать L1- и L2-регуляризации для решения задач машинного обучения

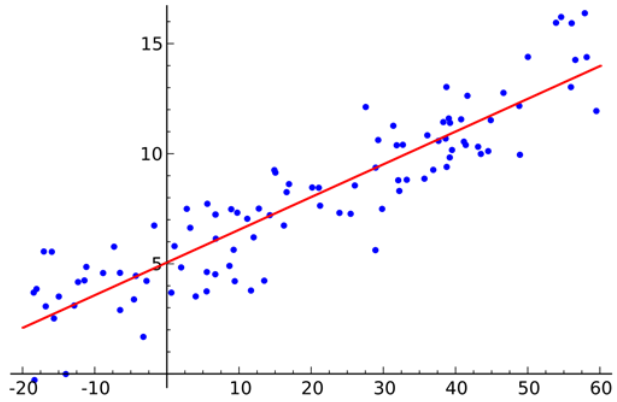
План занятия

1. Линейные модели машинного обучения
2. Линейная регрессия
3. Теорема Гаусса-Маркова
4. L1 и L2 регуляризация
5. Решение линейной регрессии и анализ устойчивости решения

Конспект занятия

1. Линейные модели машинного обучения

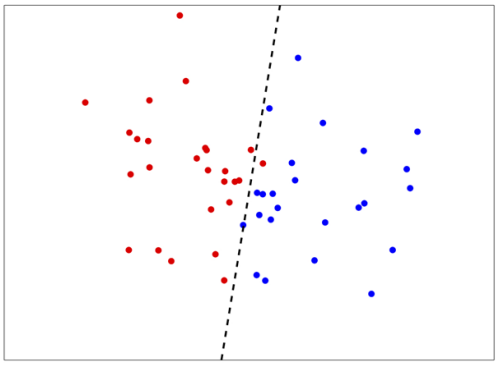
Линейные модели – одни из самых популярных и эффективных моделей в мире машинного обучения. В задаче линейной регрессии задается линейная зависимость между целевой переменной и исходными признаками:



Наша целевая переменная принимает значения, как некоторая линейная комбинация, то есть взвешенная сумма исходных значений признаков.

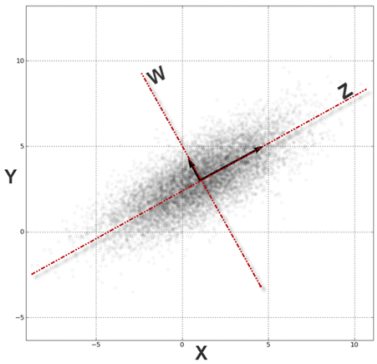
$$\hat{Y}_i = b_0 + b_1 X_i$$

В линейной задаче классификации появляется линейная разделяющая гиперплоскость:



При этом в задаче классификации сама модель уже может быть нелинейной.

Линейные модели могут применяться и в случае снижения размерности:



Данная картинка из метода главных компонент (PCA). Мы пытаемся найти линейное подпространство в исходном признаковом пространстве, в котором будет максимально точно описана исходная выборка с точки зрения потерь дисперсии.

Все линейные модели обладают тем свойством, что они зависят только от линейных комбинаций признаков модели. Из этого следует их замечательное свойство – они быстрые в отличие от того же kNN.

Линейные модели встречаются в огромном числе задач:

- регрессии
- классификации
- в методах снижения размерности, в задачах обучения без учителя

Линейные модели являются теми самыми строительными блоками, из которых строятся другие более сложные модели.

Линейные модели можно ассамблировать, могут частично присутствовать в деревьях. Вообще, решающее дерево – линейная модель над другим признаковым пространством.

Линейные модели являются строительными блоками нейронных сетей. Нейронные сети – это по сути линейные преобразования и нелинейные функции активации.

Пока мы пытаемся напрямую отобразить значение признакового пространства в пространство целевой переменной. Потом мы научимся отображать через промежуточные представления для получения более качественного результата.

2. Линейная регрессия

Поставим формально задачу линейной регрессии:

$L = \{x_i, y_i\}_{i=1}^{N}$, $x_i \in R^n$, $y_i \in R$.

Это задача обучения с учителем. У нас есть выборка L и значения целевой переменной y_i.

Наша оценка целевой переменной есть линейная комбинация исходных признаков с некоторыми весами с некоторым свободным членом:

$$\hat{y} = \omega_0 + \sum_{k=1}^{p} x_k \cdot \omega_k = \{\boldsymbol{x} = [1, x_1, x_2, \dots, x_p]\} = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{w}$$

$w = (\omega_0, \omega_1, \dots, \omega_n)$ – вектор весов.

Если у нас не будет свободного члена, то все линейные зависимости будут проходить через 0. Но далеко не всегда наши данные проходят через 0. Свободный член отвечает за сдвиг относительно нуля.

Мы сделали упрощение формулы, добавив к вектору x единицу:

$x = [1, x_1, x_2, \dots, x_p]$.

Никакого физического смысла это не несет.

В таком предположении мы можем сказать, что оптимальное решение для задачи линейной регрессии – это то, которое доставляет минимум некоторой функции ошибки.

$$\hat{\mathbf{w}} = \arg\min_{\mathbf{w}} \|Y - \hat{Y}\|_2^2 = \arg\min_{\mathbf{w}} \|Y - X\mathbf{w}\|_2^2$$

Для простоты возьмем среднюю квадратичную ошибку. Значит нужно минимизировать среднее значение квадрата отклонений.

Данная задача имеет аналитическое решение. Распишем нашу функцию потерь.

$Q(w) = (Y - Xw)^T(Y - Xw) = ||Y - Xw||_2^2$,

$X = [x_1, \dots, x_n]$, $x_i \in R^p$, $Y = [y_1, \dots, y_n]$, $y_i \in R$.

Возьмем производную:

$$\nabla_{\mathbf{w}} Q(\mathbf{w}) = \nabla_{\mathbf{w}}[Y^T Y - Y^T X\mathbf{w} - \mathbf{w}^T X^T Y + \mathbf{w}^T X^T X\mathbf{w}] =$$

$$= 0 - X^T Y - X^T Y + (X^T X + X^T X)\mathbf{w} = 0$$

Получаем оптимальное значение параметров:

$$\hat{\mathbf{w}} = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

Что если матрица $X^T X$ необратима? Матрица X – это число объектов × число признаков. Это в общем случае неквадратная матрица. Обратную матрицу у неквадратной матрицы взять нельзя. $X^T X$ – эта матрица квадратная. В каком случае она может оказаться необратимой? Когда признаки линейно зависимы. В этом случае матрица окажется вырожденной. Обратную матрицу у вырожденной посчитать невозможно. Значит решение найти нельзя. Что делать в этом случае?

Если при малом изменении обучающих данных модель сильно меняется, то такая модель неустойчива.

Пример. Представлено истинное значение w. Второй и третий признак зависимы друг от друга. Они отличаются друг от друга на какой-то случайный шум.

```
w_true
```

```
array([ 2.68647887, -0.52184084, -1.12776533])
```

```
w_star = np.linalg.inv(X.T.dot(X)).dot(X.T).dot(Y)
w_star
```

```
array([   2.68027723, -186.0552577 ,  184.41701118])
```

Нашли оценку вектора весов. Сумма во втором и третьем векторе практически одинакова. Была информация только о линейной комбинации признаков.

В случае, когда признаки созависимы, скоррелированы, наше решение неустойчиво.

Если исходная задача неразрешима, и мы постулируем, что в исходной задаче не единственное решение, то нужно вводить дополнительное ограничение на наше решение.

$$\hat{\mathbf{w}} = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T Y \qquad (1)$$

$I = diag[1_1, \dots, 1_p]$

Введем понятие регуляризации. Регуляризация – это по сути ограничение. Мы к матрице $X^T X$ добавляем диагональную, и тогда она перестанет быть вырожденной. Мы сможем получить единственное решение.

Аналитическое решение (1) – задача минимизации величины:

$$Q(w) = ||Y - Xw||_2^2 + \lambda^2 ||w||_2^2$$

У нас все еще сохраняется квадратичное отклонение, и появляется слагаемое с квадратом нормы вектора весов.

Каждый признак при решении задачи оптимизации обладает весом, наименьшим из возможных. При дальнейшем уменьшении начнет расти функция ошибки.

3. Теорема Гаусса-Маркова

Теорема Гаусса-Маркова очень простая, но при этом крайне важная. В виду того, что многие результаты машинного обучения были достигнуты сначала эвристически, из каких-то интуитивных, математических, но не строго доказанных предположений и показали свою эффективность на практике, они используются и сейчас, хотя многие решения, используемые во всем мире, до сих пор не имеют четкого обоснования.

Рассмотрим задачу регрессии. Наша модель является линейной

$Y = Xw + \varepsilon, \varepsilon = [\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_N]$

То есть предсказание целевой переменной зависит от признакового описания линейным образом.

$\varepsilon = [\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_N]$ – внешний шум, есть во всех измерениях и исследованиях, не подлежит описанию.

Теорема Гаусса-Маркова. Если целевая переменная зависит от признаков линейным образом, и

- ошибка является несмещенной

  $E(\varepsilon_i) = 0 \ \forall i$ – мат. ожидание ошибки равно нулю.

- дисперсия ошибки существует и конечна

  $Var(\varepsilon_i) = \sigma^2 < inf \ \ \forall i$

- ковариация любых двух ошибок не зависима

  $Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0 \ \ \forall i \neq j$

В таком случае решение, получаемое методом наименьших квадратов,

$$\hat{\mathbf{w}} = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

минимизация квадратичной ошибки является оптимальной оценкой параметров среди несмещенных (Best Linear Unbiased Estimator, BLUE).

Иными словами, если ошибка обладает перечисленными выше свойствами, то наша линейная модель будет оптимальной с точки зрения минимизации дисперсии, если будем минимизировать среднюю квадратичную ошибку.

Для чего нужен этот результат? В этом случае у нас есть гарантия, что мы можем получить оптимальное аналитическое решение.

Стоит заметить, что теорема Гаусса-Маркова, несмотря на свою полезность, часто не работает. Как мы обсуждали ранее, матрица $X^T X$ может быть необратимой. В этом случае найти решение мы не сможем. “Починить” это можно, добавив регуляризацию, и тогда получим устойчивое решение.

Когда мы используем регуляризацию, мы получаем смещенное решение относительно исходной задачи. Получается, что теорема Гаусса-Маркова не работает, если мы принимаем любую регуляризацию.

Не всегда используют среднеквадратичную ошибку, можно применять и среднюю абсолютную ошибку:

- Для L2-регуляризации норма $||w||_2^2$, и

$MSE = \frac{1}{n}\left|\left|x^T w - y\right|\right|_2^2$ – среднеквадратичная ошибка.

- Для L1-регуляризации норма $||w||_1$, и

  $MAE = \frac{1}{n}\left|\left|x^T w - y\right|\right|_1$ – средняя абсолютная ошибка.

Важно! Следует отличать норму, которую мы используем для подсчета отклонения, и норму, которую используем для регуляризации.

4. L1 и L2 регуляризация

Рассмотрим различные нормы в задаче регрессии. Мы можем минимизировать как среднеквадратичную ошибку, так и среднюю абсолютную. Можно брать ошибки и с более высокими четными степенями. Различные нормы доставляют нам различные функции ошибки. Первая норма – MAE, вторая норма – MSE. Мы можем использовать различные техники регуляризации: L1 и L2.

Все эти ошибки различны. Когда мы говорим про задачи машинного обучения, мы говорим о решении оптимизационной задачи. Мы хотим минимизировать данну. ошибку на данной выборке. Если меняем функцию ошибки, мы меняем оптимизационную задачу, тогда и решение поменяется, и результат, и некоторые свойства. Поэтому выбирать функцию ошибки нужно аккуратно.

Разные нормы в различной регуляризации тоже доставляют различные результаты.

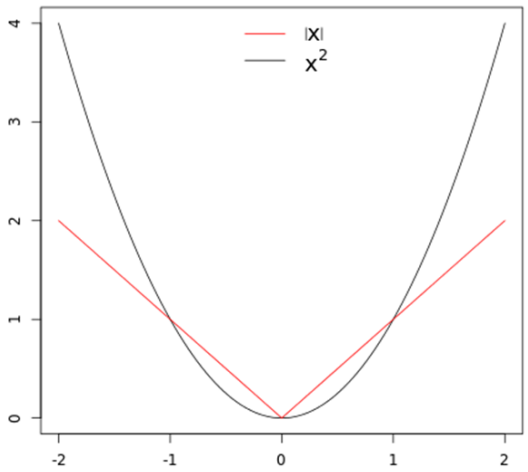
Рассмотрим основное различие L1 и L2 регуляризаций.

<u>MSE-ошибка</u>

- Является основанием L2 нормы. По сути это евклидово расстояние. Мы смотрим на квадрат отклонения.
- Это удобная ошибка с точки зрения того, что она доставляет оптимальное усреднение, согласно теореме Гаусса-Маркова.
- Она дифференцируема.
- Есть недостаток. Она чувствительна к шумам. Если присутствуют шумы, то она увеличивает в квадрат раз.

<u>MAE-ошибка</u>

- не дифференцируема. В нуле есть разрыв производной. Но мы можем ее использовать в градиентных методах, поскольку там не требуется ее гладкость. Достаточно то, что мы знаем производную в каждой точке. В нуле можем доопределить нулем.
- MAE линейно увеличивает ошибку. Она гораздо более толерантна к шумам.
- Решение аналитически выразить нельзя.



L1 и L2 нормы можно использовать для регуляризации. Во всех регуляризациях мы накладываем дополнительное ограничение на наше решение.

L2 регуляризация

- Позволяет добавить диагональный член в аналитическое решение
- Ограничение на решение – добавляем вторую норму вектора весов. Оптимизируем за счет минимизации весов по второй норме. Норма вектора – сумма квадратов координат.

L1 регуляризация

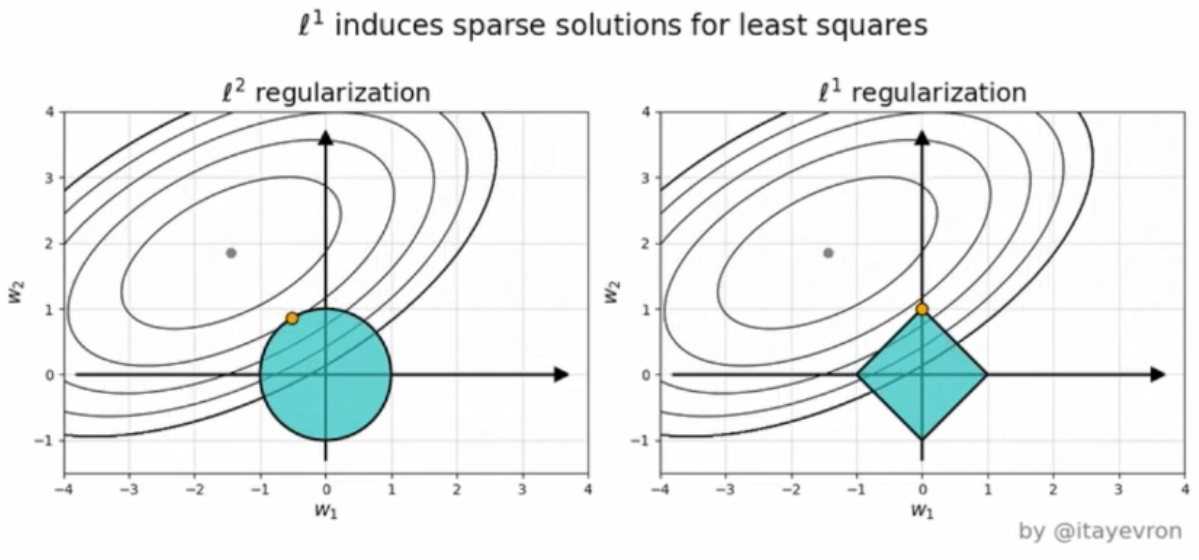
- Позволяет бороться с различными проблемами
- Решение аналитически выражаться не будет
- Ограничение на решение – добавляем первую норму вектора весов. Оптимизируем за счет минимизации весов по первой норме. Норма вектора – сумма модулей координат.

Каков физический смысл подходов L1 и L2 регуляризаций?

L2 норма ограничивает максимальную норму нашего вектора и старается выровнять веса всех признаков.

L1 норма по факту отбирает признаки. Отбор признаков – зануление некоторых из них.

Иллюстрацию различия L1 и L2 регуляризаций можно посмотреть здесь.



На рисунке эллипсы – линии уровня функции потерь. Каждая точка – решение в двумерном пространстве параметров. В данном случае всего два параметра: w_1 и w_2.

Каждая точка соответствует какому-то значению функции потерь. В центре линий эллипсов достигается минимум. У нас есть второй член – регуляризация. Слева на рисунке круг в L2 норме, справа – “круг” в L1 норме. Мы одновременно должны минимизировать и функцию потерь, и минимизировать норму вектора весов. В случае L1 и L2 нормы желтая точка ведет себя по-разному. Желтая точка – оптимальное решение в зависимости от того, какая у нас функция потерь, то есть от наших данных. Для L2 нормы желтая точка передвигается вдоль окружности. В случае L1 нормы точка все время “сваливается” в какую-то вершину. То есть один из весов зануляется. И либо первый, либо второй признак не вносит вклад в итоговое решение.

Допустим, мы решаем оптимизационную задачу с помощью градиентных методов. Градиент у L2 нормы $2x$. Антиградиент, соответственно, $-2x$. У L1 нормы градиент и антиградиент $+1$ и -1 – всегда константа независимо от значения величины признака. При L2 регуляризации при минимизации функции ошибки градиент падает, когда мы приближаемся к оптимуму. В случае L1 регуляризации норма вектора весов ненулевая, ошибка всегда будет, градиент всегда будет ненулевым. В этом случае L1 регуляризация требует зануления каких-то признаков, иначе оптимум не будет достигнут.

Существует множество функций потерь:

- R2 score – коэффициент детерминации. Оценка, на сколько модель лучше или хуже среднего константного предсказания. Коэффициент детерминации не работает в случае деления на нулевое предсказание.

- MAPE – средняя абсолютная ошибка, нормированная на значение целевой переменной. Не зависит от значения целевой переменной, измеряется в процентах. Не устойчива к нулевым или близким к нулю значениям целевой переменной.
- SMAPE – в этом случае происходит деление не на истинное значение таргета, а на усредненное значение таргета и предсказания.
- ...

5. Решение линейной регрессии и анализ устойчивости решения

Рассмотрим линейную регрессию, ее аналитическое и градиентное решение, повторим градиентные методы оптимизации и обсудим анализ устойчивости.

Решение линейной регрессии

Можно работать локально с ноутбука или работать облачно:

```
'''
If you are using Google Colab, uncomment the next line to download
`utils_02.py`.
'''
# !wget
https://raw.githubusercontent.com/girafe-ai/ml-course/22f_basic/week0_02_li
near_reg/utils_02.py
```

Импортируем все необходимое:

```
import numpy as np
import matplotlib
import matplotlib.pyplot as plt
import pandas as pd
import warnings
warnings.filterwarnings("ignore")

random_seed = 45

matplotlib.rcParams.update({'font.size': 16})
```

Создадим небольшую случайную выборку:

```
n_features = 2
n_objects = 300
batch_size = 10
num_steps = 43
np.random.seed(random_seed+1)
```

```
# Let it be the *true* weights vector
w_true = np.random.normal(size=(n_features, ))

X = np.random.uniform(-5, 5, (n_objects, n_features))

# For different scales of features. In case of 3 features the code is equal
to the commented line below
# X *= np.arange([1, 3, 5])[None, :]
X *= (np.arange(n_features) * 2 + 1)[np.newaxis, :]

# Here comes the *true* target vector
Y = X.dot(w_true) + np.random.normal(0, 1, n_objects)
```

У нас есть линейная модель:

$$\hat{Y} = X\mathbf{w}$$

Средняя квадратичная функция ошибки:

$$Q(Y, X, w) = MSE(Y, Xw) = ||Y - Xw||_2^2 = \sum_i \left(y_i - x_i^T w\right)^2$$

Аналитическое решение имеет вид:

$$w *= \left(X^T X\right)^{-1} X^T Y$$

Посмотрим на оценку решения:

```
w_star = np.linalg.inv(X.T.dot(X)).dot(X.T).dot(Y)
w_star
```

>>> array([0.59054644, 1.23044047])

```
w_true
```

>>> array([0.58487584, 1.23119574])

Несоответствие между w_star и w_true может быть из-за наличия шумов.

Посмотрим, что произойдет в случае коррелированных признаков:

```
n_features = 3
n_objects = 300
batch_size = 10
num_steps = 43
eps = 1e-3

# Let it be the *true* weights vector
w_true = np.random.normal(size=(n_features, ))
```

```
X = np.random.uniform(-5, 5, (n_objects, n_features))

# Now we duplicate the second feature with some small noise, so featues 2
and 3 are collinear
X[:, -1] = X[:, -2] + np.random.uniform(-eps, eps, X[:, -2].shape)

# Here comes the *true* target vector
Y = X.dot(w_true) + np.random.normal(0, 1, (n_objects))
```

Второй и третий признак теперь совпадают вплоть до небольшого шума.

```
w_star = np.linalg.inv(X.T.dot(X)).dot(X.T).dot(Y)
w_star
```

>>> array([-0.40979459, 35.18332853, -36.65086199])

```
w_true
```

>>> array([1.05992911, 0.30253587, 0.18578283])

Очень сильное отличие.

Посмотрим на оценку суммы второго и третьего признака весов:

```
w_star[1:].sum()
```

>>> 0.5181098596909948

```
w_star[1:].sum()
```

>>> 0.48831870290055673

От запуска к запуску они меняются, но остаются похожими. У нас решением является любая пара чисел. Таких чисел бесконечное множество.

Введем L2 регуляризацию:

$$Q_{reg}(Y, X, w) = MSE(Y, Xw) + \lambda||w||_2^2 = ||Y - Xw||_2^2 + \lambda||w||_2^2 = \sum_i \left(y_i - x_i^T w\right)^2 + \sum_p \omega_p^2$$

Получаем аналитическое решение:

$$w_{reg}^* = \left(X^T X + \lambda I_p\right)^{-1} X^T Y$$

Матрица $X^T X + \lambda I_p$ обратима всегда.

Посмотрим на наше решение:

```
w_star_reg = np.linalg.inv(X.T.dot(X) +
0.05*np.eye(n_features)).dot(X.T).dot(Y)
```

```
w_star_reg
```

>>> array([0.81856465, -0.56904305, -0.29321512])

```
w_true[1:].sum()
```

>>> -0.8563631037988879

```
w_star_reg[1:].sum()
```

>>> -0.8622581626339355

Теперь у нас решение единственное

Градиентный спуск

Градиентные решения гораздо более популярны на практике. В случае аналитического решения $w^{\star}_{reg} = \left(X^T X + \lambda I_p\right)^{-1} X^T Y$ размерность матрицы $X^T X$ есть p^2.

Чтобы обратить матрицу, придется посчитать количество операций $p^3 + p^2 N$, где N – количество объектов.

Поэтому часто используют градиентный спуск:

$$\mathbf{w}^{(t+1)} = \mathbf{w}^{(t)} - \eta_t \nabla Q(\mathbf{w}^{(t)})$$

Градиент для матрицы весов:

$$\nabla Q(\mathbf{w}) = -2X^T Y + 2X^T X\mathbf{w} = 2X^T(X\mathbf{w} - Y)$$

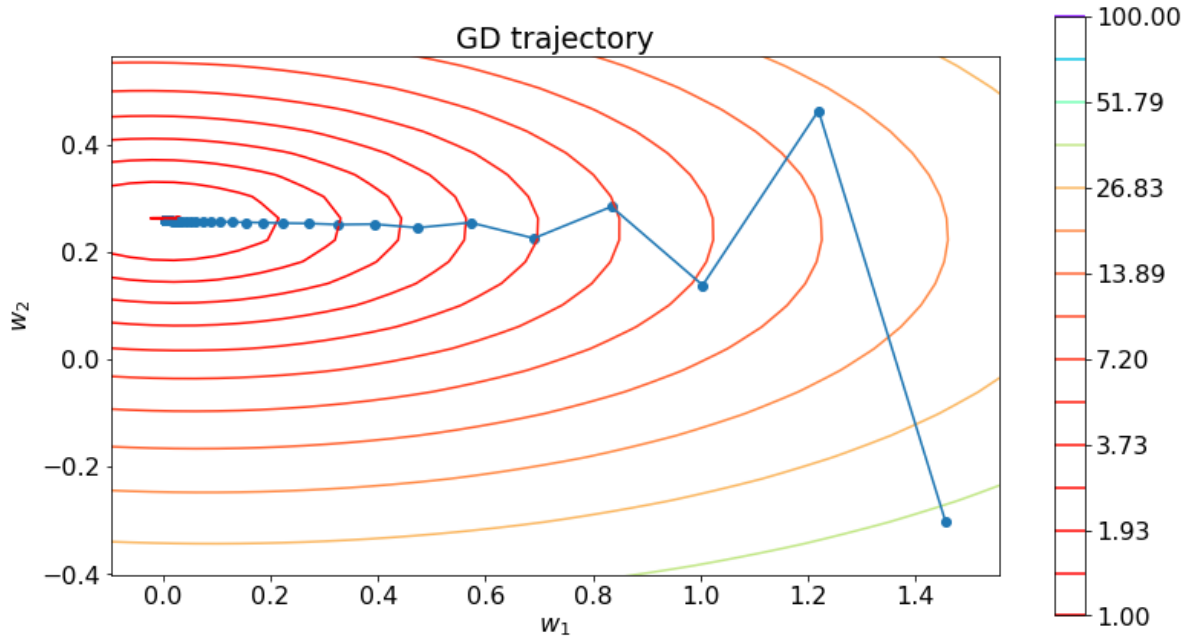
Рассмотрим пример, мы его уже его видели ранее. Стохастический градиентный спуск:

```
n_features = 2
n_objects = 300
batch_size = 10
num_steps = 43
np.random.seed(random_seed)

# Let it be the *true* weights vector
w_true = np.random.normal(size=(n_features, ))

X = np.random.uniform(-5, 5, (n_objects, n_features))

# For different scales of features. In case of 3 features the code is equal to the commented line below
# X *= np.arange([1, 3, 5])[None, :]
X *= (np.arange(n_features) * 2 + 1)[np.newaxis, :]
```

```
# Here comes the *true* target vector
Y = X.dot(w_true) + np.random.normal(0, 1, n_objects)
```

```
np.random.seed(random_seed)
w_0 = np.random.uniform(-2, 2, n_features)-0.5
w = w_0.copy()
w_list = [w.copy()]
step_size = 1e-2

for i in range(num_steps):
    w -= step_size * 2. * np.dot(X.T, (X.dot(w) - Y)) / Y.size # YOUR CODE HERE
    w_list.append(w.copy())
w_list = np.array(w_list)
```

```
# compute level set
A, B = np.meshgrid(np.linspace(-2, 2, 100), np.linspace(-2, 2, 100))

levels = np.empty_like(A)
for i in range(A.shape[0]):
    for j in range(A.shape[1]):
        w_tmp = np.array([A[i, j], B[i, j]])
        levels[i, j] = np.mean(np.power(np.dot(X, w_tmp) - Y, 2))

plt.figure(figsize=(13, 9))
plt.title('GD trajectory')
plt.xlabel('$w_1$')
plt.ylabel('$w_2$')
plt.xlim(w_list[:, 0].min() - 0.1, w_list[:, 0].max() + 0.1)
plt.ylim(w_list[:, 1].min() - 0.1, w_list[:, 1].max() + 0.1)
plt.gca().set_aspect('equal')

# visualize the level set
CS = plt.contour(A, B, levels, levels=np.logspace(0, 2, num=15), cmap=plt.cm.rainbow_r)
CB = plt.colorbar(CS, shrink=0.8, extend='both')

# visualize trajectory
plt.scatter(w_true[0], w_true[1], c='r')
plt.scatter(w_list[:, 0], w_list[:, 1])
plt.plot(w_list[:, 0], w_list[:, 1])

plt.show()
```



Проведем анализ нестабильности нашего решения. Под **нестабильностью** будем понимать возможность получить различные значения матрицы весов при малом изменении обучающей выборки.

Число обусловленности:

$$\kappa(a) = \frac{\sigma_{max}(A)}{\sigma_{min}(A)}$$

$\sigma_{max}(A)$ и $\sigma_{min}(A)$ – максимальное и минимальное сингулярные числа матрицы A, соответственно. Показывают, насколько “растянуты” в одну и другую стороны наши данные.

Чем выше $\kappa(a)$, тем более нестабильно наше решение.

Посмотрим на стохастический градиентный спуск:

```
def get_w_by_grad(X, Y, num_steps, w_0, lr):
    w = w_0.copy()

    for i in range(num_steps):
        w -= 2 * lr * np.dot(X.T, np.dot(X, w) - Y) / Y.shape[0]
    return w

def get_w_by_stoch_grad(X, Y, num_steps, w_0, lr_0, n_objects):
    w = w_0.copy()
    lr_0 = 0.45

    for i in range(num_steps):
```

```
        lr = lr_0 / ((i+1)**0.51)
        sample = np.random.randint(n_objects, size=batch_size)
        w -= 2 * lr * np.dot(X[sample].T, np.dot(X[sample], w) - Y[sample]) / Y.shape[0]
    return w

def rmse(y_true, y_pred):
    return np.linalg.norm(y_true-y_pred)
```

Минимизация средней квадратичной ошибки – выпуклая задача, тогда решение, которое находится аналитическим методом, и решение, которое находится градиентным спуском, эквивалентны друг другу. Но если матрица A вырожденная или близка к таковой, то появляются вычислительные ошибки.

Посмотрим на графики.

```
lr = 1e-3
sgd_lr = 0.1
num_steps = 250
noise_eps_seq = np.logspace(-2, -6, 20)

w_0 = np.random.uniform(-2, 2, (n_features))
```

```
condition_numbers = []
vector_norms_list = []
rmse_list = []
results_list = []
for eps in noise_eps_seq:
    local_condition_numbers = []
    local_vector_norms_list = []
    local_rmse_list = []
    for i in range(50):
        X[:, -1] = 2 * (X[:, -2] + np.random.uniform(-eps, eps, X[:, -2].shape))

        a = np.linalg.eigvals(X.T.dot(X))
        local_condition_numbers.append(a.max() / a.min())

        w_star = np.linalg.inv(X.T.dot(X)).dot(X.T).dot(Y)
        w_star_grad = get_w_by_grad(X, Y, num_steps, w_0, lr)
        w_star_sgd = get_w_by_stoch_grad(X, Y, num_steps, w_0, sgd_lr, n_objects)
        local_vector_norms_list.append([
            np.linalg.norm(w_star),
            np.linalg.norm(w_star_grad),
            np.linalg.norm(w_star_sgd),
        ])
```

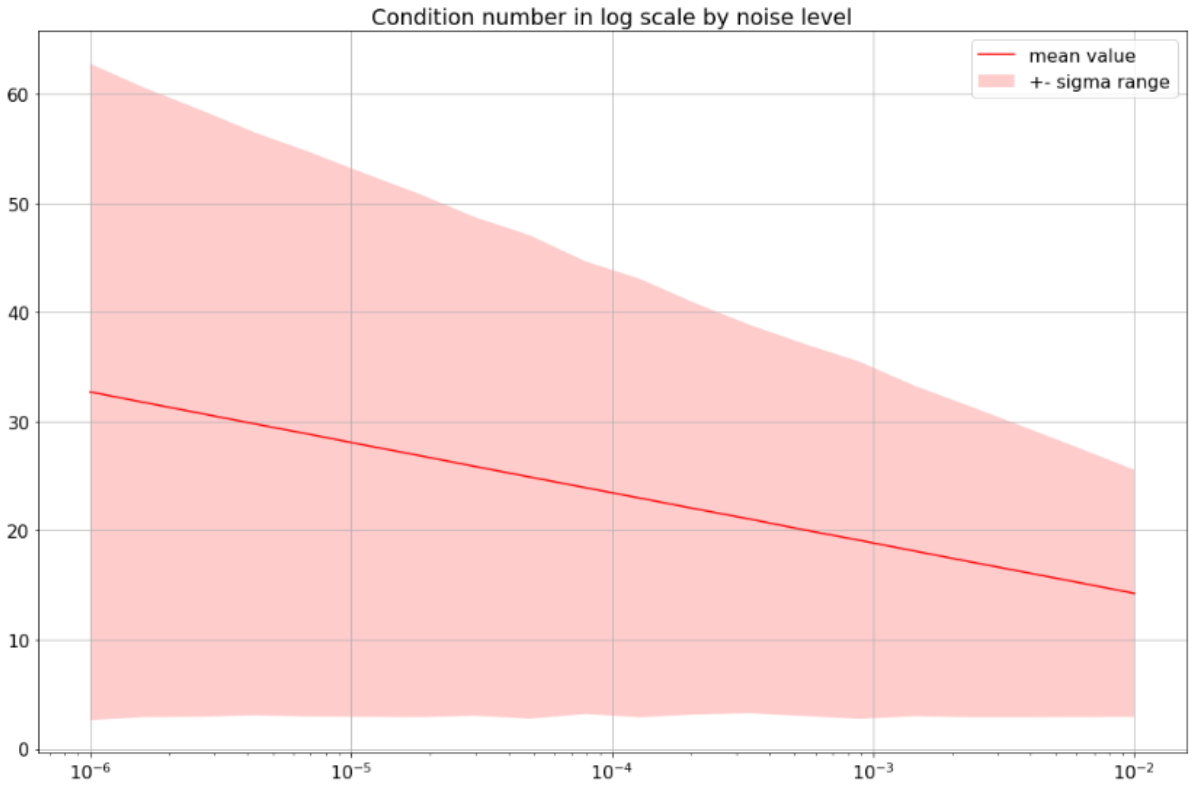
```
        analytical_predict = X.dot(w_star)
        grad_predict = X.dot(w_star_grad)
        sgd_predict = X.dot(w_star_sgd)

        local_rmse_list.append([
            rmse(Y, analytical_predict),
            rmse(Y, grad_predict),
            rmse(Y, sgd_predict),
        ])

        results_list.append([w_star, w_star_grad, w_star_sgd])

    condition_numbers.append([np.mean(local_condition_numbers),
np.std(local_condition_numbers)])
    vector_norms_list.append([
        np.mean(np.array(local_vector_norms_list), axis=0),
        np.std(np.array(local_vector_norms_list), axis=0),
    ])
    rmse_list.append(np.mean(np.array(local_rmse_list), axis=0))

condition_numbers = np.array(condition_numbers)
vector_norms_list = np.array(vector_norms_list)
rmse_list = np.array(rmse_list)
```

Мы повторяем множество экспериментов, получаем решение с помощью градиентного спуска и стохастического градиентного спуска. Считаем среднюю квадратичную ошибку для каждого решения.

Мы зашумляем наши данные.

```
from utils_02 import visualise
```

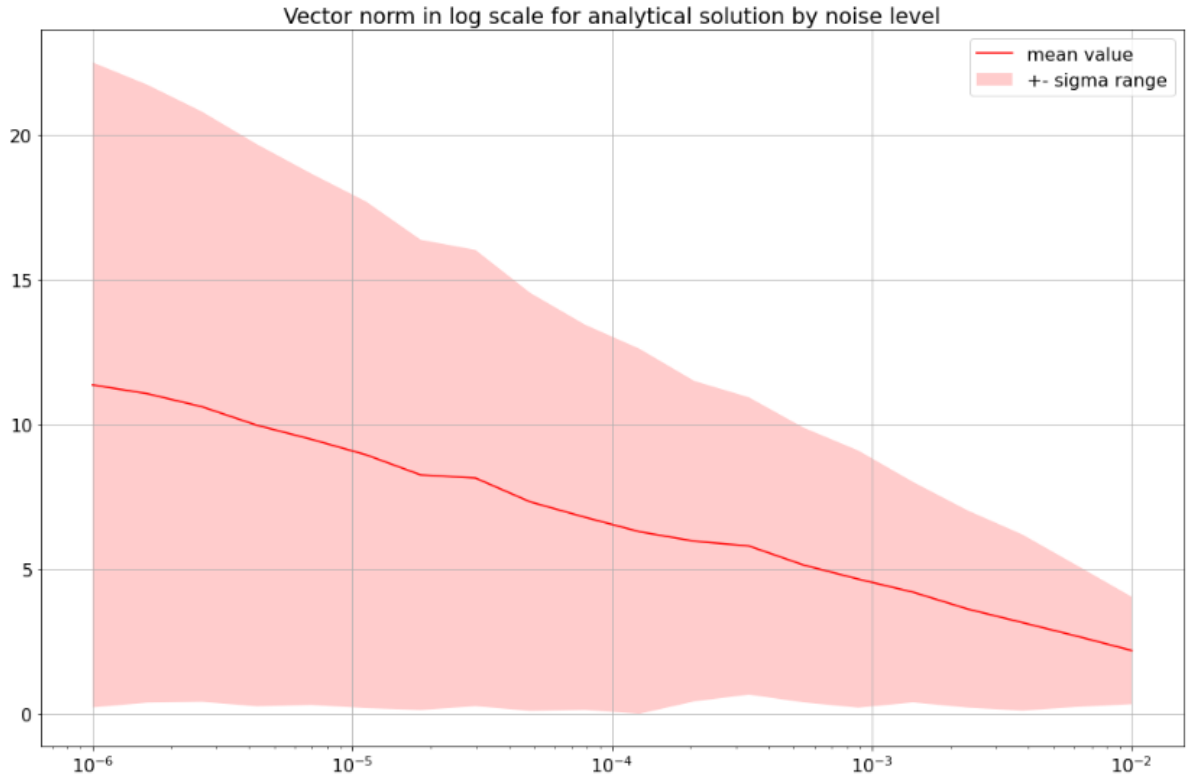
```
visualise(
    np.log(condition_numbers[:, 0]),
    np.log(condition_numbers[:, 1]),
    noise_eps_seq,
    title='Condition number in log scale by noise level',
    greater_than_zero=True,
    log_scale=True
)
```



На графике по оси x – шум, по оси y – число обусловленности. Получаем, что чем больше шум, тем меньше число обусловленности, то есть тем больше похожи друг на друга признаки нашей выборки. Чем выше число обусловленности, тем менее устойчиво решение.

Посмотрим на норму вектора весов аналитического решения в зависимости от шума.

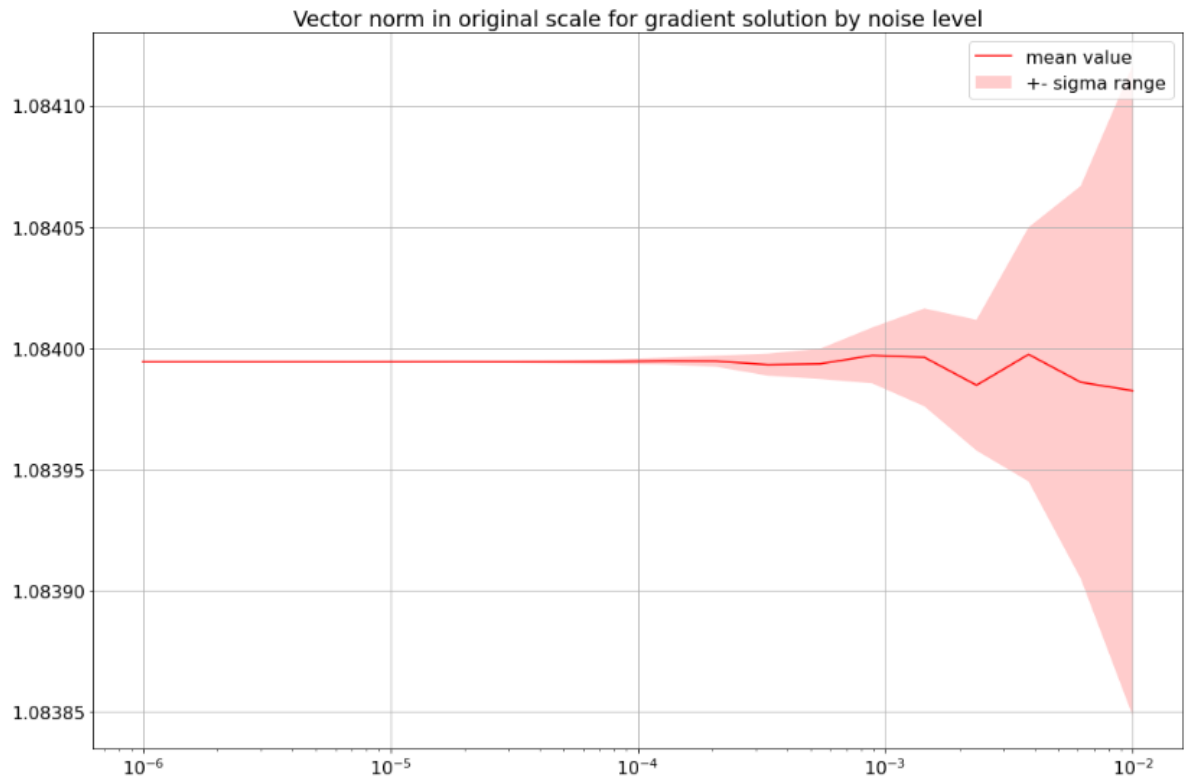
```
visualise(
    np.log(vector_norms_list[:, 0, 0]),
    np.log(vector_norms_list[:, 1, 0]),
    noise_eps_seq,
    title='Vector norm in log scale for analytical solution by noise level',
    greater_than_zero=True,
    log_scale=True
)
```



Чем больше шум, который позволяет нам делать признаки непохожими друг на друга, тем меньше дисперсия вектора весов.

Теперь посмотрим для градиентного решения:

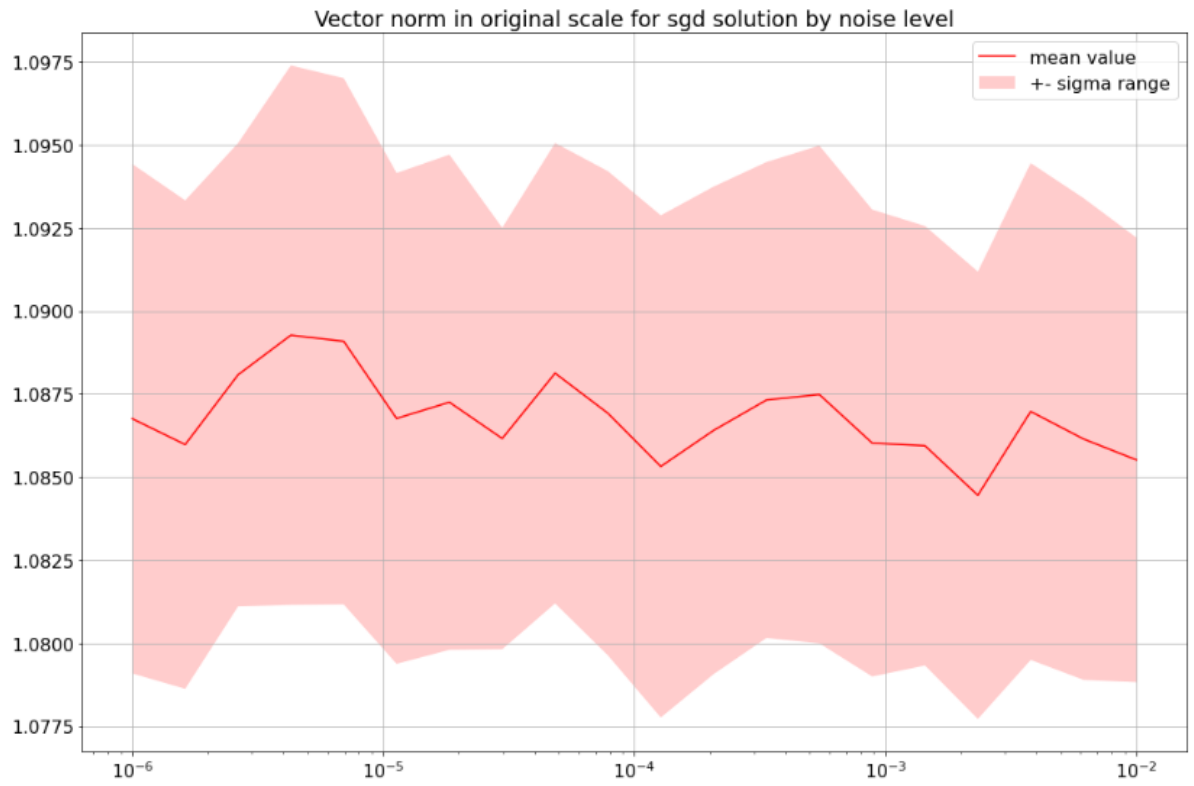
```
visualise(
    vector_norms_list[:, 0, 1],
    vector_norms_list[:, 1, 1],
    noise_eps_seq,
    title='Vector norm in original scale for gradient solution by noise level',
    greater_than_zero=True,
    log_scale=True
)
```



Мы видим, что градиентное решение всегда сходится в одну и ту же точку, поскольку здесь нет проблем с обращением матрицы, и нет численной ошибки. Но чем больше шума, тем больше мы будем получать различные решения.

Посмотрим на стохастический градиентный спуск:

```
visualise(
    vector_norms_list[:, 0, 2],
    vector_norms_list[:, 1, 2],
    noise_eps_seq,
    title='Vector norm in original scale for sgd solution by noise level',
    greater_than_zero=True,
    log_scale=True
)
```



Когда данные скоррелированы, нужно использовать регуляризацию. Стохастический градиентный спуск тоже дает неплохие результаты.

Линейная регрессия

Импортируем все необходимое:

```
from sklearn.linear_model import LinearRegression, Lasso, Ridge
```

Lasso – L1 регуляризация,

Ridge – L2 регуляризация,

LinearRegression дает нам аналитическое решение.
Чтобы оценить качество, будем использовать коэффициент детерминации:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_i (y_i - a(x_i))^2}{\sum_i (y_i - \overline{y}_i)^2}$$

Как видим, отношение средней квадратичной ошибки к дисперсии ответов.
Будем использовать большую выборку:

```
n_features = 700
n_objects = 100000
num_steps = 150

w_true = np.random.uniform(-2, 2, (n_features, 1))
```

```
X = np.random.uniform(-100, 100, (n_objects, n_features))
Y = X.dot(w_true) + np.random.normal(0, 10, (n_objects, 1))
```

Измерим время для наших регрессий:

```
%%time

lr = LinearRegression()
lr.fit(X, Y)
print(f'R2: {lr.score(X, Y)}')
```

>>> 22.6 s – оптимизация для аналитического решения

```
%%time

lr = Ridge(alpha=0.0, solver='sparse_cg')
lr.fit(X, Y)
print(f'R2: {lr.score(X, Y)}')
```

>>> 555 ms – оптимизация для градиентного спуска.

Теперь построим свою модель.

```
from sklearn.base import BaseEstimator, RegressorMixin
# also ClassifierMixin and TransformerMixin exist
```

```
class LinearRergessionSGD(BaseEstimator, RegressorMixin):
    '''LinearRergession with L2 regularization and SGD optimizer
    '''
    def __init__(
        self, C: float=1.0,
        batch_size: int=25,
        lr: float=1e-2,
        num_steps: int=200,
    ) -> None:
        self.C = C
        self.batch_size = batch_size
        self.lr = lr
        self.num_steps = num_steps

    def fit(self, X, Y):
        w = np.random.randn(X.shape[1])[:, None]
        n_objects = len(X)

        # this is just copied from above
        for i in range(self.num_steps):
            sample_indices = np.random.randint(n_objects, size=self.batch_size)
```

```
            w -= 2 * self.lr * np.dot(X[sample_indices].T, np.dot(X[sample_indices], w) -
Y[sample_indices]) / self.batch_size

        self.w = w
        return self

    def predict(self, X):
        return X@self.w
```

Создаем датасет:

```
n_features = 700
n_objects = 100000
num_steps = 150

w_true = np.random.uniform(-2, 2, (n_features, 1))

X = np.random.uniform(-100, 100, (n_objects, n_features)) * np.arange(n_features)
Y = X.dot(w_true) + np.random.normal(0, 10, (n_objects, 1))
```

Разбиваем на train и валидацию:

```
from sklearn.model_selection import train_test_split
x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(X, Y)
```

Запускаем оптимизацию:

```
own_lr = LinearRergessionSGD().fit(x_train, y_train)
print(f'R2: {own_lr.score(x_test, y_test)}')
```

И у нас получается ошибка. Мы забыли отнормировать наши данные, получили слишком большие градиенты.

```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
```

Отнормируем наши данные:

```
scaler = StandardScaler()
scaler.fit(x_train)
x_scaled = scaler.transform(x_train)
```

Обучаем learning rate:

```
own_lr = LinearRergessionSGD().fit(x_scaled, y_train)
```

Преобразуем тестовые данные:

```
x_test_scaled = scaler.transform(x_test)
```

```
print(f'R2: {own_lr.score(x_test_scaled, y_test)}')
```

>>> 0.9965142196068342 – все хорошо работает.

Мы можем строить pipeline – последовательности операций.

```
from sklearn.pipeline import make_pipeline
```

```
pipe = make_pipeline(
    StandardScaler(),
    LinearRergessionSGD(),
)
```

```
pipe.fit(x_train, y_train)
print(f'R2: {pipe.score(x_test, y_test)}')
```

>>> 0.9964865310951883 – результат такой же.

Дополнительные материалы для самостоятельного изучения

1. https://people.eecs.berkeley.edu/~jrs/189/
2. https://raw.githubusercontent.com/girafe-ai/ml-course/22f_basic/week0_02_linear_reg/utils_02.py