APA-L1-python

September 7, 2018

1 APA Laboratori 1 (TEMA 1) - Ridge and standard regression

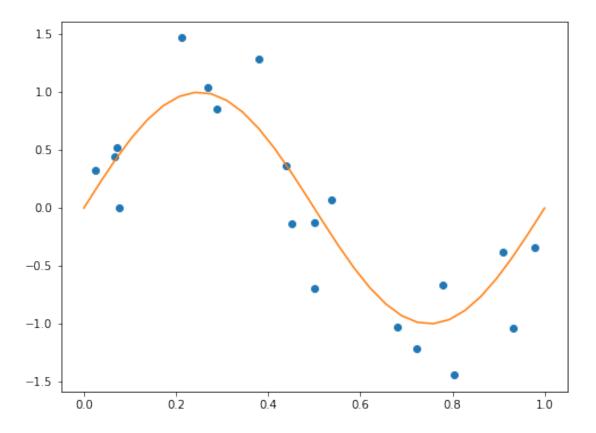
Començarem fent bàsicament l'exemple introductori del TEMA 1 (ajust polinòmic)

```
In [2]: #%matplotlib notebook
        import numpy as np
        import pandas as pd
        import matplotlib.pyplot as plt
        from IPython.core.interactiveshell import InteractiveShell
        InteractiveShell.ast_node_interactivity = "all"
        pd.set_option('precision', 3)
In [3]: # extra imports
        from numpy.random import uniform, normal
        from statsmodels.genmod.generalized_linear_model import GLM
        from sklearn.linear_model import Ridge, RidgeCV
        from sklearn.metrics import mean_squared_error
In [4]: np.random.seed(7)
In [5]: N = 20
        a = 0
        b = 1
        sigma_quadrat = 0.3**2
```

Generació de la mostra TR (de training) de mida N, inputs x_n uniformes en (0,1) El sort() és per claredat, no té cap importància

Noteu que a classe era N=10 per pura simplicitat del dibuix a la pissarra!

```
In [6]: x = np.sort(uniform( a,b,N))
       t = np.sin(2*np.pi*x) + normal(loc=0,
                                    scale=np.sqrt(sigma_quadrat),
                                    size=N)
       sample = pd.DataFrame({'input':x,'target':t})
       sample
Out[6]:
           input target
           0.025
                  0.322
       0
       1 0.066
                  0.440
       2 0.072
                 0.520
       3 0.076
                 0.003
       4 0.213
                 1.469
       5 0.268
                 1.040
       6 0.288
                 0.855
       7 0.381 1.289
       8
         0.438 0.364
       9 0.452 -0.139
       10 0.500 -0.121
       11 0.501 -0.694
       12 0.538 0.075
       13 0.679 -1.028
       14 0.723 -1.209
       15 0.780 -0.661
       16 0.804 -1.439
       17 0.910 -0.377
       18 0.931 -1.038
       19 0.978 -0.337
In [7]: fig, ax = plt.subplots(figsize=(8,6))
       ax.plot(sample.input, sample.target, 'o')
       ax.plot(np.linspace(0, 1,num=30),
               np.sin(2*np.pi*np.linspace(0, 1,num=30)));
```



Generació de la mostra de validacio (VA) de mida N.valid, inputs x equiespaiats en (a,b) la usarem per fer prediccions

Regressió lineal amb grau M=1, per començar, model lineal

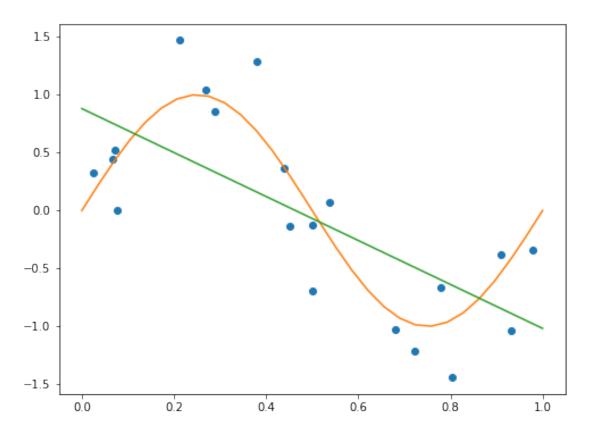
Fem servir la classe GLM de statsmodels perque te una sortida similar a la funcio de R, pero teniu implementats tots els generalized linear models a scikit-learn. Tambe es pot fer la regresio lineal directament fent servir la classe OLS (Ordinary Least Squares) de statsmodels.

Generalized Linear Model Regression Results

______ No. Observations: 20 Dep. Variable: target Model: GLM Df Residuals: 18 Model Family: Gaussian Df Model: 1 Link Function: identity Scale: 0.37100 Method: IRLS Log-Likelihood: -17.410 Date: Fri, 07 Sep 2018 Deviance: 6.6779 Time: 08:20:14 Pearson chi2: 6.68 No. Iterations: nonrobust 3 Covariance Type: ______ coef std err z P>|z| [0.025 ______ 0.8802 0.257 3.423 0.001 0.376 Intercept 1.384 -1.8980 0.453 -4.189 0.000 -2.786 ______

fem-lo predir les dades TR (les usades per trobar el model) i calculem l'error quadràtic mitjà

```
Out[10]:
            prediccio
         0
                0.833
         1
                0.755
         2
                0.743
         3
                0.735
         4
                0.475
         5
                0.371
         6
                0.333
         7
                0.157
         8
                0.048
         9
                0.022
         10
                -0.069
         11
                -0.071
         12
                -0.142
         13
                -0.409
         14
                -0.493
         15
               -0.600
         16
                -0.645
         17
               -0.846
         18
               -0.887
         19
                -0.976
In [11]: fig, ax = plt.subplots(figsize=(8,6))
         ax.plot(sample.input, sample.target, 'o')
         ax.plot(np.linspace(0, 1,num=30),
                 np.sin(2*np.pi*np.linspace(0, 1,num=30)));
```



Out[12]: 0.33389610292629496

alternativament, glm() ens el calcula

In [13]: result.deviance/N

Out[13]: 0.33389610292629496

Dit tot això, reprenem el fil i tornem a l'error quadràtic mitjà. Resulta que és convenient treballar amb la seva arrel, per obtenir així la "llargada" del vector d'errors

Out[14]: 0.577837436418146

però és encara millor normalitzar l'error, dividint per la variança dels targets, obtenint el que s'anomena NMSE (normalized mean squared error)

Out[15]: 0.5330463679571131

Interpretació:

- 1. Òbviament NMSE >= 0, però no té cota superior definida
- 2. un model constant que predigui la mitjana dels targets (de fet, el millor model constant), tindria un NMSE = 1.
- 3. models amb NMSE > 1 són per tant horribles; un model es comença a considerar acceptable a partir de NMSE < 0.2
- 4. observeu que, notant que l'error quadràtic no és més que l'estimació de la variança dels targets, el NMSE es pot veure com la fracció de la variança dels targets no explicada (capturada) per les prediccions del model. Per exemple, un NMSE = 0.13 correspon a un model capaç d'explicar el 87% de la variabilitat del target.

El nostre model M=1 explica per tant només el 47% de la variabilitat del target. Regressió cúbica (polinomi de grau M=3, continua sent un model lineal, penseu-lo)

Out[16]: <class 'statsmodels.iolib.summary.Summary'>

Generalized Linear Model Regression Results

______ Dep. Variable: target No. Observations: 20 GLM Df Residuals: Model: 16 Gaussian Df Model: Model Family: 3 Link Function: identity Scale: 0.14813 Method: IRLS Log-Likelihood: -7.0508 Fri, 07 Sep 2018 Deviance: Date: 2.3701 08:20:15 2.37 Time: Pearson chi2: No. Iterations: Covariance Type: nonrobust

	coef	std err	z	P> z	[0.025	0.975]
const	-0.2517	0.294	-0.856	0.392	-0.828	0.325
x1	13.1664	2.868	4.591	0.000	7.545	18.787
x2	-37.9735	7.043	-5.392	0.000	-51.777	-24.170
x3	25.0637	4.714	5.317	0.000	15.825	34.303

11 11 11

In [17]: result.params

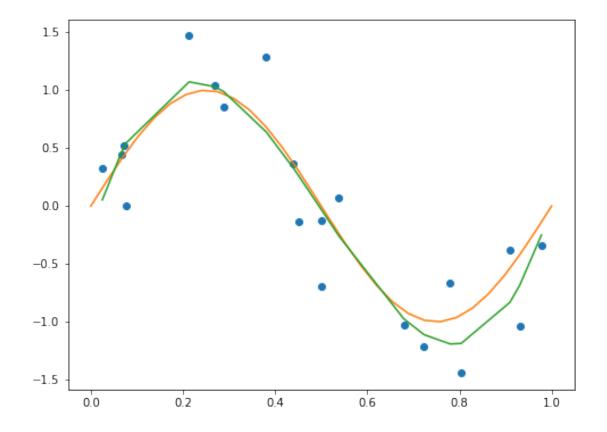
```
Out[17]: const -0.252
x1 13.166
x2 -37.973
x3 25.064
dtype: float64
```

o sigui el polinomi és $y(x) = 25.063691 ux^3 - 37.973481 x^2 + 13.166378 x - 0.251710$

Std. Error és la incertesa de cada coeficient, relativa al valor del coeficient; en aquest cas són molt altes, cosa que és deguda a que només tenim 20 punts

La darrera columna és un test sobre la probabilitat de que cada coeficient sigui en realitat zero (i per tant, l'entrada x corresponent no té relació amb el target). Els talls de significativitat del coeficient de major a menor son:

```
Signif: 0 > 0.001 > 0.01 > 0.05 > 0.1 > 1
Ara ho dibuixem tot de nou
```



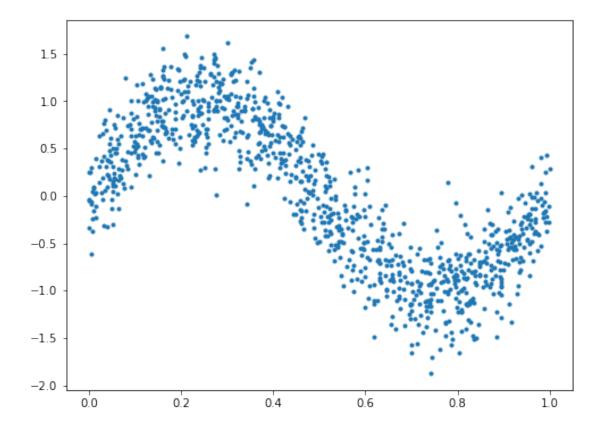
calculem l'error normalitzat NRMSE a la mostra de TR

Out[19]: 0.18918715127406932

gairebé 81%, ha millorat força ... per cert, aquesta quantitat és el famós coeficient R^2 d'ajust en regressió (expressat com a 0.81)

Ara veurem com calcular l'error normalitzat a la mostra de validacio hem de fer-ho explícitament, ja que predict() només dóna les prediccions, no els errors

fem un cop d'ull primer a les dades de VA



i calculem l'error

Quan un model és incorrecte, el seu error de predicció és alt. En cas de models sobreajustats, sol ser molt superior al de TR. En cas de models infraajustats (com és el cas ara), tots dos són elevats i similars. Aquest és un model raonable i per tant tos dos errors són baixos i similars.

Ara farem la mateixa simulació que a classe, fent regressió polinòmica, de graus M des de p a q (poden ser arbitraris, els fixarem en 1 i N-1)

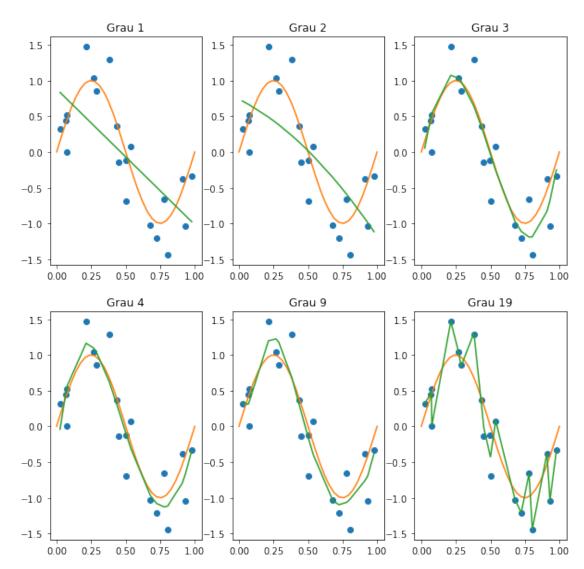
desem coeficients del polinomi (del model) i els error de training i validacio

```
In [22]: p = 1
         q = N
         coef = []
         model = []
         norm_mse_train = []
         norm_mse_valid = []
         for i in range(p,q):
           cmodel = GLM(sample.target,
                         np.vander(sample.input,i+1, increasing=True))
           fmodel = cmodel.fit()
           coef.append(fmodel.params)
           norm_mse_train.append(fmodel.deviance/((N-1)*np.var(sample.target)))
           prediccions = fmodel.predict(exog=np.vander(valid_sample.input,
                                                          i+1, increasing=True))
           norm\_mse\_valid.append(sum((valid\_sample.target - prediccions)**2)/ \  \  \, \backslash 
                                   ((N_valid-1)*np.var(valid_sample.target)))
           model.append(fmodel)
/usr/local/lib64/python3.6/site-packages/statsmodels/regression/_tools.py:99: RuntimeWarning: di
  scale = np.dot(wresid, wresid) / df_resid
   dibuixem 6 dels models (graus 1,2,3,4,9,19) contra les dades de training
In [23]: fig = plt.figure(figsize=(10,10))
         for f, i in enumerate([1,2,3,4,9,19]):
             ax = fig.add_subplot(2,3,f+1)
```

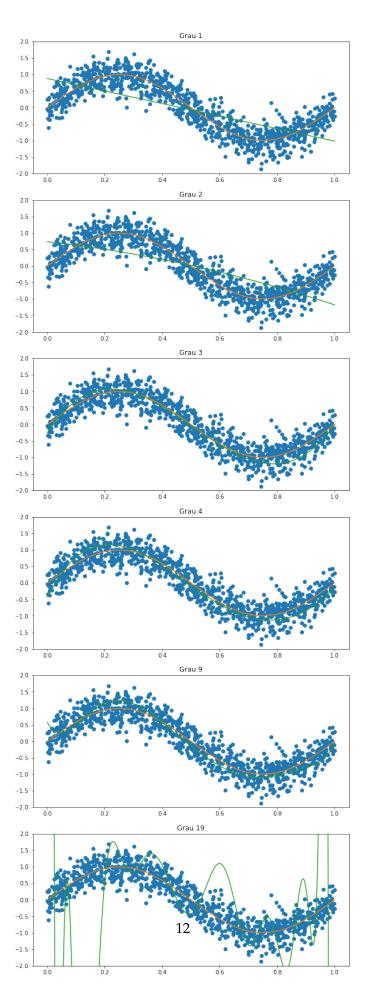
np.sin(2*np.pi*np.linspace(0, 1,num=30)));

ax.plot(sample.input, sample.target, 'o')

ax.plot(np.linspace(0, 1,num=30),



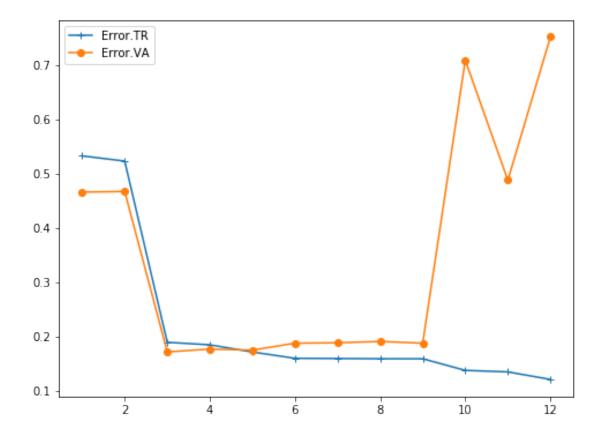
Ara dibuixem les prediccions dels mateixos models contra les dades de validacio la funció a modelar està sempre en taronja, per referència



Ara farem una gràfica similar a la de classe: error de TR i error de VA junts, en funció del grau M; observarem els fenòmens de sobreajust i infraajust molt clarament

Ometem els graus a partir del 13 perquè els valors es disparen i caurien fora del dibuix; però podeu mirar els resultats numèrics a la matriu:

```
In [25]: r = pd.DataFrame({'Grau':range(p,q),
                             'Error.train':norm_mse_train,
                             'Error.valid': norm_mse_valid})
         r
Out[25]:
                   Error.train Error.valid
             Grau
         0
                 1
                          0.533
                                        0.466
                 2
         1
                          0.523
                                        0.467
         2
                 3
                          0.189
                                        0.171
         3
                 4
                          0.185
                                        0.177
         4
                 5
                          0.171
                                        0.175
         5
                 6
                                        0.188
                          0.160
         6
                 7
                          0.159
                                        0.188
         7
                 8
                          0.159
                                        0.191
                 9
         8
                          0.159
                                        0.188
         9
                10
                          0.137
                                        0.709
                          0.135
                                        0.488
         10
                11
         11
                12
                          0.121
                                        0.753
         12
               13
                          0.054
                                       14.044
         13
                14
                          0.021
                                       47.862
         14
               15
                          0.021
                                       47.678
         15
               16
                          0.017
                                      501.863
         16
                17
                          0.015
                                     1071.542
                          0.015
         17
                18
                                     1034.497
         18
               19
                          0.016
                                     1467.715
In [26]: fig, ax = plt.subplots(figsize=(8,6))
         plt.plot(range(1,13), norm_mse_train[0:12], '-+', label='Error.TR')
         plt.plot(range(1,13), norm_mse_valid[0:12], '-o', label='Error.VA')
         plt.legend();
```



Per un pèl, el menor error de VA és per M=3, per tant el métode vist a classe seleccionaria el model correcte (se'n diu "model selection"). Noteu que el "model selection" és bàsicament la detecció de la complexitat adequada al problema (la millor en aquest cas, --és a dir, dins els polinomiscorrespón a un de cúbic). Més endavant tractarem el tema de la "complexitat" d'un model des d'un de vista més general.

Ara investigarem els propis coeficients: veurem que tot coeficient del mateix grau va fent-se gran (en valor absolut) a mesura que puja el grau màxim (tret del coeficient de grau 0 o Intercept, que més o menys es manté constant, donat que intenta seguir la mitjana dels targets, que no varia) Estudiem només fins al grau 10, per fer la taula manegable

```
In [27]: coefs_table = np.zeros((10,11))
         for i in range(10):
             for j in range(i+2):
                 coefs_table[i][j] = coef[i][j]
         pd.DataFrame(coefs_table.T)
Out [27]:
                 0
                         1
                                 2
                                         3
                                                                                  7
                                                                        6
             0.880 0.736
                           -0.252
                                   -0.429
                                              0.017
                                                         0.486
                                                                   0.563
                                                                              0.688
           -1.898 -0.962 13.166
                                    16.934
                                               4.601
                                                       -10.906
                                                                 -14.487
                                                                            -21.918
```

```
2
    0.000 -0.953 -37.973 -54.586
                                   28,295
                                            169.588
                                                      219.365
                                                                350.786
    0.000 0.000
                 25.064 50.415 -166.690 -706.091
3
                                                    -991.928 -1956.273
4
   0.000 0.000
                  0.000 - 12.486
                                 229.610 1216.832
                                                     2020.865 5615.382
5
   0.000 0.000
                  0.000
                           0.000
                                 -96.358
                                          -954.865 -2128.604 -9551.261
    0.000 0.000
                   0.000
                           0.000
                                            284.807
6
                                    0.000
                                                     1138.897 9742.263
7
    0.000 0.000
                  0.000
                           0.000
                                    0.000
                                              0.000
                                                    -244.895 -5483.782
8
   0.000 0.000
                   0.000
                           0.000
                                    0.000
                                              0.000
                                                        0.000
                                                              1304.006
9
    0.000 0.000
                   0.000
                           0.000
                                    0.000
                                              0.000
                                                        0.000
                                                                  0.000
10 0.000 0.000
                   0.000
                           0.000
                                    0.000
                                              0.000
                                                        0.000
                                                                  0.000
                       9
            8
0
       0.579 4.578e+00
1
      -14.637 -2.960e+02
2
     203.747 6.468e+03
3
     -667.099 -6.444e+04
4
    -375.048 3.576e+05
5
    6628.664 -1.207e+06
```

si cap a la finestra, movem-ne els marges: és important veure la taula d'una sola peça

Interpretació: 1. Les files són els coeficients dels diferents graus 1..M i les columnes els graus M; per exemple, [3,4] és el coeficient de grau 3 del polinomi M=4 2. tot coeficient del mateix grau va fent-se gran (en valor absolut) a mesura que puja el grau màxim 3. Això implica que a mesura que creix M, tots els coeficients es fan molt grans. I ens suggereix que, tot i sobreestimar el grau M, podríem controlar l'ajust si poguéssim limitar aquest creixement: això porta a la tècnica de regularització (que en estadística es coneix com a "ridge regression")

Ara comprovarem que el sobreajust disminueix amb N !!! generació de la mostra de training de mida N, inputs x equiespaiats en (a,b)

6

7

8

9

10

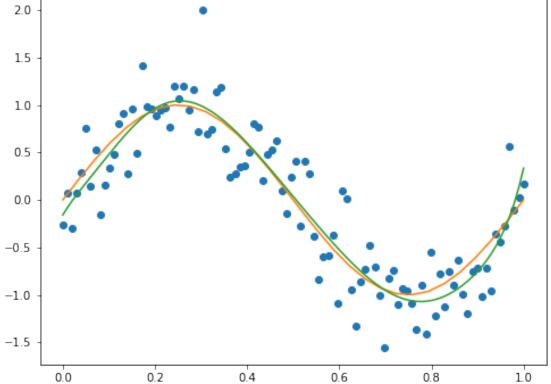
-16513.357 2.575e+06

-11902.681 2.899e+06

19735.113 -3.484e+06

2904.694 -1.352e+06 0.000 2.703e+05

```
Out[29]: 0.1548887440222033
In [30]: prediccions = pd.DataFrame({'prediccio':
                                     result.predict(exog=np.vander(valid_sample.input,
                                                                    10, increasing=True))})
         nmse_valid = np.sum((valid_sample.target - prediccions.prediccio)**2)/ \
                             ((N_big-1)*np.var(valid_sample.target))
         nmse_valid
Out[30]: 1.5912845280448578
In [31]: fig, ax = plt.subplots(figsize=(8,6))
         ax.plot(big_sample.input, big_sample.target, 'o')
         ax.plot(np.linspace(0, 1,num=30),
                 np.sin(2*np.pi*np.linspace(0, 1,num=30)));
         ax.plot(big_sample.input,
                 result.predict(exog=np.vander(big_sample.input,
                                               increasing=True)));
      2.0
```



Sí: estem modelant el TR amb M=9 i no sobreajusta tant (compareu-lo amb la gràfica que hem generat abans)

Conclusió: a mesura que N es fa gran el problema del sobreajust s'alleuja força. En general, però, el concepte "N gran" depèn de quantes variables x usem per modelar i, a més, no és usual tenir control sobre N; per tant, en la pràctica caldrà restringir la mida dels coeficients.

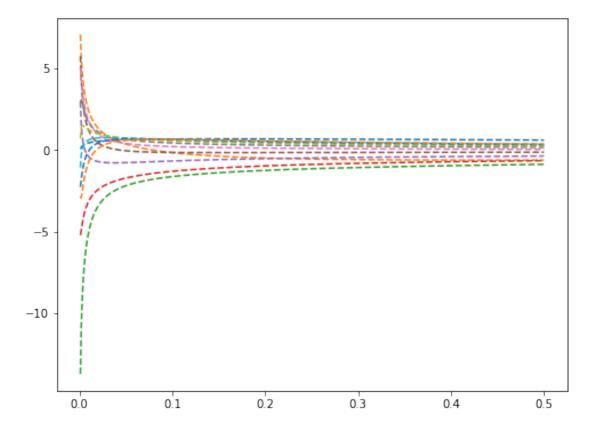
2 Ridge regression

Ara passem a regressió ridge per re-ajustar el TR més gran (N=100)

Aquesta és la idea de la regularització; partim d'una especificació de model sobradament complexe (M=11) i limitem explícitament la mida (en valor absolut) dels coeficients, via el paràmetre lambda (constant de regularització)

La gràcia ara és estimar un bon valor per lambda: veurem més endavant que es pot fer de manera molt eficient quan el model és lineal. Provem doncs dins una seqüència de valors molt llarga:

```
In [32]: # ara farem servir la Ridge regression de scikit learn
         # que es mes practica que la de statsmodels
         pcoef = 11
         lambdes = np.linspace(0.001, 0.5, num=500)
   aquest seria el model "estàndar" (sense regularitzar)
In [33]: model = GLM(sample.target,
                     np.vander(sample.input,pcoef+1, increasing=True))
         result = model.fit()
   aquest seria el model regularitzat
In [34]: model_ridge = Ridge(fit_intercept=False)
         coefs=[]
         for a in lambdes:
             model_ridge.set_params(alpha=a)
             model_ridge.fit(np.vander(sample.input,pcoef+1,
                                        increasing=True),
                              sample.target)
             coefs.append(model_ridge.coef_)
         coefs = np.array(coefs);
In [35]: fig, ax = plt.subplots(figsize=(8,6))
         for i in range(pcoef+1):
             ax.plot(lambdes, coefs[:,i], '--')
         0;
```



El que veiem a la gràfica (que és molt xula) és com tots els coeficients (dels graus 1 al 12) se'n van a zero a mesura que regularitzem més (lambdes més altes)

Igual que la crida anterior, però ara seleccionem la millor lambda (que és la que té un error quadràtic regularitzat menor); podríem haver fet només aquesta crida directament:

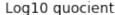
hi ha varis criteris per seleccionar la millor lambda de manera eficient; a classe (quan toqui) veurem el GCV

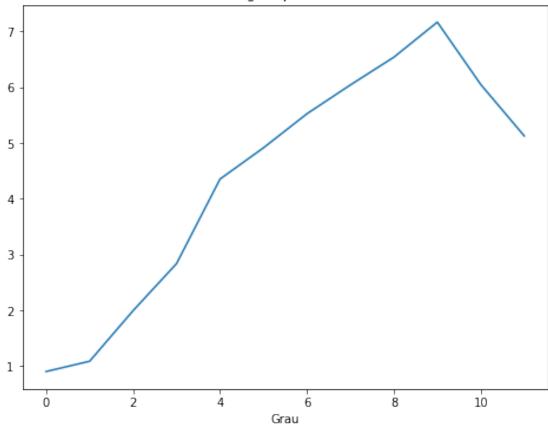
dóna lambda = {{model_ridgeCV.alpha_}}, per tant ajustem un nou model (que serà el definitiu) amb aquest valor:

In [37]: model_final = Ridge(fit_intercept=False,

```
alpha=model_ridgeCV.alpha_)
         model_final.fit(np.vander(sample.input,
                                     increasing=True),
                          sample.target);
   Compareu els dos grups de coeficients del nostre model M=12 (estàndar i regularitzats)
In [38]: pd.DataFrame(result.params)
Out [38]:
                         0
         const 1.471e+00
         x1
               -6.934e+01
         x2
               1.062e+03
         xЗ
               -3.372e+03
               -3.329e+04
         x4
                3.455e+05
         x5
         x6
               -1.435e+06
         x7
                3.367e+06
               -4.790e+06
         8x
         x9
                4.096e+06
         x10
               -1.939e+06
         x11
                3.911e+05
In [39]: pd.DataFrame(model_final.coef_)
Out [39]:
                   0
              0.183
         0
         1
              5.652
         2
           -10.756
         3
             -4.896
         4
              1.478
         5
              4.224
         6
              4.309
         7
              3.075
              1.393
         8
         9
             -0.281
         10 -1.745
         11 -2.931
In [40]: np.sqrt(np.sum(result.params**2)) / np.sqrt(np.sum(model_final.coef_**2))
Out [40]: 494886.4387369518
   per tenir una idea millor, calcularem el quocient entre uns i altres.
```

Millor fem un plot logarítmic, per veure els ordres de magnitud





Queda per veure que el model regularitzat no és pitjor que l'inicial (no sigui que per penalitzarli els coeficients ara sigui un model pitjor)

primer calculem l'error pel mètode estàndar (sense regularitzar) com fins ara

dóna 0.17365749442701198, mentre que el model anterior, trobat per prova i error de M donava 0.17144211872698967; és a dir, són dos models igualment bons, però el regularitzat s'ha trobat mitjançant un mecanisme de control de complexitat que és independent del métode (només afecta la funció d'error) i el paràmetre lambda és més fàcil d'ajustar i menys sensible a fluctuacions