R 机器学习

第06讲 正则化回归

张敬信

2022年9月25日

哈尔滨商业大学

一. 正则化回归模型

- 多元线性回归中,通常会在众多变量中选择对因变量显著性影响大的那些自变量。但常常会遇到一个问题:在某些情况下,增加或剔除一个自变量后,回归系数变化很大甚至改变符号,主要原因就是变量之间存在多重共线性,得到回归模型是"伪回归"。
- 这时就需要岭回归、Lasso 回归、弹性网回归,它们都是基于一种正则化 技术 (可减少过拟合)。

1. 岭回归

- 岭回归是一种改良的最小二乘法,通过放弃最小二乘法的无偏性,以损失部分信息、降低精度为代价,获得回归系数更为符合实际、更可靠的回归方法。
- 这种改良是通过对损失函数添加 l_2 正则项 (也称为惩罚项) 来实现的:

$$\begin{split} J(\beta) &= \sum_{i=1}^n (y_i - X\beta)^2 + \lambda \|\beta\|_2^2 \\ &= \sum_{i=1}^n (y_i - X\beta)^2 + \lambda \sum_{i=1}^n |\beta_i|^2 \end{split}$$

3

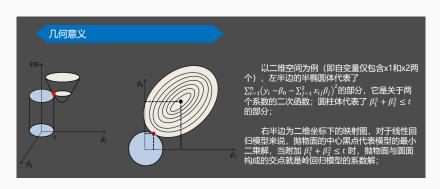
- ・ 其中正则项系数 λ 为非负实数, 用于平衡方差 (回归系数的方差) 和偏差
- 当 $\lambda=0$ 时,损失函数退化为多元线性回归模型的损失函数
- ・ 当 $\lambda \to \infty$ 时,会缩减回归系数 β 使其趋于 0
- β 为模型参数, λ 是需要调参的超参数。

• 岭回归模型的等价表示 (拉格朗日乘数法):

$$J(\beta) = \sum (y - X\beta)^{2} + \lambda \|\beta\|_{2}^{2} = \sum (y - X\beta)^{2} + \lambda \sum \beta^{2}$$

$$\begin{cases} argmin \left\{ \sum (y - X\beta)^{2} \right\} \\ \text{附加约束 } \sum \beta^{2} \leq t \end{cases}$$

• 岭回归模型正则项的几何意义:



2. Lasso 回归

- 岭回归添加 l_2 正则的惩罚项,但缺陷在于始终保留建模时的所有变量, 无法降低模型的复杂度(减少变量)。
- 对于此,若改为添加 l_1 正则的惩罚项,就得到 Lasso 回归模型:

$$\begin{split} J(\beta) &= \sum_{i=1}^n (y_i - X\beta)^2 + \lambda \cdot \frac{1}{2} \|\beta\|_1^2 \\ &= \sum_{i=1}^n (y_i - X\beta)^2 + \lambda \cdot \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n |\beta_i| \end{split}$$

• β 为模型参数, λ 是需要调参的超参数。

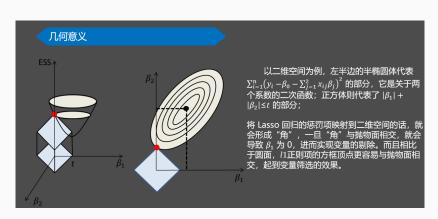
7

• Lasso 回归模型的等价表示 (拉格朗日乘数法):

$$J(\beta) = \sum (y - X\beta)^{2} + \lambda ||\beta||_{1} = \sum (y - X\beta)^{2} + \sum \lambda |\beta|$$

$$\begin{cases} argmin \left\{ \sum (y - X\beta)^{2} \right\} \\ \text{附加约束 } \sum |\beta| \le t \end{cases}$$

· Lasso 回归模型正则项的几何意义:



3. 弹性网模型

• 弹性网模型是将岭回归和 Lasso 回归结合起来,混合 l_1 正则项和 l_2 正则项,用新参数 α 控制二者所占比重:

$$\begin{split} J(\beta) &= \sum_{i=1}^n (y_i - X\beta)^2 + \lambda \big[(1-\alpha) \|\beta\|_2^2 + \alpha \|\beta\|_1^2 \big] \\ &= \sum_{i=1}^n (y_i - X\beta)^2 + \lambda \Big[(1-\alpha) \cdot \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n |\beta_i|^2 + \alpha \sum_{i=1}^n |\beta_i| \Big] \end{split}$$

- $\alpha=0$ 退化为岭回归, $\alpha=1$ 退化为 Lasso 回归
- β 为模型参数, α 和 λ 都是需要调参的超参数

二. 正则化回归案例

- mlr3 做正则化回归是调用的 glmnet 包实现岭回归、Lasso 回归、弹性 网回归,提供了两个学习器:
 - "regr.glmnet": 调用 glmnet::glmnet()
 - "regr.cv_glmnet": 调用 glmnet::cv.glmnet()

• 两个原始函数的基本格式为:

```
glmnet(x, y, family=..., alpha=1, lambda=NULL, ...)
cv.glmnet(x, y, family=..., alpha=1, lambda=NULL, ...)
```

- 其中,
 - x 为自变量数据, y 为因变量数据;
 - family 指定因变量的类型,默认为 "gaussian" (适合一般连续变量),还可以是 "binomial", "poisson", "multinomial", "cox", "mgaussian";
 - alpha 为弹性网混合系数,0 为岭回归,1 为 Lasso 回归,介于 0 和 1 之间为弹性网回归;
 - lambda 设定惩罚程度的超参数
- 二者区别: cv.glmnet()已经带有交叉验证对 lambda 调参,根据预测错误率或 RMSE 最小选择最优 lambda

1. 准备数据

• 本例使用自带任务 boston_housing (波士顿房价数据),先加载包

```
library(tidyverse)
library(mlr3verse)
library(glmnet) # 正则化广义回归模型
```

・ 从 mlr3 自帯任务 boston_housing 中提取 Boston 房价数据

#> \$ medv <dbl> 24.0, 21.6, 34.7, 33.4, 36.2, 28.7, 22.9,

#> \$ chas <fct> 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,

<dbl> 65.2, 78.9, 61.1, 45.8, 54.2, 58.7, 66.6,

<dbl> 397, 397, 393, 395, 397, 394, 396, 397, 38

<dbl> 24.0, 21.6, 34.7, 33.4, 36.2, 28.7, 22.9,

<dbl> 0.00632, 0.02731, 0.02729, 0.03237, 0.0696

<dbl> 4.09, 4.97, 4.97, 6.06, 6.06, 6.06, 5.56,

<dbl> 2.31, 7.07, 7.07, 2.18, 2.18, 2.18, 7.87,

<dbl> 42.3, 42.3, 42.3, 42.3, 42.3, 42.3, 42.3,

<dbl> -71.0, -71.0, -70.9, -70.9, -70.9, -70.9,

<dbl> 4.98, 9.14, 4.03, 2.94, 5.33, 5.21, 12.43,

~dhl~ 0 538 0 460 0 460 0 458 0 458 0 458

boston = tsk("boston housing")\$data()

```
glimpse(boston)
```

```
#> Rows: 506
```

#> \$ age

#> \$ b

#> \$ cmedv

#> \$ crim

#> \$ dis

#> \$ indus

#> \$ lat

#> \$ lon

#> \$ lstat

#> \$ nov

额外步骤

- glmnet 包比较特殊,不能直接处理因子型变量,所以需要做额外的数据准备:
 - · town 水平值过于分散,为了简单直接从特征变量中移除它
 - · chas 是两水平因子,处理成虚拟变量
- 函数 model_matrix() 根据回归公式,将自变量数据转换为模型数据, 因子型变量将处理成虚拟变量,但多了一列都是1的截距列,需移除它

```
boston = boston[,-"town"]
x = modelr::model_matrix(boston, medv ~ .)[,-1]
boston = bind_cols(x, boston[,"medv"])
```

2. 创建任务

```
bh_task = as_task_regr(boston, target = "medv")
bh_task

#> <TaskRegr:boston> (506 x 18)

#> * Target: medv

#> * Properties: -

#> * Features (17):

#> - dbl (17): age, b, chas1, cmedv, crim, dis, indus, lat,

#> mox, ptratio, rad, rm, tax, tract, zn
```

3. 划分训练集和测试集

- 做留出 (holdout) 重抽样, 80% 作为训练集, 其余 20% 作为测试集
- 为了保持训练集、测试集的因变量数据具有相似的分布,采用分层抽样 方法
- 用 partition()函数对任务做划分,默认按因变量分层,取出训练集索引和测试集索引

```
set.seed(123)
split = partition(bh_task, ratio = 0.8)
# 默认 stratify = TRUE
```

4. 岭回归模型

(1) 选择学习器

```
learner = lrn("regr.glmnet", alpha = 0) # 需要 glmnet 包
learner
#> <LearnerRegrGlmnet:regr.glmnet>
#> * Model · -
#> * Parameters: family=gaussian, alpha=0
#> * Packages: mlr3, mlr3learners, glmnet
#> * Predict Types: [response]
#> * Feature Types: logical, integer, numeric
#> * Properties: weights
```

注:可用 lrns() 查看所有可用的学习器,更多学习器在mlr3extralearners包。

(2) 超参数调参

#5 11.

• 查看模型的所有超参数及默认值

1		1					
Lea	arner\$param_	set					
#>	<paramset></paramset>						
#>		id	class	lower	upper	nlevels	
#>	1:	alignment	ParamFct	NA	NA	2	
#>	2:	alpha	ParamDbl	0	1	Inf	
#>	3:	big	ParamDbl	-Inf	Inf	Inf	
#>	4:	devmax	ParamDbl	0	1	Inf	
#>	5:	dfmax	ParamInt	0	Inf	Inf	< N (
#>	6:	eps	ParamDbl	0	1	Inf	
#>	7:	epsnr	ParamDbl	0	1	Inf	
#>	8:	exact	ParamLgl	NA	NA	2	
#>	9:	exclude	ParamInt	1	Inf	Inf	< N (
#>	10:	exmx	ParamDbl	-Inf	Inf	Inf	19

family DaramEct

NΙΛ

NΛ

- 需要对模型中的惩罚超参数 λ 做调参,对应超参数中的 s
- 使用自动调参器,需要设置学习器、重抽样方法、模型评估指标、搜索空间、终止条件、搜索方法

```
library(paradox)
search_space = ps(
 s = p \ dbl(lower = 0.001, upper = 10))
at = AutoTuner$new(
 learner = learner,
                                     # 3 折交叉验证
  resampling = rsmp("cv", folds = 3L),
 measure = msr("regr.rmse"),
                                         # 评估指标选 rmse
  search space = search space,
 terminator = trm("evals", n_evals = 10), # 计算 10 次终止
                                        # 随机搜索
 tuner = tnr("random search"))
```

启动自动调参过程

#> TNEO

at\$train(bh task, row ids = split\$train) [21:25:16.612] [bbotk] Starting to optimize 1 parame #> INFO

[21:25:16.649] [bbotk] Evaluating 1 configuration(s) #> INFO [21:25:16.688] [mlr3] Running benchmark with 3 resam #> INFO

#> INFO [21:25:16.727] [mlr3] Applying learner 'regr.glmnet'

[21:25:16.779] [mlr3] Applying learner 'regr.glmnet' #> INFO

#> INFO [21:25:16.804] [mlr3] Applying learner 'regr.glmnet'

[21:25:16.827] [mlr3] Finished benchmark #> INFO #> INFO [21:25:16.861] [bbotk] Result of batch 1:

#> INFO [21:25:16.863] [bbotk] s regr.rmse warnings erro

#> INFO [21:25:16.863] [bbotk] 2.87 2.37

[21:25:16.863] [bbotk] #> INFO

#> INFO [21:25:16.863] [bbotk] bf8bb37c-500a-4d53-b076-4ec9

#> INFO [21:25:16.865] [bbotk] Evaluating 1 configuration(s)

[21:25:16.896] [mlr3] Running benchmark with 3 resan #> INFO

[21.25.16 QQ1] [m]r2] Applying learner 'regr glmpet'

• 查看最优超参数

(3) 训练模型

• 用调出的最优参数更新学习器的参数集

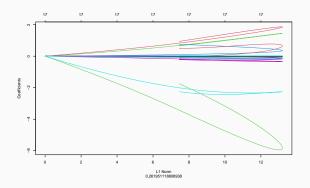
```
learner$param_set$values =
  at$tuning_result$learner_param_vals[[1]]
learner$train(bh_task, row_ids = split$train)
```

注: 也可以用最优的超参数重新构建学习器

• 提取岭回归模型系数:

```
coef(learner$model, s = at$tuning result$s)
#> 18 x 1 sparse Matrix of class "dgCMatrix"
#>
                     s1
#> (Intercept) -1.38e+02
               5.02e-04
#> age
#> b
               1.93e-03
#> chas1
               6.53e-01
#> cmedv
             7.54e-01
#> crim
             -2.39e-02
#> dis
             -1.95e-01
#> indus
              -1.37e-02
#> lat
              4.91e-01
#> lon
              -1.75e+00
             -1.15e-01
#> lstat
#> nox
            -2.26e+00
\#\ ntratio =2 230-01
```

plot(learner\$model, s = at\$tuning_result\$s)



(4) 模型预测

```
predictions = learner$predict(bh_task, row_ids = split$test)
predictions
#> <PredictionRegr> for 102 observations:
#>
      row_ids truth response
#>
              21.6
                      22.45
            3 34.7 33.60
#>
#>
           30 21.0 21.10
#> ---
#>
              13.3
                      13.87
          476
              19.1
#>
          487
                      19.19
          490 7.0
                       7.87
#>
```

(5) 模型评估

注:用 msrs()可查看所有可用的模型评估指标。

(6) 预测新数据

```
newdata = boston[1:5,-18]
learner$predict_newdata(newdata)
#> <PredictionRegr> for 5 observations:
#>
   row_ids truth response
              NA
                    25.5
#>
#>
              NA 22.5
#>
              NA 33.6
#>
              NA 32.3
#>
              NA 34.3
```

5. Lasso **回归模型**

(1) 选择学习器

```
learner = lrn("regr.glmnet", alpha = 1) # 需要 glmnet 包
learner
#> <LearnerRegrGlmnet:regr.glmnet>
#> * Model: -
#> * Parameters: family=gaussian, alpha=1
#> * Packages: mlr3, mlr3learners, glmnet
#> * Predict Types: [response]
#> * Feature Types: logical, integer, numeric
#> * Properties: weights
```

注:可用 lrns() 查看所有可用的学习器,更多学习器在mlr3extralearners包。

(2) 超参数调参

#5 11.

• 查看模型的所有超参数及默认值

1							
Lea	arner\$param_	set					
#>	<paramset></paramset>						
#>		id	class	lower	upper	nlevels	
#>	1:	alignment	ParamFct	NA	NA	2	
#>	2:	alpha	ParamDbl	0	1	Inf	
#>	3:	big	ParamDbl	-Inf	Inf	Inf	
#>	4:	devmax	ParamDbl	0	1	Inf	
#>	5:	dfmax	ParamInt	0	Inf	Inf	< N (
#>	6:	eps	ParamDbl	0	1	Inf	
#>	7:	epsnr	ParamDbl	0	1	Inf	
#>	8:	exact	ParamLgl	NA	NA	2	
#>	9:	exclude	ParamInt	1	Inf	Inf	< N (
#>	10:	exmx	ParamDbl	-Inf	Inf	Inf	30

family DaramEct

NΙΛ

NΛ

30

- ・ 需要对模型中的惩罚超参数 λ 做调参, 对应超参数中的 s
- 使用自动调参器,需要设置学习器、重抽样方法、模型评估指标、搜索空间、终止条件、搜索方法

```
search_space = ps(
 s = p \ dbl(lower = 0.001, upper = 10))
at = AutoTuner$new(
 learner = learner,
  resampling = rsmp("cv", folds = 3L),
                                    # 3 折交叉验证
 measure = msr("regr.rmse"),
                                         # 评估指标选 rmse
  search space = search space,
 terminator = trm("evals", n_evals = 10), # 计算 10 次终止
                                        # 随机搜索
 tuner = tnr("random search"))
```

启动自动调参过程

#> TNEO

at\$train(bh task, row ids = split\$train) [21:25:18.667] [bbotk] Starting to optimize 1 parame #> INFO

[21:25:18.675] [bbotk] Evaluating 1 configuration(s) #> INFO [21:25:18.712] [mlr3] Running benchmark with 3 resam

#> INFO #> INFO [21:25:18.718] [mlr3] Applying learner 'regr.glmnet'

[21:25:18.741] [mlr3] Applying learner 'regr.glmnet' #> INFO

#> INFO [21:25:18.765] [mlr3] Applying learner 'regr.glmnet'

[21:25:18.785] [mlr3] Finished benchmark #> INFO #> INFO [21:25:18.815] [bbotk] Result of batch 1:

#> INFO [21:25:18.817] [bbotk] s regr.rmse warnings erro

#> INFO [21:25:18.817] [bbotk] 6.54 6.58

[21:25:18.817] [bbotk] #> INFO

#> INFO [21:25:18.817] [bbotk] 91eed8de-a314-4855-8489-2273

#> INFO [21:25:18.820] [bbotk] Evaluating 1 configuration(s)

[21:25:18.907] [mlr3] Running benchmark with 3 resan #> INFO

[21.25.18 013] [mlr3] Applying learner 'regr glmpet'

• 查看最优超参数

(3) 训练模型

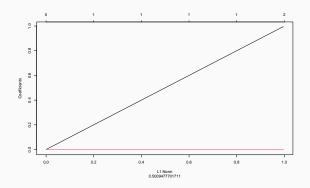
• 用调出的最优参数更新学习器的参数集

```
learner$param_set$values =
  at$tuning_result$learner_param_vals[[1]]
learner$train(bh_task, row_ids = split$train)
```

• 提取 Lasso 回归模型系数:

```
coef(learner$model, s = at$tuning result$s)
#> 18 x 1 sparse Matrix of class "dgCMatrix"
#>
                  s1
#> (Intercept) 1.242
#> age
#> b
#> chas1
#> cmedv
             0.945
#> crim
#> dis
#> indus
#> lat
#> lon
#> lstat
#> nox
#> ntratio
```

plot(learner\$model, s = at\$tuning_result\$s)



(4) 模型预测

```
predictions = learner$predict(bh_task, row_ids = split$test)
predictions
#> <PredictionRegr> for 102 observations:
#>
      row_ids truth response
#>
              21.6
                      21.66
            3 34.7 34.04
#>
#>
           30 21.0 21.09
#>
#>
              13.3
                      13.81
          476
              19.1
#>
          487
                      19.29
          490 7.0
                       7.86
#>
```

(5) 模型评估

注:用 msrs()可查看所有可用的模型评估指标。

(6) 预测新数据

```
newdata = boston[1:5,-18]
learner$predict_newdata(newdata)
#> <PredictionRegr> for 5 observations:
#>
   row_ids truth response
              NA
                     23.9
#>
#>
              NA 21.7
#>
              NA 34.0
#>
              NA 32.8
#>
              NA
                    35.5
```

6. 弹性网模型

(1) 选择学习器

```
learner = lrn("regr.glmnet") # 需要 glmnet 包
learner
#> <LearnerRegrGlmnet:regr.glmnet>
#> * Model · -
#> * Parameters: family=gaussian
#> * Packages: mlr3, mlr3learners, glmnet
#> * Predict Types: [response]
#> * Feature Types: logical, integer, numeric
#> * Properties: weights
```

注:可用 lrns() 查看所有可用的学习器,更多学习器在mlr3extralearners包。

(2) 超参数调参

#5 11.

• 查看模型的所有超参数及默认值

1		- 4					
tea	arner\$param_s	et					
#>	<paramset></paramset>						
#>		id	class	lower	upper	nlevels	
#>	1:	alignment	ParamFct	NA	NA	2	
#>	2:	alpha	ParamDbl	0	1	Inf	
#>	3:	big	ParamDbl	-Inf	Inf	Inf	
#>	4:	devmax	ParamDbl	0	1	Inf	
#>	5:	dfmax	ParamInt	0	Inf	Inf	<n0< td=""></n0<>
#>	6:	eps	ParamDbl	0	1	Inf	
#>	7:	epsnr	ParamDbl	0	1	Inf	
#>	8:	exact	ParamLgl	NA	NA	2	
#>	9:	exclude	ParamInt	1	Inf	Inf	< N c
#>	10:	exmx	ParamDbl	-Inf	Inf	Inf	41

family DaramEct

МΛ

NΛ

- 需要对模型中的惩罚超参数 λ 以及权重参数 α 做调参,分别对应超参数 中的 s 和 alpha
- 使用自动调参器,需要设置学习器、重抽样方法、模型评估指标、搜索空间、终止条件、搜索方法

```
search space = ps(
  s = p \ dbl(lower = 0.001, upper = 10),
 alpha = p dbl(lower = 0, upper = 1))
at = AutoTuner$new(
 learner = learner,
 resampling = rsmp("cv", folds = 3L), # 3 折交叉验证
                                         # 评估指标选 rmse
 measure = msr("regr.rmse"),
  search_space = search_space,
 terminator = trm("evals", n_evals = 10), # 计算 10 次终止
 tuner = tnr("random search"))
                                         # 随机搜索
```

启动自动调参过程

#> TNEO

at\$train(bh task, row ids = split\$train) [21:25:20.643] [bbotk] Starting to optimize 2 parame #> INFO

[21:25:20.654] [bbotk] Evaluating 1 configuration(s) #> INFO

[21:25:20.685] [mlr3] Running benchmark with 3 resam #> INFO

#> INFO [21:25:20.692] [mlr3] Applying learner 'regr.glmnet' [21:25:20.717] [mlr3] Applying learner 'regr.glmnet' #> INFO

#> INFO [21:25:20.740] [mlr3] Applying learner 'regr.glmnet'

[21:25:20.768] [mlr3] Finished benchmark #> INFO

#> INFO [21:25:20.800] [bbotk] Result of batch 1:

#> INFO [21:25:20.801] [bbotk] s alpha regr.rmse warni

#> INFO [21:25:20.801] [bbotk] 0.664 0.0376 1.03

[21:25:20.801] [bbotk] #> INFO

#> INFO [21:25:20.801] [bbotk] 94f0880a-de8f-479e-8166-fb31

#> INFO

[21:25:20.804] [bbotk] Evaluating 1 configuration(s)

[21:25:20.833] [mlr3] Running benchmark with 3 regan #> INFO

[21.25.20 830] [mlr3] Applying learner 'regr glmpet'

• 查看最优超参数

(3) 训练模型

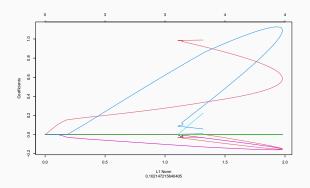
• 用调出的最优参数更新学习器的参数集

```
learner$param_set$values =
  at$tuning_result$learner_param_vals[[1]]
learner$train(bh_task, row_ids = split$train)
```

• 提取弹性网回归模型系数:

```
coef(learner$model, s = at$tuning result$s)
#> 18 x 1 sparse Matrix of class "dgCMatrix"
#>
                      s1
#> (Intercept) 4.78e-01
#> age
#> b
                3.87e-05
#> chas1
#> cmedv
              9.76e-01
#> crim
              -4.59e-05
#> dis
#> indus
#> lat
#> lon
#> lstat
               -4.11e-03
#> nox
              -3.01e-03
#> ntratio
            -3 476-02
```

plot(learner\$model, s = at\$tuning_result\$s)



(4) 模型预测

```
predictions = learner$predict(bh_task, row_ids = split$test)
predictions
#> <PredictionRegr> for 102 observations:
#>
      row_ids truth response
#>
              21.6
                      21.69
            3 34.7 34.58
#>
#>
           30 21.0 21.01
#> ---
#>
              13.3
                      13.41
          476
#>
          487 19.1
                      19.11
          490 7.0
                       7.18
#>
```

(5) 模型评估

注:用 msrs()可查看所有可用的模型评估指标。

(6) 预测新数据

```
newdata = boston[1:5,-18]
learner$predict_newdata(newdata)
#> <PredictionRegr> for 5 observations:
#>
   row_ids truth response
              NA
                     24.2
#>
#>
              NA 21.7
#>
              NA 34.6
#>
              NA 33.3
#>
              NA
                     36.0
```

主要参考文献

- [1] mlr3book. 2021. https://mlr3book.mlr-org.com/
- [2] A. Kassambara, Machine Learning Essential: Practiale Guide in R. 2017. http://www.sthda.com
- [3] 刘顺祥. 从零开始学 Python-数据分析与挖掘. 清华大学出版社, 2018.