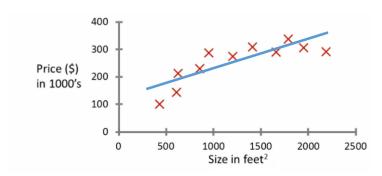
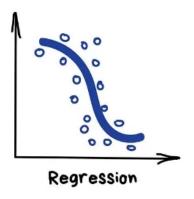


**Линейные модели** — это модели, отображающие зависимость целевого признака от факторов в виде линейной взаимосвязи.

## Линейные модели



# Регрессия



**Регрессия** — это класс задач обучения с учителем, когда по определённому набору признаков объекта необходимо предсказать **числовую целевую переменную**.

**Цель обучения** — построить модель, которая бы отражала зависимость между признаками и целевой числовой переменной.

Когда зависимость принимается линейной, такая модель называется линейной регрессией.



# Линейная регрессия

**Линейная регрессия (Linear Regression)** — одна из простейших моделей для решения задачи регрессии. Главная гипотеза состоит в том, что рассматриваемая зависимость является линейной.

Общий вид модели в случае, когда целевая переменная зависит от m факторов, будет иметь следующий вид:

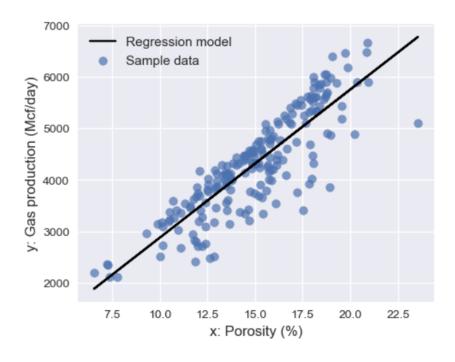
$$\hat{y} = \omega_0 + \omega_1 x_1 + \omega_2 x_2 + ... + \omega_m x_m$$

#### Геометрическая интерпретация. 2D-случай

В случае, когда целевой признак y зависит от одного только фактора x, уравнение модели линейной регрессии — это уравнение прямой в 2D-пространстве:

$$\hat{y} = \omega_0 + \omega_1 x$$

#### Пример:

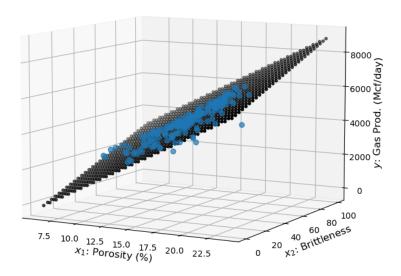


#### Геометрическая интерпретация. 3D-случай

Когда целевой признак y зависит от двух факторов  $x_1$  и  $x_2$  , уравнение модели линейной регрессии — это уравнение плоскости в 3D-пространстве:  $\hat{y}=\omega_0+\omega_1x_1+\omega_2x_2$ 

#### Пример:

Sample dataRegression model



# Геометрическая интерпретация. Общий случай

Пусть у нас есть m факторов  $\{x_1, x_2, ..., x_m\}$ , от которых зависит целевая переменная y.

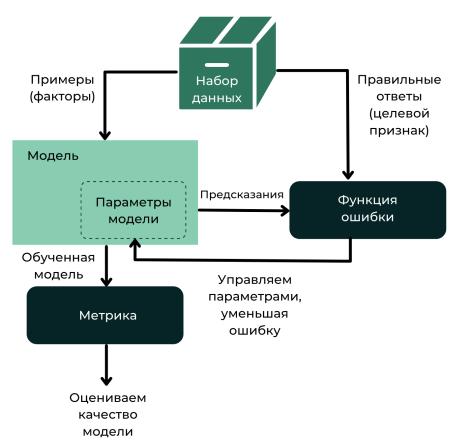
$$\hat{y} = \omega_0 + \omega_1 x_1 + \omega_2 x_2 + ... + \omega_m x_m = \omega_0 + \sum_{j=1}^m \omega_j x_j$$

В геометрическом смысле данное уравнение описывает плоскость в (m+1)-мерном пространстве (m факторов + один целевой признак отложены по осям координат). Такую плоскость называют **гиперплоскостью**.



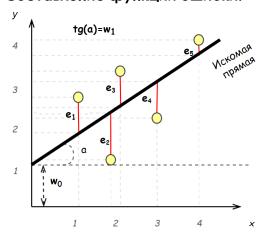
## Поиск параметров линейной регрессии

Поиск параметров модели производится по принципу минимизации эмпирического риска (минимизации функции потерь):



Функция ошибки в линейной регрессии — **средний квадрат разности ошибки** (MSE).

#### Составление функции ошибки:



**Рассчитать ошибки**  $e_{_{i}}$  (на рисунке они отмечены красными отрезками):

$$e_i = |y_i - \hat{y}_i|,$$

где  $\widehat{y_i}$  — это результат подстановки i-ого значения x в модель линейной регрессии.

Возвести все ошибки в квадрат и вычислить среднее:

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^{n} e^{2}_{i}}{n} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \hat{y}_{i})^{2}}{n} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \omega_{0} - \omega_{1} x_{i})^{2}}{n}$$

Это и будет функция ошибки, которую мы будем минимизировать, управляя параметрами  $w_{_0}$  и  $w_{_1}$ :

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{n} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \omega_0 - \omega_1 x_i)^2}{n} \rightarrow min_{\omega}$$

В общем случае, когда X — это таблица из n наблюдений и m признаков, постановка задачи оптимизации MSE выглядит следующим образом:

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \hat{y}_{i})^{2}}{n} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - \omega_{0} - \sum_{j=1}^{m} \omega_{j} x_{ij})^{2}}{n} \to min_{\omega},$$

где  $x_{ij}$  — значение, которое находится в i-ой строке и j-ом столбце таблицы наблюдений.

# Аналитическое решение. Метод наименьших квадратов

Метод поиска параметров линейной регрессии называется **методом** наименьших квадратов (сокращённо — MHK). В англоязычной литературе часто можно встретить аббревиатуру OLS (Ordinary Least Squares).

Аналитическое решение по МНК для общего случая:

$$\hat{y} = \omega_0 + \omega_1 x_1 + \omega_2 x_2 + \dots + \omega_m x_m = \overline{\omega} \cdot \overline{x}$$

$$\overline{\omega} = (\omega_0, \omega_1, \omega_2, ..., \omega_m)$$
 — вектор параметров  $\overline{x} = (1, x_1, x_2, ..., x_m)$  — вектор признаков

$$\overline{\omega} = (X^T X)^{-1} X^T y = Q X^T y$$

Данная матричная формула позволяет найти неизвестные параметры линейной регрессии в виде вектора  $\overline{\omega}=(\omega_0,\omega_1,\omega_2,...,\omega_m)$ . Найденные коэффициенты называют **решением задачи линейной регрессии**.

# Аналитическое решение с помощью NumPy

```
def linear_regression(X, y):

#Создаём вектор из единиц

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

#Добавляем вектор к таблице первым столбцом

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

#Вычисляем обратную матрицу Q

Q = np.linalg.inv(X.T @ X)

#Вычисляем вектор коэффициентов

w = Q @ X.T @ y

return w
```

# Аналитическое решение с помощью sklearn

Обучение (поиск параметров) — метод fit():

```
#Создаём объект класса LinearRegression

Ir = linear_model.LinearRegression()

#Обучаем модель — ищем параметры по МНК

Ir .fit(X, y)
```

Предсказание — метод predict():

```
y_predict = Ir.predict(X)
```

Посмотреть коэффициенты — атрибуты coef\_ и intercept\_:

```
lr .coef_ — коэффициенты при факторах lr.intercept _ — свободный член
```

SKILLFACTORY

**Курс** Специализация Data Science **Модуль ML-2** "Обучение с учителем: регрессия"

Составление таблицы из факторов и коэффициентов при них:

```
#Составляем таблицу из признаков и их коэффициентов w_df = pd.DataFrame({'Features': features, 'Coefficients': Ir_full .coef_}) #Составляем строчку таблицы со свободным членом intercept_df =pd.DataFrame({'Features': ['INTERCEPT'], 'Coefficients': Ir_full .intercept_}) coef_df = pd.concat([w_df, intercept_df], ignore_index=True)
```

Каждый из коэффициентов в модели показывает, на сколько в среднем изменится целевой признак при увеличении параметра на единицу.

#### Пример визуализации ошибок:

#### Требования к данным при подаче в модель линейной регрессии:

- отсутствие пропущенных значений,
- → отсутствие выбросов,
- → кодированные категориальные признаки.

# Метрики регрессии

**Метрика** — это численное выражение качества моделирования.

# Средняя абсолютная ошибка — MAE (Mean Absolute Error)

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^{n} |y_i - \hat{y}_i|}{n}$$

# Средняя абсолютная ошибка в процентах — MAPE (Mean Absolute Percent Error)

$$MAPE = \sum_{i=1}^{n} \frac{|y_i - \hat{y}_i|}{|y_i|} \frac{100\%}{n}$$

# Средняя квадратическая ошибка — MSE (Mean Squared Error)

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{n}$$

# Корень из средней квадратической ошибки — RMSE (Root Mean Squared Error)

$$RMSE = \sqrt{MSE} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{n}}$$

# Коэффициент детерминации ( $R^2$ )

$$R^2 = 1 - \frac{\mathit{MSE}}{\mathit{MSE}_{\mathit{mean}}}$$
, где

$$MSE_{mean} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \overline{y})^2}{n}$$

Назва ние	Формула	Интерпретация и применение	Достоинств а	Недостатки	Функция в модуле metrics библиотеки sklearn
MAE	$\frac{\sum_{i=1}^{n}  y_i - \hat{y}_i }{n}$	Помогает оценить абсолютную ошибку: насколько в среднем число в предсказании разошлось с реальным числом.	Удобно интерпретир овать. Измеряется в тех же единицах, что и целевой признак. Несильно искажается при наличии выбросов.	Не поможет, если необходим о сравнить модели, предсказыв ающие одно и то же по разным признакам.	mean_absol ute_error( )
MAPE	$\sum_{i=1}^{n} \frac{ y_i - \hat{y}_i }{ y_i } \frac{100\%}{n}$	Помогает абстрагировать ся от конкретных чисел и оценить абсолютную ошибку в процентах.	Легко интерпретир овать. Используетс я в задачах, где неизвестно, какое значение метрики считать приемлемы м.	Плохо подходит для задач, в которых важны конкретные единицы измерений. лучше использоват ь в паре с маЕ, чтобы знать абсолютную ошибку и её значение в процентах.	mean_absol ute_percen tage_error ()
MSE	$\frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{n}$	Интерпретации нет. Используется в задачах, где критически важны большие ошибки, например при предсказании	Каждая ошибка вносит свой квадратичны й штраф, большие расхождени я между предсказан	Измеряется в квадратах единиц, поэтому менее доступна для понимания. Искажается	mean_squar e_error()

		координат полёта.	ием и истиной увеличивают штраф.	при наличии выбросов. Не поможет, если нужно сравнить модели, предсказыв ающие одно и то же по разным признакам.	
RMSE	$\sqrt{\frac{\sum\limits_{i=1}^{n}(y_{i}-\widehat{y}_{i})^{2}}{n}}$	Можно трактовать как стандартное отклонение предсказаний от истинных ответов. Используется в тех же задачах, что и MSE.	Имеет те же преимущес тва, что и МSE, но более удобна для понимания (измеряется в тех же единицах, что и целевая переменная ).	Не поможет, если нужно сравнить модели, предсказыв ающие одно и то же по разным признакам.	Отдельная функция отсутствует, но можно извлечь корень из результата функции mean_squar e_error().
R <sup>2</sup>	$1 - \frac{MSE}{MSE_{mean}}$	Помогает понять, какую долю разнообразия (дисперсии) смогла уловить модель в данных. Позволяет сравнить, насколько модель лучше, чем простое предсказание средним.	Можно сравнивать модели, обученные на разных признаках. Легко оценить качество модели: измеряется от -∞ до 1. Удовлетвори тельным показателе м считается показатель выше 0.5.	Чувствительн а к добавлению новых данных. Чувствительн а к выбросам, так как основана на MSE.	r2_score()

### Расчёт метрик на Python

#### from sklearn import metrics

- → mean\_absolute\_error() расчёт МАЕ;
- → mean\_square\_error() расчёт MSE;
- → mean\_absolute\_percentage\_error() расчёт МАРЕ;
- ightarrow r2\_score() расчёт коэффициента детерминации  $R^2$ .

**Примечание.** Для расчёта метрики RMSE нет специальной функции, однако мы знаем, что для её расчёта достаточно извлечь квадратный корень из MSE.

По причине реализации mean\_absolute\_percent\_error() функция возвращает результат НЕ в процентах, а в долях. Чтобы отобразить результат в процентах, необходимо умножить его на 100.

### Недостатки аналитического решения

$$\overline{\omega} = (X^T X)^{-1} X^T y = Q X^T y$$

- 1. Кубическая сложность вычисления обратной матрицы.  $O = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1}$
- 2. Невозможность инкрементального обучения.
- 3. Матрица  $Q = (X^T X)^{-1}$  может не существовать.

# Численное решение. Градиентный спуск

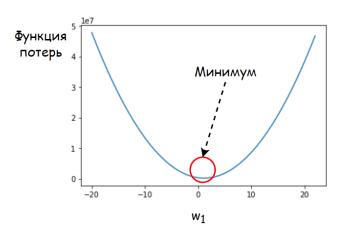
Искать минимум функции потерь можно не только аналитическим, но и численным способом.

Градиентный спуск (Gradient descent) — самый используемый алгоритм минимизации функции потерь. Он применяется почти в каждой модели машинного обучения и является наиболее простым в реализации из всех методов численной оптимизации.

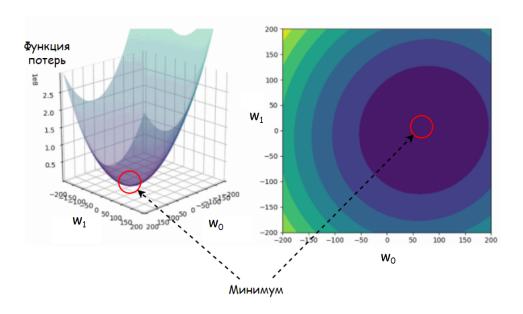
Пространство, в котором находится функция потерь — это **пространство параметров**  $\omega$  нашей модели. То есть это система координат, в которой по осям отложены все возможные значения параметров  $\omega$ .



#### Случай одного параметра:



#### Случай двух параметров:



1. Проинициализировать значения параметров.

Выбрать начальную точку в пространстве, из которой мы будем двигаться.

- 2. Повторять до тех пор, пока длина градиента не приблизится к 0.
  - 2.1. Вычислить градиент функции потерь  $\nabla L(\omega)$ .

Это будет означать найти направление и вектор скорости роста функции потерь.

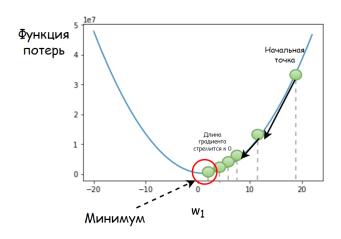
2.2. Обновить параметры модели, сдвинув их в сторону антиградиента.

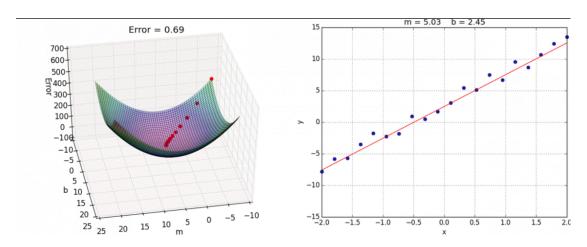
Из текущей точки нужно перейти в новую точку, в сторону убывания высоты ландшафта.

Для обновления координат точки используем формулу:

$$\omega^{(k+1)} = \omega^{(k)} - \eta \nabla L(\omega^{(k)})$$

#### Примеры пошаговой работы градиентного спуска:





#### Сходимость зависит от многих факторов, главные из которых:

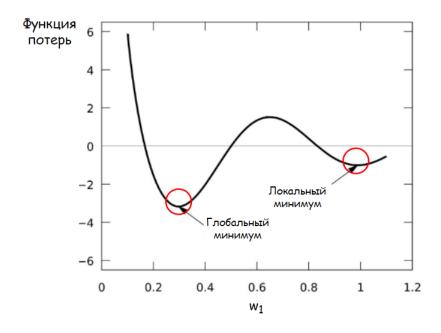
- → сложности зависимости и сложности функции потерь;
- → выбранный темп обучения;
- → выбранная начальная точка (инициализация параметров);
- → масштабирование признаков.

Из-за сложной зависимости и сложности самой функции потерь она может иметь несколько видов минимумов: **локальные** и **глобальные**.

**Локальный минимум** — это минимум на какой-то локальной области.

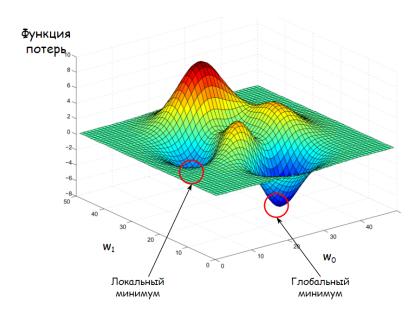
Глобальный минимум — это минимум на всей области определения функции (на всём ландшафте).

# Функция потерь с локальным и глобальным минимумом в случае одного параметра:





# Функция потерь с локальным и глобальным минимумом в случае двух параметров:



Застряв в локальном минимуме, мы не найдём настоящие оптимальные значения параметров.

Чтобы частично решить эту проблему, используется не классический градиентный спуск, а его модификации, такие как **стохастический градиентный спуск**.

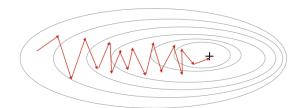
# Стохастический градиентный спуск

Стохастическая модификация предполагает, что один шаг градиентного спуска производится на основе градиента, рассчитанного не по всей выборке, а только по случайно выбранной части.

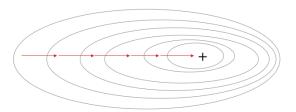
Благодаря этому вектор градиента всё время колеблется, и мы прыгаем из точки в точку, а не идём вдоль ровной линии, как это было в классическом градиентом спуске.

На рисунке ниже приведены графики «блуждания» точки в пространстве функции потерь (вид сверху).

#### Stochastic Gradient Descent

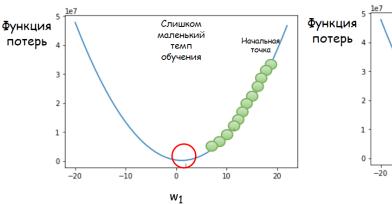


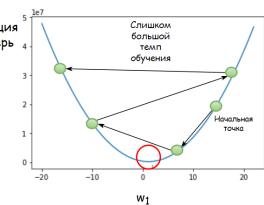
**Gradient Descent** 



Благодаря таким случайным колебаниям у нас повышается шанс «выкарабкаться» из локальных минимумов и дойти до глобального минимума.

Чтобы управлять шагами, как раз и существует параметр **темпа обучения**. Он позволяет управлять размером шага градиентного спуска.





Наиболее распространённые значения  $\eta < 1$ : 0.01, 0.001 и т. д.

В реализации стохастического градиентного спуска в sklearn, с которым мы будем работать, именно такая идея и используется по умолчанию. Параметр прегулируется в процессе обучения— он уменьшается с ростом числа итераций по формуле:

$$\eta_t = \frac{\eta_0}{t^p}$$

где  $\eta_0$  — начальное значение темпа обучения, p — мощность уменьшения (задаётся пользователем).

Еще один важный момент, на который стоит обратить внимание при работе с градиентным спуском — это обязательное **масштабирование факторов** 

# SKILLFACTORY

**Курс** Специализация Data Science **Модуль ML-2** "Обучение с учителем: регрессия"

(приведение факторов к единому масштабу или к единым статистическим характеристикам), если их несколько.

### Численное решение с помощью sklearn

Предварительная стандартизация:

#### from sklearn import preprocessing

#Инициализируем стандартизатор StandardScaler scaler = preprocessing.StandardScaler()
#Производим стандартизацию
X\_scaled = scaler.fit\_transform(X)
#Составляем DataFrame из результата
X\_scaled = pd.DataFrame(X\_scaled, columns=features)

#### Обучение (поиск параметров) — метод fit():

```
#Создаём объект класса линейной регрессии sgd_lr = linear_model.SGDRegressor(random_state=42) #Обучаем модель — ищем параметры по МНК sgd_lr.fit(X_scaled , y)
```

Предсказание — метод predict():

```
y_predict = sgd_lr.predict(X_scaled)
```

Посмотреть коэффициенты — атрибуты coef\_ и intercept\_:

```
sgd_lr .coef_ — коэффициенты при факторах sgd_lr.intercept _ — свободный член
```

#### Основные параметры SGDRegressor:

- → loss функция потерь. По умолчанию используется "squared\_loss" уже привычная нам MSE, но могут использоваться и несколько других.
- → max\_iter максимальное количество итераций, выделенное на сходимость. По умолчанию 1000.

- ightharpoonup learning\_rate режим управления темпом обучения. По умолчанию стоит 'invscaling'. Этот режим уменьшает темп обучения по формуле, которую мы рассматривали ранее:  $\eta_t = \frac{\eta_0}{r^p}$ .
- ightharpoonup eta0 начальное значение темпа обучения  $\eta_0$ . По умолчанию 0.01. Если параметр learning\_rate="constant", то значение этого параметра будет темпом обучения на протяжении всех итераций.
- ightarrow power\_t значение мощности уменьшения p в формуле  $\eta_t = \frac{\eta_0}{t^p}$ . По умолчанию 0.25.

# Сравнение аналитического и численного решений

Показатель сравнения/Наименован ие в sklearn	LinearRegression	SGDRegressor
Метод решения и его сходимость к истинному минимуму	Аналитический — метод наименьших квадратов. Это главное преимущество метода: есть формула => подставили значения => совершили вычисления.  Аналитический метод по определению является сходящимся, так как опирается на условие минимума функции.	Численный — метод стохастического градиентного спуска. Поиск минимума осуществляется итерациями.  Сходимость зависит от множества факторов: темпа обучения, характера функции потерь, критерия остановки.
Функция потерь	Средний квадрат ошибки (MSE).	Любая гладкая функция, главное — чтобы она была дифференцируемой во всех точках. Функции потерь, доступные в sklearn, можно увидеть здесь. Каждая функция потерь предназначена для конкретной задачи.
Сложность алгоритма и время обучения	Кубическая сложность из-за вычисления обратной матрицы.	Линейная сложность, простые математические



**Курс** Специализация Data Science **Модуль ML-2** "Обучение с учителем: регрессия"

	Время обучения кубически возрастает, что критически сказывается на наборах данных с большим количеством признаков.	операции умножения и сложения. Время обучения линейно возрастает с количеством признаков.
Возможность дообучения по новым данным	Отсутствует. Все данные должны быть поданы в модель заранее. Новый вызов fit() приведёт к новой настройке параметров.	Есть возможность дообучить модель на новых данных в режиме реального времени (инкрементальное обучение). Повторный вызов fit() уточняет уже существующие параметры модели.
Чувствительность к разному масштабу факторов	Низкая, стандартизация (нормализация) факторов желательна только на большом количестве признаков в данных.	Обязательная стандартизация (нормализация) факторов при наличии разных масштабов из-за особенностей сходимости.
Подбор внешних параметров	Внешних параметров нет.	Для поисков лучшего решения, возможно, придётся подбирать параметры: начальный темп обучения, режим обучения и т. д. Правильную реализацию подбора параметров мы обсудим в отдельном модуле.

# Дилемма смещения и разброса

Переобучение (overfitting) — это проблема, когда модель может детально подстроиться под зависимость в обучающей выборке, но не уловить общей сути. Такая модель намного лучше работает с обучающими данными, чем с новыми.

**Недообучение (underfitting)** — это проблема, обратная переобучению. Модель из-за своей слабости не уловила никаких закономерностей в данных. В этом случае ошибка будет высокой как для тренировочных данных, так и для данных, не показанных во время обучения.



С теоретической точки зрения недообучение и переобучение характеризуются понятиями **смещения** и **разброса** модели.

**Смещение (bias)** — это математическое ожидание разности между истинным ответом и ответом, выданным моделью. То есть это ожидаемая ошибка модели.

$$bias(\hat{y}) = M[(y - \hat{y})]$$

Чем больше смещение, тем слабее модель. Если модель слабая, то она не в состоянии выучить закономерность. То есть налицо недообучение модели.

**Разброс (variance)** — это вариативность ошибки, то, насколько ошибка будет отличаться, если обучать модель на разных наборах данных. Математически это дисперсия (разброс) ответов модели.

$$variance(\hat{y}) = D[(y - \hat{y})]$$

Чем больше разброс, тем больше будет колебаться ошибка на разных наборах данных. Наличие высокого разброса и есть свидетельство переобучения: модель подстроилась под конкретный набор данных и даёт высокий разброс ответов на разных данных.

Разложение MSE на смещение и разброс:

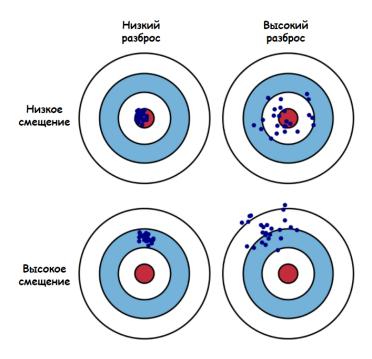
$$M[(y - \hat{y})^2] = bias(\hat{y})^2 + variance(\hat{y}) + \sigma^2$$

где  $\sigma^2$  — это неустранимая ошибка, вызванная случайностью,  $bias(\hat{y})^2$  — смещение модели (в квадрате),  $variance(\hat{y})$  — разброс модели.

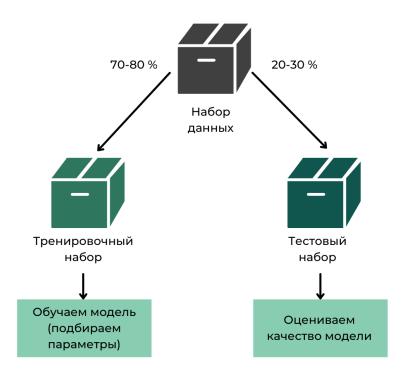
<u>Дилемма смещения-дисперсии</u> является центральной проблемой в обучении с учителем. В идеале мы хотим построить модель, которая точно описывает зависимости в тренировочных данных и хорошо работает на неизвестных данных. К сожалению, обычно это невозможно сделать одновременно.

Усложняя модель, мы пытаемся уменьшить смещение (bias), однако у нас появляется риск получить переобучение, то есть мы повышаем разброс (variance).

С другой стороны, снизить разброс (variance) позволяют более простые модели, не склонные к переобучению, но есть риск, что простая модель не уловить зависимостей и окажется недообученной, то есть мы повышаем смещение (bias).



Типичным решением является разделение данных на две части: **обучающий** и **тестовый наборы**.



#### Разделение выборки в sklearn

В sklearn для разделения выборки на тренировочную и тестовую есть функция train test split() из модуля model\_selection. Данная функция принимает следующие **аргументы**:

- → X и у таблица с примерами и ответами к ним;
- → random\_state зерно генератора случайных чисел;
- → test\_size доля тестовой выборки. Определяет, в каких пропорциях будет разделена выборка. Стандартные значения 70/30, 80/20.

#### from sklearn.model\_selection import train\_test\_split

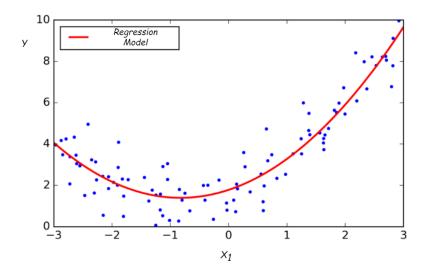
X\_train, X\_test, y\_train, y\_test = train\_test\_split(X, y, test\_size=0.3, random\_state=40)

# Полиномиальная регрессия

**Полиномиальная perpeccuя (Polynomial Regression)** — это более сложная модель, чем линейная регрессия. Вместо уравнения прямой в ней используется уравнение полинома (многочлена).

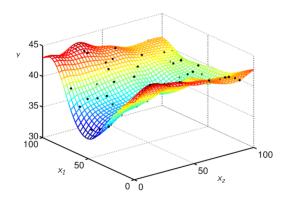
В простом двумерном случае (зависимость целевого признака от одного фактора) полином второй степени будет уравнением параболы:

$$\hat{y} = \omega_0 + \omega_1 x + \omega_2 x^2$$



Когда факторов больше одного, например два, то, помимо возведения фактора в квадрат, появляются ещё и комбинации из  $x_1$  и  $x_2$ :

$$\hat{y} = \omega_0 + \omega_1 x_1 + \omega_2 x_2^2 + \omega_3 x_2 + \omega_4 x_2^2 + \omega_5 x_1 x_2$$



### Полиномиальная регрессия в sklearn

```
#Создаём генератор полиномиальных признаков poly = preprocessing.PolynomialFeatures(degree=2, include_bias=False) poly.fit(X_train)

#Генерируем полиномиальные признаки для тренировочной выборки X_train_poly = poly.transform(X_train)

#Генерируем полиномиальные признаки для тестовой выборки X_test_poly = poly.transform(X_test)

#Создаём объект класса линейной регрессии Ir_model_poly = linear_model.LinearRegression()

#Обучаем модель по МНК Ir_model_poly.fit(X_train_poly, y_train)

#Делаем предсказание для тренировочной выборки у_train_predict_poly = Ir_model_poly.predict(X_train_poly)

#Делаем предсказание для тестовой выборки у_test_predict_poly = Ir_model_poly.predict(X_test_poly)
```

### Регуляризация

**Регуляризация** — это способ уменьшения переобучения моделей машинного обучения.

Мы намеренно пытаемся увеличить смещение модели, чтобы уменьшить разброс.

#### Методы регуляризации:

 L1-регуляризация (Lasso) — добавление к функции потерь суммы модулей коэффициентов, умноженных на коэффициент регуляризации α:

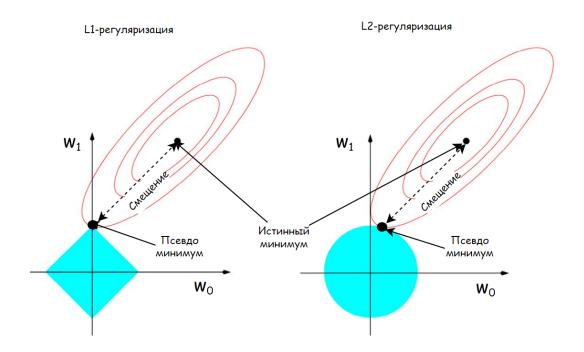
$$L_1(\omega) = MSE + \alpha \sum_{j=1}^{m} |\omega_j|$$

 L2-регуляризация (Ridge), или регуляризация Тихонова — добавление к функции потерь суммы квадратов коэффициентов, умноженных на коэффициент регуляризации α:

$$L_2(\omega) = MSE + \alpha \sum_{j=1}^{m} (\omega_j)^2 \rightarrow min_{\omega}$$

**Курс** Специализация Data Science **Модуль ML-2** "Обучение с учителем: регрессия"

**Коэффициенты**  $\alpha$  **(альфа)** — это коэффициенты регуляризации. Они отвечает за то, насколько сильное смещение мы будем вносить в модель: чем оно больше, тем выше будет штраф за переобучение.



В результате добавления смещения мы находим не настоящий минимум, а псевдоминимум, который лежит на пересечении с ромбом при L1 (с окружностью — при L2). Такая оптимизация называется условной, или оптимизацией с ограничениями.

#### Регуляризация в sklearn

#### L1-регуляризация:

```
#Создаём объект класса линейной регрессии с L1-регуляризацией lasso_lr_poly = linear_model.Lasso(alpha=0.1)
#Обучаем модель
lasso_lr_poly.fit(X_train_scaled_poly, y_train)
#Делаем предсказание для тренировочной выборки
y_train_predict_poly = lasso_lr_poly.predict(X_train_scaled_poly)
#Делаем предсказание для тестовой выборки
y_test_predict_poly = lasso_lr_poly.predict(X_test_scaled_poly)
```

#### L2-регуляризация:

```
#Создаём объект класса линейной регрессии с L2-регуляризацией ridge_lr_poly = linear_model.Ridge(alpha=10)
#Обучаем модель
ridge_lr_poly.fit(X_train_scaled_poly, y_train)
#Делаем предсказание для тренировочной выборки
y_train_predict_poly = ridge_lr_poly.predict(X_train_scaled_poly)
#Делаем предсказание для тестовой выборки
y_test_predict_poly = ridge_lr_poly.predict(X_test_scaled_poly)
```

Помимо основных методов регуляризации L1 и L2, существует комплексный метод.

Эластичная сетка (ElasticNet) — это комбинация из двух методов регуляризации.

Функция потерь в таком методе выглядит следующим образом:

$$L_2(\omega) = MSE + \alpha \cdot \lambda \sum_{i=1}^{m} |\omega_i| +$$

+ 
$$\alpha \cdot (1 - \lambda) \sum_{i=1}^{m} (\omega_i)^2 \rightarrow min_{\omega}$$

Параметры  $\alpha$  и  $\lambda$  позволяют регулировать вклад L1- и L2-регуляризации. На практике данный метод используется гораздо реже, так как необходимо подбирать оптимальную комбинацию из двух параметров.