Лабораторная работа 2. Нелинейная регрессия

1. Цели

Приобрести навыки построения моделей нелинейной регрессии

2. Задачи

1. Построить модель для нелинейной регрессии
2. Оценить точность модели и получить её уравнение

3. Теоретические сведения

Методические указания для решения поставленного задания

3.1. Регрессия

Регрессия – предсказание поведения одной величины в зависимости от поведения другой. Силу зависимости одной величины от другой называют корреляцией. Предсказание строится на основе уравнения параметрами которого являются данные. Например, с помощью такого уравнения можно предсказать наиболее вероятный вес человека, зная его рост и возраст. В данной работе модель будет работать с синтетическими данными которые не имеют интерпретации

Из-за ошибок при сборе данных в набор могут попасть явно выделяющиеся значения – выбросы. Общепринятого метода автоматического удаления выбросов не существует – необходимо проверять каждое значение отдельно. Выбросы могут не только уменьшить значение корреляции, но и испортить уравнение регрессии.

Для того, чтобы рассчитать уравнение линейной регрессии нужно провести следующие расчеты, где n – величина выборки, x – на основе чего будет делаться предсказание, y – эталонное значение, которые нужно предсказать. Уравнение регрессии имеет вид $y = a + bx$

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n}$$

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n}$$

$$\sigma_x^2 = \overline{x^2} - \bar{x}^2$$

$$\sigma_y^2 = \overline{y^2} - \bar{y}^2$$

$$\overline{xy} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i}{n}$$

$$b = \frac{\overline{xy} - \bar{x} \cdot \bar{y}}{\sigma_x^2}$$

$$a = \bar{y} - b\bar{x}$$

Для составления уравнения нелинейной регрессии нужно преобразовать x и y – само уравнение не меняется.

Тип регрессии	x	y
Линейная	x	y
Логарифмическая	$\ln x$	y
Полиномиальная, второй степени	x, x^2	y
Степенная	$\ln x$	$\ln y$
Экспоненциальная	x	$\ln y$
Гиперболическая	$\frac{1}{x}$	y

3.2. Построение модели с помощью `scikit-learn`

`scikit-learn` – популярная библиотека для машинного обучения, включена в дистрибутив `Anaconda` по умолчанию

Пример построения модели будет приведён ниже, демонстрация будет проводиться на первых `10 000` данных из набора данных non-linear regression (рус. Нелинейная регрессия)

3.2.1. Подключение библиотек

Подключение библиотек – `matplotlib` для графиков, `numpy` для работы с тензорами, `seaborn` – для красивых графиков, `sklearn` – другое название `scikit-learn`, библиотека не импортирует автоматически все свои подмодули, поэтому используются конструкции `from sklearn import …`

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
import pandas as pd
import seaborn as sns

from sklearn.linear_model import LinearRegression
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
from sklearn.pipeline import make_pipeline
```

3.2.2. Работа с набором данных

Подключение набора данных, удаление всех строк за исключением первых десяти тысяч

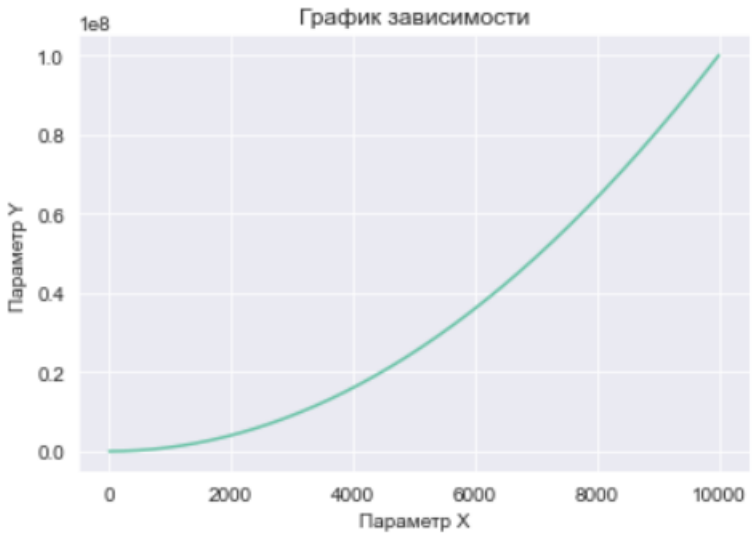
```
PATH = "regression.csv"
DATASET_SIZE = 10000

dataset = pd.read_csv(PATH)
dataset = dataset.head(DATASET_SIZE)
```

Данные из набора хранятся в строковом виде, что мешает проводить расчеты. Переводу их в целочисленный тип мешает символ `\xa0` используемый вместо пробела. Код ниже решает эти проблемы

```
for column in dataset.columns:
    dataset[column] = dataset[column].str.split().str.join("")
    dataset[column] = pd.to_numeric(dataset[column])
```

Код для построения графика по имеющимся данным

```
sns.set_style('darkgrid')
sns.set_palette('Set2')

sns.lineplot(
    x=dataset["x"],
    y=dataset["y"],
)

plt.title('График зависимости')
plt.xlabel('Параметр X')
plt.ylabel('Параметр Y')
plt.show()
```



3.2.3. Построение модели

Модель, предоставляемая библиотекой `sklearn` принимает на вход только тензоры размерностью `(длина набора данных, 1)`, как в качестве входных данных, так и выходных. Код ниже меняет размерность исходных данных

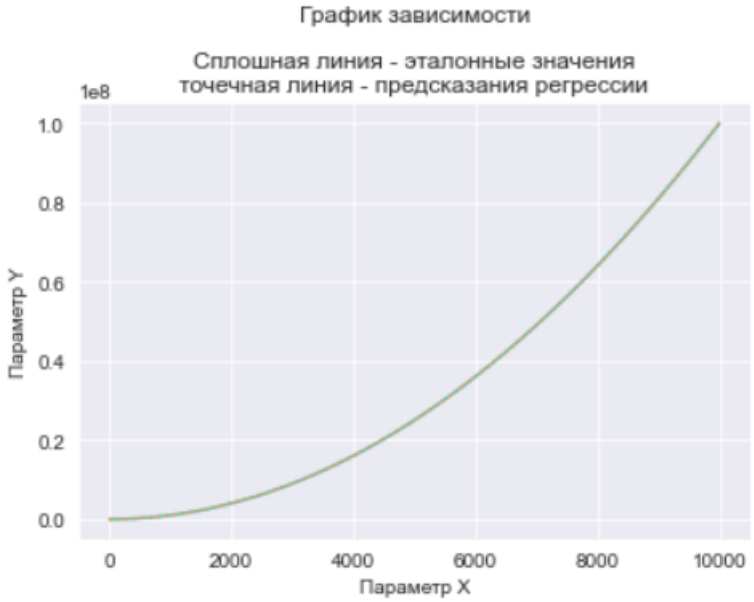
```
x = np.array(dataset["x"]).reshape(-1, 1)
y = np.array(dataset["y"]).reshape(-1, 1)
```

Создание модели, где переменная `DEGREES` обозначает степень полинома. Тут же рассчитывается среднеквадратическая ошибка предсказания модели.

```
DEGREES = 2

regression = make_pipeline(PolynomialFeatures(DEGREES), LinearRegression())
regression.fit(x, y)
predictions = regression.predict(x)
mean_squared_error = np.mean((predictions - np.array(y)) ** 2)
print(f'Среднеквадратическая ошибка = {mean_squared_error}')
```

Среднеквадратическая ошибка составила – `4,323661516743e-15`. Далее приведен код для составления графика, сравнивающего эталонные значения и предсказания модели

```
sns.lineplot(
    x=dataset["x"],
    y=dataset["y"],
    linestyle="solid"
)

sns.lineplot(
    x=dataset["x"],
    y=predictions.reshape(-1),
    linestyle="dotted"
)

plt.title(
    'График зависимости\n\n'
    'Сплошная линия - эталонные значения\n'
    'точечная линия - предсказания регрессии'
)
plt.xlabel('Параметр X')
plt.ylabel('Параметр Y')
plt.show()
```



Графики полностью совпали, что было ожидаемо из полученной среднеквадратической ошибки.

Код для извлечения из модели коэффициентов уравнения

```
x_parameters = np.append(
    regression['linearregression'].intercept_[0],
    regression['linearregression'].coef_[0][1:]
)

x_parameters
```

	0
0	32.0
1	12.0
2	1.0

Из чего следует уравнение

$$y = 32 + 12x + x^2$$

4. Задание

Выбрать с сайта kaggle.com набор данных в формате .csv, пригодный для построения регрессии, загрузить и подготовить его к дальнейшей обработке. Наборы данных не должны повторяться внутри группы. Задание индивидуальное. Требования:

1. Построить модель для нелинейной регрессии
2. Оценить точность модели
3. Сравнить предсказания модели с эталонами, с помощью графиков
4. Построить уравнение регрессии
5. Указать какие знания можно получить из набора
6. Сохранить IPython Notebook

4.1. Продвинутое задание

Построить вторую модель, без использования средств scikit-learn