Градиентный спуск

В этом домашнем задании вы напишете градиентный спуск для линейной регрессии, а так же посмотрите, как он ведёт себя с разными параметрами и разными функциями потерь.

Старайтесь сделать код как можно более оптимальным. В частности, будет штрафоваться использование циклов в тех случаях, когда операцию можно совершить при помощи инструментов библиотек.

In [1]:
```
import abc

import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
```

Часть 1. Градиентный спуск (5 баллов)

Для обучения линейной регрессии необходим функционал ошибки, определим интерфейс для последующих реализаций.

In [2]:
```
class BaseLoss(abc.ABC):
    """Base class for losses"""

    @abc.abstractmethod
    def calc_loss(self, X: np.ndarray, y: np.ndarray, w: np.ndarray) -> f
        """Calculate loss value based on inputs and weights

        Args:
            X: array with dataset objects, (n_samples, n_features)
            y: array with ground truth values, (n_samples,)
            w: linear regression weights, (n_features,)

        Returns:
            number, loss value
        """
        raise NotImplementedError

    @abc.abstractmethod
    def calc_grad(self, X: np.ndarray, y: np.ndarray, w: np.ndarray) -> n
        """Calculate gradient vector based on inputs and weights

        Args:
            X: array with dataset objects, (n_samples, n_features)
            y: array with ground truth values, (n_samples,)
            w: linear regression weights, (n_features,)

        Returns:
            gradients for weights, (n_features,)
        """
        raise NotImplementedError
```

Вспомним самый простой функционал ошибки, который мы применяем в задаче регрессии — Mean Squared Error:

$$Q(w, X, y) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\langle x_i, w \rangle - y_i)^2$$

где x_i — это i-ый объект датасета, y_i — правильный ответ для i-го объекта, а w — веса нашей линейной модели.

Как мы помним, для линейной модели, его можно записать в матричном виде вот так:

$$Q(w, X, y) = \frac{1}{\ell} ||Xw - y||^2$$

где X — это матрица объекты-признаки, а y — вектор правильных ответов

Для того чтобы воспользоваться методом градиентного спуска, нам нужно посчитать градиент нашего функционала. Для MSE он будет выглядеть так:

$$\nabla_w Q(w, X, y) = \frac{2}{\ell} X^T (Xw - y)$$

In [3]:
```
class MSELoss(BaseLoss):
    def calc_loss(self, X: np.ndarray, y: np.ndarray, w: np.ndarray) -> f
        return np.square(X @ w - y).mean()

    def calc_grad(self, X: np.ndarray, y: np.ndarray, w: np.ndarray) -> n
        return (2 / X.shape[0]) * X.T @ (X @ w - y)
```

In [4]:
```
# Проведем небольшую проверку реализации

# Создадим объект лосса
loss = MSELoss()

# Создадим какой-то датасет
X = np.arange(200).reshape(20, 10)
y = np.arange(20)

# Создадим какой-то вектор весов
w = np.arange(10)

# Выведем значение лосса и градиента на этом датасете с этим вектором вес
print(loss.calc_loss(X, y, w))
print(loss.calc_grad(X, y, w))

# Проверка, что методы реализованы правильно
assert loss.calc_loss(X, y, w) == 27410283.5, "Метод calc_loss реализован
assert np.allclose(
    loss.calc_grad(X, y, w),
    np.array(
        [
            1163180.0,
            1172281.0,
            1181382.0,
```

```
                1190483.0,
                1199584.0,
                1208685.0,
                1217786.0,
                1226887.0,
                1235988.0,
                1245089.0,
            ]
        ),
), "Метод calc_grad реализован неверно"
print("Всё верно!")
```

```
27410283.5
[1163180. 1172281. 1181382. 1190483. 1199584. 1208685. 1217786. 1226887.
 1235988. 1245089.]
Всё верно!
```

Теперь когда у нас есть всё для вычисления градиента, давайте напишем наш градиентный спуск. Напомним, что формула для одной итерации градиентного спуска выглядит следующим образом:

$$w^t = w^{t-1} - \eta \nabla_w Q(w^{t-1}, X, y)$$

Где w^t — значение вектора весов на t-ой итерации, а η — параметр learning rate, отвечающий за размер шага.

In [5]:
```
def gradient_descent(
    w_init: np.ndarray,
    X: np.ndarray,
    y: np.ndarray,
    loss: BaseLoss,
    lr: float,
    n_iterations: int = 100000,
) -> np.ndarray:
    """Weights optimization with gradient descent

    Args:
        w_init: initial weights, (n_features,)
        X: array with dataset objects, (n_samples, n_features)
        y: array with ground truth values, (n_samples,)
        loss: BaseLoss instance to calculate loss and gradients
        lr: learning rate, float
        n_iterations: number of iterations, int

    Returns:
        History of weights on each step, (n_iterations, n_features)
    """
    w = w_init.copy()
    history = np.zeros((n_iterations + 1, w_init.shape[0]))
    history[0] = w

    for i in range(1, n_iterations + 1):
        w -= lr * loss.calc_grad(X, y, w)
        history[i] = w

    return history
```

Теперь создадим синтетический датасет и функцию, которая будет рисовать траекторию градиентного спуска по истории:

In [6]:
```
# Создаём датасет из двух переменных и реального вектора зависимости w_tr

np.random.seed(1337)

n_features = 2
n_objects = 300
batch_size = 10
num_steps = 43

w_true = np.random.normal(size=(n_features,))

X = np.random.uniform(-5, 5, (n_objects, n_features))
X *= (np.arange(n_features) * 2 + 1)[np.newaxis, :]
y = X.dot(w_true) + np.random.normal(0, 1, (n_objects))
w_init = np.random.uniform(-2, 2, (n_features))

print(X.shape)
print(y.shape)
```

```
(300, 2)
(300,)
```

In [7]:
```
loss = MSELoss()
w_list = gradient_descent(w_init, X, y, loss, 0.01, 100)
print(loss.calc_loss(X, y, w_list[0]))
print(loss.calc_loss(X, y, w_list[-1]))
```

```
425.58917680450253
0.8670644395649493
```

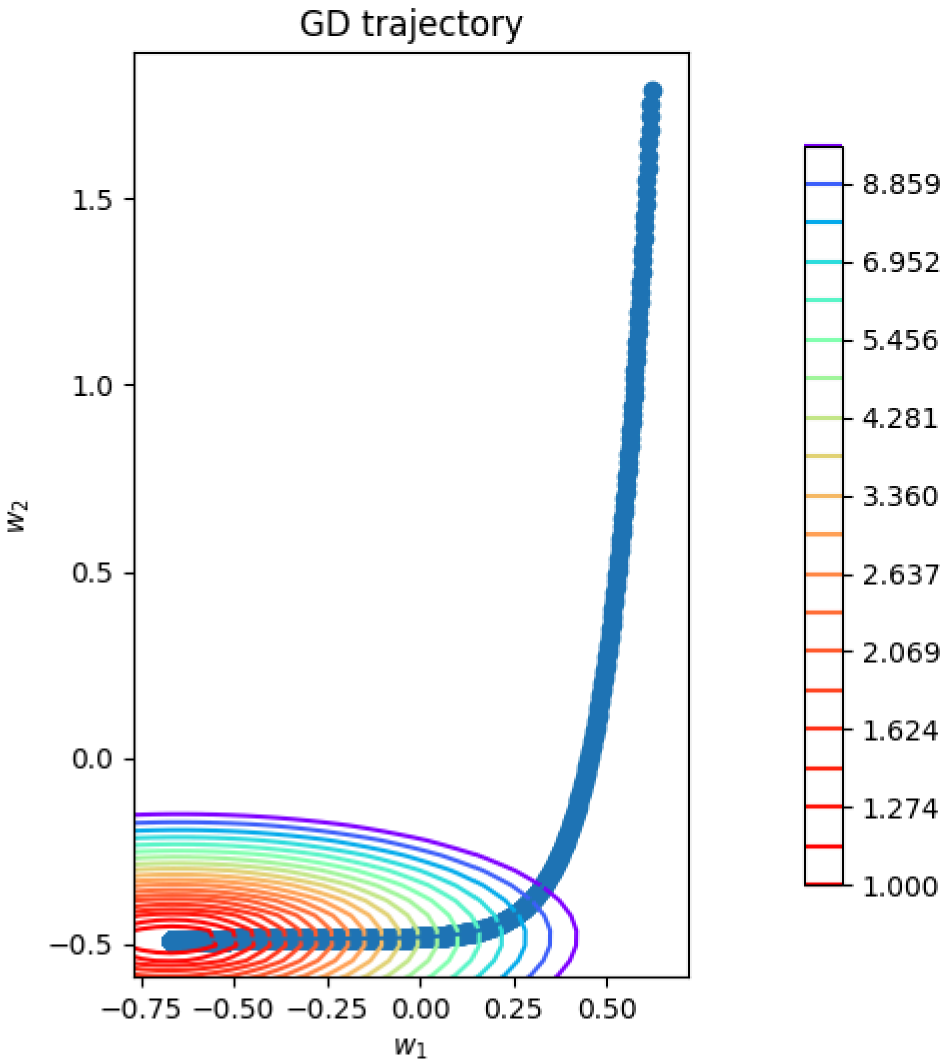
In [8]:
```
def plot_gd(w_list: np.ndarray, X: np.ndarray, y: np.ndarray, loss: BaseL
    """Plot gradient descent trajectory

    Args:
        w_list: weights history, (n_iterations, n_features)
        X: array with dataset objects, (n_samples, n_features)
        y: array with ground truth values, (n_samples,)
        loss: BaseLoss instance to calculate loss and gradients
    """
    w_list = np.array(w_list)
    meshgrid_space = np.linspace(-2, 2, 100)
    A, B = np.meshgrid(meshgrid_space, meshgrid_space)

    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] = loss.calc_loss(X, y, w_tmp)

    plt.figure(figsize=(15, 6))
    plt.title("GD trajectory")
    plt.xlabel(r"$w_1$")
    plt.ylabel(r"$w_2$")
    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")
```

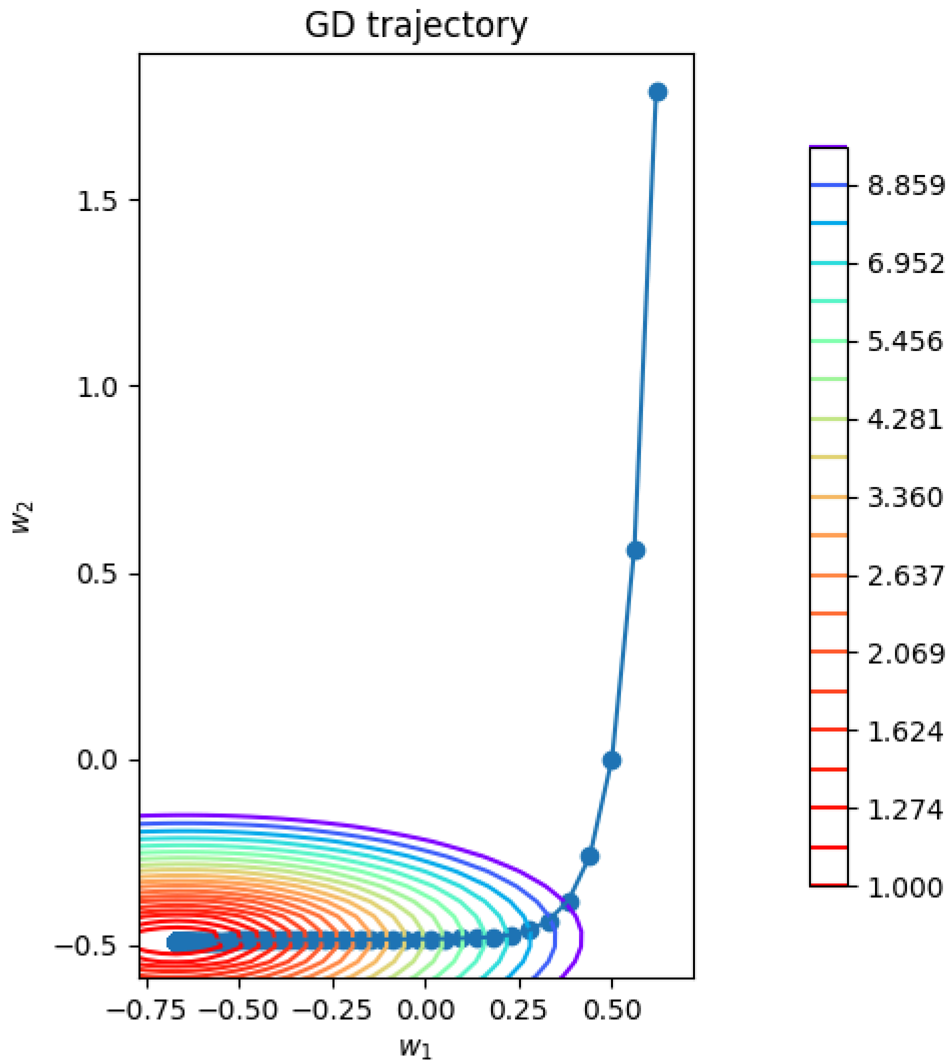
```
    # visualize the level set
    CS = plt.contour(A, B, levels, levels=np.logspace(0, 1, num=20), cmap
    CB = plt.colorbar(CS, shrink=0.8, extend="both")

    # visualize trajectory
    plt.scatter(w_list[:, 0], w_list[:, 1])
    plt.plot(w_list[:, 0], w_list[:, 1])

    plt.show()
```

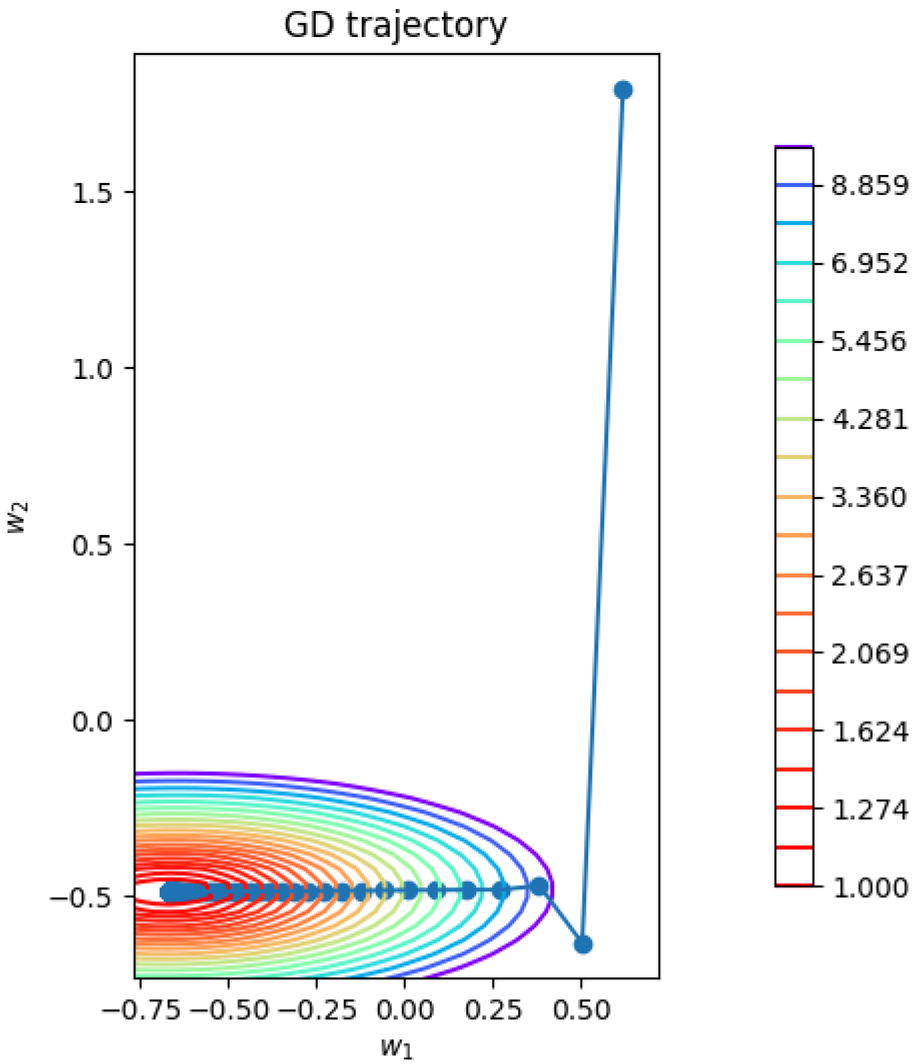
При помощи функций `gradient_descent` и `plot_gd` нарисуйте траекторию градиентного спуска для разных значений длины шага (параметра `lr`). Используйте не менее четырёх разных значений для `lr`. Хорошие значения для `lr` могут лежать в промежутке от 0.0001 до 0.1

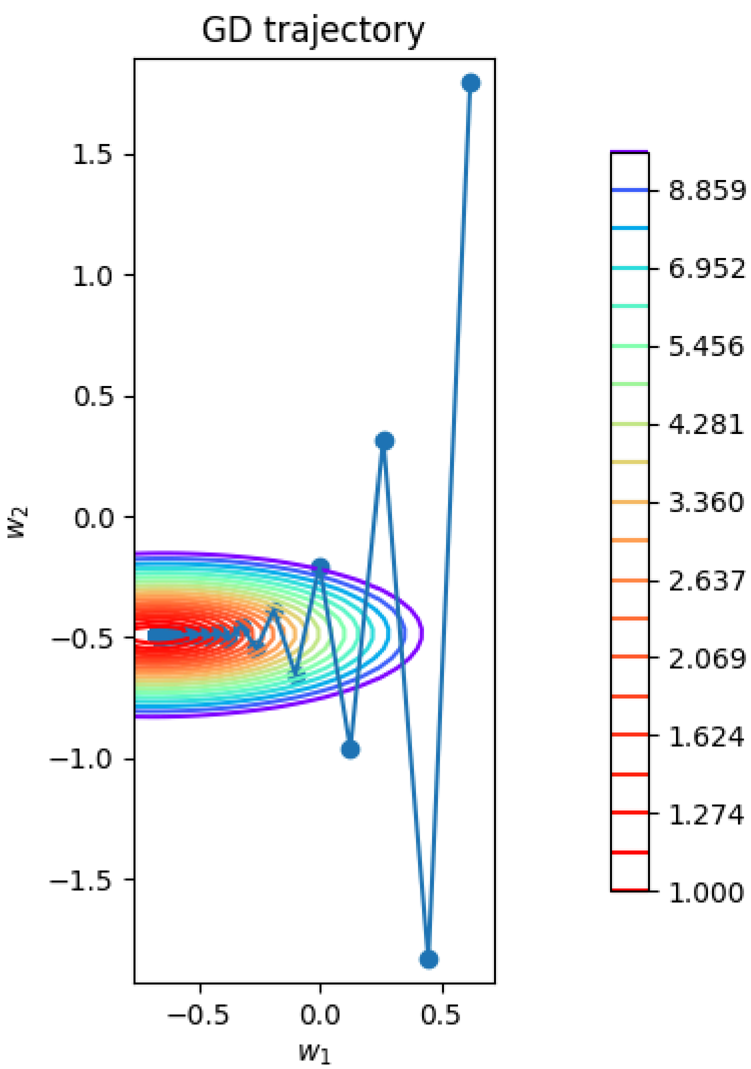
Сделайте и опишите свои выводы о том, как параметр `lr` влияет на поведение градиентного спуска

In [9]:
```
loss = MSELoss()
lrs = np.linspace(0.0001, 0.01, 4)

for lr in lrs:
  history_w = gradient_descent(w_init, X, y, loss, lr)
  plot_gd(history_w, X, y, loss)
```




GD trajectory
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
w_2
−0.75 −0.50 −0.25 0.00 0.25 0.50
w_1
8.859
6.952
5.456
4.281
3.360
2.637
2.069
1.624
1.274
1.000


GD trajectory
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
w_2
−0.75 −0.50 −0.25 0.00 0.25 0.50
w_1
8.859
6.952
5.456
4.281
3.360
2.637
2.069
1.624
1.274
1.000



Чем меньше lr, тем медленнее будеть происходить обучение, риск не найти глобальный минимум . Чем больше - быстрее обучение, но больший шанс "перепрыгнуть" минимум. При правильном lr - точно есть сходимость.

Теперь реализуем стохастический градиентный спуск. Функция должна принимать все те же параметры, что и функция `gradient_descent`, но ещё параметр `batch_size`, отвечающий за размер батча.

Функция должна как и раньше реализовывать цикл, в котором происходит шаг градиентного спуска, но на каждом шаге считать градиент не по всей выборке `X`, а только по случайно выбранной части.

Подсказка: для выбора случайной части можно использовать `np.random.choice` с правильным параметром `size`, чтобы выбрать случайные индексы, а потом проиндексировать получившимся массивом массив `X`:

```
batch_indices = np.random.choice(X.shape[0],
size=batch_size, replace=False)
batch = X[batch_indices]
```

In [10]:
```
def stochastic_gradient_descent(
    w_init: np.ndarray,
    X: np.ndarray,
    y: np.ndarray,
    loss: BaseLoss,
    lr: float,
    batch_size: int,
    n_iterations: int = 1000,
) -> np.ndarray:
    """Weights optimization with stochastic gradient descent

    Args:
        w_init: initial weights, (n_features,)
        X: array with dataset objects, (n_samples, n_features)
        y: array with ground truth values, (n_samples,)
        loss: BaseLoss instance to calculate loss and gradients
        lr: learning rate, float
        batch_size: number of samples in each batch, int
        n_iterations: number of iterations, int

    Returns:
        History of weights on each step, (n_iterations, n_features)
    """

    w = w_init.copy()
    history = np.zeros((n_iterations + 1, w_init.shape[0]))
    history[0] = w

    for i in range(1, n_iterations + 1):
        batch_indices = np.random.choice(X.shape[0], size=batch_size, rep
        X_batch = X[batch_indices]
        y_batch = y[batch_indices]

        w -= lr * loss.calc_grad(X_batch, y_batch, w)
        history[i] = w

    return history
```

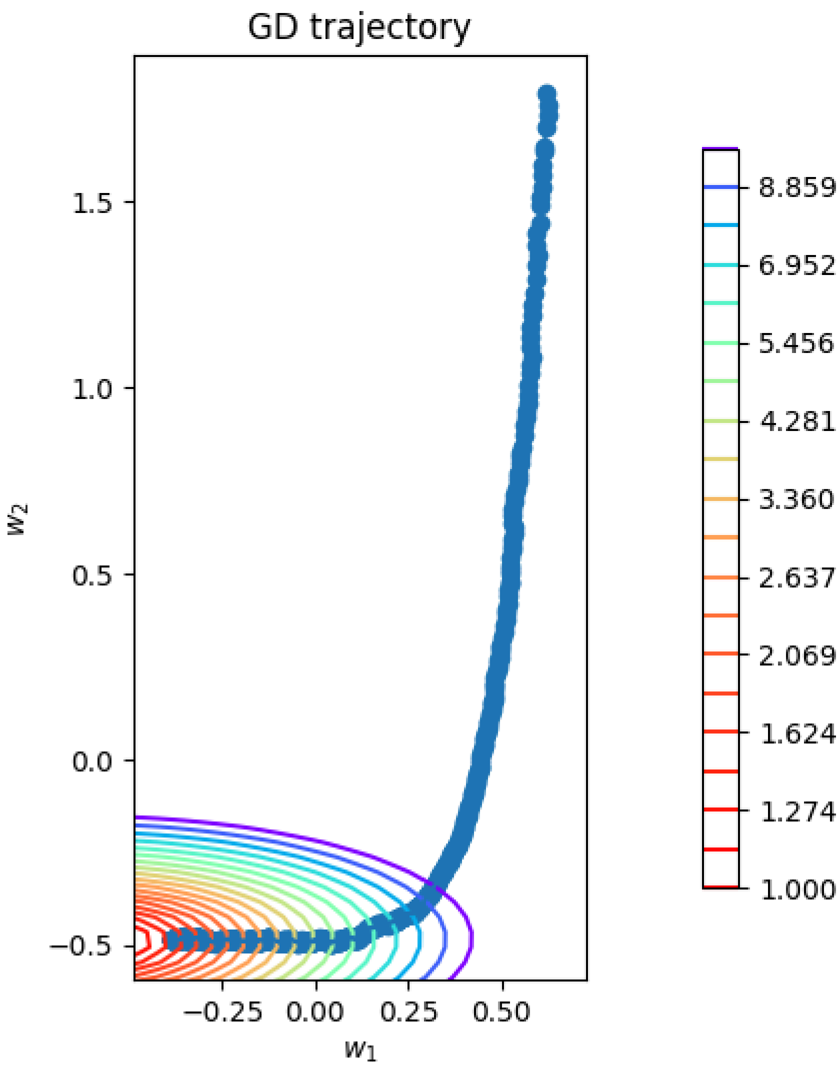
При помощи функций `stochastic_gradient_descent` и `plot_gd` нарисуйте траекторию градиентного спуска для разных значений длины шага (параметра `lr`) и размера подвыборки (параметра `batch_size`). Используйте не менее четырёх разных значений для `lr` и `batch_size`.

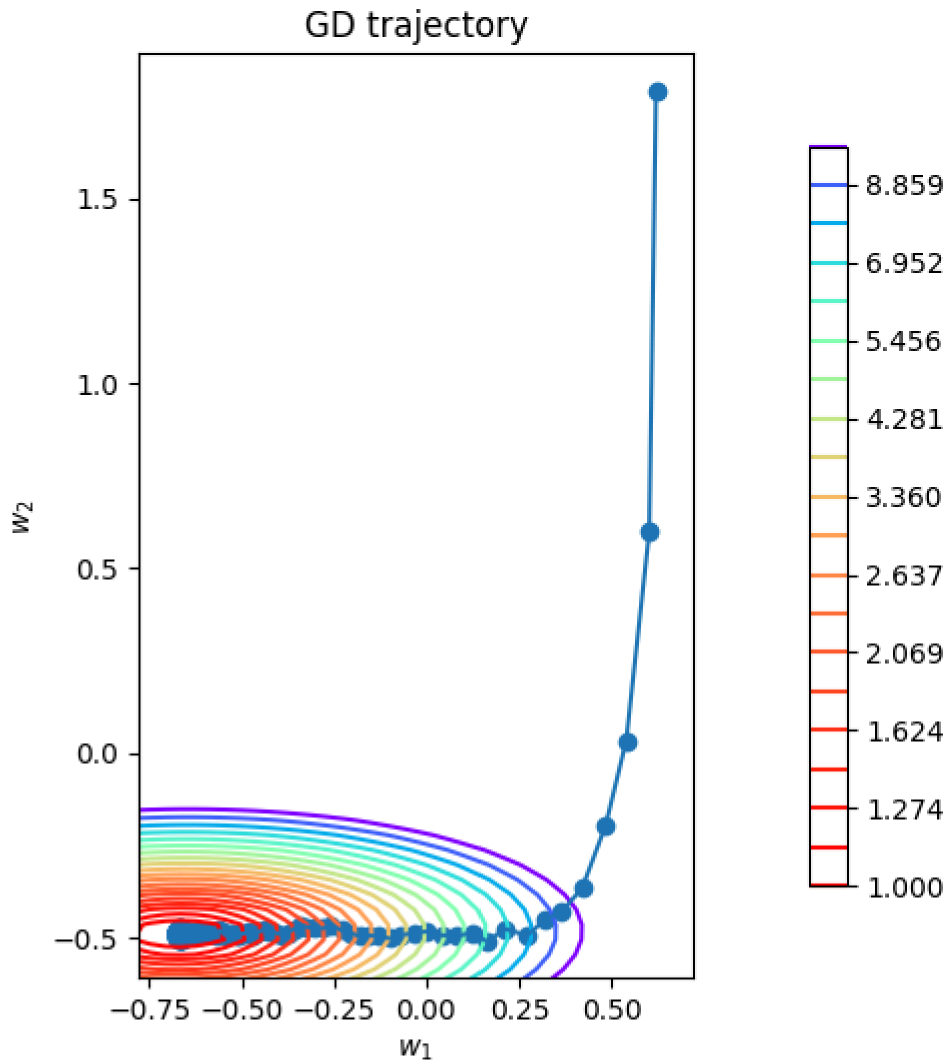
Сделайте и опишите свои выводы о том, как параметры `lr` и `batch_size` влияют на поведение стохастического градиентного спуска. Как отличается поведение стохастического градиентного спуска от обычного?

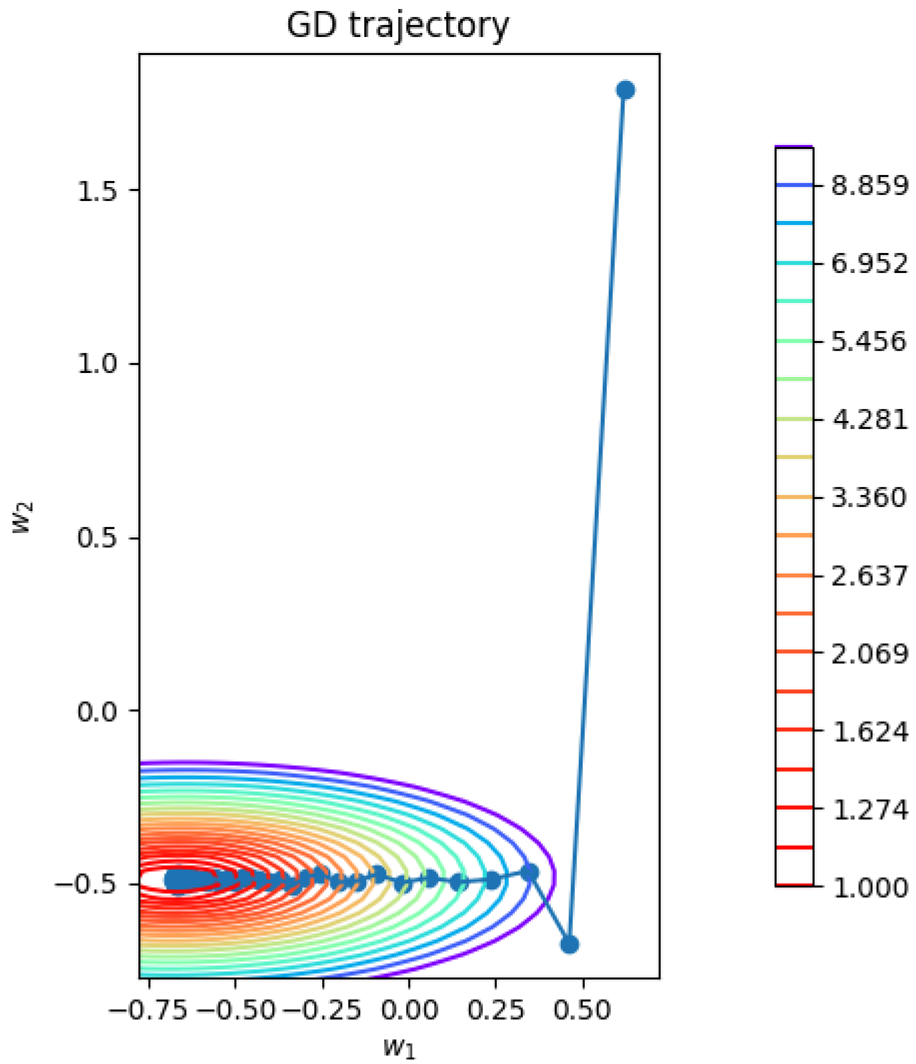
Обратите внимание, что в нашем датасете всего 300 объектов, так что `batch_size` больше этого числа не будет иметь смысла.

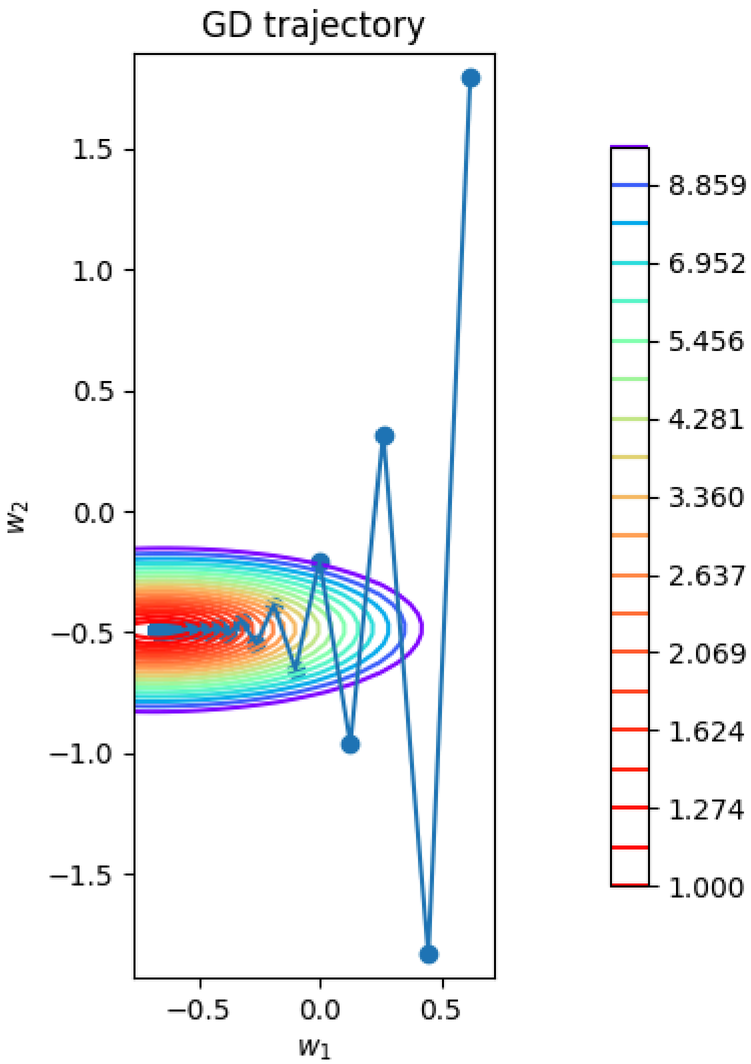
In [11]:
```
loss = MSELoss()
lrs = np.linspace(0.0001, 0.01, 4)
batch_sizes = [10, 100, 200, 300]

for lr, batch_size in zip(lrs, batch_sizes):
```

```
history_w = stochastic_gradient_descent(w_init, X, y, loss, lr, batch_s
plot_gd(history_w, X, y, loss)
```




GD trajectory
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
w_2
−0.75 −0.50 −0.25 0.00 0.25 0.50
w_1
8.859
6.952
5.456
4.281
3.360
2.637
2.069
1.624
1.274
1.000


GD trajectory
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
w_2
−0.75
−0.50
−0.25
0.00
0.25
0.50
w_1
8.859
6.952
5.456
4.281
3.360
2.637
2.069
1.624
1.274
1.000



lr так же определяет длину шага. batch_size влияет на точность оценки градиента: при маленьком увеличивается шум - точность меньше.

Вы могли заметить, что поведение градиентного спуска, особенно стохастической версии, очень сильно зависит от размера шага.

Как правило, в начале спуска мы хотим делать большие шаги, чтобы поскорее подойти поближе к минимуму, а позже мы уже хотим делать шаги маленькие, чтобы более точнее этого минимума достичь и не "перепрыгнуть" его.

Чтобы достичь такого поведения мы можем постепенно уменьшать длину шага с увеличением номера итерации. Сделать это можно, например, вычисляя на каждой итерации длину шага по следующей формуле:

$$\eta_t = \lambda \left(\frac{s_0}{s_0 + t} \right)^p$$

где η_t — длина шага на итерации t, λ — начальная длина шага (параметр `lr` у нас), s_0 и p — настраиваемые параметры.

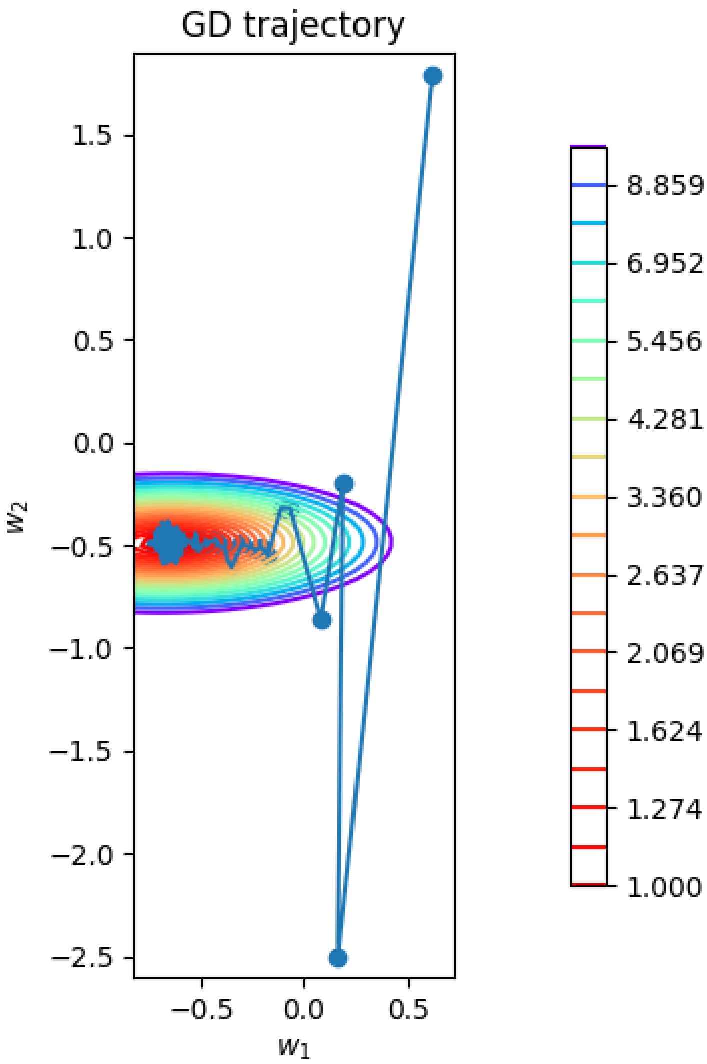
Реализуйте SGD на этот раз с затухающим шагом по формуле выше. Параметр s_0 возьмите равным 1. Параметр p возьмите из нового аргумента функции `p`.

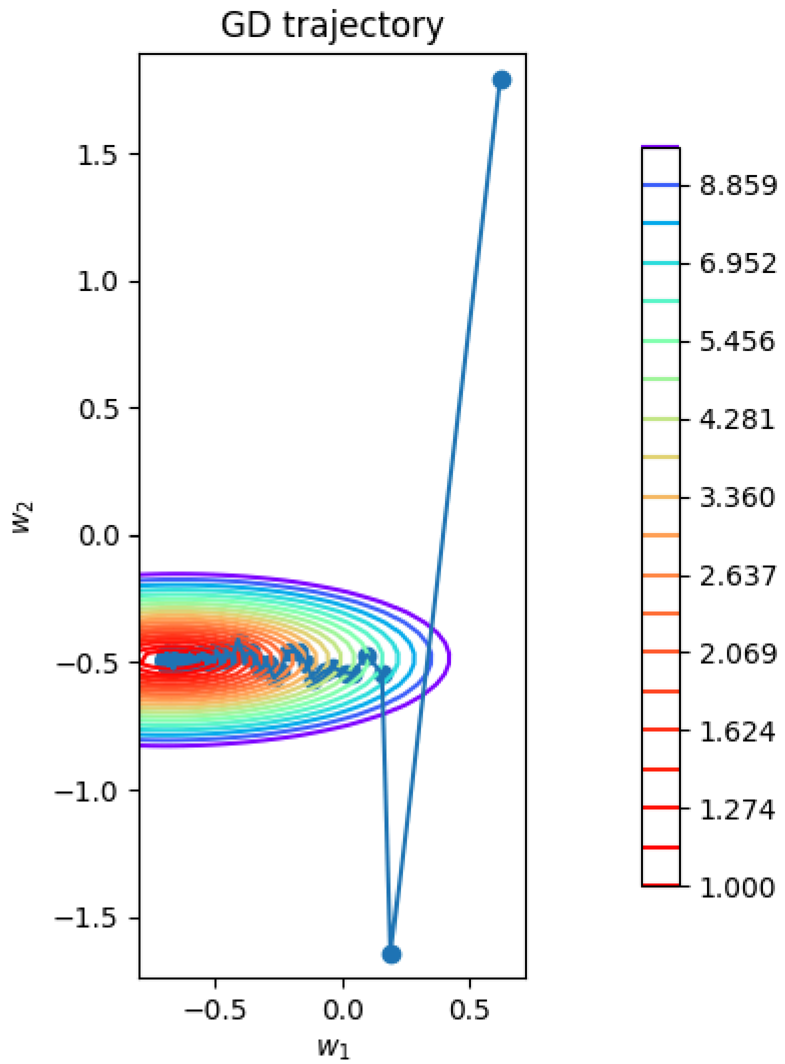
In [12]:
```
def stochastic_gradient_descent_with_decay(
    w_init: np.ndarray,
    X: np.ndarray,
    y: np.ndarray,
    loss: BaseLoss,
    lr: float,
    batch_size: int,
    p: float,
    n_iterations: int = 1000,
) -> np.ndarray:
    """Weights optimization with SGD and learning rate decay

    Args:
        w_init: initial weights, (n_features,)
        X: array with dataset objects, (n_samples, n_features)
        y: array with ground truth values, (n_samples,)
        loss: BaseLoss instance to calculate loss and gradients
        lr: learning rate, float
        batch_size: number of samples in each batch, int
        p: learning rate decay factor, float
        n_iterations: number of iterations, int

    Returns:
        History of weights on each step, (n_iterations, n_features)
    """

    w = w_init.copy()
    history = np.zeros((n_iterations + 1, w_init.shape[0]))
    history[0] = w

    for i in range(1, n_iterations + 1):
        batch_indices = np.random.choice(X.shape[0], size=batch_size, rep
        X_batch = X[batch_indices]
        y_batch = y[batch_indices]

        lr_i = lr * ((1 / (1 + i)) ** p)
        w -= lr_i * loss.calc_grad(X_batch, y_batch, w)
        history[i] = w

    return history
```

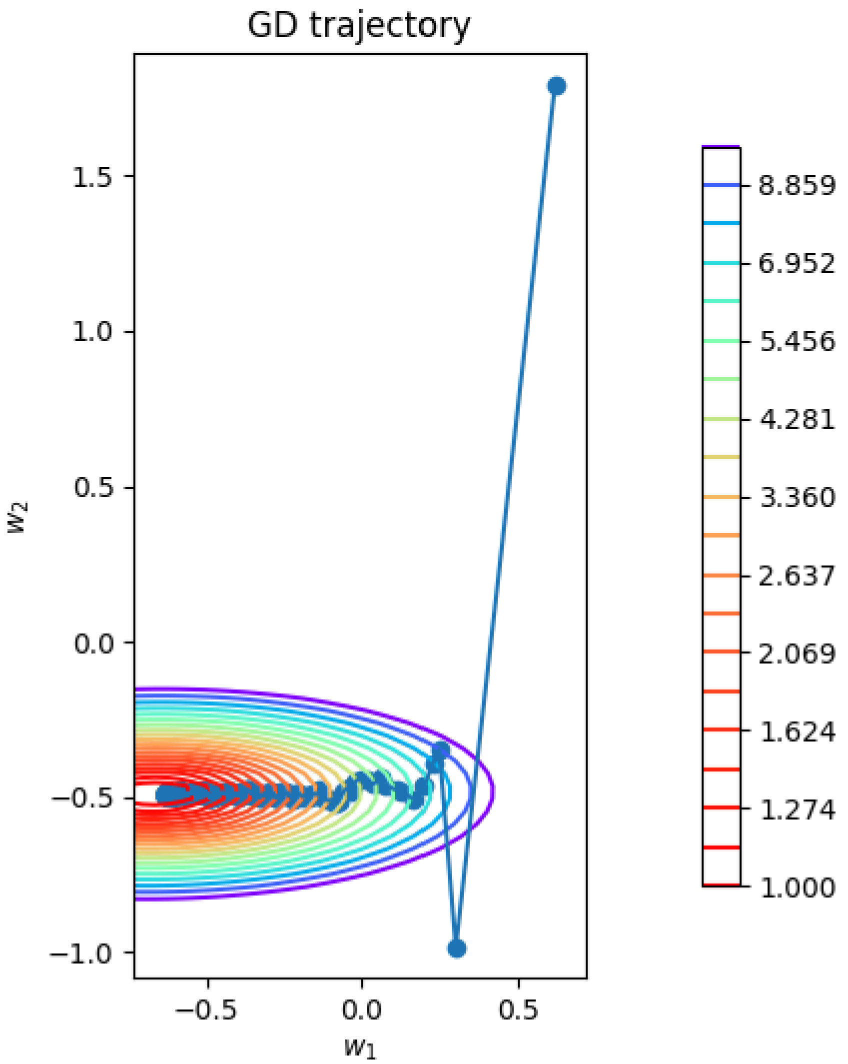
При помощи новой функции `stochastic_gradient_descent_with_decay` и функции `plot_gd` нарисуйте траекторию градиентного спуска для разных значений параметра `p`. Используйте не менее четырёх разных значений для `p`. Хорошими могут быть значения, лежащие в промежутке от 0.1 до 1. Параметр `lr` возьмите равным 0.01, а параметр `batch_size` равным 10.

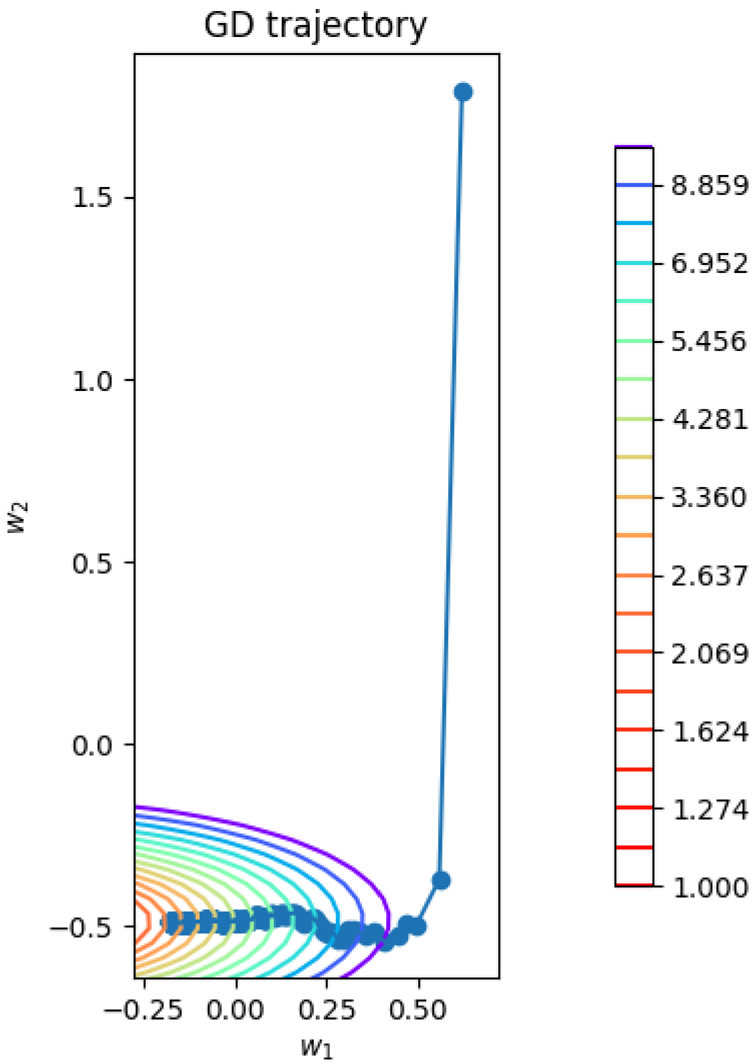
Сделайте и опишите свои выводы о том, как параметр `p` влияет на поведение стохастического градиентного спуска

In [13]:
```
lr = 0.01
batch_size = 10
list_p = np.linspace(0.1, 1, 4)

for p in list_p:
  history_w = stochastic_gradient_descent_with_decay(w_init, X, y, loss,
  plot_gd(history_w, X, y, loss)
```


GD trajectory
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
−1.5
−2.0
−2.5
w_2
−0.5
0.0
0.5
w_1
8.859
6.952
5.456
4.281
3.360
2.637
2.069
1.624
1.274
1.000


GD trajectory
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
−1.5
w_2
−0.5
0.0
0.5
w_1
8.859
6.952
5.456
4.281
3.360
2.637
2.069
1.624
1.274
1.000


GD trajectory
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
w_2
−0.5
0.0
0.5
w_1
8.859
6.952
5.456
4.281
3.360
2.637
2.069
1.624
1.274
1.000



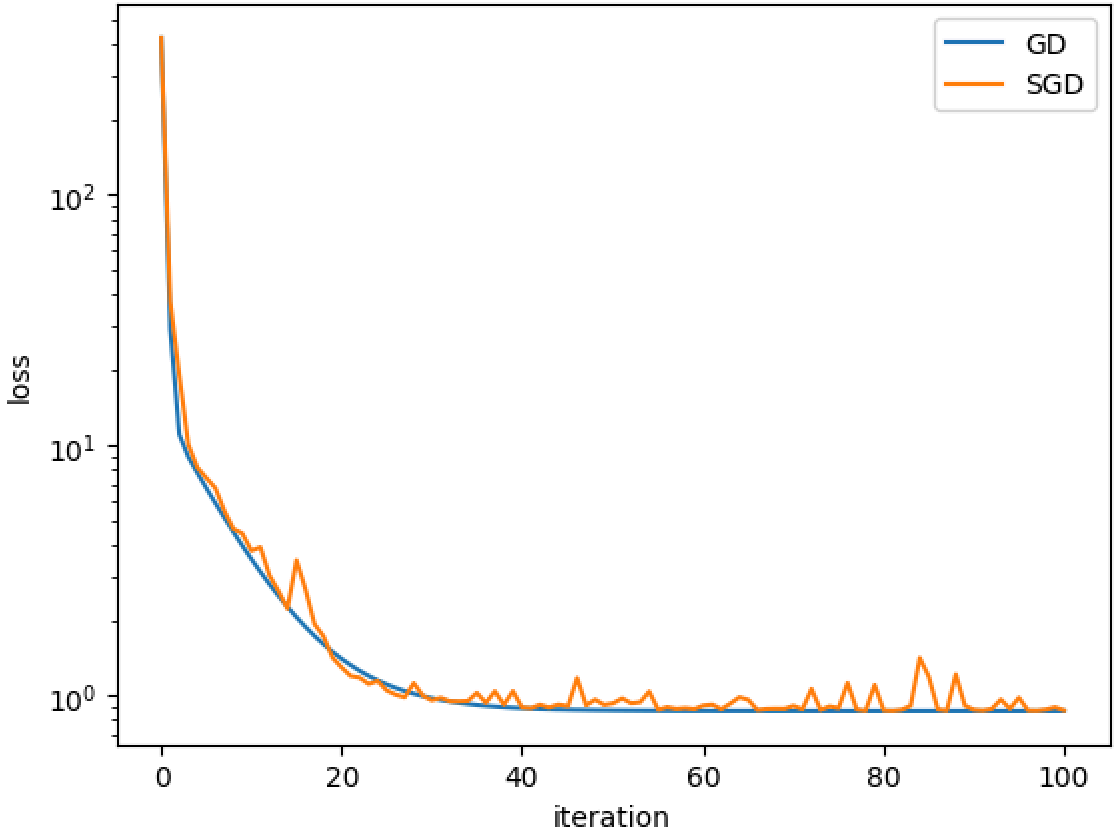
p влияет на длину шага на каждой итерации. Чем меньше p, тем больше будут шаги на конкретной итерации по сравнению с большим p. При слишком большом и слишком маленьком p не будет сходимости: в первом случае минимум не будет достигнут, во втором — "перепрыгнут"

Сравните сходимость обычного градиентного спуска и стохастичекой версии: Нарисуйте график зависимости значения лосса (его можно посчитать при помощи метода `calc_loss`, используя x и y из датасета и w с соответствующей итерации) от номера итерации для траекторий, полученных при помощи обычного и стохастического градиентного спуска с одинаковыми параметрами. Параметр `batch_size` возьмите равным 10.

Видно ли на данном графике преимущество SGD? Почему?

In [14]:
```
gd_w_list = gradient_descent(w_init, X, y, loss, 0.005, n_iterations=100)
sgd_w_list = stochastic_gradient_descent(w_init, X, y, loss, 0.005, 10, n

gd_loss = [loss.calc_loss(X, y, w) for w in gd_w_list]
sgd_loss = [loss.calc_loss(X, y, w) for w in sgd_w_list]

plt.plot(gd_loss, label="GD")
plt.plot(sgd_loss, label="SGD")
```

```
plt.ylabel('loss')
plt.xlabel('iteration')

plt.yscale('log')
plt.legend()
plt.show()
```



Основное преимущество SGD — быстрое вычисление градиента и меньшие затраты памяти на каждой итерации, а также возможность "выйти" из локального минимума. Этого на графике не видно. Видно, что SGD сходится немного раньше чем GD, но график SGD более шумный из-за выбора относительно небольшого размера батча.

Часть 2. Линейная регрессия (5 баллов)

Напишем наш класс для линейной регрессии. Он будет использовать интерфейс, знакомый нам из библиотеки `sklearn`.

В методе `fit` мы будем подбирать веса `w` при помощи градиентного спуска нашим методом `gradient_descent`. Не забывайте про единичный признак!

В методе `predict` мы будем применять нашу регрессию к датасету,

In [15]:
```
from sklearn.base import BaseEstimator, RegressorMixin


class LinearRegression(BaseEstimator, RegressorMixin):
    def __init__(self, loss: BaseLoss, lr: float = 0.1, **kwargs) -> None
        self.loss = loss
```

```
        self.lr = lr

        if 'loss__coef' in kwargs and hasattr(self.loss, 'coef'):
            self.loss.coef = kwargs['loss__coef']

        if 'loss__eps' in kwargs and hasattr(self.loss, 'eps'):
            self.loss.coef = kwargs['loss__eps']

    def fit(self, X: np.ndarray, y: np.ndarray) -> "LinearRegression":
        X = np.asarray(X)
        y = np.asarray(y)

        ones_column = np.ones((X.shape[0], 1))
        X = np.hstack([X, ones_column])

        w_init = np.zeros(X.shape[1])

        self.w = gradient_descent(w_init, X, y, self.loss, self.lr)[-1]
        return self

    def predict(self, X: np.ndarray) -> np.ndarray:
        # Проверяем, что регрессия обучена, то есть, что был вызван fit и
        assert hasattr(self, "w"), "Linear regression must be fitted firs

        X = np.asarray(X)

        ones_column = np.ones((X.shape[0], 1))
        X = np.hstack([X, ones_column])

        return X @ self.w

    def get_params(self, deep=True):
        params = {"loss": self.loss, "lr": self.lr}

        if hasattr(self.loss, "coef"):
            params["loss__coef"] = self.loss.coef

        if hasattr(self.loss, "eps"):
            params["loss__eps"] = self.loss.eps

        return params

    def set_params(self, **params):
        if "loss" in params:
            self.loss = params["loss"]

        if "lr" in params:
            self.lr = params["lr"]

        if "loss__coef" in params and hasattr(self.loss, "coef"):
            self.loss.coef = params["loss__coef"]

        if "loss__eps" in params and hasattr(self.loss, "eps"):
            self.loss.eps = params["loss__eps"]

        return self
```

Теперь у нас есть наш класс линейной регрессии. Более того, мы можем управлять тем, какую функцию потерь мы оптимизируем, просто передавая разные классы в параметр `loss` при инициализации.

Пока у нас нет никаких классов кроме `MSELoss`, но скоро они появятся.

Для `MSELoss` мы бы создавали наш объект линейной регрессии, например, так:

In [16]:
```
MSE_linear_regression = LinearRegression(MSELoss())
```

Применим нашу регрессию на реальном датасете. Загрузим датасет с машинами, который был у вас на семинарах:

In [17]:
```
import pandas as pd

X_raw = pd.read_csv(
    "http://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/autos/impor
    header=None,
    na_values=["?"],
)
X_raw.head()
X_raw = X_raw[~X_raw[25].isna()].reset_index()
```

In [18]:
```
y = X_raw[25]
X_raw = X_raw.drop([25, "index"], axis=1)
```

Как обычно обработайте датасет всеми нужными методами, чтобы на нём можно было обучать линейную регрессию:

- Разделите датасет на обучающую и тестовую выборку
- Заполните пропуски
- Нормализуйте числовые признаки
- Закодируйте категориальные переменные

In [19]:
```
from sklearn.compose import ColumnTransformer
from sklearn.pipeline import Pipeline
from sklearn.preprocessing import FunctionTransformer, OneHotEncoder, Sta
from sklearn.model_selection import train_test_split


X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X_raw, y, test_size=0

numeric_features = X_raw.select_dtypes([np.number]).columns
X_train[numeric_features] = X_train[numeric_features].fillna(X_train[nume
X_test[numeric_features] = X_test[numeric_features].fillna(X_train[numeri

categorical = list(X_train.dtypes[X_train.dtypes == "object"].index)
X_train[categorical] = X_train[categorical].fillna("NotGiven")
X_test[categorical] = X_test[categorical].fillna("NotGiven")

column_transformer = ColumnTransformer(
    [("ohe", OneHotEncoder(handle_unknown="infrequent_if_exist", sparse_o
)
```

In [20]:
```
MSE_searcher_pipeline = Pipeline(steps=[("ohe_and_scaling", column_transf
MSE_searcher_pipeline = MSE_searcher_pipeline.fit(X_train, y_train)
```

In [ ]:
```
from sklearn.model_selection import GridSearchCV

lrs = np.logspace(-5, -1, 50)
searcher = GridSearchCV(
    MSE_searcher_pipeline, [{"regression__lr": lrs}], scoring="neg_root_m
)
searcher.fit(X_train, y_train)

best_lr = searcher.best_params_["regression__lr"]
print("Best lr = %.4f" % best_lr)
```

In [22]:
```
MSE_linear_regression = LinearRegression(MSELoss(), best_lr)
MSE_pipeline = Pipeline(steps=[("ohe_and_scaling", column_transformer), (
```

Обучите линейную регрессию на обучающей выборке

In [23]:
```
MSE_model = MSE_pipeline.fit(X_train, y_train)
```

Для оценки качества реализуем `r2_score`, который является нормализацией `mean_square_error`.

In [24]:
```
def r2(y_true: np.ndarray, y_predicted: np.ndarray) -> float:
    mse = np.sum(np.square(y_predicted - y_true))
    y_mean = y_true.mean()
    mse_best_const = np.sum(np.square(y_true - y_mean)
)
    return 1 - (mse / mse_best_const)
```

Посчитайте ошибку обученной регрессии на обучающей и тестовой выборке.

In [25]:
```
y_train_predicted = MSE_model.predict(X_train)
print(f"R2-score on train: {r2(y_train, y_train_predicted)}")

y_test_predicted = MSE_model.predict(X_test)
print(f"R2-score on test: {r2(y_test, y_test_predicted)}")
```

```
R2-score on train: 0.9529743843095974
R2-score on test: 0.9215687485655379
```

```
/home/sashka/python_spbu_TP23_sem4/.venv/lib/python3.12/site-packages/skle
arn/pipeline.py:62: FutureWarning: This Pipeline instance is not fitted ye
t. Call 'fit' with appropriate arguments before using other methods such a
s transform, predict, etc. This will raise an error in 1.8 instead of the
current warning.
  warnings.warn(
/home/sashka/python_spbu_TP23_sem4/.venv/lib/python3.12/site-packages/skle
arn/pipeline.py:62: FutureWarning: This Pipeline instance is not fitted ye
t. Call 'fit' with appropriate arguments before using other methods such a
s transform, predict, etc. This will raise an error in 1.8 instead of the
current warning.
  warnings.warn(
```

Наша модель переобучилась. Давайте как обычно в такой ситуации добавим к ней L2 регуляризацию. Для этого нам нужно написать новый класс лосса.

Формула функции потерь для MSE с L2 регуляризацией выглядит так:

$$Q(w, X, y) = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}(\langle x_i, w\rangle - y_i)^2 + \lambda||w||^2$$

Или в матричном виде:

$$Q(w, X, y) = \frac{1}{\ell}||Xw - y||^2 + \lambda||w||^2$$

Где λ — коэффициент регуляризации

Градиент выглядит так:

$$\nabla_w Q(w, X, y) = \frac{2}{\ell}X^T(Xw - y) + 2\lambda w$$

Обратите внимание, что последний элемент вектора `w` — это bias (в классе `LinearRegression` к матрице `X` добавляется колонка из единиц — константный признак).

Вопрос: надо ли регуляризовывать bias?

Ответ: **Нет, bias не связан с признаками, он смещает предсказание модели.**

Не забудьте убрать последний элемент из `w` при подсчёте слагаемого $\lambda||w||^2$ в `calc_loss` и занулить его при подсчёте слагаемого $2\lambda w$ в `calc_grad`

In [26]:
```
class MSEL2Loss(BaseLoss, BaseEstimator):
    def __init__(self, coef: float = 1.0):
        self.coef = coef

    def calc_loss(self, X: np.ndarray, y: np.ndarray, w: np.ndarray) -> f
        return np.square(X @ w - y).mean() + self.coef * np.sum(np.square

    def calc_grad(self, X: np.ndarray, y: np.ndarray, w: np.ndarray) -> n
        w_without_bias = w.copy()
        w_without_bias[-1] = 0

        return (2 / X.shape[0]) * X.T @ (X @ w - y) + 2 * self.coef * w_w

    def get_params(self, deep=True):
        return {"coef": self.coef}

    def set_params(self, **params):
        if "coef" in params:
            self.coef = params["coef"]
        return self
```

Теперь мы можем использовать лосс с l2 регуляризацией в нашей регрессии, например, так:

In [27]:
```
MSEL2_linear_regression = LinearRegression(MSEL2Loss(0.005), best_lr)
```

Обучите регрессию с лоссом `MSEL2Loss`. Подберите хороший коэффициент регуляризации и добейтесь улучшения результата на тестовой выборке. Сравните результат на обучающей и тестовой выборке с регрессией без регуляризации.

In [28]:
```
MSEL2_searcher_pipeline = Pipeline(steps=[("ohe_and_scaling", column_tran
```

In [ ]:
```
from sklearn.model_selection import GridSearchCV

msel2_coefs = np.logspace(-4, 1, 50)
searcher = GridSearchCV(
    MSEL2_searcher_pipeline, [{"regression__lr": [best_lr], "regression__
)
searcher.fit(X_train, y_train)

best_msel2_coef = searcher.best_params_["regression__loss__coef"]
print("Best msel2_coef = %.4f" % best_msel2_coef)
```

In [30]:
```
MSEL2_linear_regression = LinearRegression(MSEL2Loss(best_msel2_coef), be
MSEL2_pipeline = Pipeline(steps=[("ohe_and_scaling", column_transformer),
```

In [31]:
```
MSEL2_model = MSEL2_pipeline.fit(X_train, y_train)
```

In [32]:
```
y_train_predicted = MSEL2_model.predict(X_train)
print(f"R2-score on train: {r2(y_train, y_train_predicted)}")

y_test_predicted = MSEL2_model.predict(X_test)
print(f"R2-score on test: {r2(y_test, y_test_predicted)}")
```

```
R2-score on train: 0.9064984651862813
R2-score on test: 0.8473219247747823
```

```
/home/sashka/python_spbu_TP23_sem4/.venv/lib/python3.12/site-packages/skle
arn/pipeline.py:62: FutureWarning: This Pipeline instance is not fitted ye
t. Call 'fit' with appropriate arguments before using other methods such a
s transform, predict, etc. This will raise an error in 1.8 instead of the
current warning.
  warnings.warn(
/home/sashka/python_spbu_TP23_sem4/.venv/lib/python3.12/site-packages/skle
arn/pipeline.py:62: FutureWarning: This Pipeline instance is not fitted ye
t. Call 'fit' with appropriate arguments before using other methods such a
s transform, predict, etc. This will raise an error in 1.8 instead of the
current warning.
  warnings.warn(
```

Ухудшились.

В нашем датасете могут быть выбросы, с ними хорошо помогает бороться Huber Loss. Вдали от нуля он работает как Mean Absolute Error и не реагирует на выбросы так сильно, как MSE. Давайте его реализуем и применим в нашей регрессии.

Напомним, что функция потерь Huber Loss'а выглядит так:

$$Q(w, X, y) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \phi_\varepsilon(\langle x_i, w \rangle - y_i)$$

$$\phi_\varepsilon(z) = \begin{cases} \frac{1}{2} z^2, -\varepsilon < z < \varepsilon, \\ \varepsilon(|z| - \frac{1}{2}\varepsilon), \text{иначе} \end{cases}$$

А градиент так:

$$\nabla_w Q(w, X, y) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} x_i \nabla_z \phi_\varepsilon(\langle x_i, w \rangle - y_i)$$

$$\nabla_z \phi_\varepsilon(z) = \begin{cases} z, -\varepsilon < z < \varepsilon, \\ \varepsilon \ \mathrm{sign}(z), \text{иначе} \end{cases}$$

In [33]:
```
class HuberLoss(BaseLoss, BaseEstimator):
    def __init__(self, eps: float) -> None:
        self.eps = eps

    def calc_loss(self, X: np.ndarray, y: np.ndarray, w: np.ndarray) -> f
        errors = X @ w - y
        loss_values = np.where(np.abs(errors) < self.eps,
                               (errors ** 2) / 2,
                               self.eps * (np.abs(errors) - self.eps / 2))

        return np.mean(loss_values)

    def _phi_grad(self, z: float) -> float:
        if -self.eps < z < self.eps:
            return z

        return self.eps * np.sign(z)

    def calc_grad(self, X: np.ndarray, y: np.ndarray, w: np.ndarray) -> n
        errors = X @ w - y
        phi_grad_val = np.array([self._phi_grad(z) for z in errors])

        return X.T @ phi_grad_val / X.shape[0]

    def get_params(self, deep=True):
        return {"eps": self.eps}

    def set_params(self, **params):
        if "eps" in params:
            self.eps = params["eps"]
        return self
```

Обучите регрессию с лоссом `HuberLoss`. Сравните результат на обучающей и тестовой выборке с регрессией, обученной с `MSELoss`.

In [34]:
```
Huber_linear_regression = LinearRegression(HuberLoss(100), best_lr)
Huber_searcher_pipeline = Pipeline(steps=[("ohe_and_scaling", column_tran
```

In [ ]:
```
from sklearn.model_selection import GridSearchCV

epss = np.logspace(3, 5, 20)
searcher = GridSearchCV(
    Huber_searcher_pipeline, [{"regression__loss__eps": epss}], scoring="
)
searcher.fit(X_train, y_train)

best_eps = searcher.best_params_["regression__loss__eps"]
print("Best eps = %.4f" % best_eps)
```

In [36]:
```
Huber_linear_regression = LinearRegression(HuberLoss(best_eps), best_lr)
Huber_pipeline = Pipeline(steps=[("ohe_and_scaling", column_transformer),
```

In [37]:
```
Huber_model = Huber_pipeline.fit(X_train, y_train)
```

In [38]:
```
y_train_predicted = Huber_model.predict(X_train)
print(f"R2-score on train: {r2(y_train, y_train_predicted)}")

y_test_predicted = Huber_model.predict(X_test)
print(f"R2-score on test: {r2(y_test, y_test_predicted)}")
```

```
R2-score on train: 0.9268251294736307
R2-score on test: 0.8693215764127333
```

```
/home/sashka/python_spbu_TP23_sem4/.venv/lib/python3.12/site-packages/skle
arn/pipeline.py:62: FutureWarning: This Pipeline instance is not fitted ye
t. Call 'fit' with appropriate arguments before using other methods such a
s transform, predict, etc. This will raise an error in 1.8 instead of the
current warning.
  warnings.warn(
/home/sashka/python_spbu_TP23_sem4/.venv/lib/python3.12/site-packages/skle
arn/pipeline.py:62: FutureWarning: This Pipeline instance is not fitted ye
t. Call 'fit' with appropriate arguments before using other methods such a
s transform, predict, etc. This will raise an error in 1.8 instead of the
current warning.
  warnings.warn(
```

Вставьте ваш любимый мем 2025 в ячейку ниже: