PRACE NAUKOWE
Uniwersytetu Ekonomicznego we Wrocławiu

RESEARCH PAPERS
of Wrocław University of Economics

Nr 327

Taksonomia 22
Klasyfikacja i analiza danych – teoria i zastosowania

Redaktorzy naukowi
Krzysztof Jajuga, Marek Walesiak

Wydawnictwo Uniwersytetu Ekonomicznego we Wrocławiu
Wrocław 2014

Redaktor Wydawnictwa: Barbara Majewska
Redaktor techniczny: Barbara Łopusiewicz
Korektor: Barbara Cibis
Łamanie: Beata Mazur
Projekt okładki: Beata Dębska

Publikacja jest dostępna w Internecie na stronach:
www.ibuk.pl, www.ebscohost.com,
w Dolnośląskiej Bibliotece Cyfrowej www.dbc.wroc.pl,
The Central and Eastern European Online Library www.ceeol.com,
a także w adnotowanej bibliografii zagadnień ekonomicznych BazEkon
http://kangur.uek.krakow.pl/bazy_ae/bazekon/nowy/index.php

Informacje o naborze artykułów i zasadach recenzowania znajdują się
na stronie internetowej Wydawnictwa
www.wydawnictwo.ue.wroc.pl

Tytuł dofinansowany ze środków Narodowego Banku Polskiego
oraz ze środków Sekcji Klasyfikacji i Analizy Danych PTS

ISSN 1899-3192 (Prace Naukowe Uniwersytetu Ekonomicznego we Wrocławiu)
ISSN 1505-9332 (Taksonomia)

Wersja pierwotna: publikacja drukowana

Druk: Drukarnia TOTEM

Spis treści

Summaries

PRACE NAUKOWE UNIWERSYTETU EKONOMICZNEGO WE WROCŁAWIU
RESEARCH PAPERS OF WROCŁAW UNIVERSITY OF ECONOMICS nr 327 • 2014
Taksonomia 22 ISSN 1899-3192
Klasyfikacja i analiza danych – teoria i zastosowania

Mariusz Kubus
Politechnika Opolska

PROPOZYCJA MODYFIKACJI METODY ZŁAGODZONEGO LASSO

Streszczenie: Regularyzowana regresja liniowa (np. LASSO [Tibshirani 1996]) zyskała duże zainteresowanie jako narzędzie selekcji zmiennych. Meinshausen [2007] zaproponował modyfikację metody LASSO, wprowadzając parametr łagodzący, który kontroluje wariancje parametrów strukturalnych niezależnie od etapu eliminacji zmiennych. Metoda ta jest rekomendowana dla dużych wymiarów i dla dużego stosunku wariancji zmiennej objaśnianej do wariancji składnika losowego. W artykule zaproponowano modyfikację metody złagodzonego LASSO. Przeprowadzone symulacje pokazały, że nowe podejście daje bardziej stabilne wyniki i skuteczniej eliminuje zmienne nieistotne (tj. takie, które nie mają wpływu na zmienną objaśnianą).

Słowa kluczowe: regularyzowana regresja liniowa, złagodzone LASSO, selekcja zmiennych.

1. Wstęp

Problematyka selekcji zmiennych w metodach statystycznego uczenia z nauczycielem cieszy się obecnie dużym zainteresowaniem. Uzyskana w ten sposób redukcja wymiaru przestrzeni cech nie tylko ma walory interpretacyjne, ale często pozwala uzyskać model, który cechuje się większą dokładnością przewidywania nieznanych wartości (lub kategorii) zmiennej objaśnianej dla nowych obiektów. Zmienne objaśniające, które nie mają wpływu na zmienną objaśnianą – tzw. zmienne nieistotne (*irrelevant variables*) – wywołują efekt nadmiernego dopasowania do danych (*overfitting*), przez co model traci na zdolności generalizacji. Wśród obecnie wymienianych trzech podejść do selekcji zmiennych [zob. np. Guyon i in. 2006] dużą popularnością cieszą się metody, w których estymacja modelu i dobór zmiennych odbywa się jednocześnie (*embedded methods*). Inaczej mówiąc selekcja zmiennych jest integralną częścią algorytmu uczącego. Przykładami takich metod są drzewa klasyfikacyjne (lub regresyjne) oraz modele liniowe z regularyzacją. Tym drugim poświęcony jest ten artykuł.

Główną ideą regularyzacji jest możliwość uzyskania modeli o różnym stopniu złożoności. W praktyce wiąże się to z lepszym lub gorszym dopasowaniem do

danych ze zbioru uczącego. W przypadku modeli liniowych złożoność rozumiana jest jako liczba parametrów lub norma wektora parametrów. Pierwszą propozycją regularyzacji w liniowym modelu regresji, która wywoływała efekt selekcji zmiennych, było LASSO [Tibshirani 1996]. Pomysł ten doczekał się wielu rozszerzeń i modyfikacji (np. elastyczna sieć [Zou, Hastie 2005], zgrupowane LASSO [Yuan, Lin 2007], złagodzone LASSO [Meinshausen 2007]). W porównaniu z większością metod doboru zmiennych przed etapem uczenia (*filters*) w regularyzowanej regresji liniowej uwzględniany jest kontekst oddziaływania wielu zmiennych objaśniających na zmienną objaśnianą. Z kolei w porównaniu z regresją krokową uważana jest za metodę mniej skłonną do nadmiernego dopasowania do danych. Ponadto metody estymacji w regularyzowanej regresji liniowej cechują się relatywnie małą złożonością obliczeniową. Główną trudnością w praktycznym stosowaniu LASSO (jak i innych metod regularyzacji) jest ustalenie wartości parametru kary. Meinshausen [2007] w metodzie złagodzonego LASSO (*relaxed* LASSO) zaproponował modyfikację polegającą na wprowadzeniu dodatkowego parametru regularyzacji. Metoda ta jest zalecana szczególnie w przypadku wysokich wymiarów przestrzeni cech oraz dużej wariancji zmiennej objaśnianej w stosunku do wariancji składnika losowego (*signal-to-noise ratio*). W przeprowadzonych symulacjach, mających na celu porównanie różnych metod selekcji zmiennych w regresji dla dużych wymiarów przestrzeni cech [zob. Kubus 2013a], okazało się, że metoda Meinshausena [2007] jest konkurencyjna, lecz cechuje się małą stabilnością, tzn. czasem włącza do modelu dużą liczbę zmiennych nieistotnych, sztucznie wprowadzonych do zbioru danych. W artykule zaproponowana będzie modyfikacja metody złagodzonego LASSO, polegająca na konstrukcji ciągu modeli zagnieżdżonych i wyborze optymalnego. Skuteczność nowego podejścia zostanie potwierdzona empirycznie za pomocą badań symulacyjnych.

2. Regularyzacja w liniowym modelu regresji

Przedmiotem rozważań będzie zbiór wielowymiarowych obserwacji (tzw. zbiór uczący):

$$\{(\boldsymbol{x}_1, y_1),...,(\boldsymbol{x}_N, y_N) : \boldsymbol{x_i} \in \boldsymbol{X} = (X_1,..., X_p),\ y_i \in Y,\ i \in \{1,..., N\}\}, \tag{1}$$

gdzie Y (ilościowa zmienna objaśniana) reprezentuje zjawisko, które chcemy wyjaśnić na podstawie obserwowanych cech $X_1,..., X_p$, o których zakładać będziemy, że są ilościowe lub binarne. Na podstawie informacji, jaką niesie zbiór uczący, estymowane będą parametry liniowego modelu regresji:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + ... + b_p x_p + \varepsilon. \tag{2}$$

W przypadku, gdy w zbiorze danych znajdują się zmienne nieistotne, estymatory klasycznej metody najmniejszych kwadratów (MNK), choć nieobciążone, nie

gwarantują dokładnych predykcji dla obiektów nowych (spoza zbioru uczącego). Sytuacja ta sprawia, że model odzwierciedla nie tylko proces generowania danych, ale też zawarty w nich szum, przez co jest mało stabilny i traci zdolność generalizacji. Wprowadzenie składnika kary za duże wartości bezwzględne parametrów w kryterium wykorzystywanym do estymacji daje możliwość uzyskania estymatorów o mniejszej wariancji, choć obciążonych. Tak dzieje się w metodzie LASSO [Tibshirani 1996]. Kryterium ma postać:

$$\hat{\boldsymbol{b}}^{LASSO} = \arg\min_{\boldsymbol{b}} \left(\sum_{i=1}^{N} \left(y_i - b_0 - \sum_{j=1}^{p} b_j x_{ij} \right)^2 + \lambda \cdot \sum_{j=1}^{p} \left| b_j \right| \right), \tag{3}$$

gdzie λ jest parametrem regularyzacji. Wartości (bezwzględne) estymatorów LASSO są mniejsze od odpowiadających im estymatorów MNK. W skrajnym przypadku niektóre współczynniki się zerują, co daje efekt selekcji zmiennych. Rozmiar zmniejszania wartości (bezwzględnych) współczynników oraz liczba zerujących się współczynników zależy od wartości parametru λ. Duże wartości λ drastyczniej zmniejszają wartości (bezwzględne) współczynników i więcej z nich zostaje wyzerowanych. Zmniejsza się wtedy wariancja, lecz rośnie obciążenie. Celem jest uzyskanie pewnego stanu kompromisu między obciążeniem a wariancją, a w efekcie modelu o optymalnej zdolności generalizacji, czyli dokładności przewidywania dla nowych obiektów [zob. np. Hastie i in. 2009; s. 219-224]. Ustalenie parametru λ jest zatem kluczowym zadaniem w stosowaniu regresji liniowej z regularyzacją. Zwykle w tym celu dla różnych wartości λ stosuje się ocenę błędu predykcji przez sprawdzanie krzyżowe lub kryteria informacyjne. Studium porównawcze tych kryteriów można znaleźć w pracy Kubusa [2013b].

Zaproponowana przez Meinshausena [2007] modyfikacja metody LASSO – nazwana złagodzonym LASSO (*relaxed* LASSO) – związana jest z ustaleniem rozmiaru kary za duże wartości (bezwzględne) parametrów. Punktem wyjścia jest postawienie pytania, czy kontrolowanie efektu zmniejszania wartości bezwzględnych parametrów (a co za tym idzie wariancji) oraz efektu selekcji zmiennych przez tylko jeden parametr regularyzacji jest rozwiązaniem optymalnym. Na przykład Efron i in. [2004] stosują połączenie LARS z MNK polegające na tym, że LARS dokonuje selekcji zmiennych, a pozostałe współczynniki estymowane są klasyczną MNK. Meinshausen [2007] wprowadza dodatkowy parametr regularyzacji i proponuje dwukrokową procedurę. Najpierw dokonuje się selekcji zmiennych przez klasyczne zastosowanie LASSO. Ten etap kontrolowany jest parametrem λ. Następnie dla zredukowanego zbioru predyktorów jeszcze raz stosuje się LASSO, a rozmiar zmniejszania wartości bezwzględnych współczynników (a co za tym idzie wariancji) kontrolowany jest parametrem φ, nazywanym parametrem łagodzącym (*relaxation parameter*).

Estymatory złagodzonego LASSO (metoda ta oznaczana będzie przez rLASSO) definiuje się następująco. Oznaczmy przez $A_\lambda \subseteq \{1,...,p\}$ niepusty podzbiór indek-

sów zmiennych objaśniających, dla których oszacowano niezerowe współczynniki w metodzie LASSO. Przez $\tilde{\boldsymbol{b}}$ oznaczmy nowy wektor parametrów modelu liniowego, który będzie estymowany w drugim kroku procedury. Ma on postać:

$$\tilde{b}_j = \begin{cases} b_j & \text{dla} \quad j \in A_\lambda \\ 0 & \text{dla} \quad j \notin A_\lambda \end{cases}. \tag{4}$$

Ponadto $\tilde{b}_0 = b_0$. Wówczas:

$$\hat{\boldsymbol{b}}^{rLASSO} = \arg\min_{\boldsymbol{b}} \left(\sum_{i=1}^{N} \left(y_i - \tilde{b}_0 - \sum_{j=1}^{p} \tilde{b}_j x_{ij} \right)^2 + \varphi \cdot \lambda \cdot \sum_{j=1}^{p} \left| \tilde{b}_j \right| \right). \tag{5}$$

Jeżeli $\varphi = 1$, to estymatory rLASSO są identyczne z estymatorami LASSO. Z kolei jeśli $\varphi = 0$, to uzyskuje się estymatory MNK dla wyselekcjonowanych wstępnie przez LASSO zmiennych. W tym przypadku model podobny jest do wspomnianego już połączenia LARS z MNK [Efron i in. 2004]. Dla $\varphi \in (0;1)$ można uzyskać continuum modeli pośrednich między tymi skrajnymi przypadkami. W przeprowadzonym przez Meinshausena [2007] eksperymencie, przy założeniu niezależności zmiennych, metoda złagodzonego LASSO wykazała przewagę nad klasycznym LASSO oraz nad połączeniem LARS z MNK. Przy porównywalnych błędach predykcji złagodzone LASSO wprowadzało do modelu mniej zmiennych nieistotnych. Różnice były wyraźne zwłaszcza w przypadku dużej wariancji zmiennej objaśnianej w porównaniu z wariancją składnika losowego (*signal-to-noise ratio*).

3. Propozycja modyfikacji

W trakcie badań własnych nad algorytmem rLASSO okazało się, że jego ponowne zastosowanie dla zredukowanej przestrzeni cech prowadziło do dalszej redukcji wymiaru. Co więcej, empirycznie stwierdzono, że kontynuacja takiego postępowania wykazuje się zbieżnością, tzn. przestrzeń zawsze redukowana jest dość szybko do jednej zmiennej. Wobec przytoczonych obserwacji proponujemy, by za pomocą wielokrotnego zastosowania metody rLASSO skonstruować ciąg modeli zagnieżdżonych, a następnie wybrać optymalny. Proponowany algorytm oznaczany będzie nrLASSO, a jego formalny zapis przedstawiono w tabeli 1.

Do oceny jakości modeli zagnieżdżonych w trzecim kroku algorytmu wykorzystano kryterium informacyjne EDC [Bai i in. 1986], które dało obiecujące rezultaty w symulacjach przeprowadzonych w pracy [Kubus 2013b]. Ma ono postać:

$$Q(k) = N \cdot \ln\left(\frac{RSS}{N} \right) + (k+1) \cdot P(N), \tag{6}$$

gdzie: *k* jest liczbą zmiennych w modelu, *RSS* sumą kwadratów reszt, a $P(N)$ funkcją spełniającą warunki:

$$\lim_{N\to\infty}\frac{P(N)}{N}=0 \quad \text{oraz} \quad \lim_{N\to\infty}\frac{P(N)}{\ln\ln N}=\infty, \tag{7}$$

która decyduje o rozmiarze kary za złożoność modelu. W proponowanym algorytmie przyjęto $P(N)=\sqrt{N}$.

Tabela 1. Algorytm nrLASSO

Niech $\boldsymbol{A_i} \subseteq \{1,...,p\}$ będzie podzbiorem indeksów zmiennych objaśniających $X_1,...,X_p$ w *i*-tym kroku algorytmu.
1. Ustal wartości początkowe: $i=1$ oraz $\boldsymbol{A}_1=\{1,...,p\}$.
2. Dopóki $\boldsymbol{A_i}$ zawiera więcej niż jeden indeks zmiennej, wykonuj:
2a. Zbuduj model rLASSO (M_i) dla predyktorów z indeksami ze zbioru $\boldsymbol{A_i}$.
2b. Oblicz wartość kryterium oceny *Q* dla modelu M_i.
2c. Zwiększ numer iteracji o jeden: $i \leftarrow i+1$.
2d. Zmodyfikuj zbiór indeksów $\boldsymbol{A_i}$ (usuń indeksy zmiennych, dla których współczynniki w modelu M_{i-1} były równe zero).
3. Z ciągu modeli zagnieżdżonych $M_1 \prec ... \prec M_{i-1}$ wybierz model optymalny na podstawie minimalnej wartości kryterium oceny *Q*.

Źródło: opracowanie własne.

4. Badania symulacyjne

W celu zweryfikowania zaproponowanej modyfikacji metody złagodzonego LASSO przeprowadzono badania symulacyjne. W każdym z generowanych zbiorów danych dla liniowych modeli regresji (2) dokonano podziału na próbę uczącą (100 obserwacji) oraz testową (także 100 obserwacji). Szum gaussowski ε na poziomie 0,4 odchylenia standardowego zmiennej objaśnianej dodawano tylko w próbach uczących. W ten sposób uzyskano stosunek wariancji *y* do wariancji składnika losowego równy 6,25. Zbiory testowe, niewykorzystane w etapie uczenia, służyły do oszacowania błędu predykcji estymowanych modeli.

W każdym eksperymencie dołączano też 20 zmiennych nieistotnych, niemających wpływu na zmienną objaśnianą. Pierwsze 10 było parami skorelowane według formuły:

$$X_{2k}=k\cdot X_{2k-1}+e, \tag{8}$$

gdzie $k \in \{1,...,5\}$. Realizacje zmiennych o numerach nieparzystych generowano z rozkładu $N(0;1)$, a szum *e* z rozkładu $N(0;0{,}1)$. Kolejne 10 zmiennych nieistot-

nych generowano z rozkładu zero-jedynkowego: pięć z frakcją jedynek 0,5 oraz pięć z frakcją jedynek 0,25. Każdy z trzech opisanych poniżej eksperymentów był przeprowadzony 100 razy. Wszystkich obliczeń dokonano za pomocą programu R, wykorzystując pakiety `lars` i `relaxo` oraz własne procedury. Po selekcji zmiennych metodami LASSO, rLASSO i nrLASSO współczynniki estymowano klasyczną MNK.

Eksperyment 1

Rozważany będzie model liniowy (2) z pięcioma zmiennymi objaśniającymi ($p = 5$). Realizacje zmiennych $X_1,...,X_5$ oraz współczynniki $b_0, b_1,...,b_5$ generowano niezależnie z rozkładu $N(0;1)$.

Eksperyment 2

Ponownie rozważać będziemy model liniowy (2) dla $p = 5$. Tym razem wprowadzone będą zależności między zmiennymi z modelu. Zmienne $X_1,..., X_3$ oraz współczynniki $b_0, b_1,..., b_5$ generowano z rozkładu $N(0;1)$ natomiast:

$$\begin{aligned} X_4 &= X_2 + X_3 + e \\ X_5 &= X_1 + e \end{aligned}, \tag{9}$$

gdzie *e* oznacza szum gaussowski, który generowano z rozkładu $N(0;0{,}1)$.

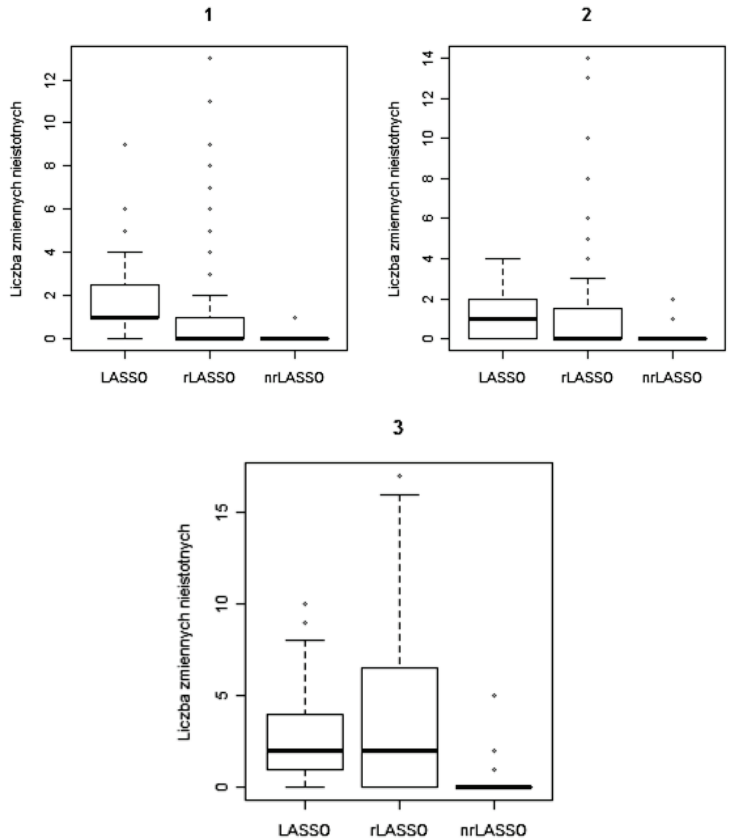
Eksperyment 3

Rozważany będzie model liniowy (2) z 10 zależnymi zmiennymi objaśniającymi ($p = 10$). Wszystkie współczynniki oraz realizacje zmiennych objaśniających (z wyjątkiem X_5 oraz X_{10}) były generowane niezależnie z rozkładu $N(0;1)$. Zależności wprowadzono wg formuły:

$$x_{5+k*5} = \alpha_{k1} x_{1+k*5} + \alpha_{k2} x_{2+k*5} + \alpha_{k3} x_{3+k*5} + \alpha_{k4} x_{4+k*5} + e_k, \tag{10}$$

dla $k \in \{0,1\}$. Tu również współczynniki losowane były z jednowymiarowego standaryzowanego rozkładu normalnego, a poziom szumu dobierano losowo: $e_k - N(0, s_k)$, gdzie $s_k = m \cdot sd(x_{5+k*5})$ i $m \in \{0{,}1;\ 0{,}2;\ 0{,}3;\ 0{,}4\}$.

Liczby zmiennych nieistotnych wprowadzanych do modeli w 100 symulacjach przedstawia rys. 1. Ewidentnie widać przewagę zaproponowanej modyfikacji (oznaczonej przez nrLASSO). W każdym z trzech modeli zmienne nieistotne były wprowadzane w niewielkiej liczbie, co najwyżej 3 razy na 100. Zbadano też błędy średniokwadratowe szacowane na zbiorach testowych, a ich rozkłady porównano testem Friedmana (zob. tab. 2). W przypadku dwóch pierwszych eksperymentów hipoteza zerowa o jednakowych rozkładach została odrzucona. Mediany błędów były mniejsze dla metody nrLASSO, a dalsza analiza post-hoc wskazała istotne różnice dla par nrLASSO – LASSO oraz nrLASSO – rLASSO w pierwszym eks-



Rys. 1. Liczby zmiennych nieistotnych wprowadzanych do modeli w eksperymentach 1-3. Dla każdego eksperymentu wykonano 100 symulacji

Źródło: obliczenia własne.

perymencie oraz dla pary nrLASSO – LASSO w drugim eksperymencie. Dla trzeciego modelu mediana błędów w nrLASSO jest nieco większa, ale różnica ta nie jest statystycznie istotna.

Tabela 2. Mediany błędów średniokwadratowych szacowanych na zbiorach testowych w 100 symulacjach przeprowadzonych dla każdego eksperymentu oraz wyniki testu Friedmana

Nr eksperymentu	LASSO	rLASSO	nrLASSO	Test Friedmana (wartości *p*)
1	0,0802	0,0682	**0,0529**	0,00000
2	0,0570	0,0519	**0,0391**	0,00121
3	0,5348	0,5149	0,5980	0,87370

Źródło: obliczenia własne.

5. Podsumowanie

Przeprowadzone symulacje pokazały, że z punktu widzenia zdolności eliminacji zmiennych nieistotnych (tj. takich, które nie mają wpływu na zmienną objaśnianą) zaproponowany w artykule algorytm jest znacznie stabilniejszy od oryginalnego złagodzonego LASSO. Zdecydowanie lepiej je identyfikował przy porównywalnych lub nawet niższych błędach predykcji. Rezultat ten został potwierdzony testami statystycznej istotności. Warto podkreślić, że eksperymenty przeprowadzono w sytuacji ogólniejszej niż w artykule Meishausena [2007], mianowicie dla zmiennych zależnych oraz binarnych zmiennych nieistotnych.

Literatura

Bai Z.D., Krishnaiah P.R., Zhao L.C. (1986), *On the detection of the number of signals in the presence of white noise*, „Journal of Multivariate Analysis" 20, s.1-25.

Efron B., Hastie T., Johnstone I., Tibshirani R. (2004), *Least Angle Regression*, „Annals of Statistics" 32 (2), s. 407-499.

Guyon I., Gunn S., Nikravesh M., Zadeh L. (2006), *Feature Extraction: Foundations and Applications*, Springer, New York.

Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. (2009), *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inferance, and Prediction*, 2nd edition, Springer, New York.

Kubus M. (2013a), *Feature selection in high dimensional regression problem*, [w:] C. Domański (red.), *Methods and Applications of Multivariate Statistical Analysis*, Acta Universitatis Lodziensis, „Folia Oeconomica" 286, s. 139-146.

Kubus M. (2013b), *On model selection in some regularized linear regression methods*, [w:] Cz. Domański, A. Kupis-Fijałkowska (red.), *Multivariate Statistical Analysis – Theory and Practice*, Acta Universitatis Lodziensis, „Folia Oeconomica" 285, s. 115-123.

Meinshausen N. (2007), *Lasso with relaxation*, „Computational Statistics and Data Analysis" 52(1), s. 374-293.

Tibshirani R. (1996), *Regression shrinkage and selection via the lasso*, „Journal of the Royal Statistical Society" Series B 58, s. 267-288.

Yuan M., Lin Y. (2007), *Model selection and estimation in regression with grouped variables*, „Journal of the Royal Statistical Society" Series B. 68(1), s. 49-67.

Zou H., Hastie T. (2005), *Regularization and variable selection via the elastic net,* „Journal of the Royal Statistical Society" Series B. 67(2), s. 301-320.

THE PROPOSITION OF MODIFICATION OF THE RELAXED LASSO METHOD

Summary: Regularized linear regression (i.e. LASSO [Tibshirani 1996]) has reached a lot of interest as a feature selection tool. Meinshausen [2007] proposed a modified version of the LASSO by introducing a relaxation parameter which controls the variances of the parameters, regardless of the feature elimination stage. This method is recommended in high dimensions, and for the high signal-to-noise ratio. The modification of the relaxed LASSO method is proposed in this paper. The simulations show that the new approach provides more stable results, and more effectively discards noisy variables.

Keywords: regularized linear regression, relaxed LASSO, feature selection.