

DATA SCIENCE 2

REGRESSIONSVERFAHREN

PROF. DR. CHRISTIAN BOCKERMANN

HOCHSCHULE BOCHUM

SOMMERSEMESTER 2022

- 1 Polynomielle Regression
- 2 Polynomielle Regression in Python
- 3 Exkursion: Pre-Processing mit SciKit Learn
- 4 Overfitting + Risiko-Minimierung

Lineare Regression

Einfache Modell-Klasse linearer Funktionen

$$\begin{aligned}\hat{f}(\mathbf{x}) &= b + \sum_{i=1}^p w_i x_i \\ &= \sum_{i=0}^p w_i x_i \quad \text{mit } w_0 = b, x_0 = 1 \\ &= \mathbf{w}^T \mathbf{x} = \hat{f}_{\mathbf{w}}(\mathbf{x})\end{aligned}$$

Lineare Regression

Einfache Modell-Klasse linearer Funktionen

$$\begin{aligned}\hat{f}(\mathbf{x}) &= b + \sum_{i=1}^p w_i x_i \\ &= \sum_{i=0}^p w_i x_i \quad \text{mit } w_0 = b, x_0 = 1 \\ &= \mathbf{w}^T \mathbf{x} = \hat{f}_{\mathbf{w}}(\mathbf{x})\end{aligned}$$

Parameter $\mathbf{w} = (w_0, w_1, \dots, w_p)$ bestimmen das Modell

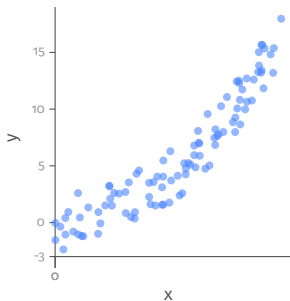
Lineare Regression - Optimierung

Parameter werden an die Daten angepasst - Fehlerminimierung:

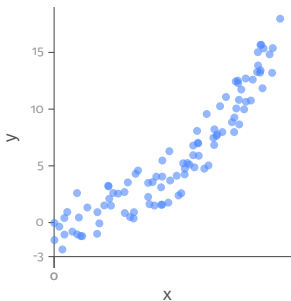
$$\arg \min_{\mathbf{w}} \sum_{i=1}^n \underbrace{\left(\hat{f}_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) - y_i \right)^2}_{=RSS(\hat{f}_{\mathbf{w}}(\mathbf{X}), \mathbf{Y})}$$

- Quadratische Fehlersumme ist stetig differenzierbar
- Vereinfacht Optimierung (Ableitung, Extrem-Wert Bestimmung,...)

Was ist, wenn die Daten **nicht** linear erklärbar sind?



Was ist, wenn die Daten **nicht** linear erklärbar sind?



Funktionsklasse linearer Funktionen
reicht nicht immer aus!



Idee: Erweiterung auf komplexere Funktionen

Polynom d -ten Grades, ein-dimensionale Daten \mathbf{X} :

$$\begin{aligned} p(x) &= a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_dx^d \\ &= \sum_{i=0}^d a_i x_i^i = \mathbf{a}^T \mathbf{x} \end{aligned}$$

Idee: Erweiterung auf komplexere Funktionen

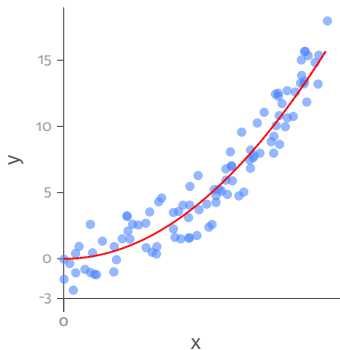
Polynom d -ten Grades, ein-dimensionale Daten \mathbf{X} :

$$\begin{aligned} p(x) &= a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_dx^d \\ &= \sum_{i=0}^d a_i x_i^i = \mathbf{a}^T \mathbf{x} \end{aligned}$$

Beispiel: Polynom q mit Parametern $\mathbf{a}^T = (17, 3, 2)$ ergibt

$$q(x) = 17 + 3x + 2x^2$$

Polynom 2-ten Grades



Generierte Daten und das Polynom $q(x) = 4x^2$

Polynome für Multiple Regression

Erweiterung auf mehrere Merkmale:

$$X_1, X_2 \Rightarrow X_1, X_2, X_1X_2, X_1^2, X_2^2$$

x_1	x_2
0.445	0.259
0.158	0.528
0.487	0.561
0.755	0.884
0.495	0.312



x_1	x_2	x_1x_2	x_1^2	x_2^2
0.445	0.259	0.115	0.198	0.067
0.158	0.528	0.083	0.025	0.278
0.487	0.561	0.274	0.237	0.315
0.755	0.884	0.668	0.571	0.781
0.495	0.312	0.154	0.245	0.097

Polynomielle Regression für mehrere Variablen/Merkmale

- Berechnung zusätzlicher Merkmale (Feature-Berechnung)
- Funktionsklasse linear in der Anzahl der Merkmale
- Optimierung wie bei normaler Regression

Polynomielle Regression für mehrere Variablen/Merkmale

- Berechnung zusätzlicher Merkmale (Feature-Berechnung)
- Funktionsklasse linear in der Anzahl der Merkmale
- Optimierung wie bei normaler Regression

Hinweis: So etwas ähnliches hatten wir schonmal – bei der SVM wurden die Daten nicht explizit transformiert, sondern lediglich das erforderliche Skalarprodukt in einem höherdimensionalen Raum berechnet (Kernel-Trick).

SciKit Learn enthält Funktion zur Merkmalsberechnung

```
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures

X = ... # read DataFrame
pre = PolynomialFeatures(degree=2)

# berechne neue Merkmale auf X:
Xpoly = pre.fit_transform(X)
```

Wichtig:

- Preprocessor: fit, transform, fit_transform
- SciKit Learn benutzt numpy statt Pandas DataFrames

SciKit Learn enthält Funktion zur Merkmalsberechnung

```
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures

X = ... # read DataFrame
pre = PolynomialFeatures(degree=2)

# berechne neue Merkmale auf X:
Xpoly = pre.fit_transform(X)
```

Wichtig:

- Preprocessor: fit, transform, fit_transform
- SciKit Learn benutzt numpy statt Pandas DataFrames

Wie funktioniert Preprocessing in SciKit-Learn?

SciKit Learn enthält Funktion zur Merkmalsberechnung

```
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures

X = ... # read DataFrame
pre = PolynomialFeatures(degree=2)

# berechne neue Merkmale auf X:
Xpoly = pre.fit_transform(X)
```

Wichtig:

- Preprocessor: fit, transform, fit_transform
- SciKit Learn benutzt numpy statt Pandas DataFrames

Wie funktioniert Preprocessing in SciKit-Learn? [Exkursion!](#)

Exkursion: Pre-Processing mit SciKit Learn

Vorverarbeitung - Data Pre-Processing

Pre-Processing dient der Vorbereitung von Daten z.B. für die Modellierung:

- Normalisierung, Filtern von Daten
- Ersetzen fehlender Werte, Umrechnungen
- Berechnung zusätzlicher Merkmale
- Binning, Encoding nicht-numerischer Werte

Vorverarbeitung - Data Pre-Processing

Pre-Processing dient der Vorbereitung von Daten z.B. für die Modellierung:

- Normalisierung, Filtern von Daten
- Ersetzen fehlender Werte, Umrechnungen
- Berechnung zusätzlicher Merkmale
- Binning, Encoding nicht-numerischer Werte

SciKit Learn enthält eine Reihe von Preprocessing Klassen, z.B.

- MinMaxScaler, StandardScaler
- PolynomialFeatures, OrdinalEncoder
- KBinsDiscretizer

Preprocessing Module in SciKit Learn haben drei Funktionen:

- `fit(data)`
- `transform(data)`
- `fit_transform(data)`

Mit `fit(data)` werden die Parameter für ein Modul bestimmt.

Preprocessing Module in SciKit Learn haben drei Funktionen:

- `fit(data)`
- `transform(data)`
- `fit_transform(data)`

Mit `fit(data)` werden die Parameter für ein Modul bestimmt.

Mit `transform(data)` werden die Daten transformiert.

Preprocessing Module in SciKit Learn haben drei Funktionen:

- `fit(data)`
- `transform(data)`
- `fit_transform(data)`

Mit `fit(data)` werden die Parameter für ein Modul bestimmt.

Mit `transform(data)` werden die Daten transformiert.

`fit_transform(data)` macht beides in einem Schritt.

Beispiel: Min-Max Skalierung

Alle numerischen Attribute werden auf das Interval $[0, 1]$ skaliert.

```
# Parameter bestimmen (fit):  
x_min = min(df['x'])  
x_max = max(df['x'])  
  
# Daten transformieren (transform):  
df['x'] = (df['x'] - x_min) / (x_max - x_min)
```

Data Science 1: Übungsblatt 6, Aufgabe 2 und Foliensatz 6, Folien 26+27

Beispiel: Min-Max Skalierung

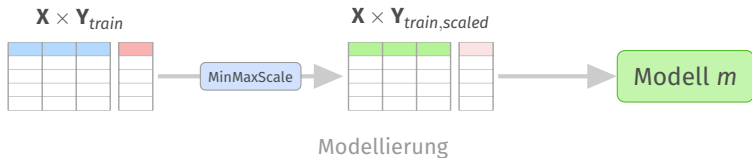
Alle numerischen Attribute werden auf das Interval $[0, 1]$ skaliert.

```
# Parameter bestimmen (fit):  
x_min = min(df['x'])  
x_max = max(df['x'])  
  
# Daten transformieren (transform):  
df['x'] = (df['x'] - x_min) / (x_max - x_min)
```

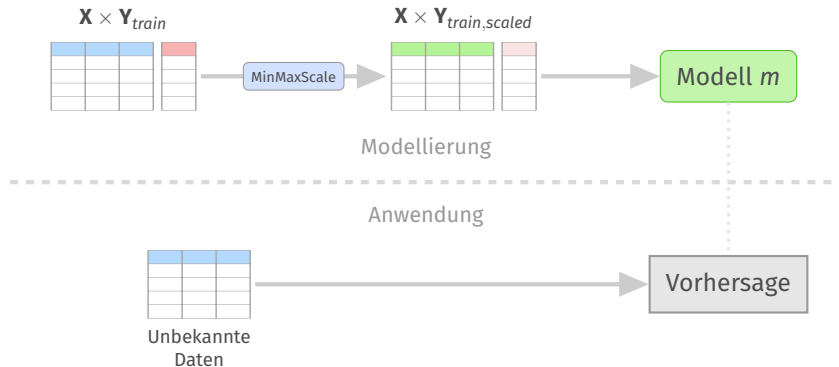
Data Science 1: Übungsblatt 6, Aufgabe 2 und Foliensatz 6, Folien 26+27

Die Parameter brauchen wir, wenn wir später Daten nochmal **auf die gleiche Weise** vorverarbeiten müssen!

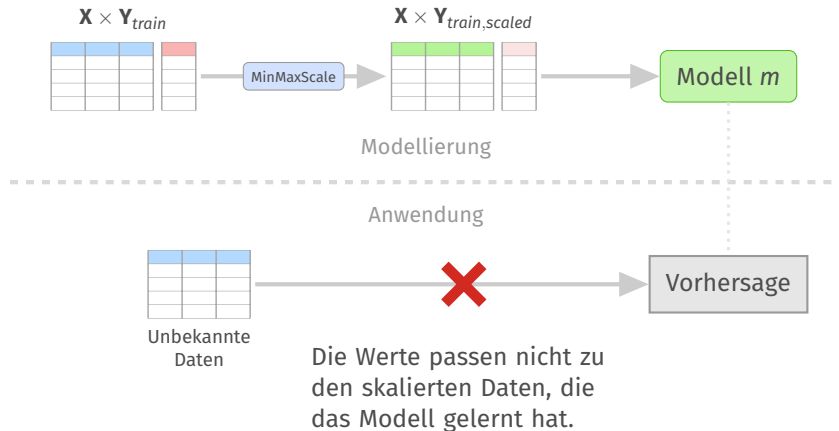
Beispiel: Min-Max Skalierung



Beispiel: Min-Max Skalierung



Beispiel: Min-Max Skalierung



Beispiel: Min-Max Skalierung



Modellierung

Anwendung



Skalierung muss mit den gleichen Parametern erfolgen wie im Training!

Min-Max Skalierung mit SciKit Learn

```
from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler

df = ... # read DataFrame

scaler = MinMaxScaler()
scaler.fit(df)

# scaler hat jetzt die min/max Werte gelernt:
scaler.data_max_
scaler.data_min_
```

Problem: SciKit Learn arbeitet auf NumPy Arrays

NumPy Arrays sind effiziente Datenstruktur aus numpy:

- Liste von Zeilen, jede Zeile ist Liste von Werten
- nur numerische Werte erlaubt
- Keine Verwaltung von "Spaltennamen" wie bei DataFrame
- Aus NumPy Array lässt sich leicht ein DataFrame machen

```
tf = scaler.transform(df)
# ergibt:
# array([[0.347, 0.613], [0.292, 0.586],...])
```

Min-Max Skalierung mit DataFrame Output

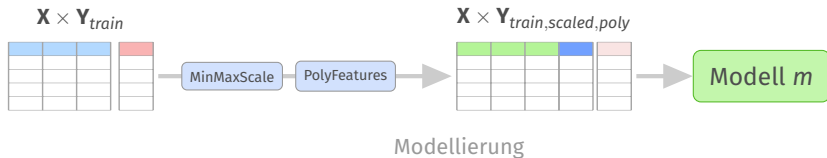
Im Folgenden sei df ein DataFrame mit numerischen Spalten:

```
# MinMax Scaler anpassen/trainieren
scaler = MinMaxScaler()
scaler.fit(df)

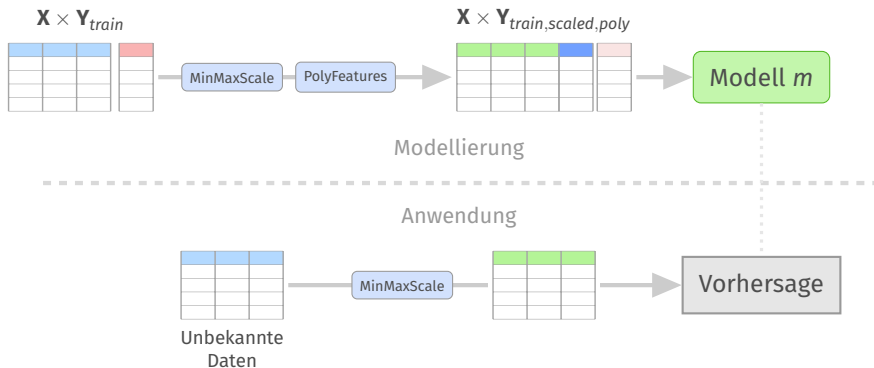
# Daten transformieren
norm_data = scaler.transform(df)

# DataFrame aus numpy-Array erzeugen - mit
# den Spaltennamen von df
norm_df = pd.DataFrame(norm_data, columns=df.columns)
```

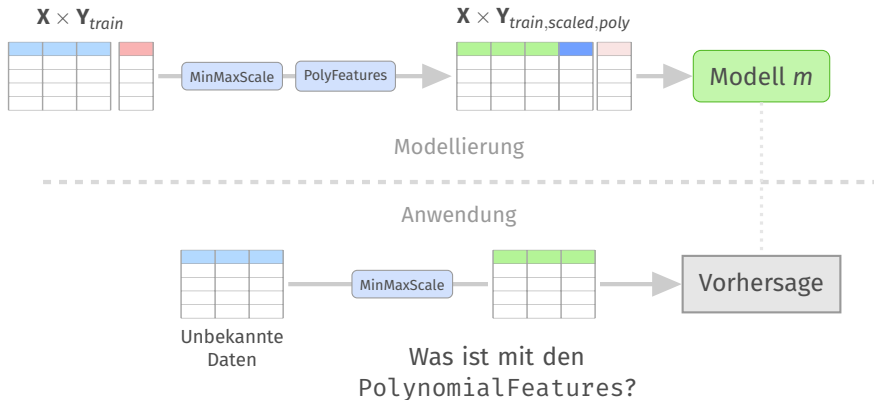
Beispiel: Min-Max Skalierung, Polynomial Regression



Beispiel: Min-Max Skalierung, Polynomial Regression



Beispiel: Min-Max Skalierung, Polynomial Regression



Pipeline: Mehrere Pre-Processing Schritte zusammengefasst

```
from sklearn.preprocessing ...
from sklearn.pipeline import Pipeline
from sklearn.pipeline import make_pipeline

# Pipeline mit 2 Schritten:
scaler = MinMaxScaler()
poly = PolynomialFeatures(degree=4)

pipeline = Pipeline([('Scaling', scaler), ('Features',
                                           ,poly)])

# kurz:
pipeline = make_pipeline(scaler, poly)
```

Pipeline ist selbst wieder Preprocessor

Pipeline definieren und Schritte anpassen/anwenden:

```
# alle Schritte anpassen  
pipeline.fit(data)  
  
# alle Schritte anwenden  
transformed = pipeline.transform(data)
```



◀ Probieren Sie es im Notebook aus!

Notebook: [Vorlesung/V2-2-MinMaxScaling_sklearn.ipynb](#)

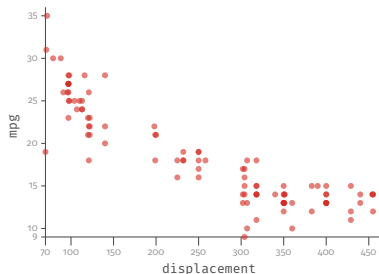
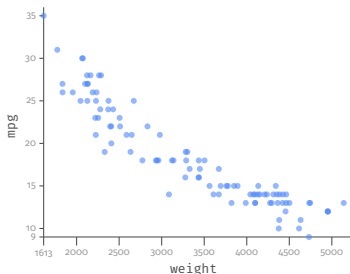
Ende der Exkursion

Zurück zur Polynomiellen Regression



Beispiel: Auto MPG Datensatz

Kraftstoffverbrauch von Autos (in *miles per gallon*)



Lineare Regression auf x_{weight} , $x_{displacement}$ führt zu

$$Err_{mae} \approx 3.28, R^2\text{-Score} \approx 0.572$$

Beispiel: Auto MPG Datensatz

```
df = pd.read_csv(...)

X = df[['displacement', 'weight']]
Y = df[['mpg']]

poly = PolynomialFeatures(degree=2)
print(poly.get_feature_names())
# ['1', 'x0', 'x1', 'x0^2', 'x0 x1', 'x1^2']

Xtrans = pd.DataFrame(X, poly.get_feature_names())

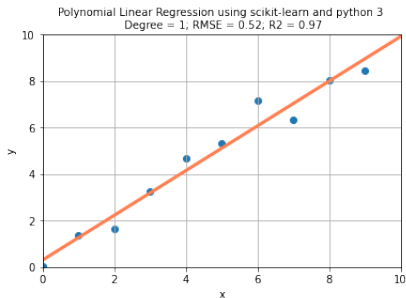
model = LinearRegression()
model.fit(Xtrans, Y)
```

Hinweis:

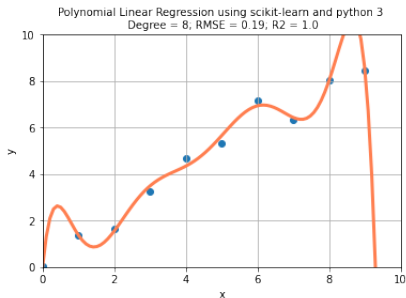
- Konvertierung in DataFrame `Xt` rans nicht zwingend notwendig
- SciKit-Learn Modelle arbeiten auch mit numpy Arrays
- DataFrame wird hier verwendet um die bekannten Methoden auf den transformierten Daten weiterhin benutzen zu können.

Overfitting + Risiko-Minimierung

Optimierung auf geringen Trainingsfehler

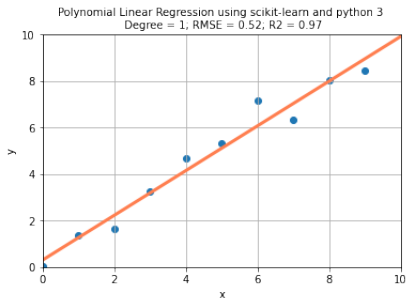


$Err_{rmse} = 0.52$
Niedrige Komplexität

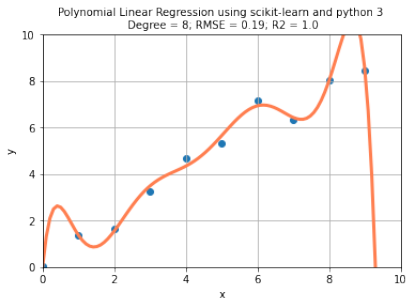


$Err_{rmse} = 0.19$
Hohe Komplexität

Optimierung auf geringen Trainingsfehler



$Err_{rmse} = 0.52$
Niedrige Komplexität



$Err_{rmse} = 0.19$
Hohe Komplexität

Frage: Welches ist das bessere Modell?

Expected Prediction Error

Gehen wir davon aus, dass es die wahre Funktion f gibt, die unsere Daten erzeugt:

$$Y = f(X) + \epsilon$$

ϵ beschreibt Rauschen in den Daten.

Der **erwartete Fehler** unseres Modells \hat{f} ist nun

$$Err_{exp}(x) = E \left[(Y - \hat{f}(x))^2 \right]$$

Fehler besteht aus **Verzerrung** und **Varianz**

Der erwartete Fehler lässt sich aufteilen in Verzerrung (Bias) und Varianz:

$$\begin{aligned} Err_{exp}(x) &= E \left[(Y - \hat{f}(x))^2 \right] \\ &= \left(E \left[\hat{f}(x) \right] - f(x) \right)^2 + E \left[\left(\hat{f}(x) - E \left[\hat{f}(x) \right] \right)^2 \right] + \sigma_\epsilon^2 \\ &= \text{Bias}(\hat{f})^2 + \text{Var}(\hat{f}) + \text{unvermeidbarer Fehler} \end{aligned}$$

Bias und Varianz

Bias von \hat{f}

- beschreibt den durchschnittlichen Abstand zur Wahrheit
- Wie gut passt \hat{f} im Mittel zum wahren Wert?
- Kann unser Modell die Wahrheit überhaupt erreichen?

Varianz von \hat{f}

- Beschreibt die Streuung unseres Modells \hat{f}
- Wie konstant sagt \hat{f} das richtige y vorher?

Bias und Varianz

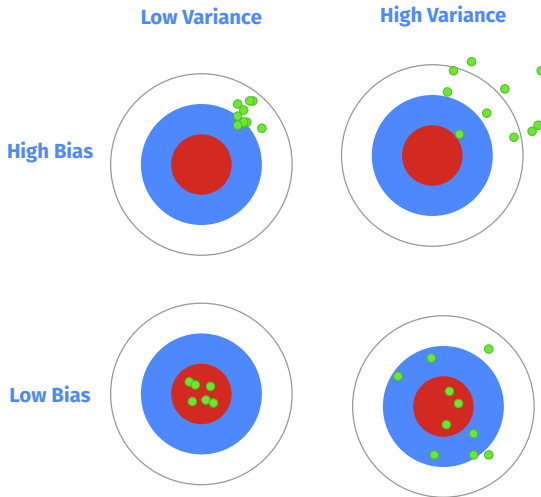
Bias von \hat{f}

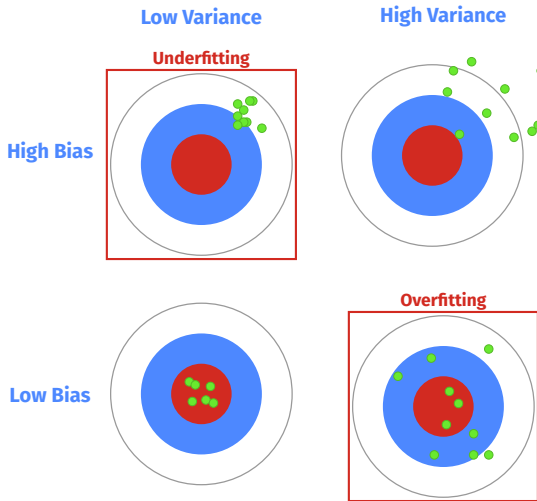
- beschreibt den durchschnittlichen Abstand zur Wahrheit
- Wie gut passt \hat{f} im Mittel zum wahren Wert?
- Kann unser Modell die Wahrheit überhaupt erreichen?

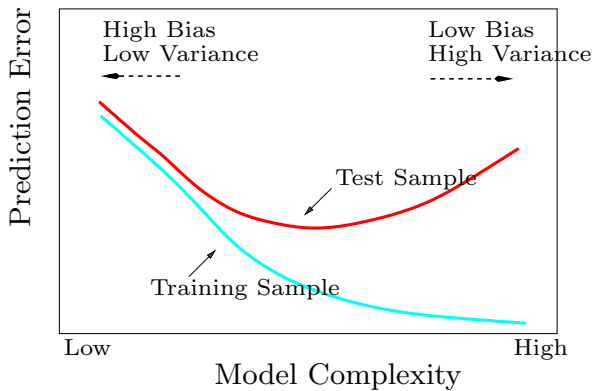
Varianz von \hat{f}

- Beschreibt die Streuung unseres Modells \hat{f}
- Wie konstant sagt \hat{f} das richtige y vorher?

Wir suchen eine gute Balance zwischen Bias und Varianz.







Wie kontrollieren wir die Balance?

- Hohe Modell-Komplexität führt zu niedrigem Bias, hoher Varianz
- Niedrige Modell-Komplexität zu hohem Bias, niedriger Varianz

Modell-Komplexität

Modell-Komplexität ergibt sich z.B. aus

- dem Grad der Polynome (Regression)
- der Tiefe von Bäumen

Wie kontrollieren wir die Modell-Komplexität?

Maß für Modell-Komplexität in Fehler-Funktion aufnehmen:

$$\arg \min_{\mathbf{w}} \underbrace{\sum_{\mathbf{x}, y} (y - f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}))^2}_{\text{Fehler}} + \lambda \underbrace{C(f_{\mathbf{w}})}_{\text{Komplexität}}$$

Parameter λ steuert Schwerpunkt (Fehler vs. Modellkomplexität)

Idee: Wenn w viele Nullen hat \rightarrow geringe Komplexität

Wir können die Modellkomplexität an w "ablesen":

$$w' = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \\ 1 \\ 8 \\ 31 \\ 19 \end{pmatrix}$$

$$4 + x^2 + 8x^3 + 31x^4 + 19x^5$$

$$w'' = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 4 \\ 0 \\ 0 \\ 19 \end{pmatrix}$$

$$4x^2 + 19x^5$$

Idee: Wenn w viele Nullen hat \rightarrow geringe Komplexität

Wir können die Modellkomplexität an w "ablesen":

$$w' = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \\ 1 \\ 8 \\ 31 \\ 19 \end{pmatrix}$$

$$4 + x^2 + 8x^3 + 31x^4 + 19x^5$$

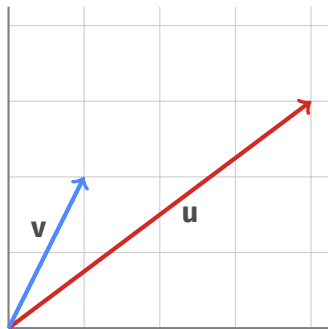
$$w'' = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 4 \\ 0 \\ 0 \\ 19 \end{pmatrix}$$

$$4x^2 + 19x^5$$

Statt Nullen sind auch viele kleine Werte gut, dann beeinflussen viele Komponenten die Funktion nicht so stark.

Frage: Wann hat ein Vektor w viele kleine Werte?

Norm eines Vektors v entspricht der Länge von v



$$\|v\| = 2.235$$

$$\|u\| = 5.0$$

Data Science 1: Foliensatz 7, Folie 9 und Übungsblatt 7

Regularisierung der Modellkomplexität

Modellkomplexität von $f_{\mathbf{w}}$ über Parametervektor \mathbf{w} messen:

$$\|\mathbf{w}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^p w_i^2}$$

Regularisierung der Modellkomplexität

Modellkomplexität von $f_{\mathbf{w}}$ über Parametervektor \mathbf{w} messen:

$$\|\mathbf{w}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^p w_i^2}$$

Beispiel: Ridge Regression

Optimierungsfunktion der Ridge Regression:

$$\arg \min_{\mathbf{w}} \left\{ \sum_{i=1}^n (y_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)^2 + \lambda \sum_{i=1}^p w_i^2 \right\}$$

$\|\mathbf{w}\|_2^2$ als Komplexitätsmaß (quadrierte L_2 -Norm)

Weiteres Beispiel: Lasso Regression

L_1 -Norm (=Betrag) als Modellkomplexität

$$L_1(\mathbf{w}) = \|\mathbf{w}\|_1 = \sum_{i=1}^p |w_i|$$

führt zu folgender Optimierungsfunktion:

$$\arg \min_{\mathbf{w}} \left\{ \sum_{i=1}^n (y_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)^2 + \lambda \sum_{i=1}^p |w_i| \right\}$$