Data Science 2

Lineare Regression

Prof. Dr. Christian Bockermann

Hochschule Bochum

Wintersemester 2023 / 2024

Inhalt

Regression

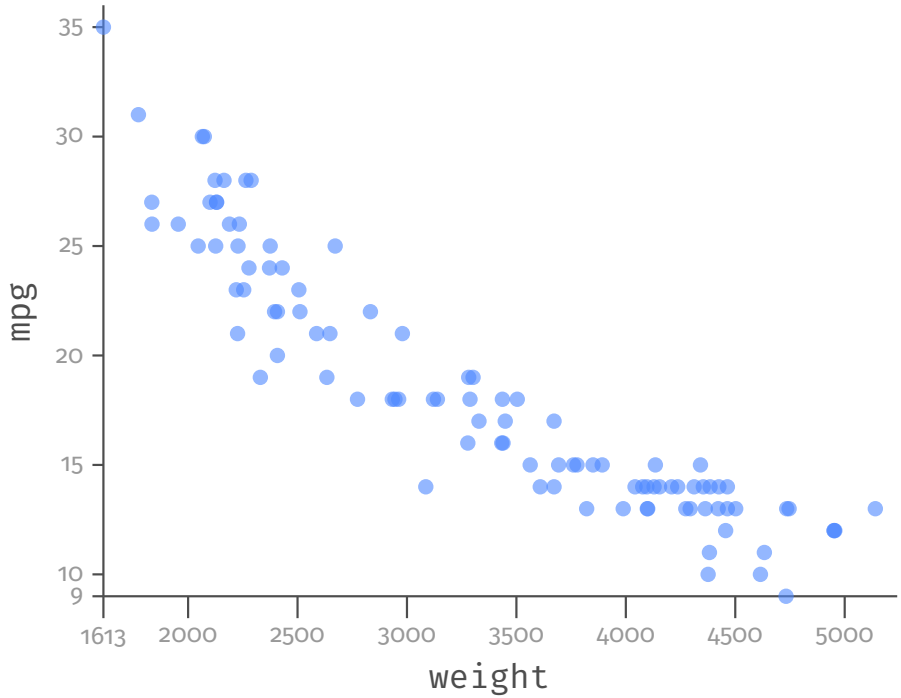
Datensatz: Auto-MPG

mpg	cylinders	displacement	horsepower	weight	acceleration	model year
18	8	307	130	3504	12	70
15	8	350	165	3693	11.500	70
18	8	318	150	3436	11	70
16	8	304	150	3433	12	70
17	8	302	140	3449	10.500	70
15	8	429	198	4341	10	70

Daten von Autos inkl. Verbrauch:

- mpg - *Mileage per Gallon*
- Wieviele Meilen fährt das Auto mit 1 Gallone Sprit?
- 1 Gallone = 4.546 Liter

Zusammenhang zwischen Gewicht und Verbrauch?



Regression liefert reellwertige Vorhersagen

- Für Regression gilt $\mathcal{Y} = \mathbb{R}$
- Menge $\mathbf{X} \times \mathbf{y}$, d.h. jedem Beispiel x_i ist ein $y_i \in \mathbb{R}$ zugeordnet
- Qualitätsfunktion $q : (\mathcal{X} \times \mathcal{Y}) \times (\mathcal{X} \to \mathcal{Y}) \to \mathbb{R}$

Ziel:

- Finde Modell

$$f : \mathcal{X} \to \mathcal{Y},$$

  das die Qualitätsfunktion optimiert.

Regression liefert reellwertige Vorhersagen

- Für Regression gilt $\mathcal{Y} = \mathbb{R}$
- Menge $\mathbf{X} \times \mathbf{y}$, d.h. jedem Beispiel x_i ist ein $y_i \in \mathbb{R}$ zugeordnet
- Qualitätsfunktion $q : (\mathcal{X} \times \mathcal{Y}) \times (\mathcal{X} \to \mathcal{Y}) \to \mathbb{R}$

Ziel:

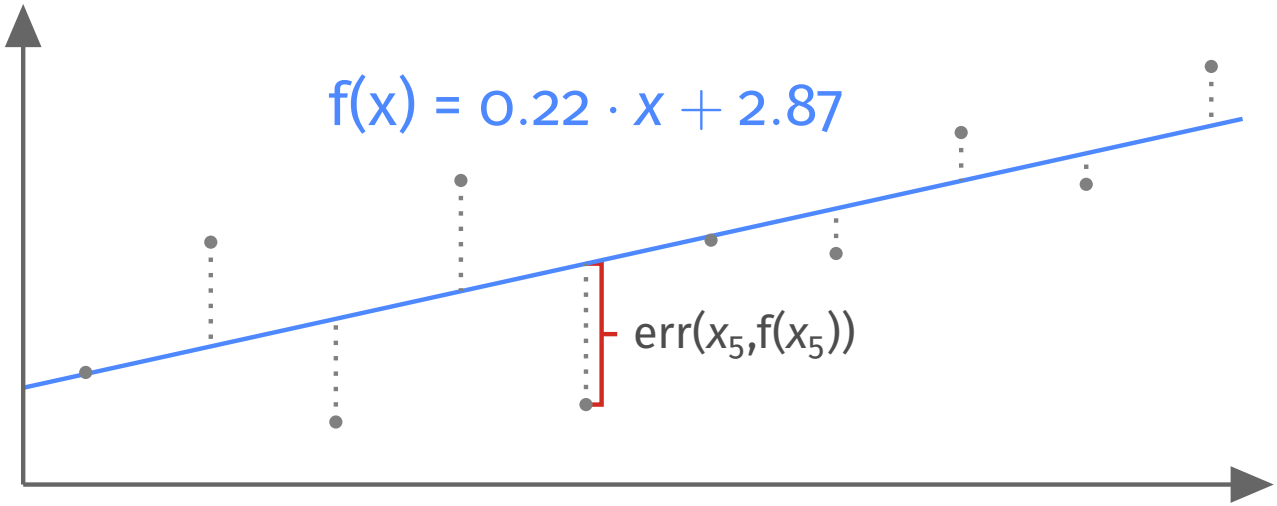
- Finde Modell

$$f : \mathcal{X} \to \mathcal{Y},$$

  das die Qualitätsfunktion optimiert.

Auch hier wieder: Lernen als Optimierungsproblem!

Beispiel: Regression

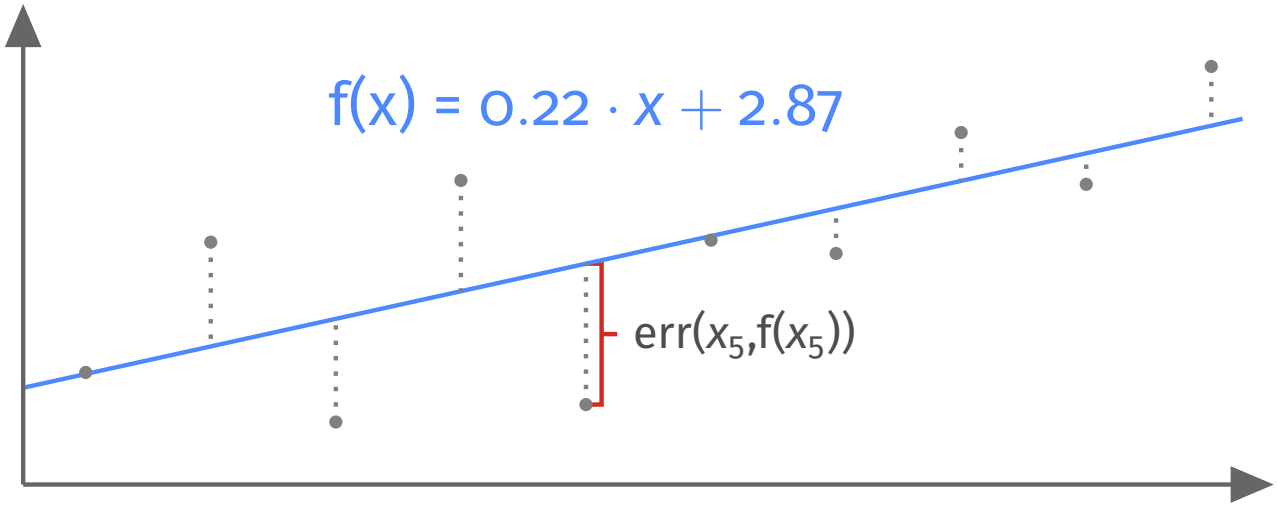


Qualitätsfunktion:

Summe der Abstände von $f(x)$ zu den "richtigen" Werten

$$q(X,f) = \sum_{(x,y)\in X} (y - f(x))^2 = RSS(X,f)$$

Beispiel: Regression



Qualitätsfunktion:

Summe der Abstände von $f(x)$ zu den "richtigen" Werten

$$q(X,f) = \sum_{(x,y)\in X} (y - f(x))^2 = \boxed{RSS(X,f)}$$

Residual Sum of Squares

Regression mit linearen Funktionen

Daten gegeben als Tabelle

x	y
1	3.105
2	4.147
3	2.709
4	4.640
5	2.848
6	4.163
7	4.056
8	5.023
9	4.609
10	5.551

Gesucht: lineare Funktion als Vorhersage Modell, z.B.

$$y = m \cdot x + b$$

Einfache lineare Regression

Problem ist Gleichungssystem mit n Unbekannten:

$$y_i = m \cdot x_i + b$$

Schätzung der Regressionskoeffizienten:

$$m = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} \quad (1)$$

$$b = \bar{y} - m \cdot \bar{x} \quad (2)$$

Vorheriges Beispiel in Matrix-Notation ergibt

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ 10 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3.105 \\ 4.147 \\ \vdots \\ 5.551 \end{pmatrix}$$

Dies führt zu folgender Formulierung des Optimierungsproblems:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} ||\mathbf{Ax} - \mathbf{y}||$$

SciKit Learn enthält Lineare Regression

```
from sklearn.linear_model import LinearRegression

df = ...  # load dataframe
X = df['x']   # -> Series Objekt!!
y = df['y']

model = LinearRegression()
model.fit(X, y)
```

SciKit Learn enthält Lineare Regression

```
from sklearn.linear_model import LinearRegression

df = ...  # load dataframe
X = df['x']   # -> Series Objekt!!
y = df['y']

model = LinearRegression()
model.fit(X, y)
```

Führt zu Fehler: LinearRegression benötigt Matrix/DataFrame!

SciKit Learn enthält Lineare Regression

```
df = ...  # load dataframe
X = df[['x']]   # -> DataFrame Objekt!!
y = df['y']

model = LinearRegression()
model.fit(X, y)
```

Wichtig:

```
X = df[['x']]
```

statt

```
X = df['x']
```

SciKit Learn enthält Lineare Regression

```
from sklearn.linear_model import LinearRegression

df = ...          # load dataframe
X = df[['x']]  # Konstante hinzufuegen fuer 'b'
y = df['y']

model = LinearRegression()
model.fit(X, y)
```

Gelernte Modell-Parameter:

```
m = model.coef_[0]
b = model.intercept_
```

Fehlermaße – Wie gut ist unser lineares Modell?

Abstand zwischen Vorhersage und Wahrheit:

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

Fehlermaße – Wie gut ist unser lineares Modell?

Abstand zwischen Vorhersage und Wahrheit:

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

Was, wenn sich Fehler gegenseitig “korrigieren”?

Betrag liefert absolute error:

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

Fehlermaße – Mean Squared Error

Betrag ist unstetig – problematisch bei Optimierung, daher:

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

Quadrat verzerrt die Fehlereinschätzung etwas: `root mean squared error`

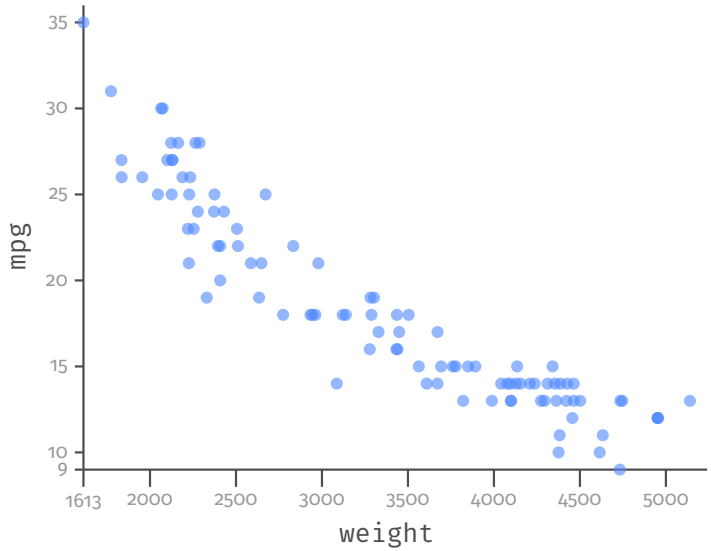
$$Err_{rmse} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - y_i)^2}$$

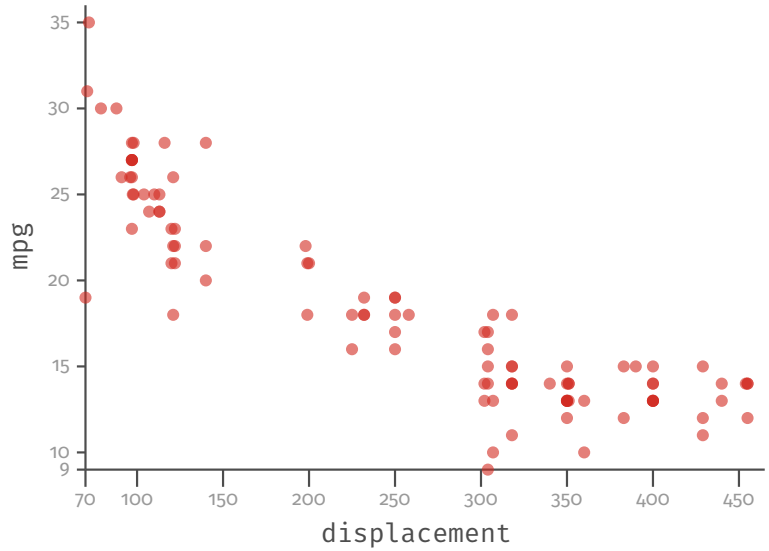
SciKit Learn: `sklearn.metrics.mean_squared_error`

```python
from sklearn.metrics import mean_squared_error

yhat = model.predict(xs)
err_mse = mean_squared_error(y, yhat)

# root mean squared error:
err_rmse = mean_squared_error(y, yhat, squared=False)
```

Multiple Lineare Regression

Zusammenhang zwischen Gewicht, Hubraum und Verbrauch?





Regression auf mehreren Variablen

Werden pro Datensatz p Merkmale gemessen, ergibt sich z.B.

$$\begin{aligned} x_{1,1}m_1 + x_{1,2}m_2 + \ldots + x_{1,p}m_p &= y_1 \\ x_{2,1}m_1 + x_{2,2}m_2 + \ldots + x_{2,p}m_p &= y_2 \\ \vdots &= \vdots \\ x_{n,1}m_1 + x_{n,2}m_2 + \ldots + x_{n,p}m_p &= y_n \end{aligned}$$

Dabei ist $x_{i,j}$ das j-te Merkmal des i-ten Datensatzes

Regression auf mehreren Variablen – Kundendaten

Werden pro Datensatz p Merkmale gemessen, ergibt sich z.B.

$$\begin{aligned} k_{1,discount} m_1 + k_{1,sport} m_2 + \ldots + k_{1,luxus} m_p &= y_1 \\ k_{2,discount} m_1 + k_{2,sport} m_2 + \ldots + k_{2,luxus} m_p &= y_2 \\ \vdots &= \vdots \\ k_{n,discount} m_1 + k_{n,sport} m_2 + \ldots + k_{n,luxus} m_p &= y_n \end{aligned}$$

Dabei ist $k_{i,j}$ das j-Eigenschaft von Kunde i, z.B. die Discount-Affinität, Vorliebe für Sport, Marke Luxus, usw.

Regression auf mehreren Variablen

discount	sport	fashion	beauty
0.683	0.130	0.370	0.350
0.107	0.080	0.300	0.410
0.419	0.060	0.240	0.510
0.119	0.130	0.320	0.360
0.825	0.160	0.340	0.350

$\cdot$

m_1
m_2
m_3
m_4

$=$

sales
2290
2782
7869
3976
3598

$$A \quad x = y$$

Regression auf mehreren Variablen

discount	sport	fashion	beauty
0.683	0.130	0.370	0.350
0.107	0.080	0.300	0.410
0.419	0.060	0.240	0.510
0.119	0.130	0.320	0.360
0.825	0.160	0.340	0.350

$\cdot$

m_1
m_2
m_3
m_4

$=$

sales
2290
2782
7869
3976
3598

$$A \quad x = y$$

Regression auf mehreren Variablen

discount	sport	fashion	beauty
0.683	0.130	0.370	0.350
0.107	0.080	0.300	0.410
0.419	0.060	0.240	0.510
0.119	0.130	0.320	0.360
0.825	0.160	0.340	0.350

$\cdot$

m_1
m_2
m_3
m_4

$=$

sales
2290
2782
7869
3976
3598

A **x** = **y**

Regression auf mehreren Variablen

discount	sport	fashion	beauty
0.683	0.130	0.370	0.350
0.107	0.080	0.300	0.410
0.419	0.060	0.240	0.510
0.119	0.130	0.320	0.360
0.825	0.160	0.340	0.350

$\cdot$

m_1
m_2
m_3
m_4

$=$

sales
2290
2782
7869
3976
3598

A **x** = **y**

Regression auf mehreren Variablen

discount	sport	fashion	beauty
0.683	0.130	0.370	0.350
0.107	0.080	0.300	0.410
0.419	0.060	0.240	0.510
0.119	0.130	0.320	0.360
0.825	0.160	0.340	0.350

$\cdot$

m_1
m_2
m_3
m_4

$=$

sales
2290
2782
7869
3976
3598

$$\mathbf{A} \quad \mathbf{x} = \mathbf{y}$$

Ürsprüngliches Problem

$$\mathbf{A}\,\mathbf{x} = \mathbf{y}$$

A und **y** als Trainingsdaten vorhanden

$$\begin{aligned} & \mathbf{A}\,\mathbf{x} && = \mathbf{y} \\ \Leftrightarrow\ & \mathbf{A}^T\mathbf{A}\,\mathbf{x} && = \mathbf{A}^T\,\mathbf{y} \\ \Leftrightarrow\ & \mathbf{x} && = (\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\,\mathbf{y} \end{aligned}$$

Analytisch lösbar, falls $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ invertierbar.
Verschiedene Approximationsverfahren bei nicht-Invertierbarkeit

SciKit Learn unterstützt Multi-Regression

```
df = pd.read_csv("data/auto-mpg.csv")

X = df[['weight', 'displacement', 'cylinders', '
                                acceleration']]
y = df['mpg']

model = LinearRegression()
model.fit(X, y)

yhat = model.predict(X)
err_mse = mean_squared_error(y, yhat)
```

◀ Notebook: Kurs/DataScience2/V2-1-LinReg

Trainings- und Test-Fehler betrachten!

- Gezeigte Schritte berechnen den Test-Fehler
- Train/Test-Split wie bei Klassifikation!
- Auch Regression kann in Overfitting enden!