Data Science 2

Regressionsverfahren

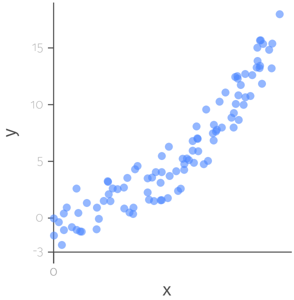
Prof. Dr. Christian Bockermann

Hochschule Bochum

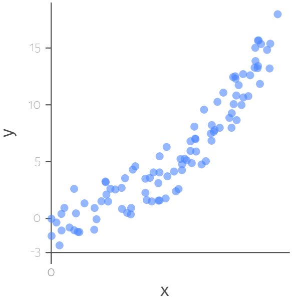
Sommersemester 2025

Inhalt

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

$$
\begin{aligned}
p(x) &= a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_d x^d \\
&= \sum_{i=0}^{d} a_i x_i^i = \mathbf{a}^T \mathbf{x}
\end{aligned}
$$

Idee: Erweiterung auf komplexere Funktionen

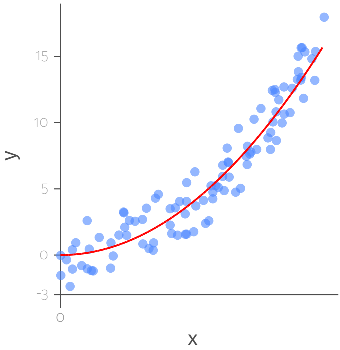
Polynom $\boldsymbol{d}$-ten Grades, ein-dimensionale Daten $\mathbf{X}$:

$$\begin{aligned} p(x) &= a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_d x^d \\ &= \sum_{i=0}^{d} a_i x_i^i = \mathbf{a}^T \mathbf{x} \end{aligned}$$

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

```python
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

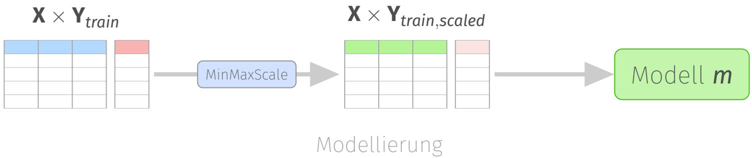
Alle numerischen Attribute werden auf das Interval [0, 1] skaliert.

```
# 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)
```

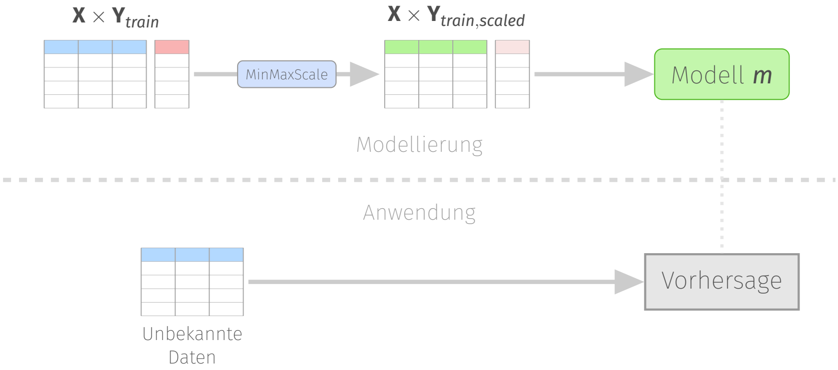
Data Science 1: Übungsblatt 6, Aufgabe 2 und Foliensatz 6, Folien 26+27

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

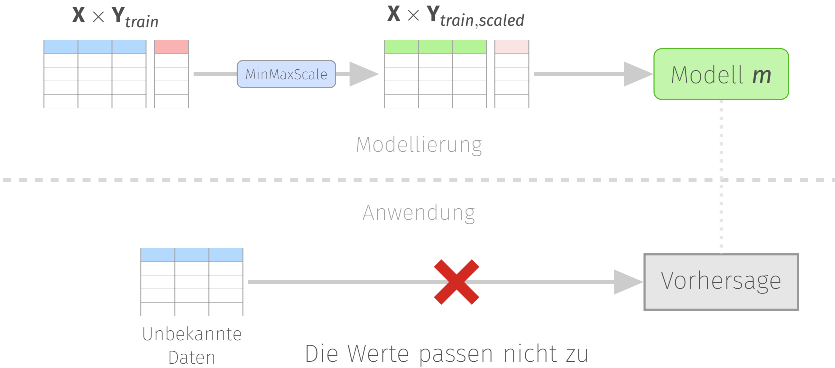
Beispiel: Min-Max Skalierung



Beispiel: Min-Max Skalierung

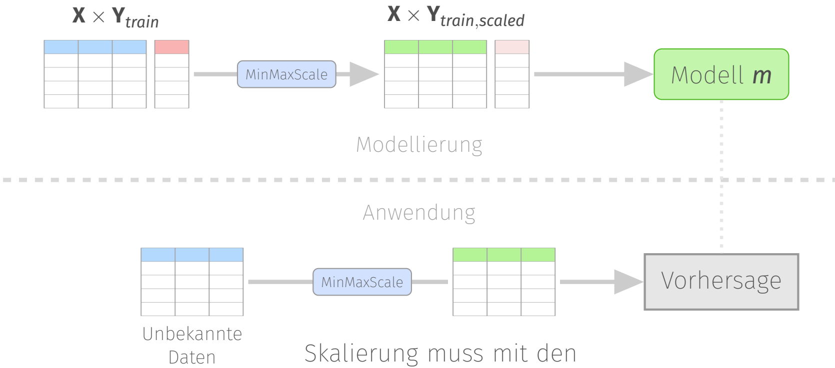


Beispiel: Min-Max Skalierung



Die Werte passen nicht zu den skalierten Daten, die das Modell gelernt hat.

Beispiel: Min-Max Skalierung



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

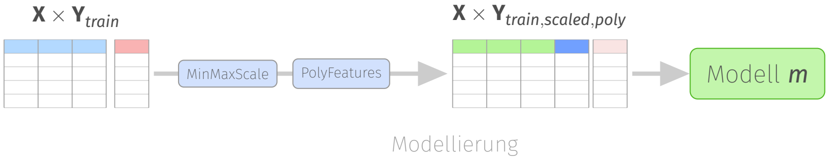
```
tf = scaler.transform(df)
# ergibt:
# array( [[0.347, 0.613], [0.292, 0.586],...])
```

Min-Max Skalierung mit DataFrame Output

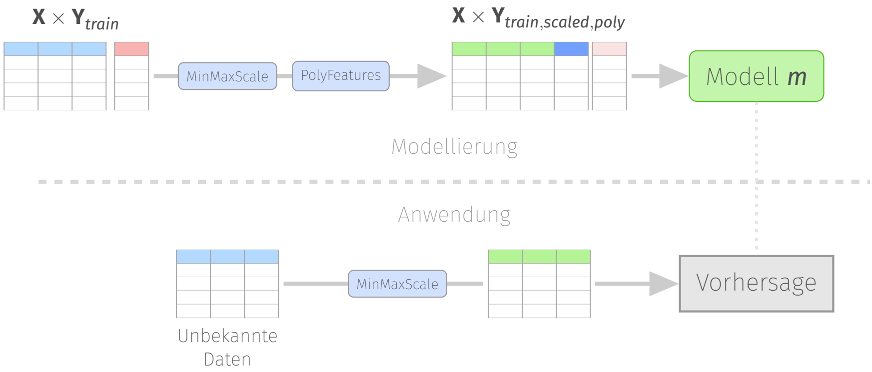
Im Folgenden sei `df` ein DataFrame mit numerischen Spalten:

```
# 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)
```

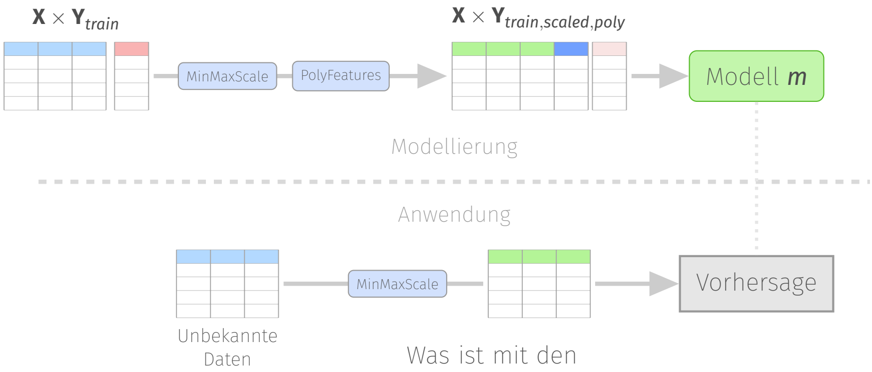
Beispiel: Min-Max Skalierung, Polynomial Regression



Beispiel: Min-Max Skalierung, Polynomial Regression



Beispiel: Min-Max Skalierung, Polynomial Regression



Was ist mit den `PolynomialFeatures`?

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)
```

Hochschule Bochum
Bochum University
of Applied Sciences

Probieren Sie es im Notebook aus!

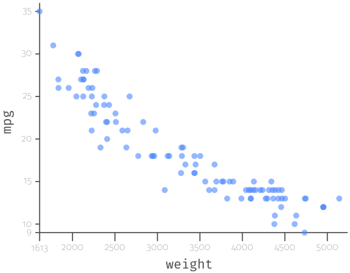
Notebook: Vorlesung/V2-2-MinMaxScaling_sklearn.ipynb

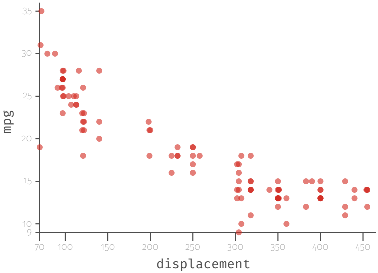
Ende der Exkursion

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

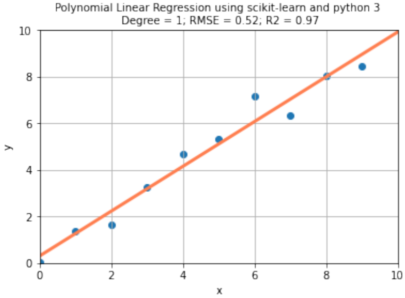
```
df = pd.read_csv(...)

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

poly = PolynomialFeatures(degree=2)
Xtrans = poly.fit_transform(X)

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 `Xtrans` 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.

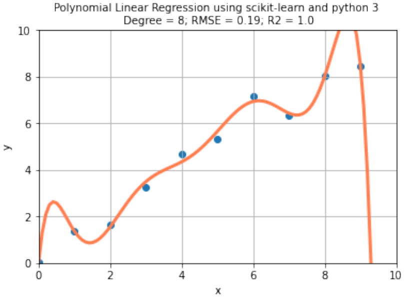
Overfitting + Risiko-Minimierung

Optimierung auf geringen Trainingsfehler



$Err_{rmse} = 0.52$

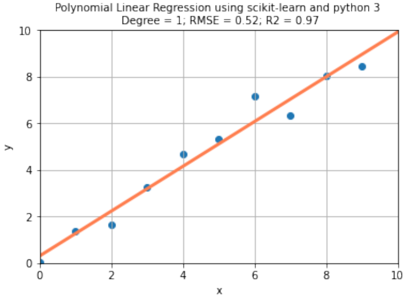
Niedrige Komplexität



$Err_{rmse} = 0.19$

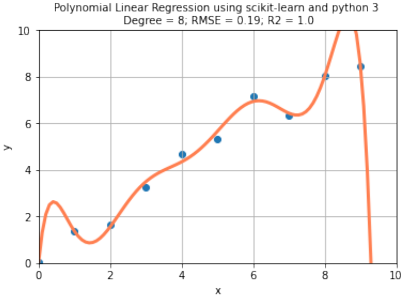
Hohe Komplexität

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:

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

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 unserers Modells $\hat{f}$
- Wie konstant sagt $\hat{f}$ das richtige y vorher?

Bias und Varianz

Bias von $\hat{f}$

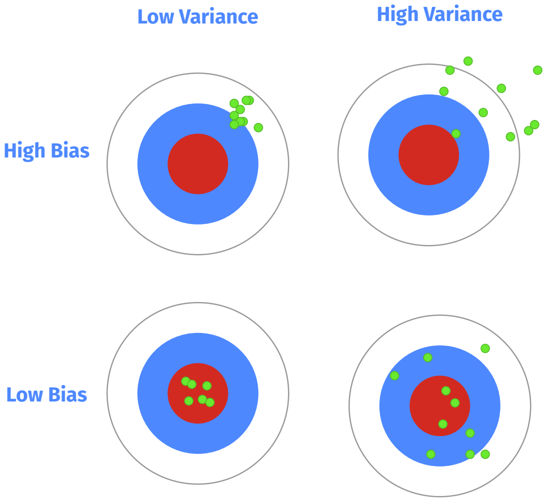
- beschreibt den durchschnittlichen Abstand zur Wahrheit
- Wie gut passt $\hat{f}$ im Mittel zum wahren Wert?
- Kann unser Modell die Wahrheit überhaupt erreichen?

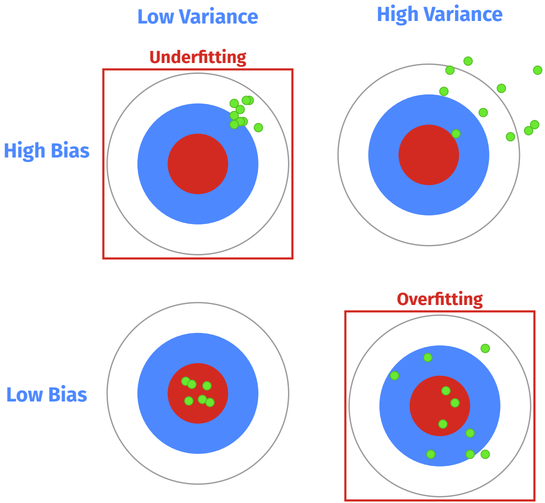
Varianz von $\hat{f}$

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

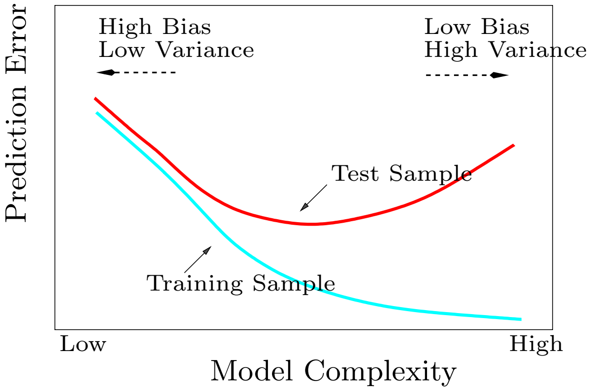
Wir suchen eine gute Balance zwischen Bias und Varianz.

Bias / Variance Decomposition




Low Variance
High Variance
Underfitting
High Bias
Overfitting
Low Bias

Bias / Variance Decomposition



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”:

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

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

Idee: Wenn w viele Nullen hat $\rightarrow$ geringe Komplexität

Wir können die Modellkomplexität an **w** "ablesen":

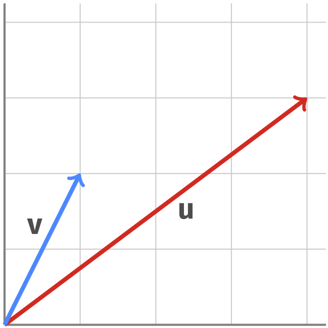
$$\mathbf{w}' = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \\ 1 \\ 8 \\ 31 \\ 19 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{w}'' = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 4 \\ 0 \\ 0 \\ 19 \end{pmatrix}$$

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

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:

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