11.05.21

Einführung in Data Science und maschinelles Lernen mit R

Einführung in maschinelles Lernen

OPENCAMPUS.sh

- Aufbau eines maschinellen Lernalgorithmus
- Definition der linearen Regression
- Kostenfunktionen
- Optimierungsfunktionen
- Overfitting
- Regularisierung

Wahl eines Prognosemodells

Teilung der Daten in Trainings- (70%), Validierungs- (20%) und Testdatensatz (10%)

Optimierung der Modellparameter anhand des Trainingsdatensatzes

Optimierung der Hyperparameter anhand des Validierungsdatensatzes

Erweiterung/Verbesserung des Datensatzes

Überprüfung der Modellqualität anhand des Testdatensatzes

Verändern der Hyper-parameter

Verändern der Input-Variablen

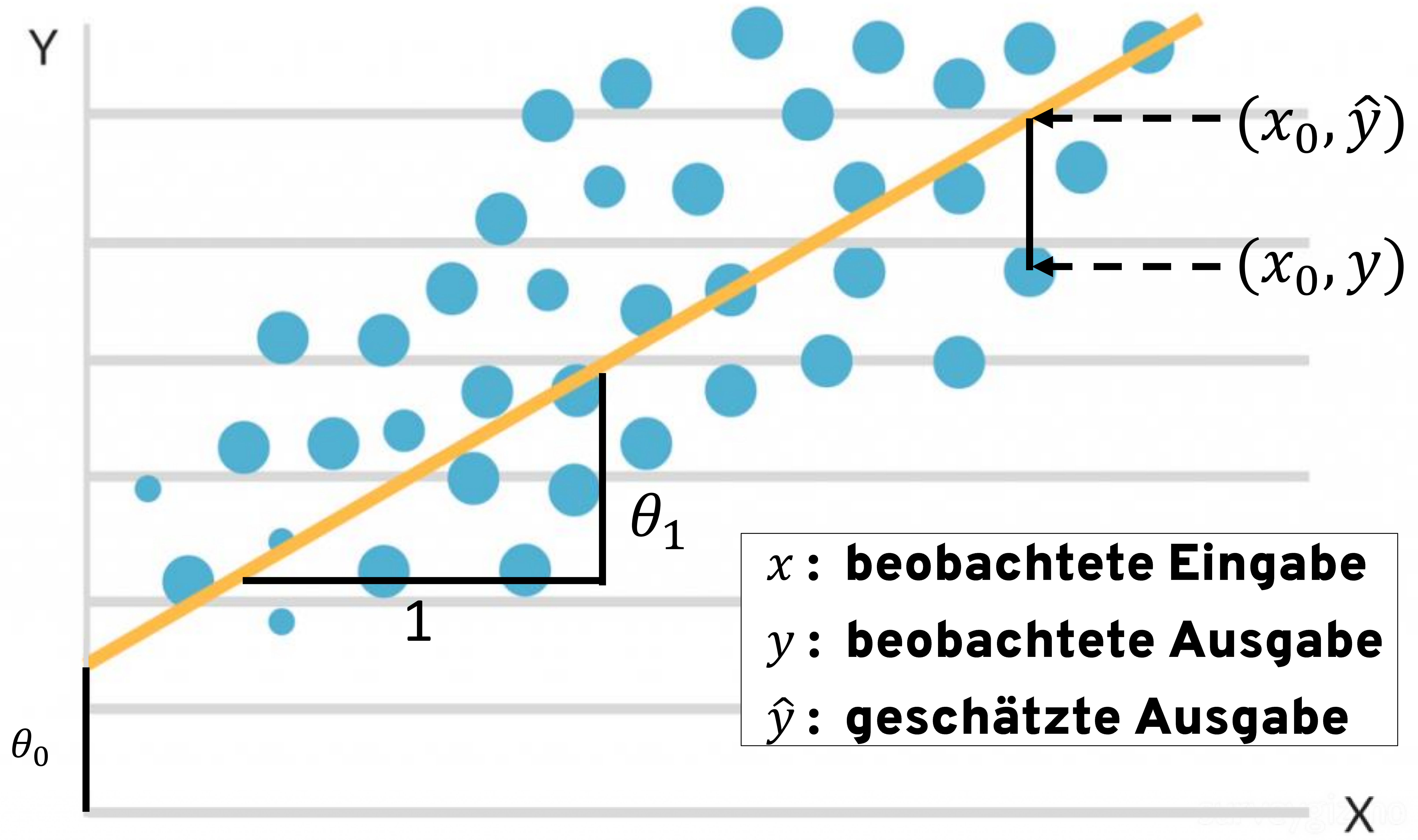
PROGNOSEMODELLE

In diesem Kurs behandelte:

- **Lineares Modell**
- **Support Vektor Maschine**
- **(Tiefes) Neuronales Netz**

LINEARES MODELL

$$\hat{y} = h_x(\theta_0, \theta_1)$$
$$= \theta_0 + \theta_1 x$$



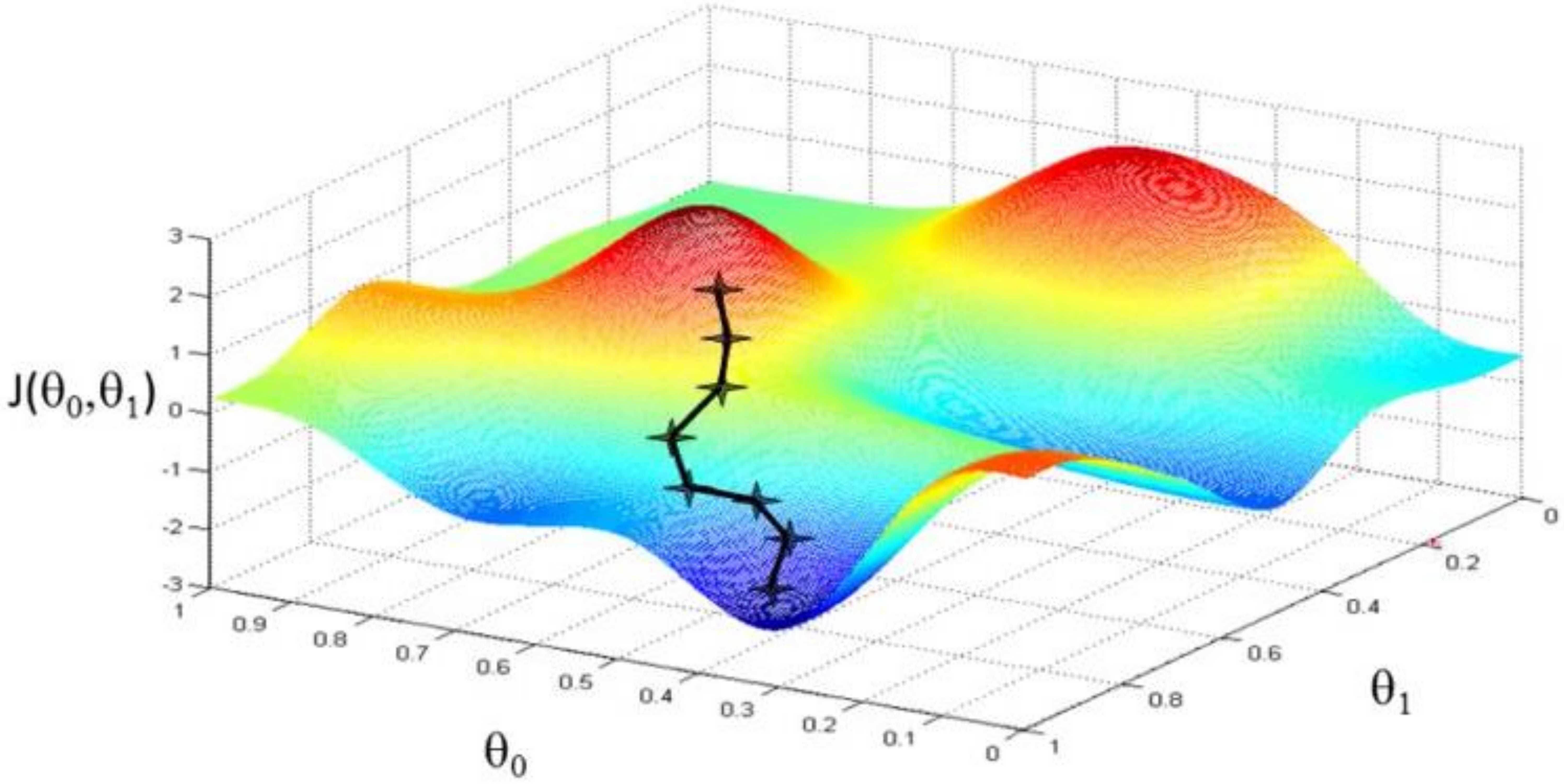
KOSTENFUNKTION

Zur Berechnung der Funktion mit den optimalen Parametern θ_0 und θ_1:

$$J_x(\theta_0, \theta_1) = \qquad (h_x(\theta_0, \theta_1) - y)$$

Mean Squared Error (MSE)

MINIMIERUNG DER KOSTENFUNKTION

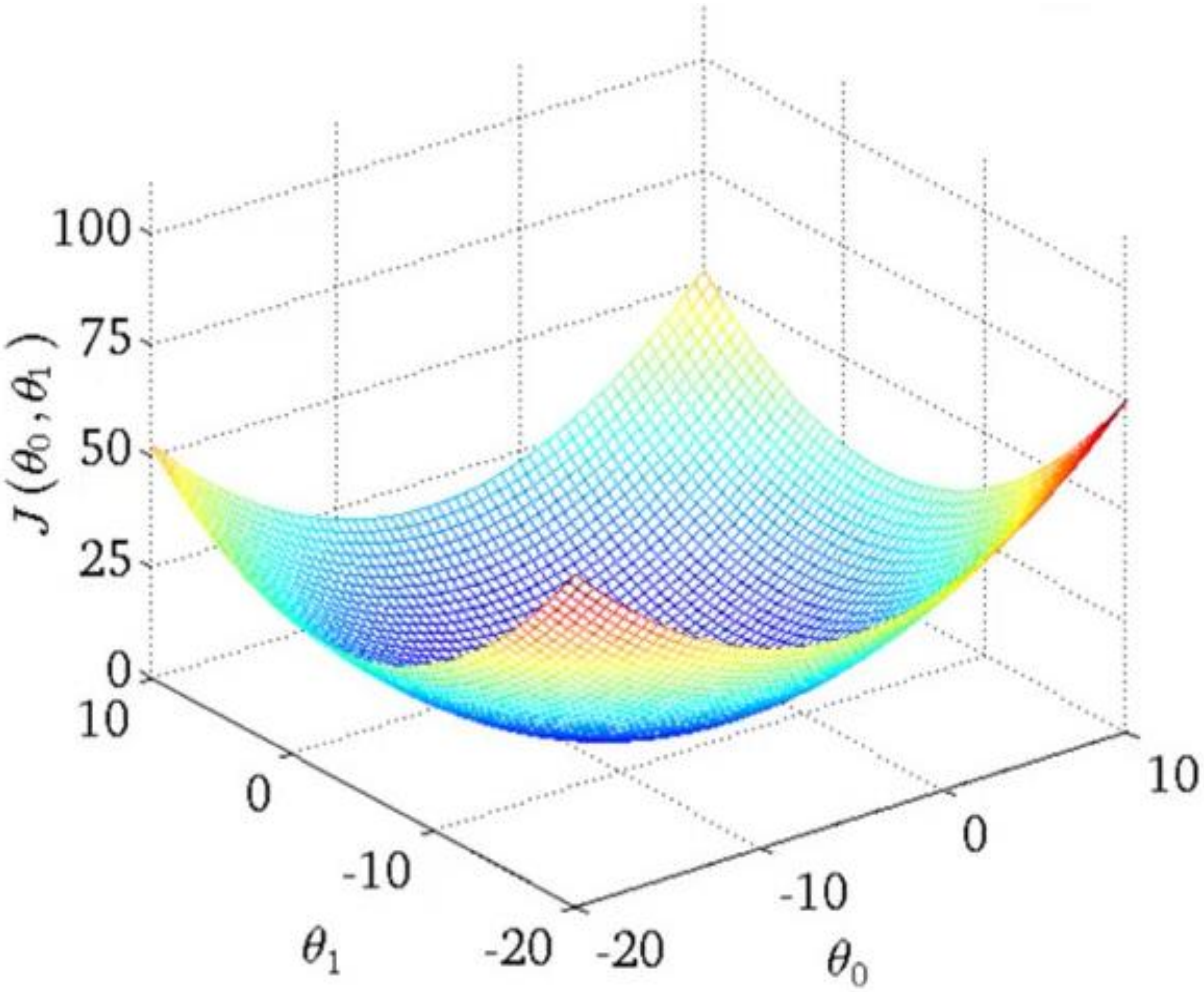


- **Minimierung der Kostenfunktion durch ein iteratives Verfahren, dass sich dem Minimum annähert.**

- **Die Schrittgröße für die Annäherung kann durch die Lernrate („Learning Parameter“) kontrolliert werden.**

Quelle: https://www.coursera.org/learn/machine-learning

GRADIENT DESCENT VERFAHREN



Quelle: https://www.coursera.org/learn/machine-learning

- **Verfahren, das für viele Kostenfunktionen eingesetzt werden kann.**
- **Für lineare Modelle ist die Kostenfunktion konvex und besitzt keine lokalen Minima.**

BEISPIEL EINES LINEAREN MODELLS

```
library(readr)
house_pricing <- read_csv("https://raw.githubusercontent.com/
                          opencampus-sh/einfuehrung-in-data-science-
                          und-ml/main/house_pricing_data/
                          house_pricing_train.csv")

mod <- lm(price ~ sqft_lot15 + as.factor(condition), house_pricing)
summary(mod)
```

ERGEBNIS DES LINEAREN MODELLS

```
Call:
lm(formula = price ~ sqft_lot15 + as.factor(condition), data = house_pricing)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-795388 -214555  -85989  101761 7183941 

Coefficients:
                        Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept)            3.261e+05  7.049e+04   4.625 3.77e-06 ***
sqft_lot15             1.138e+00  1.035e-01  11.002  < 2e-16 ***
as.factor(condition)2 -2.305e+04  7.690e+04  -0.300 0.764379    
as.factor(condition)3  2.031e+05  7.057e+04   2.878 0.004008 ** 
as.factor(condition)4  1.800e+05  7.070e+04   2.546 0.010915 *  
as.factor(condition)5  2.762e+05  7.118e+04   3.880 0.000105 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 366300 on 17284 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.01409,	Adjusted R-squared:  0.0138 
F-statistic: 49.39 on 5 and 17284 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

KENNWERTE DER REGRESSION

p-Wert

- Signifikanzwert
- Wahrscheinlichkeit, dass der zugehörige Wert in der Regression gleich null ist.
- Werte unter 0,05 (entspricht 5%) werden üblicherweise als signifikant betrachtet

(Adjustiertes) R^2

- Kennzahl zur Beurteilung der Güte einer Regression
- Wert zwischen 0 und 1, der der dem Anteil der erklärten Variation entspricht (1 entspricht 100%):

$$\boldsymbol{R^2} = \frac{\text{Erklärte Varianz}}{\text{Gesamtvarianz}}$$

- Das adjustierte R^2 bestraft das Hinzufügen zusätzlicher Variablen/Parameter

DataCamp Tutorial zur Linearen Modellierung in R :
https://www.datacamp.com/community/tutorials/linear-regression-R

EIGENSCHAFTEN DES LINEAREN MODELLS

- Die Funktion lm() liefert optimierte Parameter für das lineare Modell ohne Regularisierung (Angabe eines Lernparameters ist hier nicht nötig)

  → Für einfache Modelle ist es einfach optimierte Parameter zu erhalten.

- Einfacher zu schätzende Modelle haben stärkere Annahmen über den Zusammenhang der Variablen (hier linearer Zusammenhang)

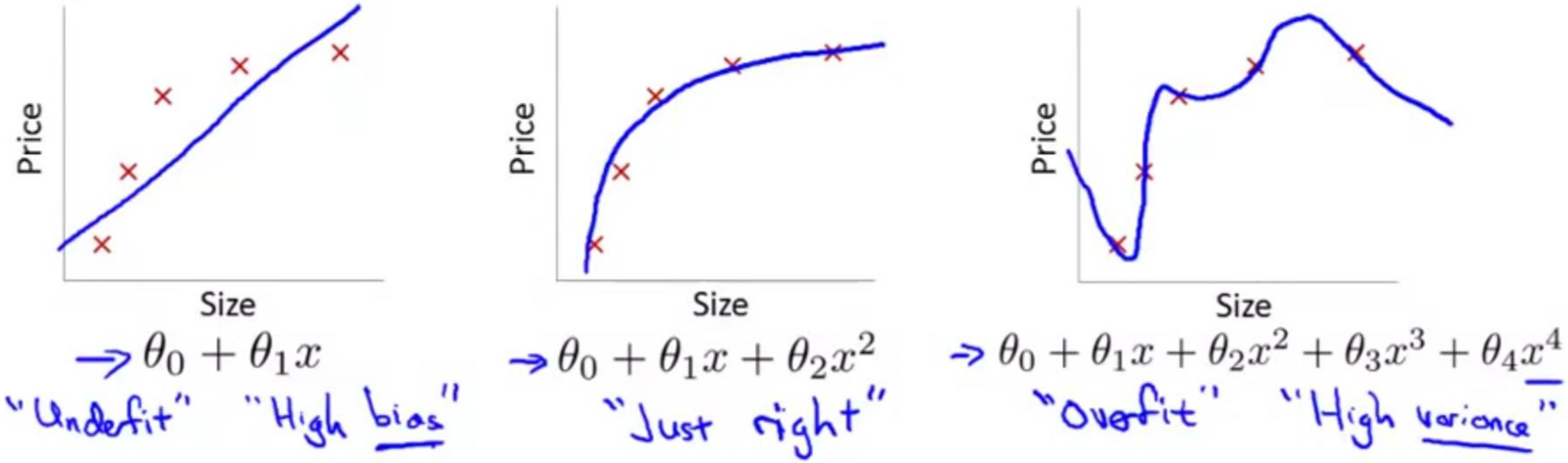
  → Die optimale Kodierung/Kategorisierung der Variablen entsprechend der Annahmen ist sehr wichtig und ggf. schwierig.

BREAKOUT

- Stellt für Euren Datensatz eine Modellgleichung auf, die das adjustierte R^2 auf Basis eines linearen Modells maximiert.

OVERFITTING

Example: Linear regression (housing prices)



Overfitting: If we have too many features, the learned hypothesis may fit the training set very well ($J(\theta) = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 \approx 0$), but fail to generalize to new examples (predict prices on new examples).

Computer Science Engineering. (2017). *3.4.1 The Problem of Overfitting by Andrew Ng*. Abgerufen von https://www.youtube.com/watch?v=OSd30QGMl88

BEISPIEL ZU OVERFITTING

```
---
title: "Linear Regression"
output: html_notebook
---

```{r}
# Importing Function Packages
library(dplyr)
library(readr)
library(lubridate)
library(broom)
library(Metrics)
```


```{r}
# Importing Training and Test Data
house_pricing_train <- read_csv("./house_pricing_data/house_pricing_train.csv")
house_pricing_test <- read_csv("./house_pricing_data/house_pricing_test.csv")
```


```{r}
# Estimating (Training) Models
mod1 <- lm(price ~ bathrooms, house_pricing_train)
mod2 <- lm(price ~ as.factor(bathrooms), house_pricing_train)
mod3 <- lm(price ~ as.factor(bathrooms) + as.factor(zipcode), house_pricing_train)
mod4 <- lm(price ~ as.factor(bathrooms) + as.factor(zipcode) + condition, house_pricing_train)
mod5 <- lm(price ~ as.factor(bathrooms) + as.factor(zipcode) + as.factor(condition), house_pricing_train)
mod6 <- lm(price ~ as.factor(bathrooms) + as.factor(zipcode) + as.factor(condition) + sqft_living15, house_pricing_train)
mod7 <- lm(price ~ as.factor(bathrooms) + as.factor(zipcode) + as.factor(condition) + sqft_living15 + floors + view + grade + as.factor(zipcode)*as.factor(bathrooms), house_pricing_train)
```


```{r}
summary(mod1)
```
```

STRATEGIEN ZUR VERMEIDUNG VON OVERFITTING

Options:

1. Reduce number of features.
   - Manually select which features to keep.
   - Model selection algorithm
2. Regularization.
   - Keep all the features, but reduce magnitude/values of parameters θ_j.
   - Works well when we have a lot of features, each of which contributes a bit to predicting y.

Computer Science Engineering. (2017). *3.4.1 The Problem of Overfitting by Andrew Ng*. Abgerufen von https://www.youtube.com/watch?v=OSd30QGMl88

REGULARISIERUNG

„Bestrafen" der Verwendung von Variableninformation im Rahmen der Kostenfunktion

Lineares Modell mit mehreren Variablen x_1, x_2 und vielen möglichen weiteren:

$$\boldsymbol{h_x(\theta_0, \theta_1, \theta_2, \dots) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \cdots}$$

(mit $\theta_0, \theta_1, \theta_2, \dots$ als den zu schätzenden Modellparametern)

Kostenfunktion mit Regularisierung:

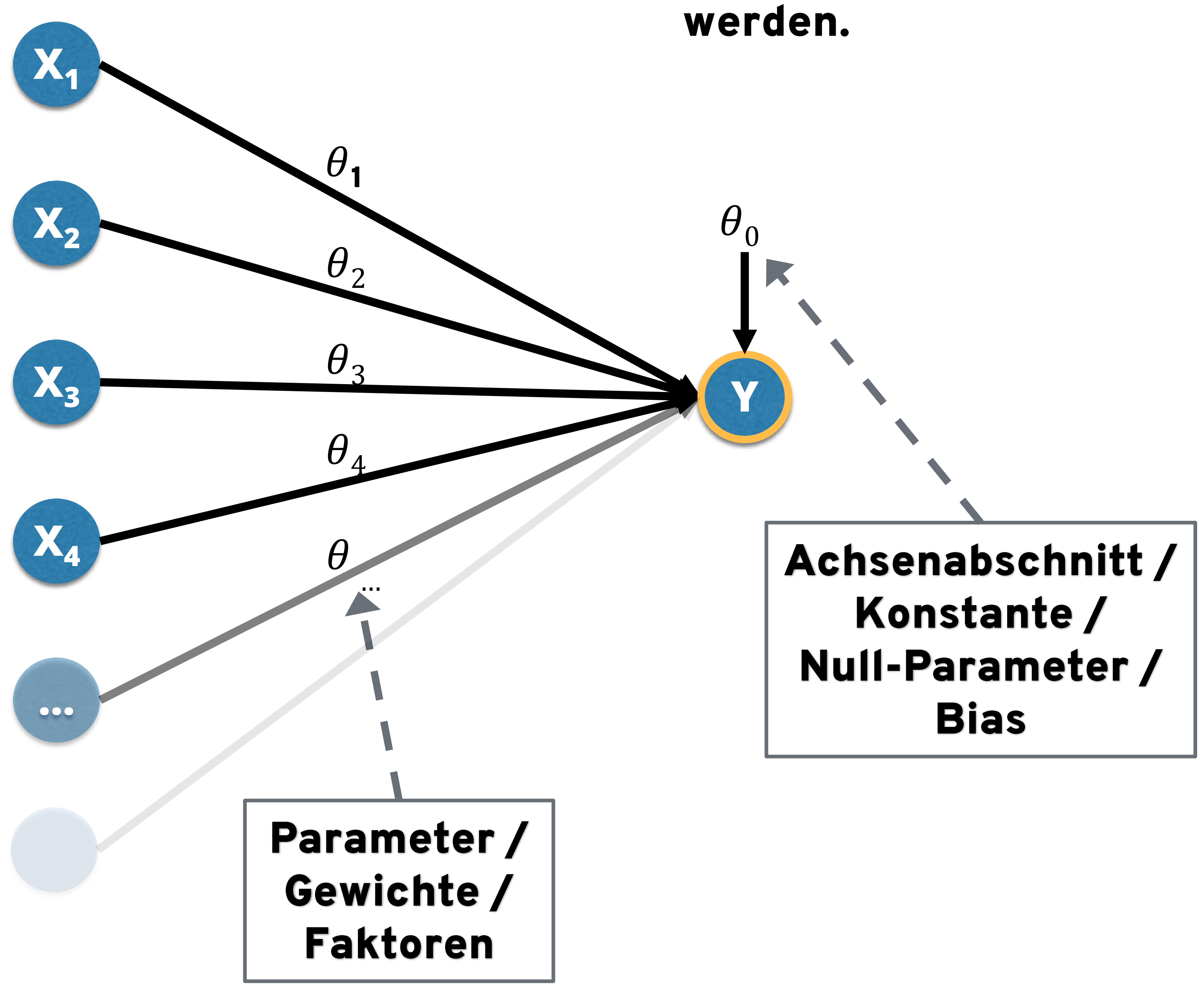
$$\boldsymbol{J_x(\theta_0, \theta_1, \theta_2, \dots) = \frac{1}{m}\left[\sum_m (h_x(\theta_0, \theta_1, \theta_2, \dots) - y)^2 + \lambda(\theta_0 + \theta_1 + \theta_2 + \cdots)\right]}$$

(mit λ als Regularisierungsparameter)

ZUSAMMENFASSUNG LINEARE REGRESSION

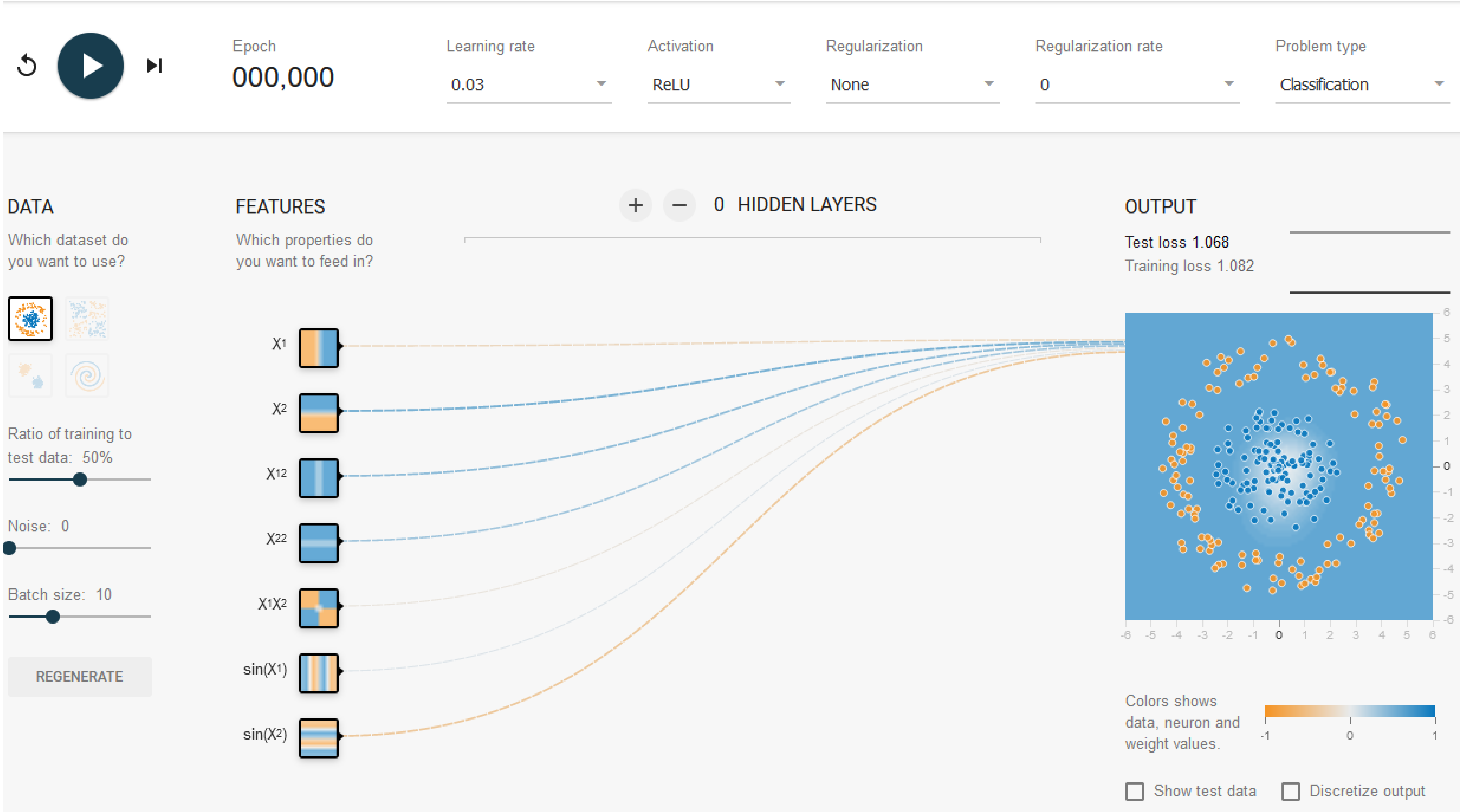
Input Layer
Elemente sind die Input-Variablen; auch genannt: Input-Features oder Input-Dimensionen.

Output Layer
Nutzt eine *„Aktivierungsfunktion“* (hier lineare Funktion) mit der die Parameter θ der eingehenden Schicht zusammengefasst werden.



- ❑ Ziel ist es, anhand des Trainingsdatensatzes die Parameter θ der Aktivierungsfunktion für eine bestmögliche Vorhersage des Testdatensatzes zu optimieren.

- ❑ Die Verwendung der Gradient Descent Optimierung mit Regularisierung erlaubt, alle Variablen in das Modell eingehen zu lassen und über einen einzelnen Regularisierungsparameter (oder auch Shrinkage-Parameter) den Umfang des Einsatzes der Variablen zu kontrollieren, um so das zur Vorhersage optimale Modell bestimmen zu können.


Epoch
000,000
Learning rate
0.03
Activation
ReLU
Regularization
None
Regularization rate
0
Problem type
Classification
DATA
Which dataset do you want to use?
Ratio of training to test data: 50%
Noise: 0
Batch size: 10
REGENERATE
FEATURES
Which properties do you want to feed in?
X_1
X_2
X_1^2
X_2^2
X_1X_2
$\sin(X_1)$
$\sin(X_2)$
+ − 0 HIDDEN LAYERS
OUTPUT
Test loss 1.068
Training loss 1.082
Colors shows data, neuron and weight values.
-1
0
1
Show test data
Discretize output

BREAKOUT

Ruft folgendes Tool auf: https://playground.tensorflow.org/

1) Definiert eine lineare Regression (keine Hidden Layer)
   - Welche der 4 Datensätze könnt Ihr mit der linearen Regression erfolgreich vorhersagen?
   - Inwieweit könnt Ihr die Ergebnisse hinsichtlich der verwendeten Features (Variaben) interpretieren?

2) Definiert zwei Hidden Layer und probiert die Anzahlen der Neuronen so zu ändern, dass Ihr den spiralförmigen Datensatz vorhersagen könnt.
   - Welche Verteilungen könnt Ihr erfolgreich vorhersagen?
   - Inwieweit könnt Ihr die Ergebnisse hinsichtlich der verwendeten Feature interpretieren?

WICHTIGE KONZEPTE

- **Aktivierungsfunktion**
- **Kostenfunktion**
- **Optimierungsfunktion (zur Minimierung der Kostenfunktion)**
- **Lernrate (Eigenschaft der Optimierungsfunktion)**
- **Regularisierung (Bestrafung der Verwendung von Variablen/ großen Parametern)**

AUFGABEN

- **Datensatz weiter um zusätzliche Variablen ergänzen, die für die Schätzung des Umsatzes relevant sein könnten.**
- **Modellgleichung aufstellen, die das adjustierte R^2 auf Basis eines linearen Modells für Euren Datensatz maximiert.**
- **Zum Thema Overfitting dieses Video anschauen.**