Healthcare Data Analytics

Overfitting und Regularisierung

Dr. Michael Strobel

02.05.2022

Inhalt

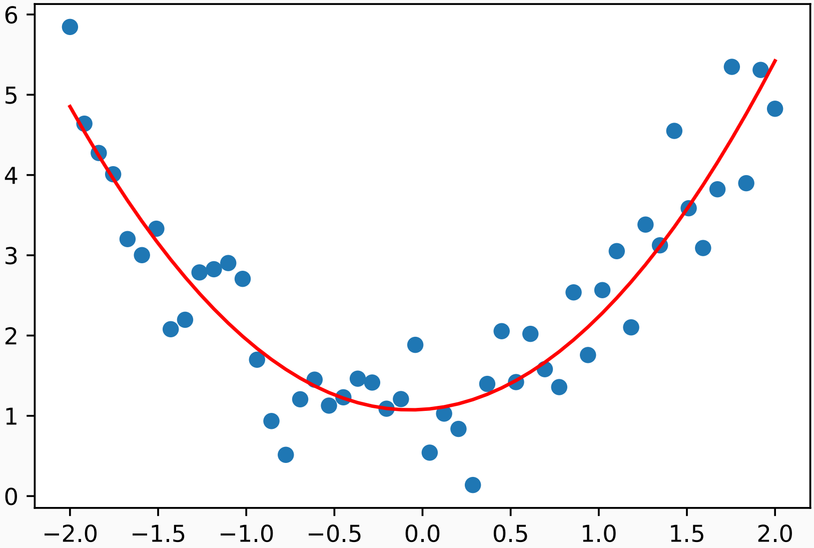
Letzte Woche

- Regression
- Gradientenabstieg
- Training von Modellen

Diese Woche

- Polynomielle Regression
- Overfitting
- Underfitting
- Regularisierung

Polynomielle Regression - Beispiel



Die Idee zur Verallgemeinerung der linearen Regression den Ansatz einer *Polynombasis*:

$P(X_1, \dots, X_n) = \sum_{0 \leq i_1, \dots, i_n \leq n} a_{i_1, \dots, i_n} X_1^{i_1} \cdots X_n^{i_n}$ Und die Bestimmung der $a_{i_1, \dots, i_n}$ über lineare Regression.

Formale Definition: nicht hier.

Polynomielle Features

Wir nennen Features die über eine Polynombasis definiert wurden *Polynomielle Features*.

Beispiele

Ein Feature, Grad zwei

$(X_1) \mapsto (1, X_1, X_1^2)$

Zwei Feature, Grad zwei

$(X_1, X_2) \mapsto (1, X_1, X_2, X_1^2, X_1 X_2, X_2^2)$

Polynomielle Regression - Zahlenbeispiel

Zwei Features und Grad Zwei

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 2 & 3 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 6 & 9 \\ 1 & 4 & 5 & 16 & 20 & 25 \end{pmatrix} =: X_{\text{poly}}$$

Verfahren zur Lösung

Geschlossene Lösung

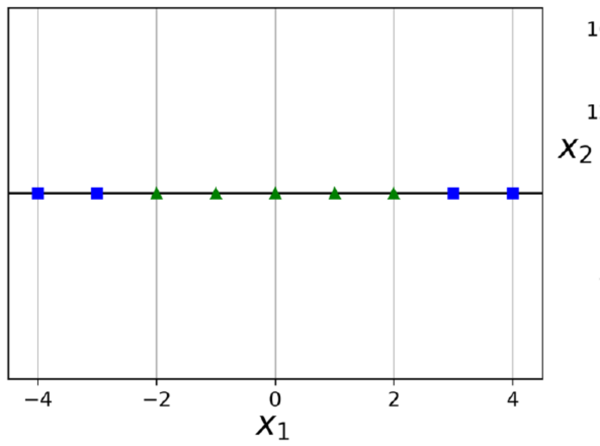
Analog zur letzen Vorlesung bestimmt sich die *geschlossene Lösung* wie

$$\hat{\alpha} = (X^T X)^{-1} X^T y$$

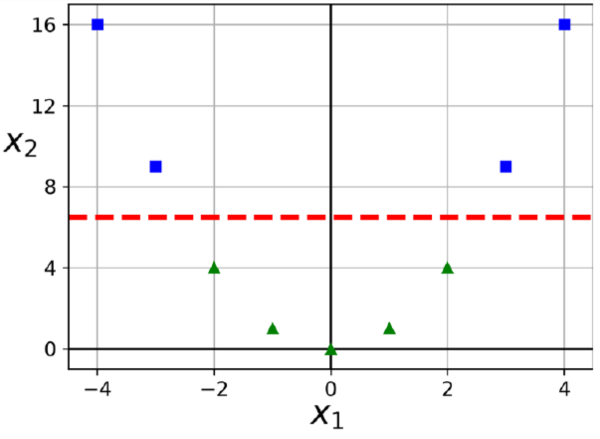
Gradientenabstieg

Analog lässt sich auch die Konvergenztheorie des Gradientenabstiegs der letzen Vorlesung nutzen.

Polynomielle Features lassen sich auch benutzen um nichtlineare Zusammenhänge zwischen Features zu erfassen.



Géron, Aurélien. "Hands-on machine learning with scikit-learn and tensorflow"



Géron, Aurélien. "Hands-on machine learning with scikit-learn and tensorflow"

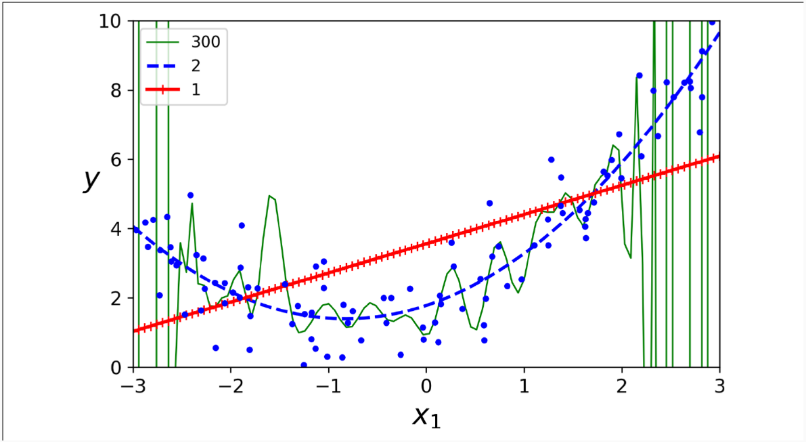
Underfitting / Overfitting

Definition: Underfitting

Wir nennen ein Model *underfitting* wenn es sowohl auf Traningsdaten als auch auf den Testdaten schlechte Performance zeigt.

Definition: Overfitting

Wir nennen ein Model *overfitting* wenn es gute Performance auf den Trainingsdaten, aber schlechte Performance auf den Testdaten zeigt.



Géron, Aurélien. "Hands-on machine learning with scikit-learn and tensorflow"

Strategien gegen Underfitting

- Passendes Modell zum gestellten Problem finden
- Genug Trainingsdaten
- Pre-Processing optimieren
- Feature Engineering: erzeugen von neuen Features aus bestehenden Features
- Mehr CPU/GPU Trainingszeit

Strategien gegen Overfitting

Wir sehen uns heute zwei Klassen von Methoden gegen Overfitting an

- Explizite Regularisierung: L_1 und L_2 (Tikhonov) Regularisierung
- Implizite Regularisierung: Early Stopping

Was ist Regularisierung?

Machine Learning Modelle können extrem komplexe Datensätze erfassen und modellieren. Dies ist natürlich wünschenswert, aber gleichzeitig auch ein Nachteil: wenn das Modell versucht auf allen Trainingsdaten extrem gut abschneidet kann es sein, dass dies nicht für die Testdaten gilt (und damit auch für den Einsatz in der Praxis). Dies liegt daran, dass ein **zu komplexes** Modell vom Algorithmus bestimmt wurde.

Bias / Varianz: Arten von Fehlern im Modell

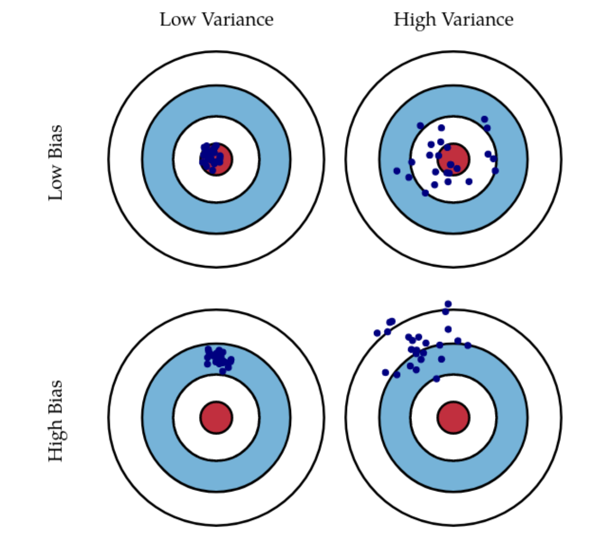
Definition: Bias

Der Bias-Fehler ist der Fehler, der durch fehlerhafte Annahmen im Machine Learning entsteht. Ein hoher Bias-Fehler kann dazu führen, dass ein Algorithmus die relevanten Beziehungen zwischen Features und Labels übersieht. Dies ist die Ursache von Underfitting.

Definition: Varianz

Die Varianz ist der Fehler, der auf die Empfindlichkeit gegenüber kleinen Schwankungen in den Trainingsdaten zurückzuführen ist. Eine hohe Varianz kann daraus resultieren, dass ein Algorithmus das Zufallsrauschen in den Trainingsdaten modelliert. Dies ist die Ursache von Overfitting.

Bias / Varianz: Visualisierung



http://scott.fortmann-roe.com/docs/BiasVariance.html

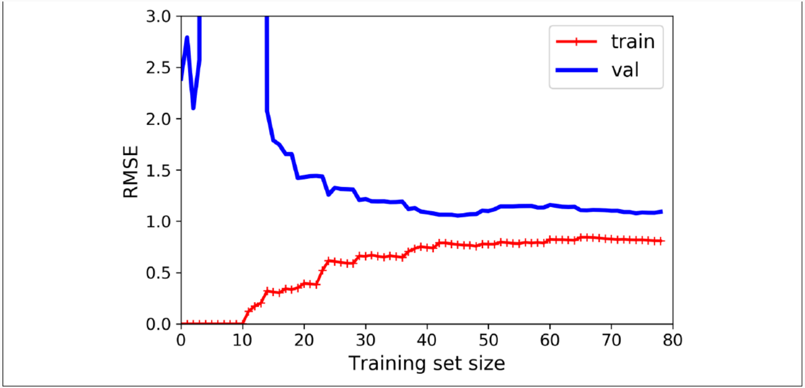
Bias / Varianz: trade-off

Definition: Bias / Varianz Trade-off
Die Erhöhung der Komplexität des Modells führt typischerweise dazu, dass der Bias sinkt, aber die Varianz steigt. Genauso führt die Verringerung der Komplexität des Modells typischerweise dazu, dass der Bias steigt, aber die Varianz sinkt.

Dies nennt man den *Bias / Varianz Trade-off*.

Wie erkennt man, dass man einen guten Kompromiss zwischen Bias und Varianz gefunden hat?

Ein Weg zu sehen wie gut unser Modell ist und wie der Bias / Varianz Trade-off sich verhält ist die *Learning Curve*. Hierfür vergleicht man den Fehler den das Modell bei steigender Anzahl von Trainingsdaten auf den Tranings- und Testdaten macht.



Géron, Aurélien. "Hands-on machine learning with scikit-learn and tensorflow"

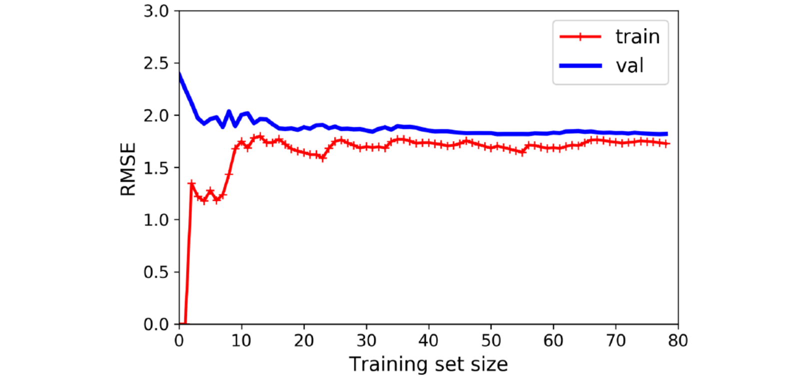
Generell möchte man bei der Learning Curve mit mehr Trainingsdaten einen **abfallenden Fehler** beobachten. Dies ist ein Zeichen, dass der Algorithmus mit mehr Trainingsdaten lernt. Zudem möchte man, dass die Kurve der Trainingsdaten und Testdaten sich annähert und keine Lücke hat. Dies ist ein Zeichen von gutem Bias / Varianz trade-off.

Typische Probleme

- Fehler des Modells ist in Trainingsdaten und Testdaten hoch: Underfitting.
- Fehler in den Testdaten höher als in den Trainingsdaten: Overfitting

Lineare Regression: Underfitting

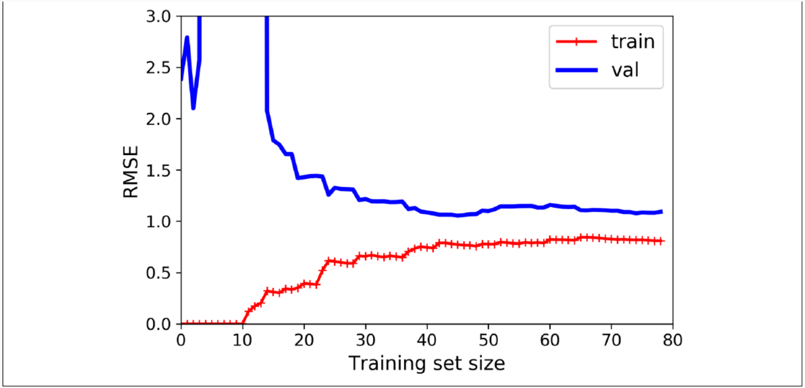
Hier sehen wir Underfitting, denn der Root Mean Square Error ist für Trainings- und Testdaten hoch.



Géron, Aurélien. "Hands-on machine learning with scikit-learn and tensorflow"

Polynomielle Regression: Overfitting

Hier sehen wir Overfitting, denn die Kurve der Testdaten liegt über der Trainingsdaten.



Géron, Aurélien. “Hands-on machine learning with scikit-learn and tensorflow”

Erinnerung: L_1 und L_2 Norm

Erinnerung: Für einen Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ gilt

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$$

$$\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}$$

Definition: L_2 Regularisierung

Erinnerung: Minimierungsproblem

$$\hat{\alpha} = \min_{\alpha \in \mathbb{R}^n} \|X\alpha - \hat{y}\|_2^2$$

Definition: L_2 Minimierungsproblem

Sei $\lambda \geq 0$, dann definieren wir das L_2 *regulierte Minimierungsproblem*

$$\hat{\alpha} = \min_{\alpha \in \mathbb{R}^n} \|X\alpha - \hat{y}\|_2^2 + \lambda \|\alpha\|_2^2$$

Weitere Namen sind auch *Tikhonov*- oder *Ridge*- Regularisierung.

Geschlossene Lösung: L_2 Minimierungsproblem

Sei $\lambda \geq 0$ und gegeben L_2 *regulierte Minimierungsproblem*

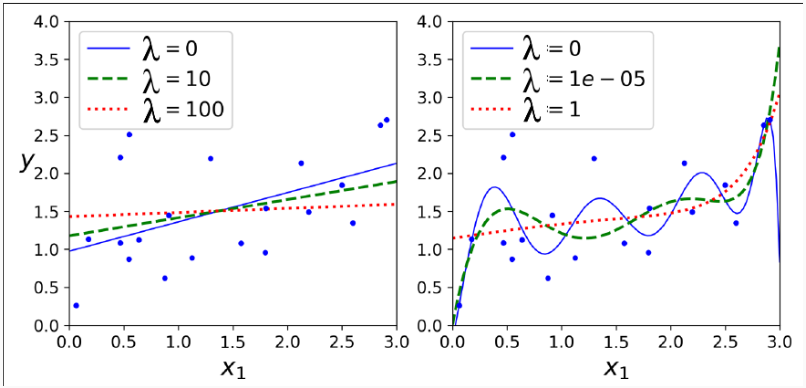
$$\hat{\alpha} = \min_{\alpha \in \mathbb{R}^n} \|X\alpha - \hat{y}\|_2^2 + \lambda\|\alpha\|_2^2$$

Dann ist die geschlossene optimale Lösung des Minimierungsproblems gegeben durch

$$\hat{\alpha} = (X^T X + \mathrm{Id}\,\lambda)^{-1} X^T \hat{y}$$

Beweis: an der Tafel

Visualisierung der L_2 Regularisierung mit verschiedenen Parametern



Definition: L_1 Minimierungsproblem

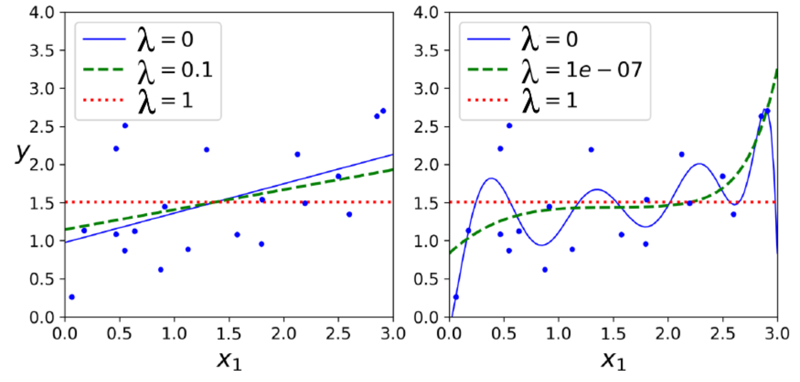
Sei $\lambda \geq 0$, dann definieren wir das L_1 *regulierte Minimierungsproblem*

$$\hat{\alpha} = \min_{\alpha \in \mathbb{R}^n} \|X\alpha - \hat{y}\|_2^2 + \lambda \|\alpha\|_1$$

Ein weiterer gebräuchlicher Name ist *Lasso* (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator Regression).

Visualisierung: L_1 Minimierungsproblem

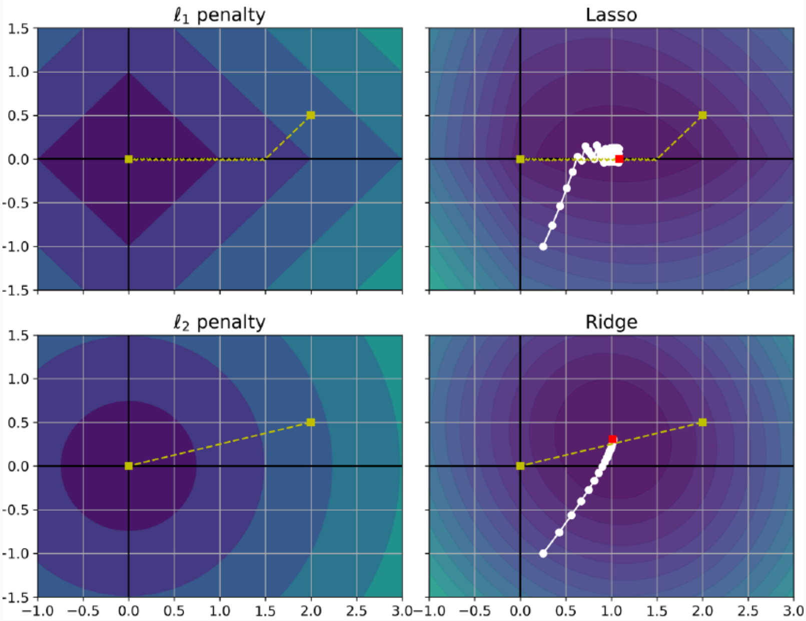
Visualisierung der L_1 Regularisierung mit verschiedenen Parametern



L_1 vs L_2 Regularisierung

Generell neigt die L_1 Regularisierung dazu möglichst viele Koeffizienten auf 0 zu drücken und führt damit zu einem *dünnbesetzten (engl. sparse)* Modell. Die L_2 Regularisierung wiederum neigt dazu die Koeffizienten stärker gleichmäßig zu minimieren was zu mehr gleichverteilten Koeffizienten führt.

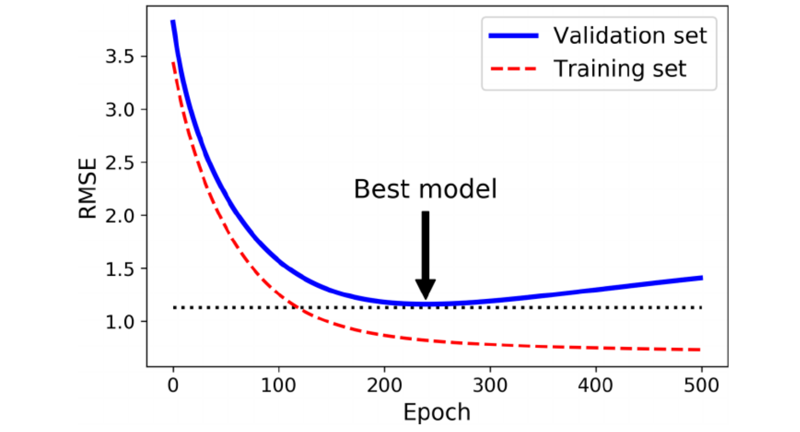
Visualisierung: L_1 vs L_2 Regularisierung



Géron, Aurélien. "Hands-on machine learning with scikit-learn and tensorflow"

Early Stopping

Ein weiterer Weg das Modell zu regularisieren ist *early stopping*. Hierbei stoppt man den Gradientenabstieg sobald der Fehler in der **Testmenge** nicht mehr sinkt beziehungsweise sogar steigt.



Géron, Aurélien. "Hands-on machine learning with scikit-learn and tensorflow"

Referenzen

- Géron, A. (2019). Hands-on machine learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow: Concepts, tools, and techniques to build intelligent systems. O'Reilly Media.