Data Science 1

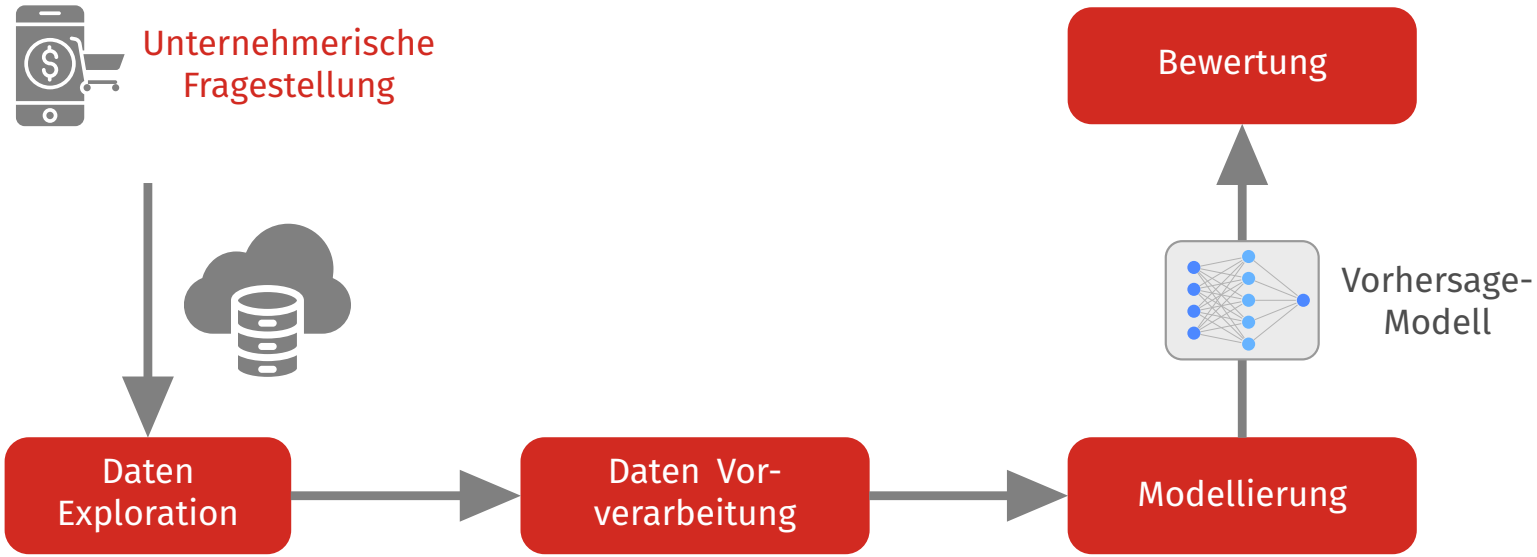
Vorlesung 4 - Maschinelles Lernen

Prof. Dr. Christian Bockermann

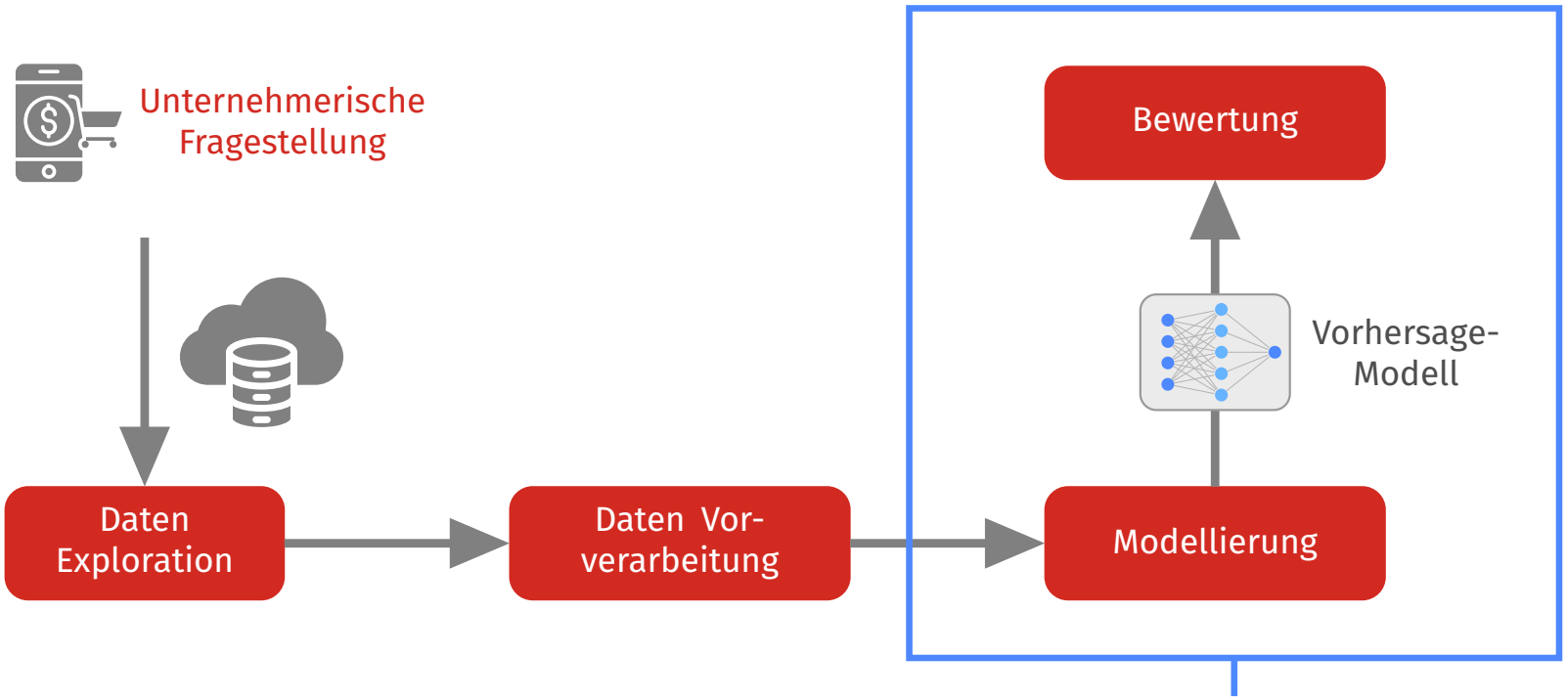
Hochschule Bochum

Sommersemester 2022

Wir erinnern uns: Vorgehen bei der Datenanalyse (CRISP-DM)



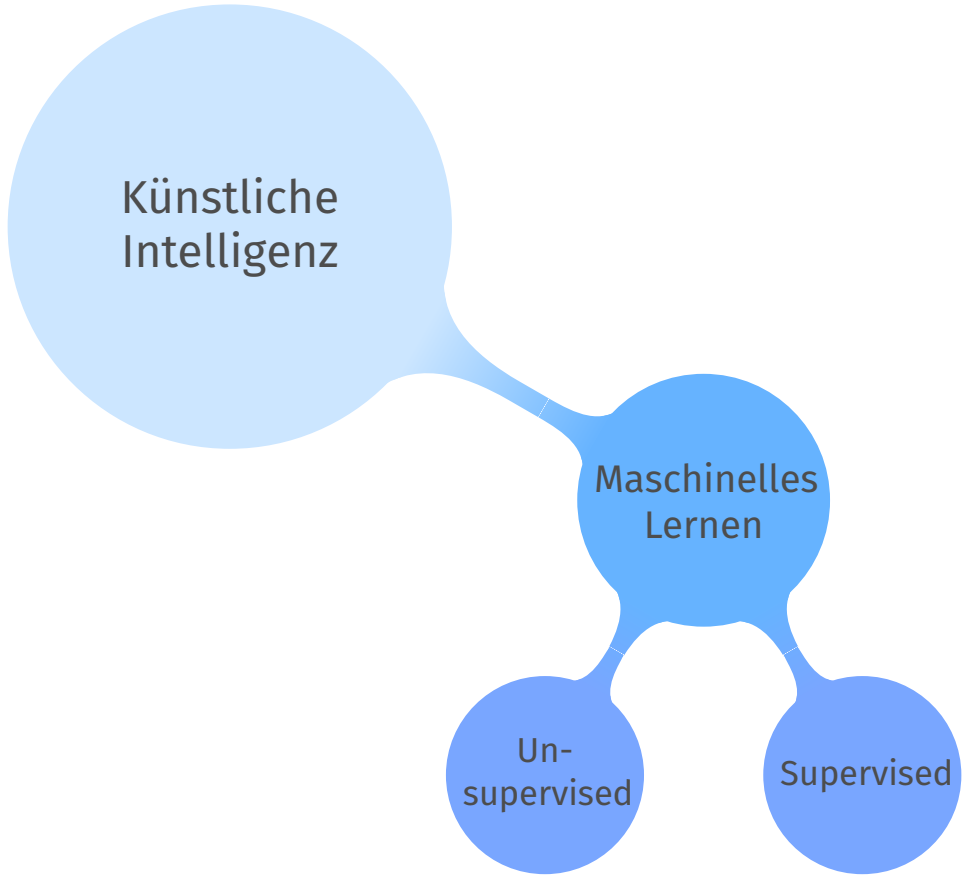
Wir erinnern uns: Vorgehen bei der Datenanalyse (CRISP-DM)



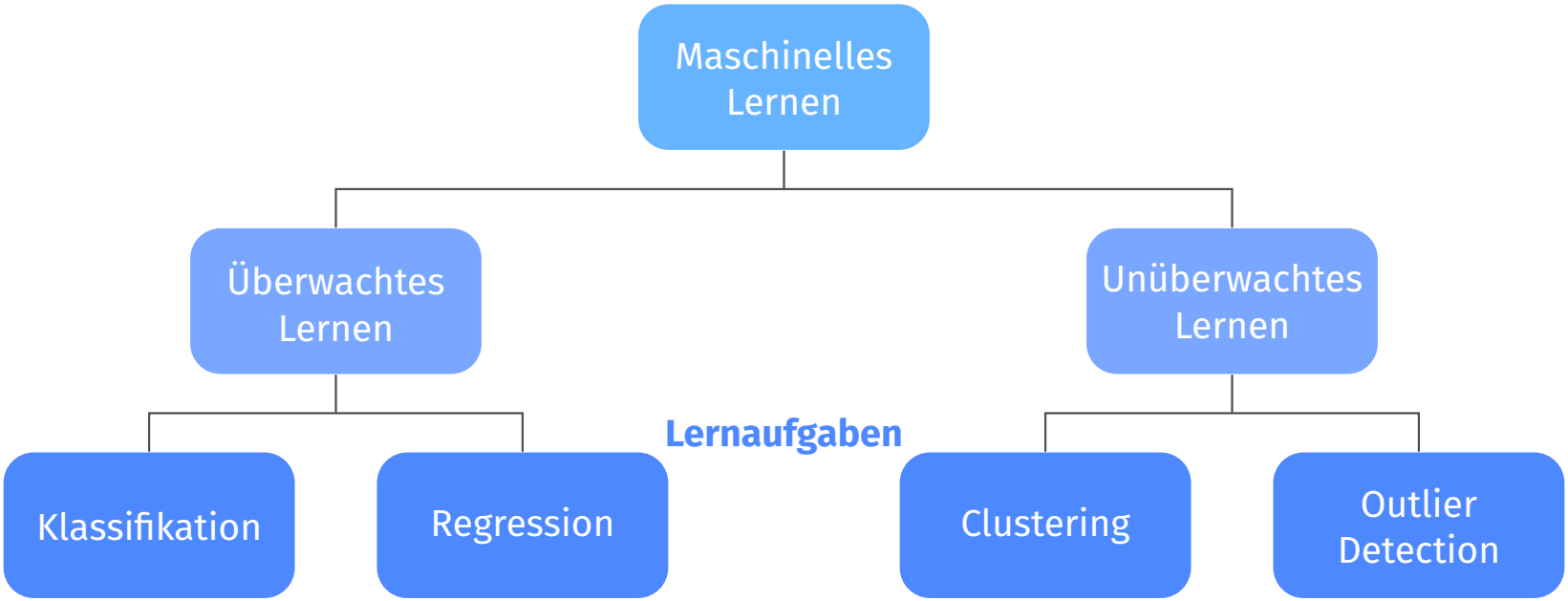
Modellierung + Validierung

mit Python/SciKit-Leran (später)

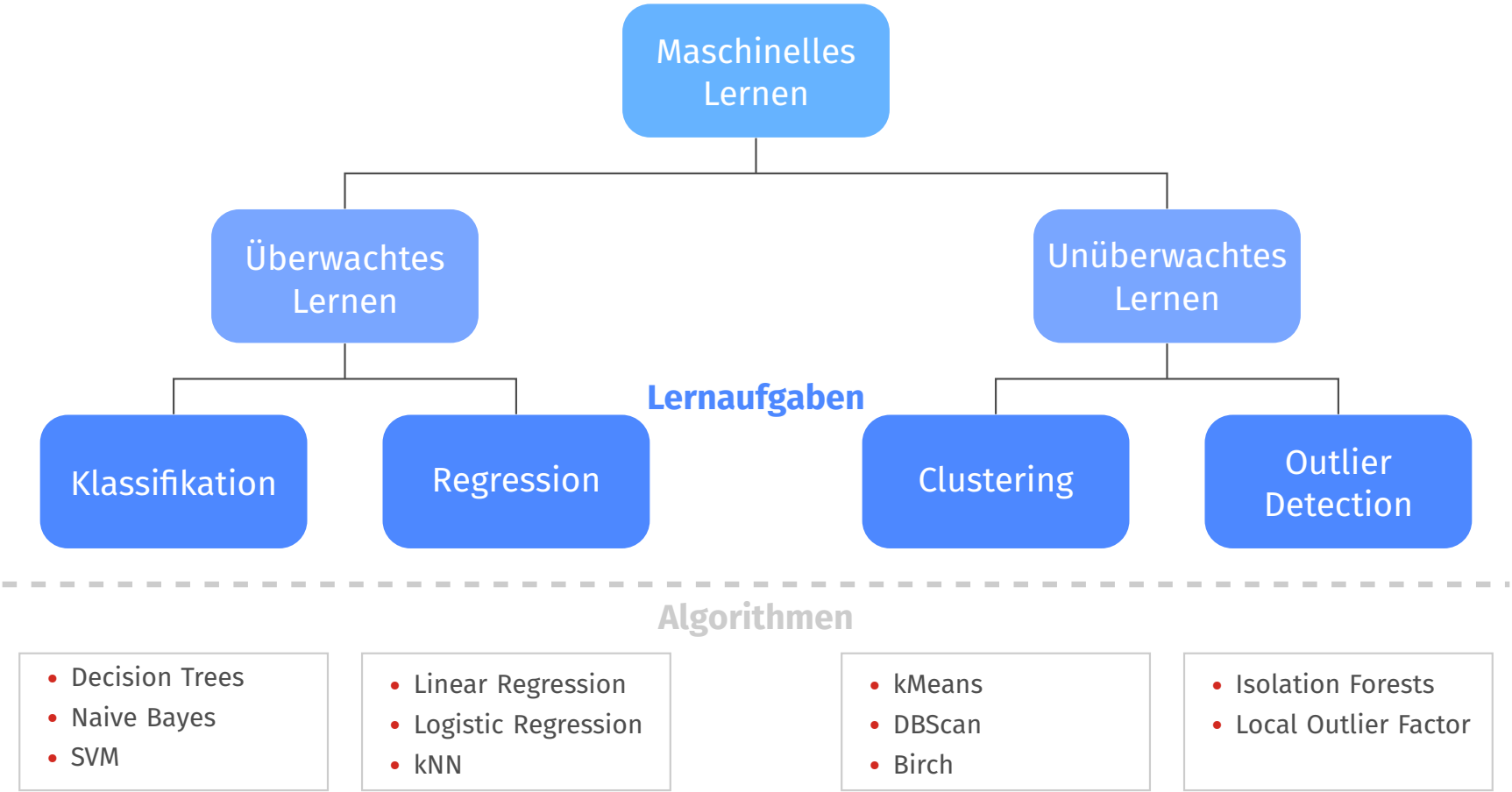
Maschinelles Lernen ist Teilgebiet der künstlichen Intelligenz



Maschinelles Lernen ist Teilgebiet der künstlichen Intelligenz



Maschinelles Lernen ist Teilgebiet der künstlichen Intelligenz



Kategorien des Lernens

Überwachtes Lernen
supervised learning

- Trainingsdaten enthalten Zielvariable (z.B. Spam=Ja/Nein)
- Zielvariable oft als *Klasse*, *Label* oder *Class* bezeichnet
- Mit Trainingsdaten, unbekannte Daten vorhersagen

Unüberwachtes Lernen
unsupervised learning

- Trainingsdaten enthalten keine Zielinformation
- Unbekannte Muster/Gruppen in Daten finden

Lernaufgaben definieren Ein- und Ausgabe, sowie das Ziel der Modellierung, z.B.

> "Entscheide für einen Text **x** ob er zur Klasse *Spam* oder zur Klasse *KeinSpam* gehört."

Lernaufgaben definieren Ein- und Ausgabe, sowie das Ziel der Modellierung, z.B.

> "Entscheide für einen Text **x** ob er zur Klasse *Spam* oder zur Klasse *KeinSpam* gehört."

Eingabedaten werden typischerweise in einen Merkmalsraum $\mathcal{X}$ der Dimension d abgebildet

$$\mathbf{x} \in \mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^d$$

Die Ausgabemenge $\mathcal{Y}$ kann eine Menge von Klassen oder eine reelle Zahl sein, z.B.

$$\mathcal{Y} = \{\text{Spam}, \text{KeinSpam}\}$$

Das Ziel besteht darin, eine Funktion (Modell) $f : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ zu lernen, mit

$$f(\mathbf{x}) = \begin{cases} +1, & \text{falls } \mathbf{x} \text{ Spam Nachricht} \\ -1, & \text{sonst} \end{cases}$$

Das Ziel besteht darin, eine Funktion (Modell) $f : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ zu lernen, mit

$$f(\mathbf{x}) = \begin{cases} +1, & \text{falls } \mathbf{x} \text{ Spam Nachricht} \\ -1, & \text{sonst} \end{cases}$$

Bei der binären Klassifikation wird häufig $\mathcal{Y} = \{-1, +1\}$ gewählt.

Das Ziel besteht darin, eine Funktion (Modell) $f : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ zu lernen, mit

$$f(\mathbf{x}) = \begin{cases} +1, & \text{falls } \mathbf{x} \text{ Spam Nachricht} \\ -1, & \text{sonst} \end{cases}$$

Bei der binären Klassifikation wird häufig $\mathcal{Y} = \{-1, +1\}$ gewählt.

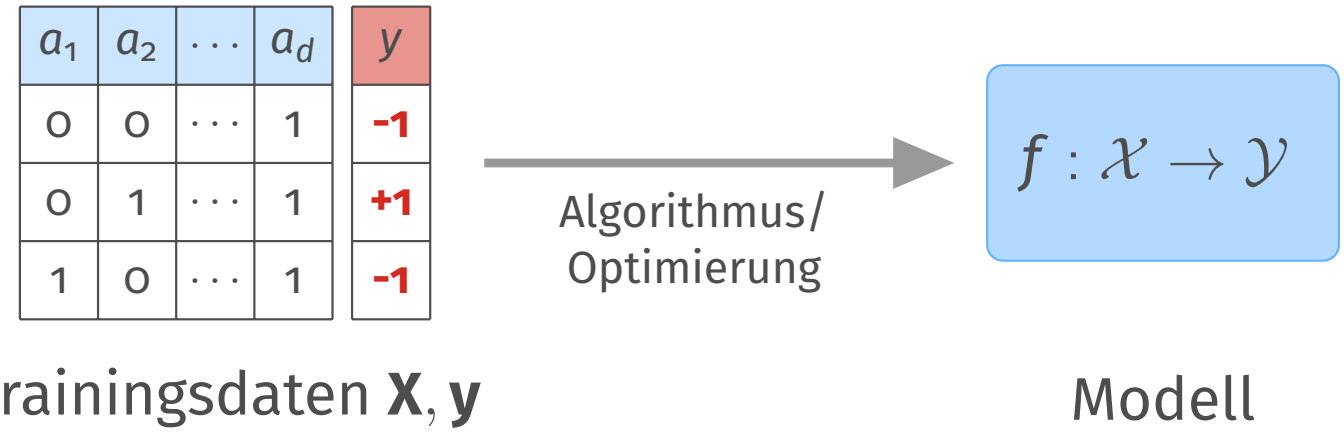
Für die Regression gilt $\mathcal{Y} = \mathbb{R}$.

Lern-Algorithmen erwarten Daten häufig in Form einer Tabelle:

	d Merkmale				
ID	a_1	a_2	$\cdots$	a_d	y
1	0	0	$\cdots$	1	**-1**
2	0	1	$\cdots$	1	**+1**
3	1	0	$\cdots$	1	**-1**

Beispiel $\mathbf{x}_2 = (x_{a_1}, x_{a_2}, \ldots, x_{a_4}, y)$
$= (0, 1, \ldots, 1, \mathbf{+1})$

- Beispiele werden auch *examples* oder *instances* genannt
- Merkmale (engl. *features*) werden auch *attributes* oder *Variablen* (Statistik) bezeichnet



Trainingsdaten **X**, **y**

Modell

ML - Modell Training

a_1	a_2	$\cdots$	a_d	y
0	0	$\cdots$	1	-1
0	1	$\cdots$	1	+1
1	0	$\cdots$	1	-1

Trainingsdaten **X**, **y**

Algorithmus/
Optimierung

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

Modell

a_1	a_2	$\cdots$	a_d	y
1	1	$\cdots$	0	?

Neue Daten $\mathbf{x}'$,
y unbekannt

ML - Modell Training

a_1	a_2	$\cdots$	a_d	y
0	0	$\cdots$	1	-1
0	1	$\cdots$	1	+1
1	0	$\cdots$	1	-1

Trainingsdaten **X**, **y**

Algorithmus/
Optimierung

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

Modell

a_1	a_2	$\cdots$	a_d	y
1	1	$\cdots$	0	?

Neue Daten $\mathbf{x}'$,
y unbekannt

Vorhersage

$\hat{y} = f(\mathbf{x}')$

Definition von Lernaufgaben

Im Folgenden werfen wir einen genaueren Blick auf die Definition von Lernaufgaben, die wir in den nächsten Vorlesungen behandeln:

Überwachtes Lernen

- Klassifikation
- Regression

Unüberwachtes Lernen

- Clustering
- (Outlier-Detection)
- Frequent Itemsets / Frequent Patterns

Klassifikation ordnet Beispielen diskreten Klassen zu

- Vorgegebene Klassen $\mathcal{Y} = \{C_1, \ldots, C_k\}$
- Gegeben Menge $\mathbf{X} \times \mathbf{y} \subset \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ bei der jedem Beispiel x_i die zugehörige Klasse zugeordnet ist: (x_i, y_i)
- 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.

Klassifikation ordnet Beispielen diskreten Klassen zu

- Vorgegebene Klassen $\mathcal{Y} = \{C_1, \ldots, C_k\}$
- Gegeben Menge $\mathbf{X} \times \mathbf{y} \subset \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ bei der jedem Beispiel x_i die zugehörige Klasse zugeordnet ist: (x_i, y_i)
- 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.

Lernen als Optimierungsproblem!

Beispiel: Klassifikation von Schwertlilien

- Klassen: $\mathcal{Y} = \{\text{setosa}, \text{versicolor}, \text{virginica}\}$
- Menge $\mathbf{X} \times \mathbf{y}$ mit 150 Beispiele mit Spalte "`species`"
- Qualitätsfunktion

$$q(\mathbf{X}\times\mathbf{y}, f) = \sum_{(x,y)\in\mathbf{X}\times\mathbf{y}} err(y, \underbrace{f(x)}_{=\hat{y}}), \quad err(y,\hat{y}) = \begin{cases} 0, & \text{falls } y = \hat{y} \\ 1, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Beispiel: Klassifikation von Schwertlilien

- Klassen: $\mathcal{Y} = \{\text{setosa}, \text{versicolor}, \text{virginica}\}$
- Menge $\mathbf{X} \times \mathbf{y}$ mit 150 Beispiele mit Spalte "`species`"
- Qualitätsfunktion

$$q(\mathbf{X}\times\mathbf{y}, f) = \sum_{(x,y)\in\mathbf{X}\times\mathbf{y}} err(y, \underbrace{f(x)}_{=\hat{y}}), \quad err(y,\hat{y}) = \begin{cases} 0, & \text{falls } y = \hat{y} \\ 1, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Funktion q zählt die Anzahl der Vorhersagefehler des Modells f auf der Menge X

Beispiel: Klassifikation von Schwertlilien

- Klassen: $\mathcal{Y} = \{\text{setosa}, \text{versicolor}, \text{virginica}\}$
- Menge $\mathbf{X} \times \mathbf{y}$ mit 150 Beispiele mit Spalte "`species`"
- Qualitätsfunktion

$$q(\mathbf{X}\times\mathbf{y}, f) = \sum_{(x,y)\in\mathbf{X}\times\mathbf{y}} err(y, \underbrace{f(x)}_{=\hat{y}}), \quad err(y,\hat{y}) = \begin{cases} 0, & \text{falls } y = \hat{y} \\ 1, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Funktion q zählt die Anzahl der Vorhersagefehler des Modells f auf der Menge X

Ziel: Finde f^* mit minimalem $q(X, f)$

Beispiel: Klassifikation von Schwertlilien

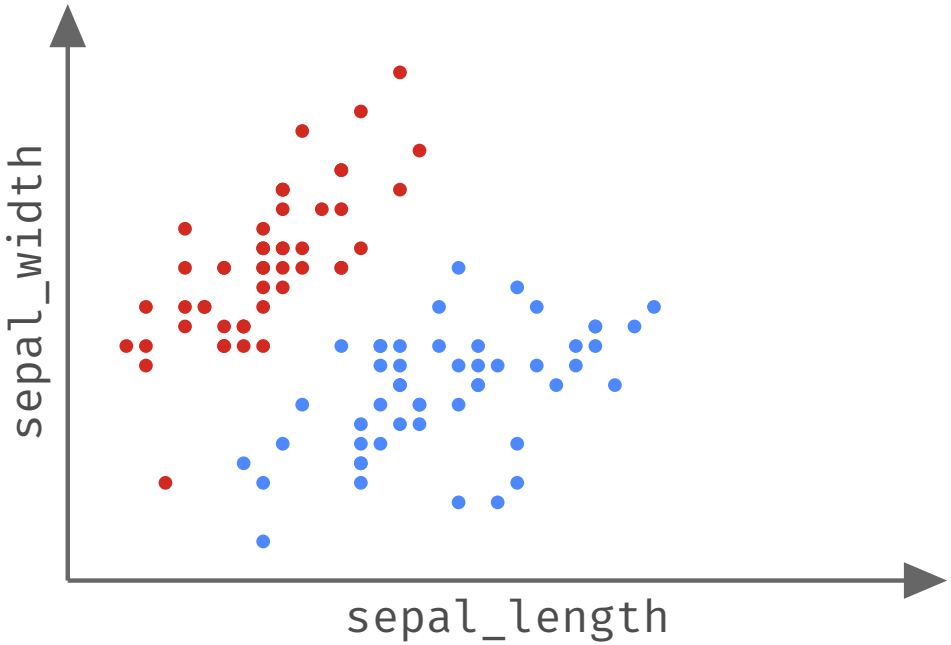
- Klassen: $\mathcal{Y} = \{\text{setosa}, \text{versicolor}, \text{virginica}\}$
- Menge $\mathbf{X} \times \mathbf{y}$ mit 150 Beispiele mit Spalte "`species`"
- Qualitätsfunktion

$$q(\mathbf{X}\times\mathbf{y}, f) = \sum_{(x,y)\in\mathbf{X}\times\mathbf{y}} err(y, \underbrace{f(x)}_{=\hat{y}}), \quad err(y,\hat{y}) = \begin{cases} 0, & \text{falls } y = \hat{y} \\ 1, & \text{sonst.} \end{cases}$$

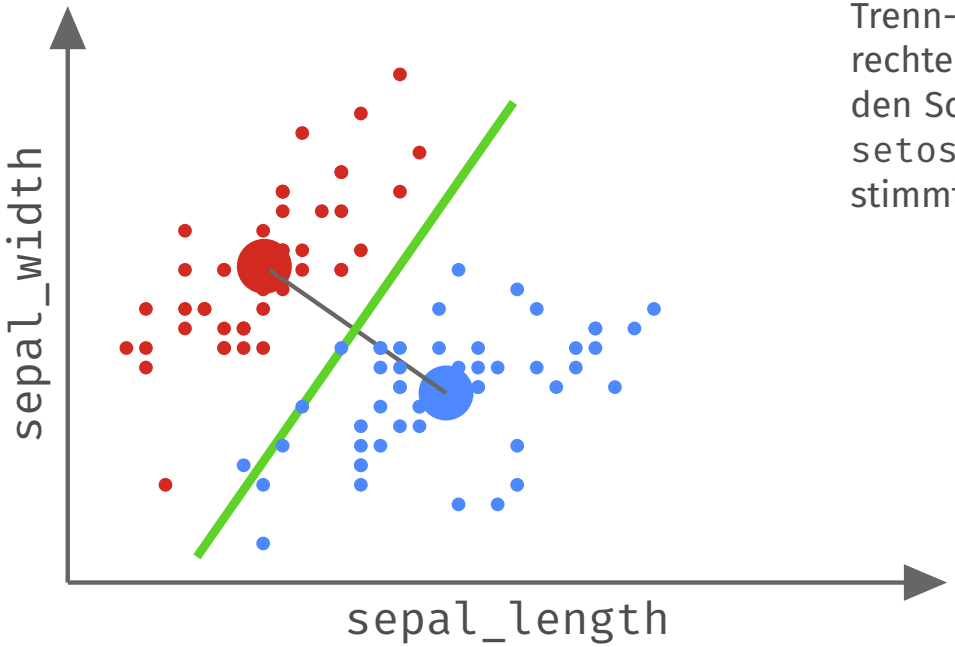
Funktion q zählt die Anzahl der Vorhersagefehler des Modells f auf der Menge X

Ziel: Finde f^* mit minimalem $q(X, f)$ ⟶ Optimierungsproblem

Beispiel: Klassifikation von Schwertlilien



Beispiel: Klassifikation von Schwertlilien

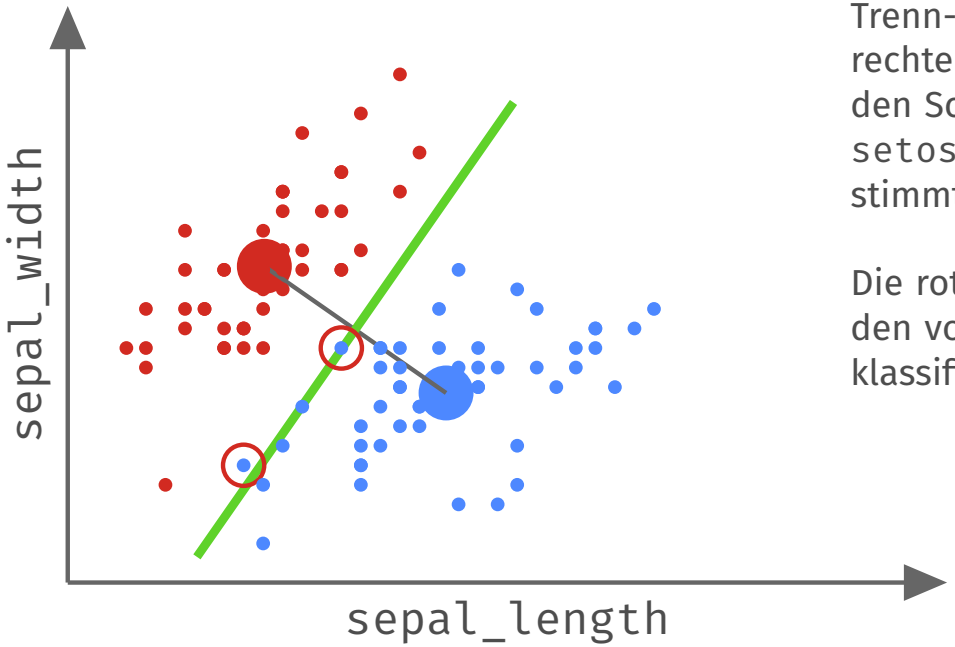


In diesem Fall wurde eine Trenn-Ebene als Mittelsenkrechte auf der Strecke zwischen den Schwerpunkten der Klasse `setosa` und `versicolor` bestimmt.

Einfacher Algorithmus:

Trenn-Ebene über die Klassenschwerpunkte der Attribute `sepal_length` und `sepal_width`

Beispiel: Klassifikation von Schwertlilien



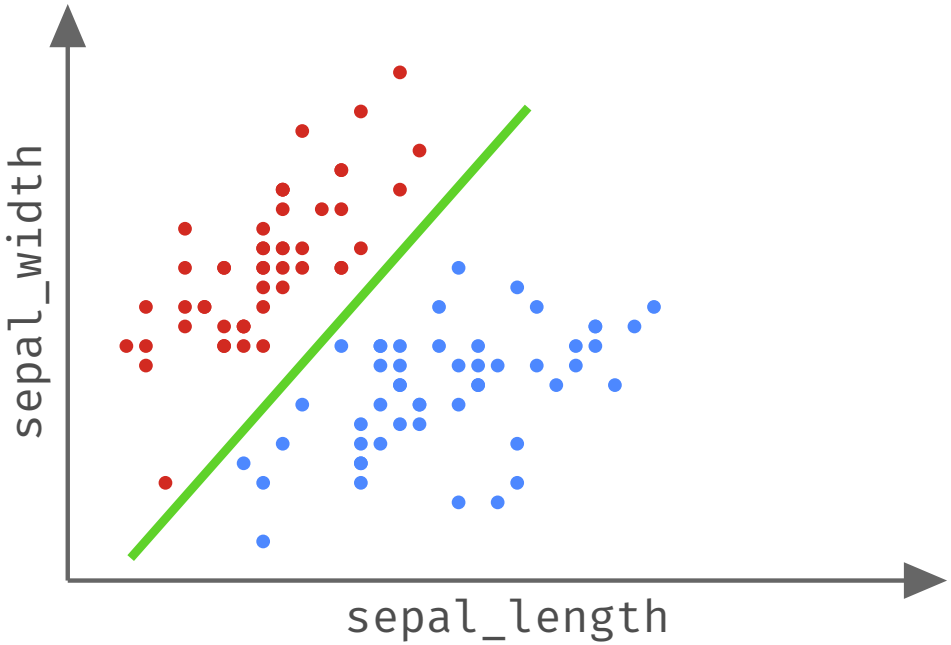
In diesem Fall wurde eine Trenn-Ebene als Mittelsenkrechte auf der Strecke zwischen den Schwerpunkten der Klasse `setosa` und `versicolor` bestimmt.

Die rot umkreisten Punkte werden von der Trenn-Ebene falsch klassifiziert.

Einfacher Algorithmus:

Trenn-Ebene über die Klassenschwerpunkte der Attribute `sepal_length` und `sepal_width`

Beispiel: Klassifikation von Schwertlilien



Die Daten sind *linear separierbar* – eine andere Ebene schafft dies ohne Fehler.
Die Optimierung der Qualitätsfunktion sucht nach der besten Ebene.

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:

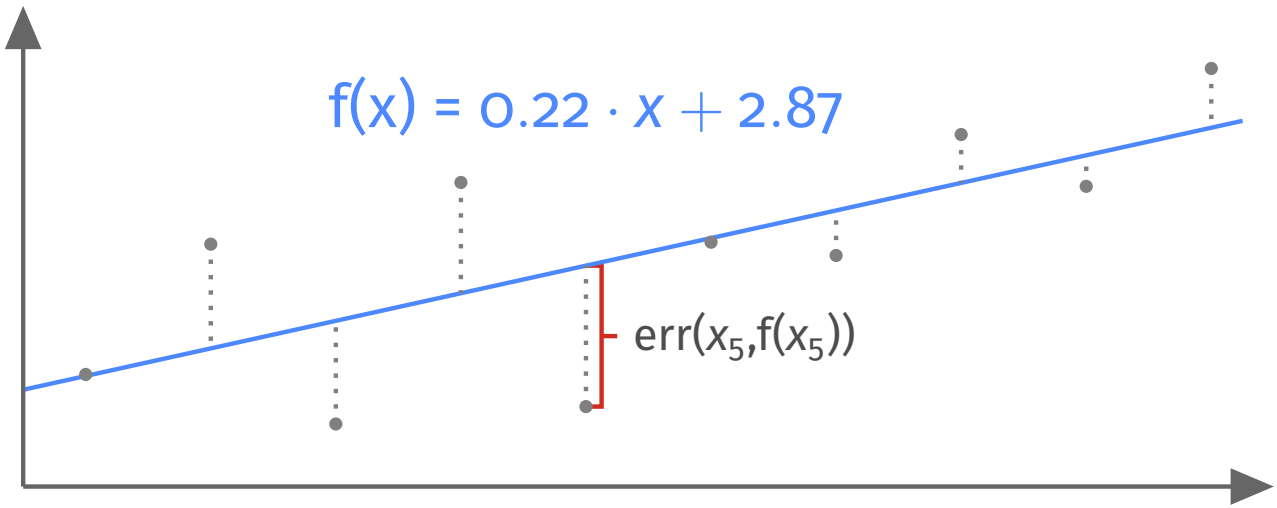
- Finde Modell

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

  das die Qualitätsfunktion optimiert.

Auch hier wieder: Lernen als Optimierungsproblem!

Beispiel: Regression

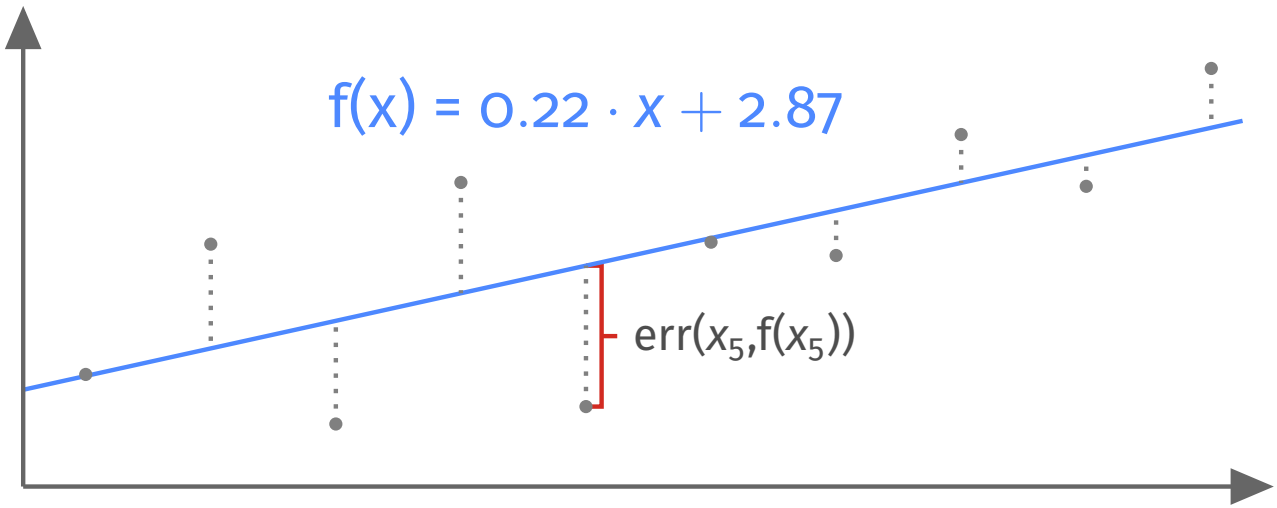


Qualitätsfunktion:

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

Clustering sucht Aufteilung von Daten in ähnliche Gruppen

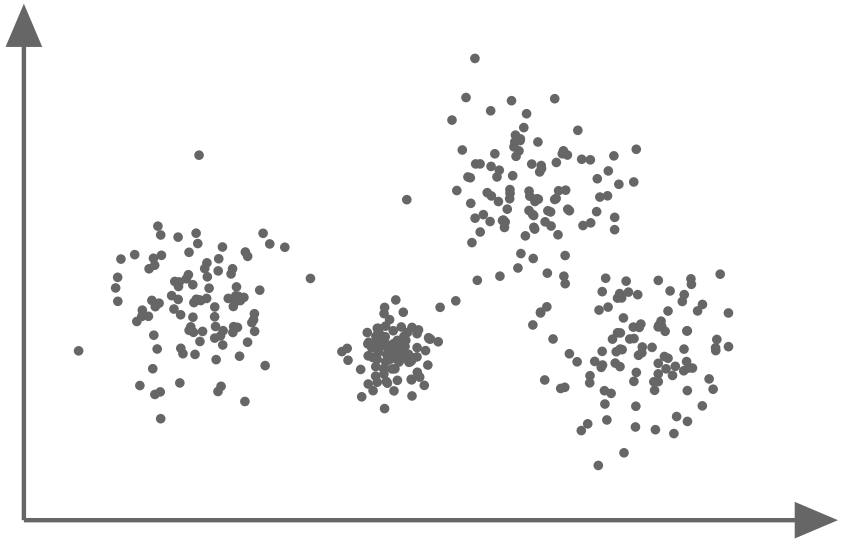
- Datenmenge **X** von Beispielen (keine Klassen gegeben!)
- Parameter k zu findender Gruppen
- Abstandsmaß $d : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$
- Qualitätsfunktion q

Ziel:

- Abstand *innerhalb* der Gruppen soll minimiert, Abstand *zwischen* den Gruppen soll maximiert werden

Beispiel: Clustering

Sei $\mathbf{C} = C_1, \ldots, C_k$ eine Aufteilung der Daten X (ein *Clustering*)

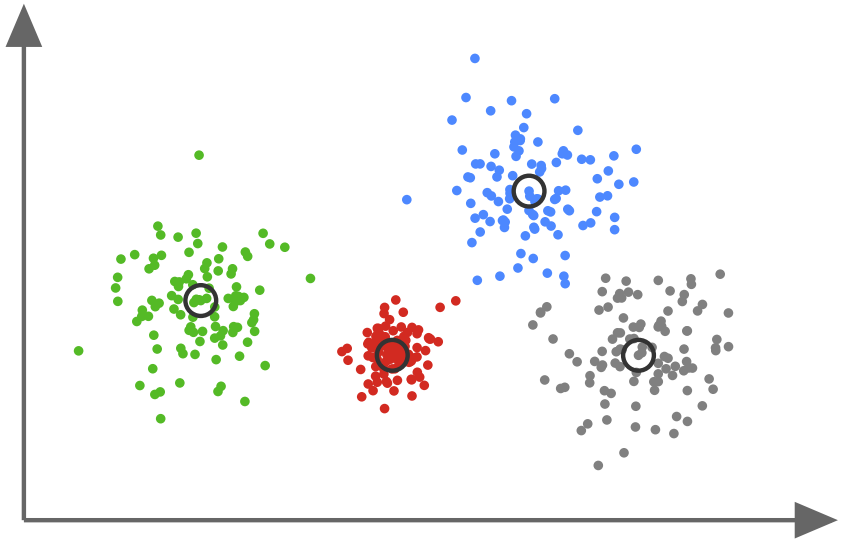


Qualitätsfunktion: (Innere Abstände)

$$q_{inner}(\mathbf{C}) = \sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in C_i} d(x, \bar{\mathbf{c}}_i) \quad \text{, mit } \bar{\mathbf{c}}_i \text{ Zentrum von } C_i$$

Beispiel: Clustering

Sei $\mathbf{C} = C_1, \ldots, C_k$ eine Aufteilung der Daten X (ein *Clustering*)



Clustering auf Datenpunkten mit $k = 4$. Die schwarzen Kreise markieren jeweils das Zentrum $\bar{\mathbf{c}}_i$ des jeweiligen Cluster C_i.

Qualitätsfunktion: (Innere Abstände)

$$q_{inner}(\mathbf{C}) = \sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in C_i} d(x, \bar{\mathbf{c}}_i) \quad \text{, mit } \bar{\mathbf{c}}_i \text{ Zentrum von } C_i$$

Beispiel: Clustering

- Clustering unter mehreren Qualitätsaspekten:

$$q_{inner}(\mathbf{C}) = \sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in C_i} d(x, \bar{\mathbf{c}}_i) \quad \rightarrow \text{Minimieren}$$

$$q_{outer}(\mathbf{C}) = \sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in C_j, j \neq i} d(x, \bar{\mathbf{c}}_j) \quad \rightarrow \text{Maximieren}$$

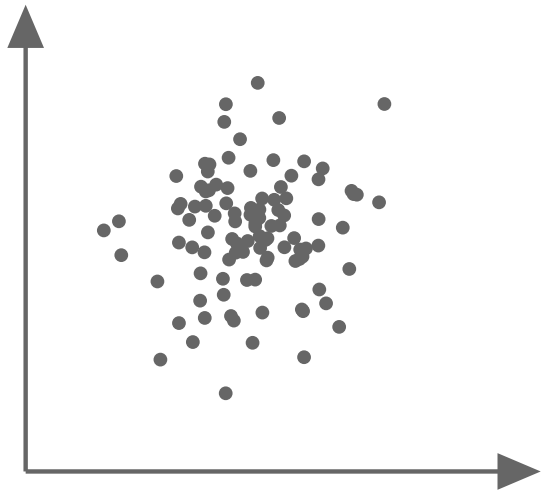
Outlier-Detection sucht nach *isolierten* Punkten

- Gegen ist Datensatz **X** (keine Label)
- i.d.R. noch Abstandsmaß $d : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$

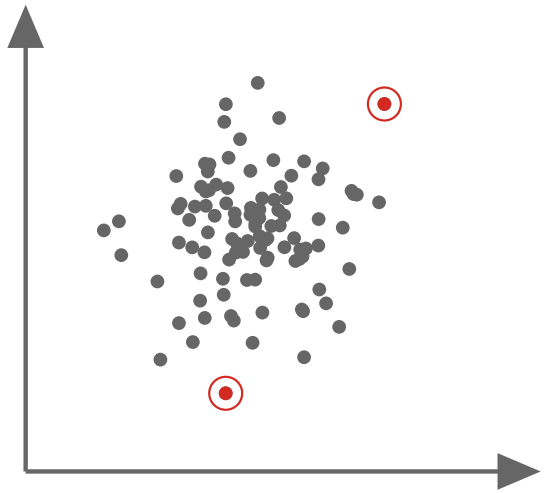
Ziel:

- Finde Punkte, die *weit weg* von allen anderen Punkten liegen

Beispiel: Outlier-Detection

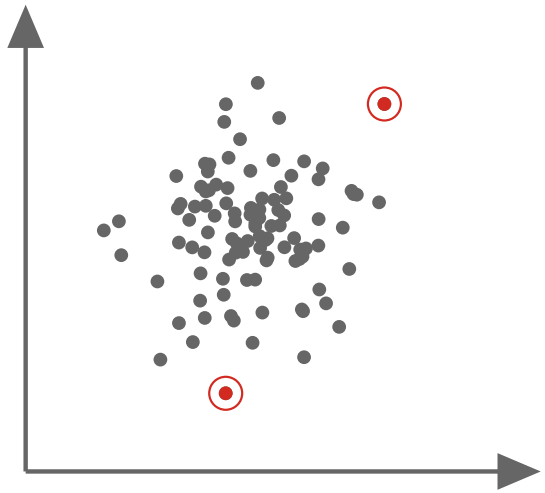


Beispiel: Outlier-Detection



Die rot markierten Punkte sind Ausreißer die im Abstand von $d = 0.35$ keine Nachbarpunkte haben.

Beispiel: Outlier-Detection



Die rot markierten Punkte sind Ausreißer die im Abstand von $d = 0.35$ keine Nachbarpunkte haben.

Unterschiedliche Ansätze für Ausreißer-Erkennung:

- Vorgabe des minimalen Abstandes zu Nachbarn (siehe oben)
- Dichte-basiert - Verteilung der Abstände
- Über Mini-Clustering (ganz viele kleine Cluster finden)

Frequent Itemset Mining sucht häufige Muster

- Gegeben ist Menge **S** von Symbolen (z.B. Artikel)
- Eingabe ist Menge **X** von Transaktionen (Einkäufe) über **S**

$$\mathbf{X} = \{ x \mid x \subseteq \mathbf{S} \}$$

Ziel:

- Fragestellung: Welche Symbole tauchen häufig zusammen auf?
- Finde die Muster $p \in \mathcal{P}(\mathbf{S})$ die in **X** am häufigsten vorkommen

Beispiel: Frequent Itemsets auf Einkäufen

ID	Artikel
1	{ A, B, F }
2	{ B, D, E, F }
3	{ C, E }
4	{ B, E, F }
5	{ A, B, E }

Beispiel: Frequent Itemsets auf Einkäufen

ID	Artikel
1	{ A, B, F }
2	{ B, D, E, F }
3	{ C, E }
4	{ B, E, F }
5	{ A, B, E }

- Artikel B = Muster { B } taucht in 4/5 der Einkäufe auf

Beispiel: Frequent Itemsets auf Einkäufen

ID	Artikel
1	{ A, B, F }
2	{ B, D, E, F }
3	{ C, E }
4	{ B, E, F }
5	{ A, B, E }

- Artikel B = Muster { B } taucht in 4/5 der Einkäufe auf
- Muster { B, F } taucht in 3/5 aller Einkäufe auf

Beispiel: Frequent Itemsets auf Einkäufen

ID	Artikel
1	{ A, B, F }
2	{ B, D, E, F }
3	{ C, E }
4	{ B, E, F }
5	{ A, B, E }

- Artikel B = Muster { B } taucht in 4/5 der Einkäufe auf
- Muster { B, F } taucht in 3/5 aller Einkäufe auf

Welche Artikel werden häufig zusammen gekauft?

Überwachtes Lernen

Charakterisierung des Überwachten Lernens

- Lernen auf Daten **X** mit zugeordnetem Label **y** (=“Wahrheit”)
- Label oft manuell vergeben oder Messwerte (Regression)
- Validierung von Modell f durch Vergleich mit **y** möglich

Charakterisierung des Überwachten Lernens

- Lernen auf Daten **X** mit zugeordnetem Label **y** (="Wahrheit")
- Label oft manuell vergeben oder Messwerte (Regression)
- Validierung von Modell f durch Vergleich mit **y** möglich

Beispiel: MNIST-Datensatz - Ziffernerkennung

Für Trainingsdaten: Manuelle Zuordnung der Ziffernbilder zum richtigen Label (2, 9, 6,...)

Lernen auf Daten

a1	a2	a3
4	1	2
5	1	3
3	8	7

X

y
1
-1
1

y

$\hat{y}$
-1
-1
1

$f(\mathbf{X})$

- Lernalgorithmus sucht bestes Modell f^* für Daten $\mathbf{X}, \mathbf{y}$
- Ziel des Trainings: Fehler auf $\mathbf{X}, \mathbf{y}$ minimieren:

$$f^* = \arg\min_f \sum_{y \in \mathbf{y}} err(y, f(y)) \quad \text{(Trainingsfehler)}$$

Wie lernt ein Algorithmus?

- Algorithmus hat Klasse von Lösungen (z.B. Trenn-Ebenen)
- Lösungsraum wird parametrisiert und die beste Lösung gesucht (Optimierungsproblem)

Beispiel: Lineare Modelle

- Alle Ebenen in $\mathcal{X}$ darstellbar als

$$\vec{x} \cdot \vec{n} = d \quad \text{(Hessesche Normalform)}$$

- Suche $\vec{n} = (n_1, \ldots, n_k)$ und d, das möglichst viele Beispiele aus **X** richtig klassifiziert (den Trainingsfehler minimiert)

Zentrale Frage: Wie gut ist das gelernte Modell f^* ?

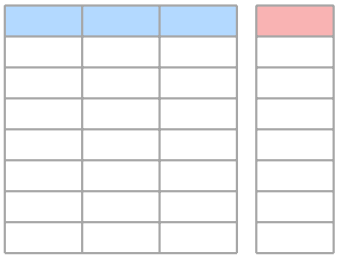
- Trainingsfehler gibt nur Auskunft über f^* auf *bekannten Daten* $\mathbf{X} \times \mathbf{y}$

Zentrale Frage: Wie gut ist das gelernte Modell f^* ?

- Trainingsfehler gibt nur Auskunft über f^* auf *bekannten Daten* $\mathbf{X} \times \mathbf{y}$

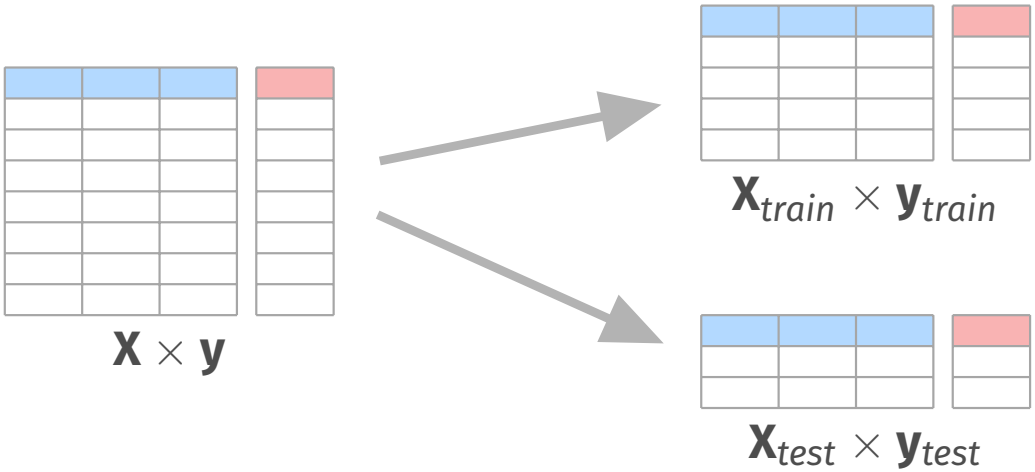
Wie gut ist f^* auf unbekannten Daten?

Ansatz: Aufteilung in Trainings- und Test-Daten



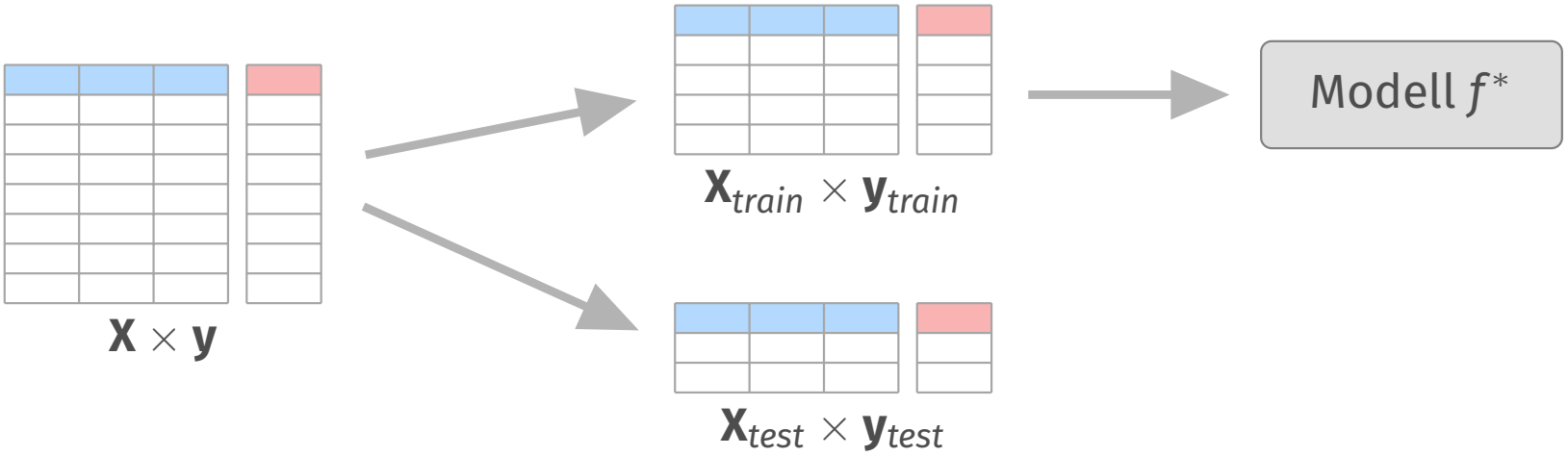
$X \times y$

Ansatz: Aufteilung in Trainings- und Test-Daten



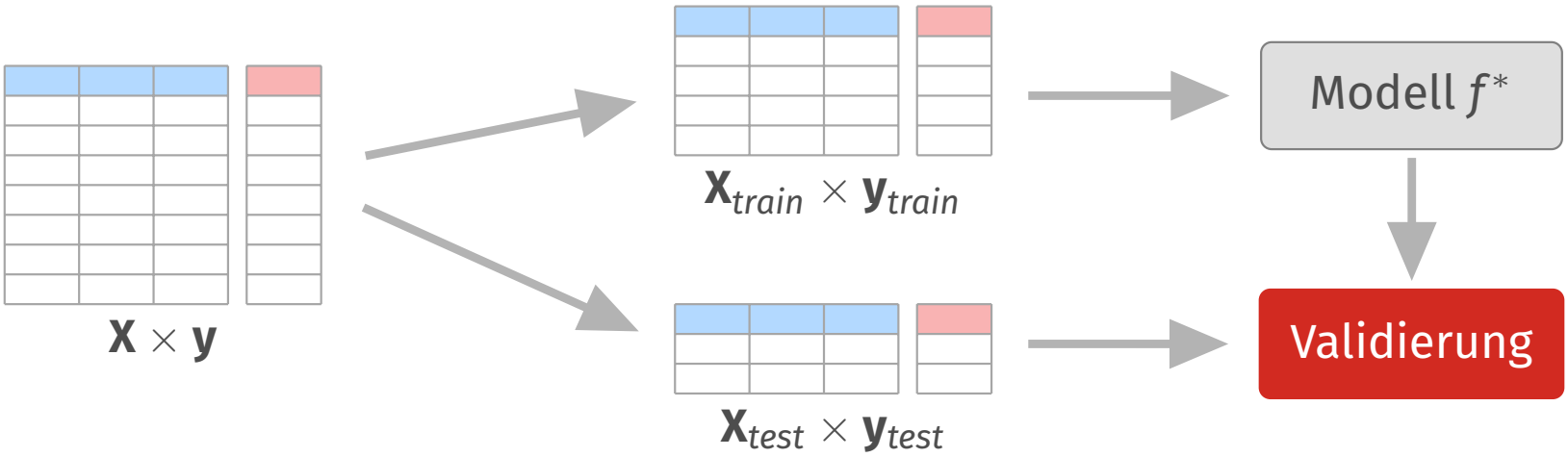
- Nutze *unabhängige* Test-Daten um f^* zu validieren!
- Oft 80% Trainingsdaten, 20% zum Testen (auch 70/30)

Ansatz: Aufteilung in Trainings- und Test-Daten



- Nutze *unabhängige* Test-Daten um f^* zu validieren!
- Oft 80% Trainingsdaten, 20% zum Testen (auch 70/30)

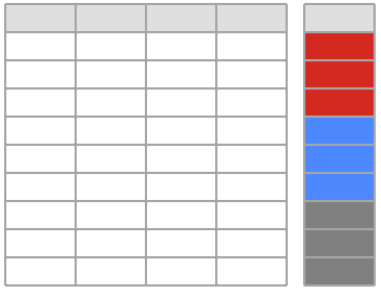
Ansatz: Aufteilung in Trainings- und Test-Daten



- Nutze *unabhängige* Test-Daten um f^* zu validieren!
- Oft 80% Trainingsdaten, 20% zum Testen (auch 70/30)

Aufteilung in Train/Test Daten

- Ok, nehmen wir 80:20 - was müssen wir beachten?
- Denken Sie an den Iris Datensatz (Übungsblatt 2, Aufgabe 2)!



Was passiert bei folgender Aufteilung von 60:40?

```
n = iris.shape[0]          # n Beispiele
splitAt = int(0.6 * n)     # 60% zum Training

X_train = iris[0:splitAt]
X_test = iris[splitAt:]
```

Wie ähnlich sollten sich $\mathbf{X}_{train} \times \mathbf{y}_{train}$ und *Xytest* sein?

Klassenverhältnis im Iris Datensatz:

- Gleichverteilt: setosa / virginica / versicolor jeweils 1/3
- Bei *linearem Splitting* im Verhältnis 60:40 ergibt sich:

$\mathbf{X}_{train} \times \mathbf{y}_{train}$	$\mathbf{X}_{test} \times \mathbf{y}_{test}$
50 × setosa	10 × virginica
40 × virginica	50 × versicolor

Wie ähnlich sollten sich $\mathbf{X}_{train} \times \mathbf{y}_{train}$ und *Xytest* sein?

Klassenverhältnis im Iris Datensatz:

- Gleichverteilt: setosa / virginica / versicolor jeweils 1/3
- Bei *linearem Splitting* im Verhältnis 60:40 ergibt sich:

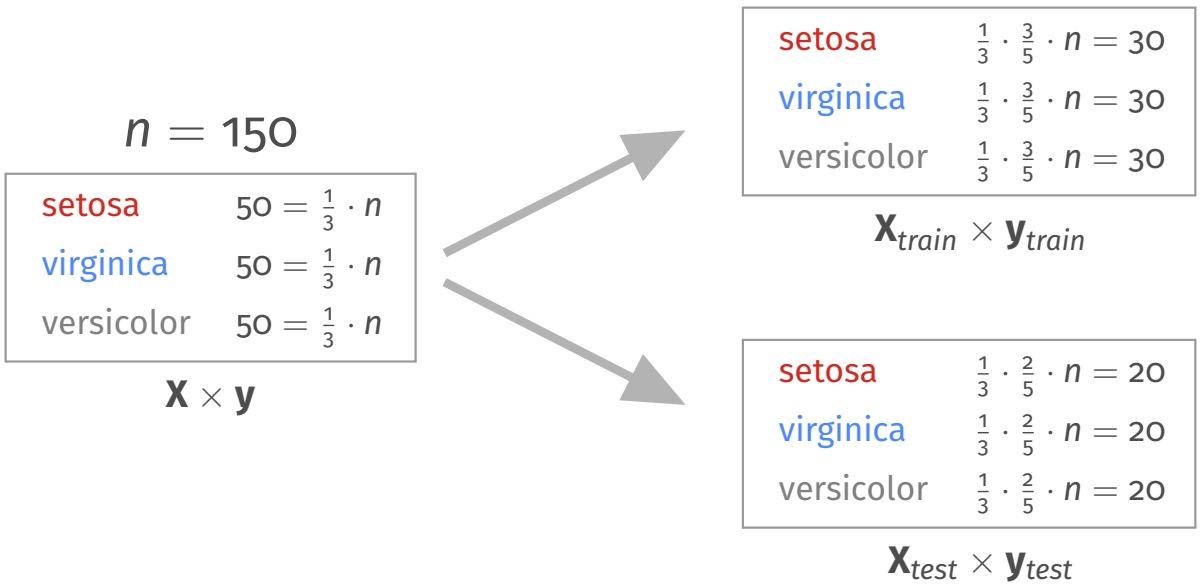
$\mathbf{X}_{train} \times \mathbf{y}_{train}$	$\mathbf{X}_{test} \times \mathbf{y}_{test}$
50 × setosa	10 × virginica
40 × virginica	50 × versicolor

Klasse versicolor in Trainingsdaten nicht enthalten!

Klasse setosa in Testdaten nicht enthalten!

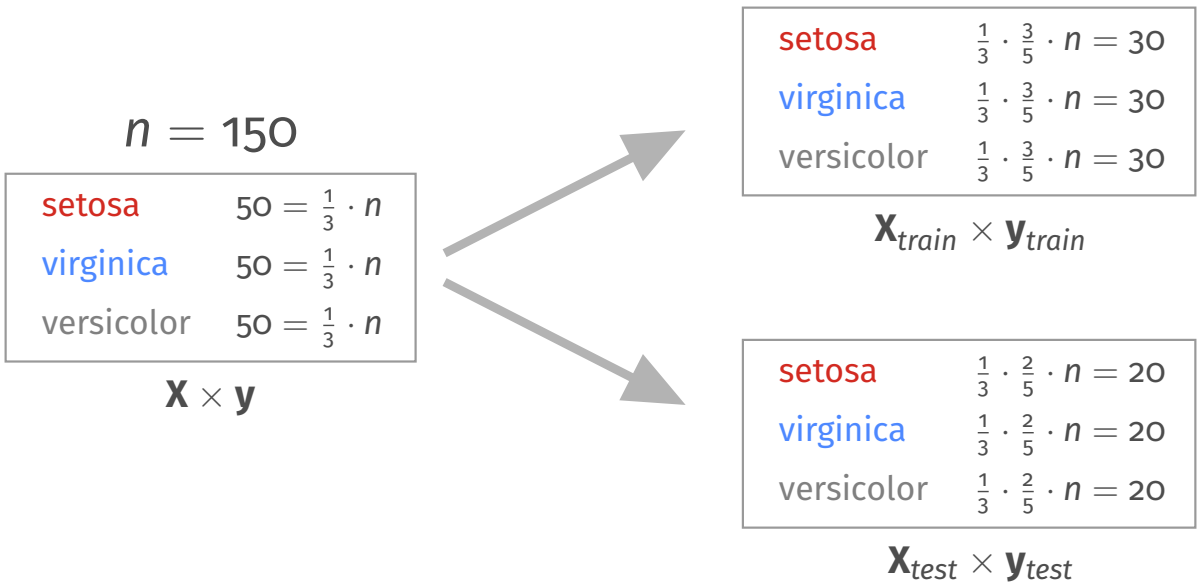
Split gemäß der Klassenverteilung: Stratified Sampling

- Stratified Sampling erhält die Klassenverhältnisse
- Beispiel für 60:40 Split:



Split gemäß der Klassenverteilung: Stratified Sampling

- Stratified Sampling erhält die Klassenverhältnisse
- Beispiel für 60:40 Split:



Aber: Was ist mit den Verteilungen der anderen Attribute? Zum Beispiel `sepal_length`?

Weiteres Problem:

- Daten mit Label oft nur begrenzt verfügbar
- Wir wollen möglichst viele Daten für ein gutes Modell nutzen

Idee: Leave-One-Out

1. Wähle ein Beispiel $x_i \in \mathbf{X}$
2. Trainiere das Modell f auf $(n-1)$ Beispielen $\mathbf{X} \setminus \{x_i\}$
3. Wir validieren f auf dem einen ausgewählten Beispiel x_i
4. Wiederhole das für alle n Beispiel und berechne den Durchschnittsfehler

Weitere Validierungsmethode ist Cross Validation

Vorgehen: Datenmenge sei $\mathbf{T}$

- Teile Daten $\mathbf{T}$ zufällig in k Teilmengen $\mathbf{T}_1, \ldots, \mathbf{T}_k$ auf
- Nutze $\mathbf{T}_i$ als Testmenge und $\mathbf{T} \setminus \mathbf{T}_i$ als Trainingsdaten
- Wiederhole dies für $i = \{1, \ldots, k\}$ und berechne Durchschnittsfehler über alle $\mathbf{T}_i$

Varianten:

- Stratified Cross-Validation erhält Klassenverteilung in den $\mathbf{T}_i$
- Spezialfall $k = n = |T|$ ergibt Leave-one-out Validierung

Maschinelles Lernen mit Python (1)

Module für das Maschinelle Lernen

- SciKit-Learn ist umfangreiches Modul mit vielen ML Algorithmen
- SciKit-Learn funktioniert ganz gut mit Pandas
- Keras als Modul für *Deep Learning* mit Python

Module für das Maschinelle Lernen

- SciKit-Learn ist umfangreiches Modul mit vielen ML Algorithmen
- SciKit-Learn funktioniert ganz gut mit Pandas
- Keras als Modul für *Deep Learning* mit Python

Zunächst aber:

- Grundlagen für das Verständnis (+Übungen)
- Einfaches Modul (`datascience`) zum Kennenlernen
- SciKit-Learn dann begleitend in den nächsten Vorlesungen

Modelle in Python - Welche Funktionen braucht man?

- Anlegen eines neuen, untrainierten Modells
- Anpassen des Modells auf Daten $\mathbf{X}, \mathbf{y}$
- Vorhersagen $\hat{\mathbf{y}}$ berechnen auf Daten $\mathbf{X}'$

Modelle als Klassen mit drei Methoden

- Initialisierung, Training (fit) und Vorhersage (predict)

```
class MyClassifier:

  __init__(self):
    pass

  fit(self, X, y):
    pass

  predict(self, x):
    pass
```

Einfaches Python Modul zu Demo-Zwecken

- Auf Notebook-Server verfügbar
- Enthält *Zufallsklassifikator*
- Auf grundlegende Konzepte beschränkt
- Benutzung mit Pandas

```
import datascience as ds

# Erzeugen eines leeren Modells:
model = ds.Zufall()
```

“Training” des Zufallsmodells

```
import pandas as pd
import datascience as ds

# Trainingsdaten anlegen:
X = pd.DataFrame([1,1],[2,2],[3,3], list("AB"))
y = pd.Series(['setosa','virginica','versicolor'])

# Modell erzeugen
model = ds.Zufall()

# Modell 'trainieren'
model.fit(X, y)

# Vorhersage auf Trainingsdaten berechnen
y_hat = Series(model.predict(X), index=X.index)
```

Ein Blick in das Modell `Zufall` - Initialisierung

Beim Anlegen wird lediglich die Liste `classes` als leere Liste angelegt und ein Zufallsgenerator `rnd` erzeugt:

```
import random.Random

class Zufall:

  # initialisiere die Liste der Klassen
  # und den Zufallsgenerator:
  def __init__(self, random_seed=0):
    self.classes=[]
    self.rnd = random.Random(seed=random_seed)
```

Ein Blick in das Modell `Zufall` - Training (fit) Beim Training

merkt sich das Modell einfach alle Klassen des Trainingsdatensatzes:

```
class Zufall:

  # "Lerne" die Liste der Klassen
  # aus dem Trainingsdatensatz
  #
  def fit(self, X, y):
    self.classes = [str(l) for l in list(y.values)]
```

Ein Blick in das Modell `Zufall` - Vorhersage

Bei der Vorhersage wird einfach für jedes zu klassifizierende Beispiel eine zufällige Klasse gewählt:

```
class Zufall:

  # Erzeuge eine Liste der Laenge n mit zufaelligen
  # Werten aus self.classes
  def predict(self, X):
    n = len(X)
    return [self._pick_random() for x in range(n)]

  # Hilfsfunktion um aus der Liste der Klassen
  # ein zufaelliges Element zu ziehen:
  def _pick_random(self):
    index = rnd.randint(0, len(classes) - 1)
    return self.classes[index]
```