Data Science

Prof. Dr. Christian Bockermann

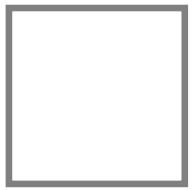
Hochschule Bochum

Wintersemester 2023/2024

Overview

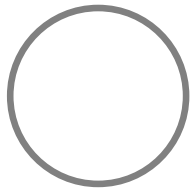
Menschliches Lernen nutzt Ähnlichkeiten aus

Zum Beispiel über Formen:



Quadrat

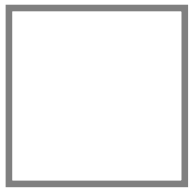
Rechteck



Kreis

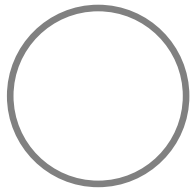
Menschliches Lernen nutzt Ähnlichkeiten aus

Zum Beispiel über Formen:



Quadrat

Rechteck



Kreis

Oder andere Eigenschaften (Größe, Gewicht):

Fussball

Handball

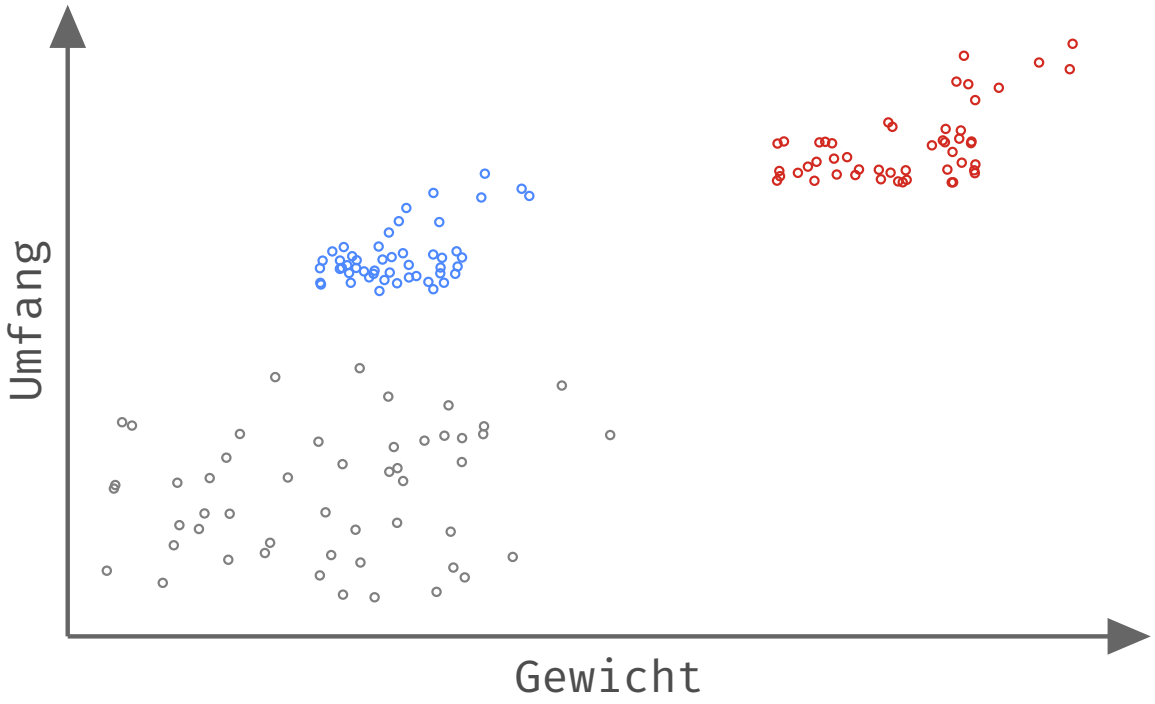
Basketball

Beispiel: Klassifikation von Bällen

Wir wollen Bälle ihrer Sportart zuordnen (Klassifikationsaufgabe)

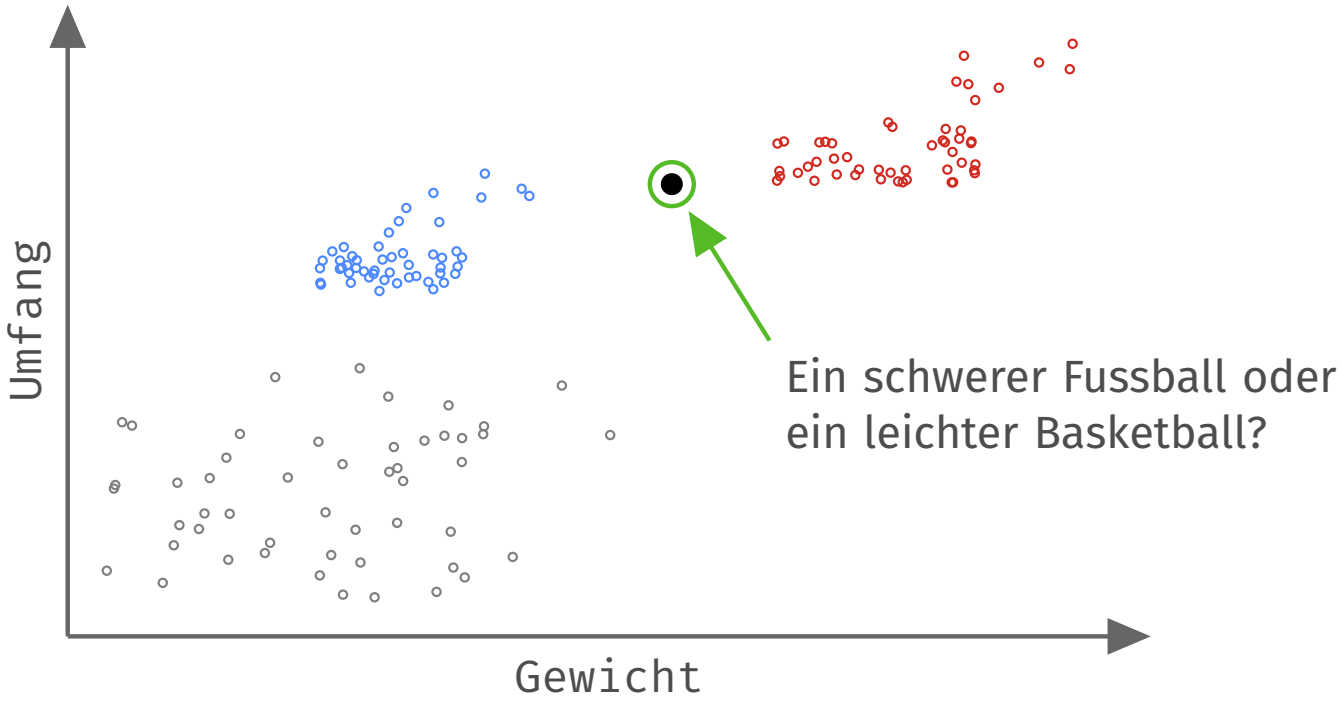
Umfang (cm)	**Gewicht** (g)	**Sportart**
70.29	444.30	Fussball
77.73	647.53	Basketball
53.34	427.07	Handball
57.09	406.12	Handball
68.28	440.96	Fussball
80.38	648.94	Basketball

Beispiel: Maße unterschiedlicher Bälle



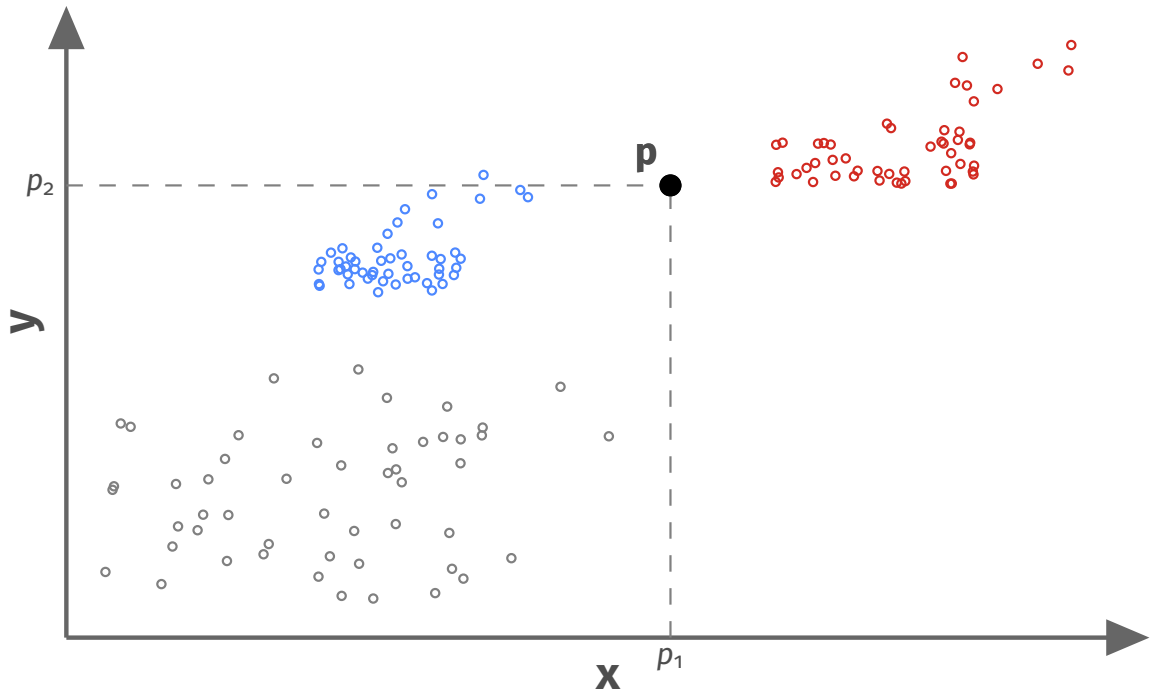
Verschiedene Bälle nachgemessen: Fussball, Handball und Basketball

Beispiel: Maße unterschiedlicher Bälle



Verschiedene Bälle nachgemessen: Fussball, Handball und Basketball

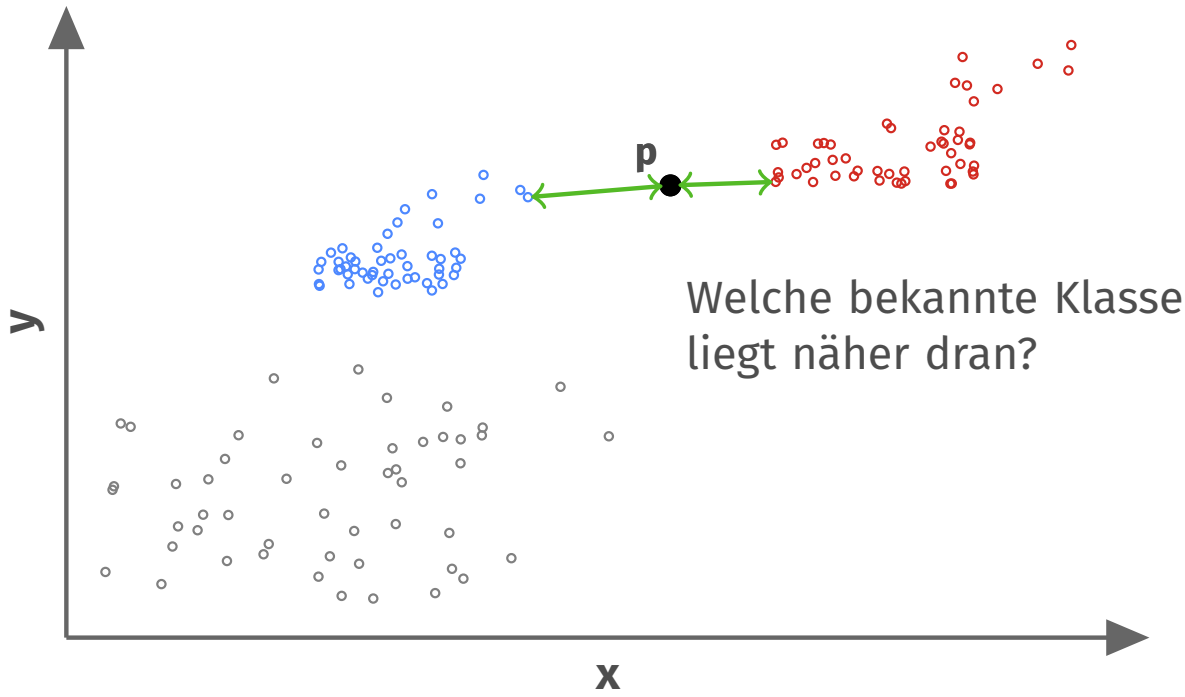
Betrachte 2-dimensionalen Raum: $\mathbb{R}^2$



2-dimensionaler Raum: Jeder Punkt **p** besteht aus 2 Koordinaten:

$$\mathbf{p} = (p_1, p_2)$$

Betrachte 2-dimensionalen Raum: $\mathbb{R}^2$



Idee: Wir nutzen den Abstand als Ähnlichkeit und sagen die Klasse vorher, die am nächsten ist!

Distanzmaße

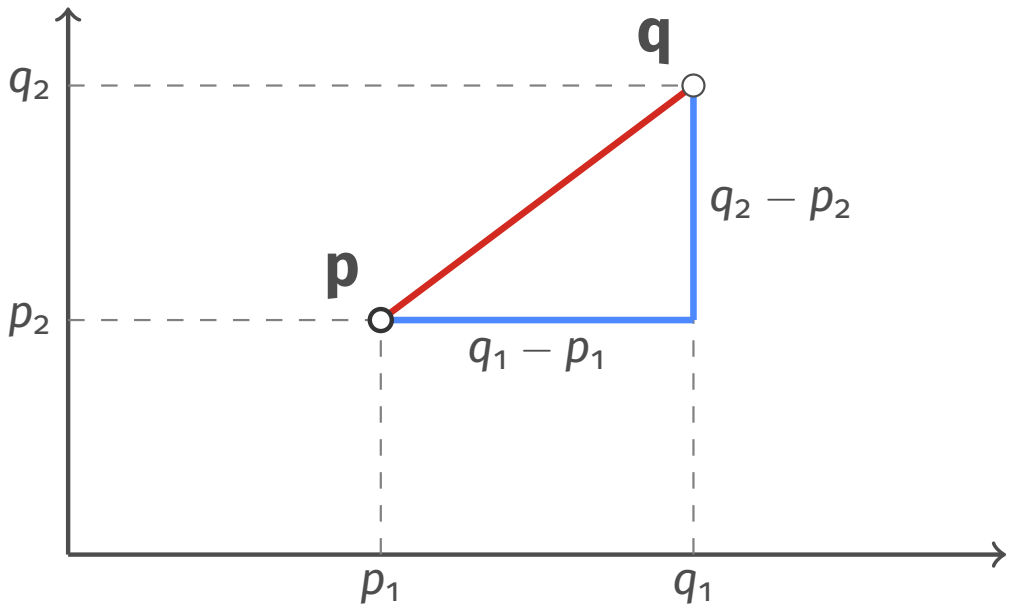
Euklidische Distanz zwischen Punkten **p** und **q**:

$$dist(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{d} (p_i - q_i)^2}$$

- Gilt für d dimensionalen Raum
- Im Bälle-Beispiel ist der Raum 2-dimensional, d.h. $d = 2$
- Euklidische Distanz entspricht der L_2 Norm eines Vektorraumes

Euklidische Distanz

Im 2-dimensionalen Raum ergibt sich die euklidische Distanz aus dem Satz des Pythagoras:



$$dist(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sqrt{(q_1 - p_2)^2 + (q_1 - p_2)^2}$$

Lernen mit Ähnlichkeiten

Wie bauen wir nun ein Modell auf Ähnlichkeiten auf?

1. Wir brauchen ein Ähnlichkeitsmaß (z.B. euklidische Distanz)
2. Wir merken uns den gesamten Trainingsdatensatz
3. Zur Vorhersage eines Beispiels vergleichen wir es mit allen Trainingsbeispielen und sagen die Klasse des ähnlichsten Beispiels vorher!

Lernen mit Ähnlichkeiten: Training des Modells

X_{train}		y_{train}
Umfang	Gewicht	Art
75,93	638,26	BB
70,39	409,84	FB
52,95	351,01	HB

Modell m

Lernen mit Ähnlichkeiten: Training des Modells

X_{train}		y_{train}
Umfang	Gewicht	Art
75,93	638,26	BB
70,39	409,84	FB
52,95	351,01	HB

Modell m

Das Modell merkt sich den kompletten Trainingsdatensatz!

```
m = datascience.AuswendigLernen()
m.fit(X_train, y_train)
```

Lernen mit Ähnlichkeiten: Vorhersage mit Modell `m`

```
y_hat = m.predict(X_test)
```

Modell `m`

X_{train} y_{train}

Umfang	Gewicht	Art
75,93	638,26	BB
70,39	409,84	FB
52,95	351,01	HB

Neue Daten
`X_test`

74,44	441,00
75,11	639,93

Vorhersage
`y_hat`

Lernen mit Ähnlichkeiten: Vorhersage mit Modell `m`

```
y_hat = m.predict(X_test)
```

Modell `m`

X_{train} y_{train}

Umfang	Gewicht	Art
75,93	638,26	BB
70,39	409,84	FB
52,95	351,01	HB

Neue Daten
`X_test`

74,44	441,00
75,11	639,93

Vorhersage
`y_hat`

Distanz:

$$\sqrt{(74,44 - 75,93)^2 + (441,00 - 638,26)^2} \approx 198,931$$

Lernen mit Ähnlichkeiten: Vorhersage mit Modell `m`

```
y_hat = m.predict(X_test)
```

Modell `m`

X_{train} y_{train}

Umfang	Gewicht	Art
75,93	638,26	BB
70,39	409,84	FB
52,95	351,01	HB

Neue Daten
`X_test`

74,44	441,00
75,11	639,93

Vorhersage
`y_hat`

Distanz:

$$\sqrt{(74,44 - 70,39)^2 + (441,00 - 409,84)^2} \approx 31.422$$

Lernen mit Ähnlichkeiten: Vorhersage mit Modell `m`

```
y_hat = m.predict(X_test)
```

Modell `m`

X_{train} y_{train}

Umfang	Gewicht	Art
75,93	638,26	BB
70,39	409,84	FB
52,95	351,01	HB

Neue Daten
`X_test`

74,44	441,00
75,11	639,93

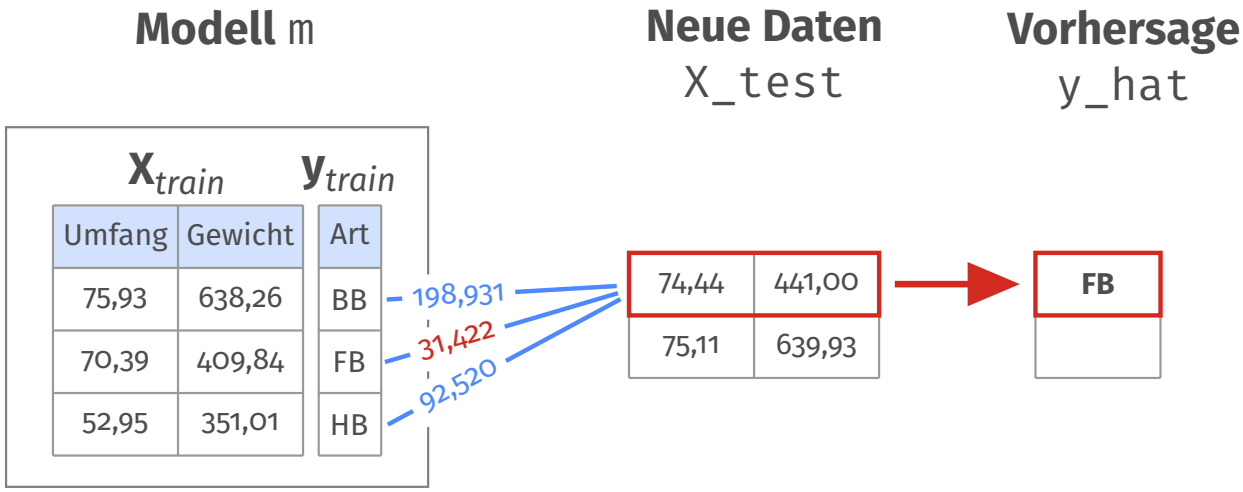
Vorhersage
`y_hat`

Distanz:

$$\sqrt{(74,44 - 52,95)^2 + (441,00 - 351,01)^2} \approx 92.520$$

Lernen mit Ähnlichkeiten: Vorhersage mit Modell `m`

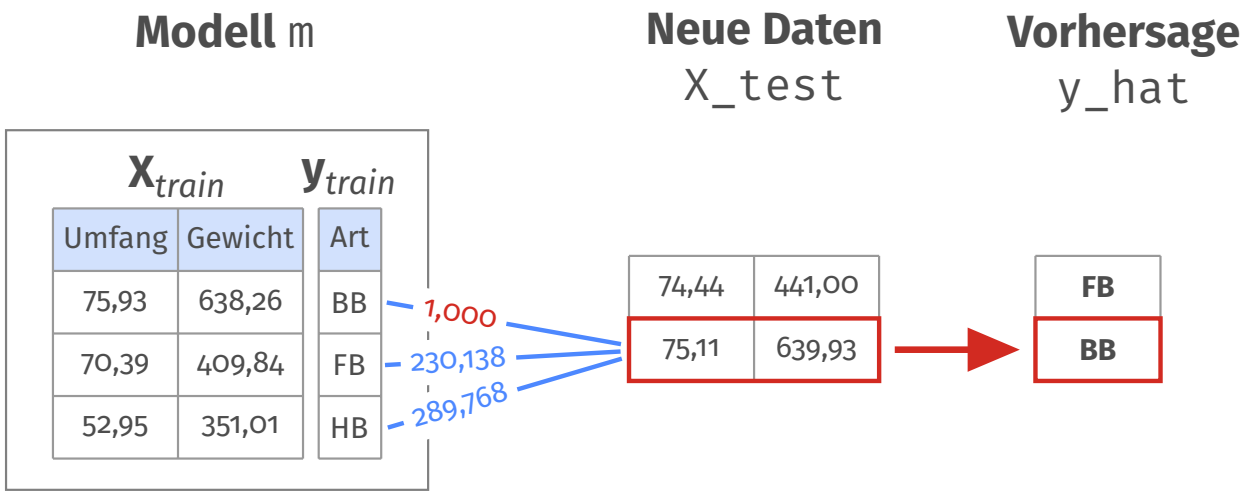
```
y_hat = m.predict(X_test)
```



Die Klasse **FB** ist
am nächsten dran!

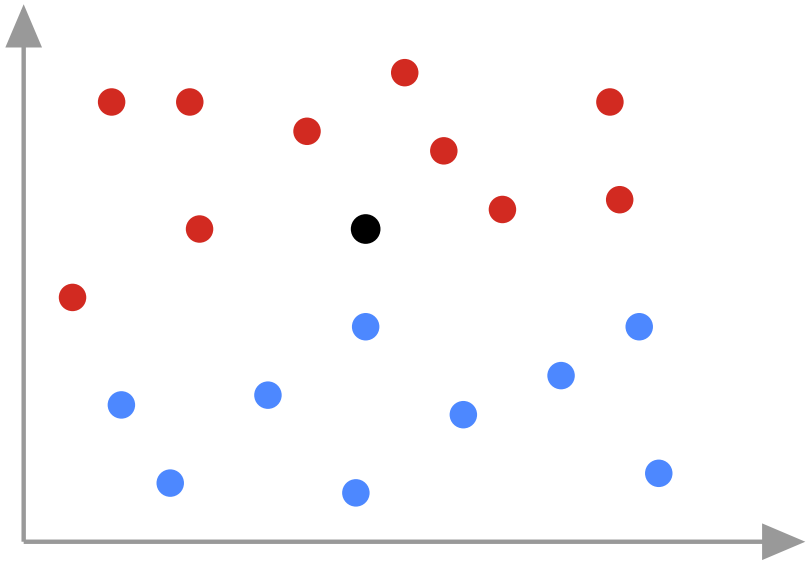
Lernen mit Ähnlichkeiten: Vorhersage mit Modell `m`

```
y_hat = m.predict(X_test)
```

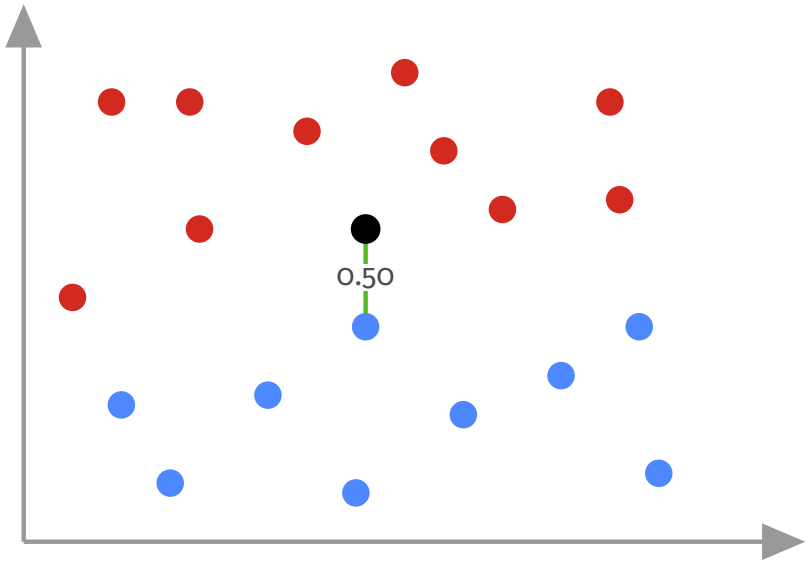


Die Klasse **BB** ist
am nächsten dran!

Frage: Ist das nächstgelegene Beispiel eine gute Vorhersage?



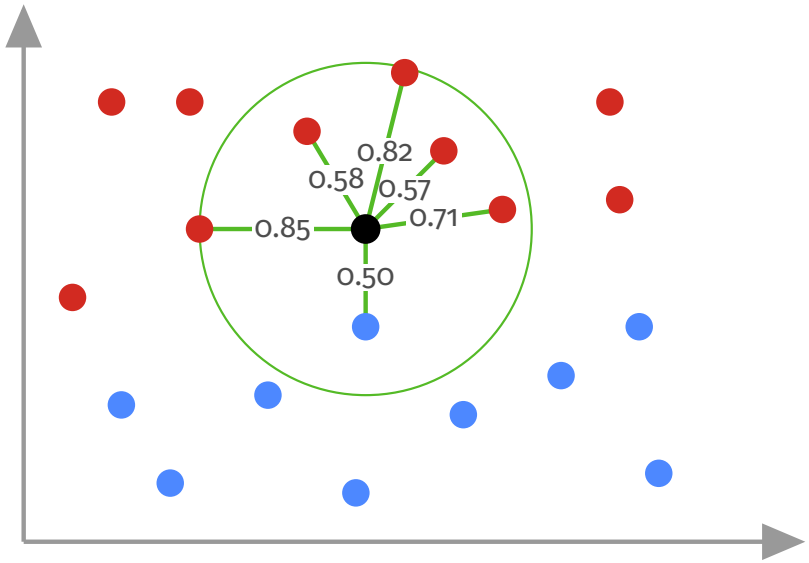
Frage: Ist das nächstgelegene Beispiel eine gute Vorhersage?



Welcher Klasse würden Sie den scharzen Punkt zuordnen?

- Der nächstgelegenste Punkt ist blau

Frage: Ist das nächstgelegene Beispiel eine gute Vorhersage?



Welcher Klasse würden Sie den scharzen Punkt zuordnen?

- Der nächstgelegenste Punkt ist blau
- Von den 5 nächstengelegensten Punkten sind 4 rot und 1 blau

Verfahren: k-Nearest Neighbors (k-NN)

Training: Speichern der Trainingsdaten $\mathbf{X}_{train}, \mathbf{y}_{train}$

Vorhersage: Beispiel $\mathbf{x}$

- Bestimme die k nächsten Nachbarn für $\mathbf{x}$ in $\mathbf{X}_{train}, \mathbf{y}_{train}$
- Vorhersage für $\mathbf{x}$ ist häufigste Klasse der Nachbarn von $\mathbf{x}$

Verfahren: k-Nearest Neighbors (k-NN)

Training: Speichern der Trainingsdaten $\mathbf{X}_{train}, \mathbf{y}_{train}$

Vorhersage: Beispiel $\mathbf{x}$

- Bestimme die k nächsten Nachbarn für $\mathbf{x}$ in $\mathbf{X}_{train}, \mathbf{y}_{train}$
- Vorhersage für $\mathbf{x}$ ist häufigste Klasse der Nachbarn von $\mathbf{x}$

k-NN in Python (SciKit-Learn):

```
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier

m = KNeighborsClassifier(5) # hier: 'k' = 5
```

Was haben Sie jetzt gelernt?

- Daten als 2-dimensionaler Raum, euklidische Distanz
- Neues Lernverfahren (*k*NN) für Klassifikation
- Direkt in Python/Notebook nutzen:

```
m = KNeighborsClassifier(5)
m.fit(X_train, y_train)
```

Was haben Sie jetzt gelernt?

- Daten als 2-dimensionaler Raum, euklidische Distanz
- Neues Lernverfahren (kNN) für Klassifikation
- Direkt in Python/Notebook nutzen:

```
m = KNeighborsClassifier(5)
m.fit(X_train, y_train)
```

Worüber sollten wir uns weiter Gedanken machen?

- Welches k nehmen wir für unser k-NN Modell?
- Was müssen wir bei Distanzen beachten? Was ist mit $d > 2$?
- Wie unterscheidet sich k-NN von Entscheidungsbäumen?

Welches k nehmen wir?

Ein Ansatz: Auswahl nach Trainingsfehler?

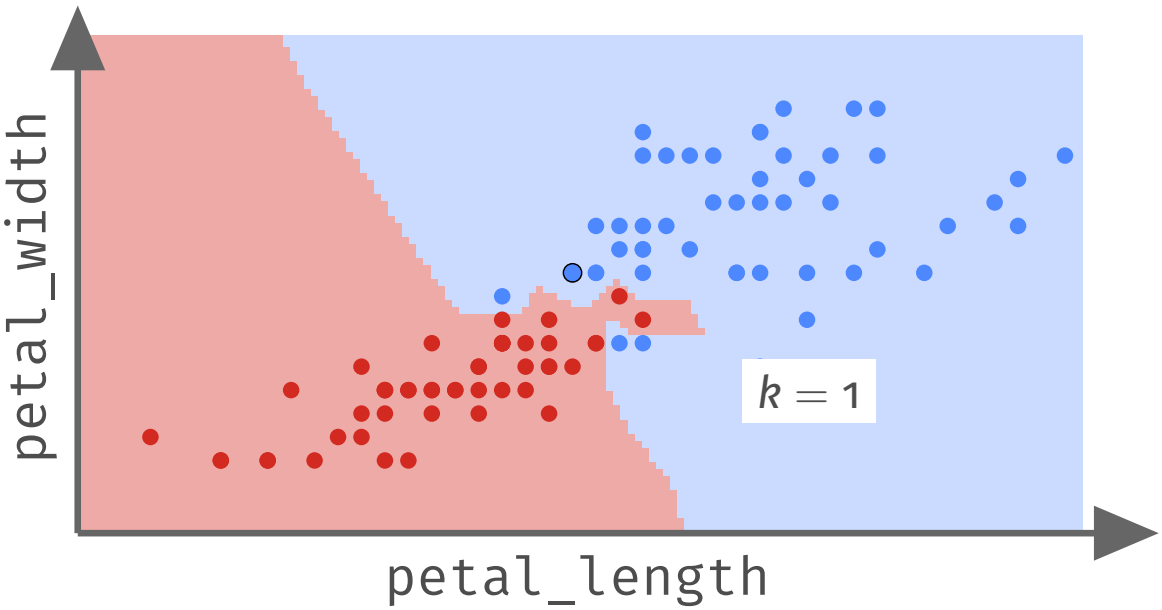
Überlegen Sie selbst:

- Was passiert bei $k = 1$ im Training/der Vorhersage?
- Welchen Trainingsfehler bekommen wir für $k = 1$?

◀ Probieren Sie es im Notebook aus!

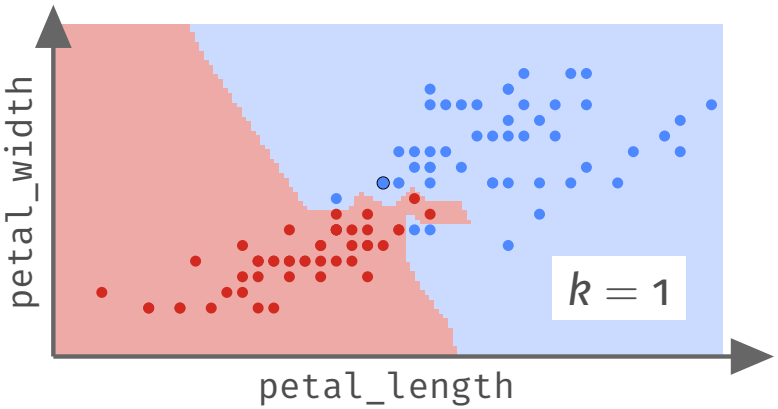
Notebook: `Kurse/DataScience1/V6-knn-Welches-k.ipynb`

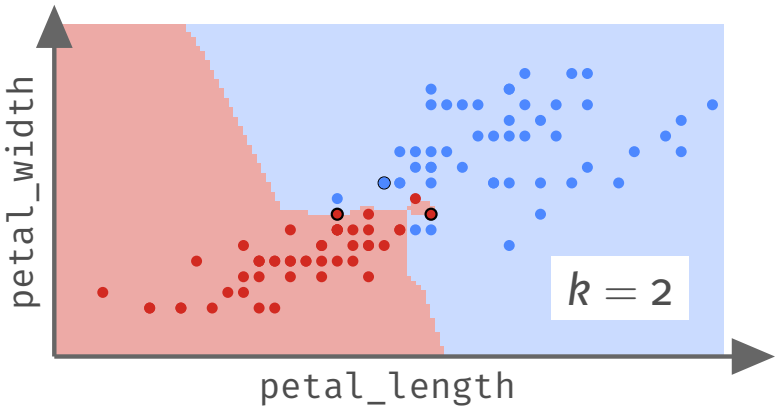
Iris Daten (2 Klassen), k-NN mit $k = 1$

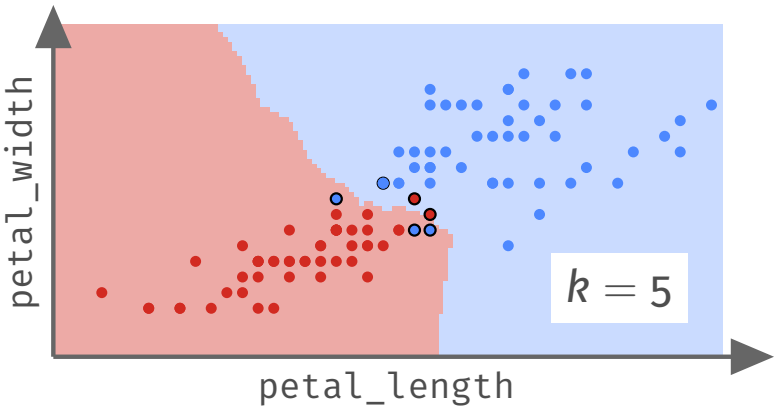


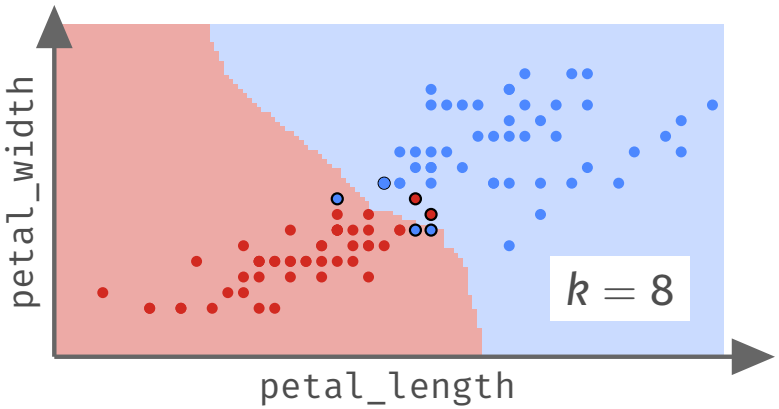
- Plot zeigt den Iris Datensatz ohne die Klasse *setosa*
- Hintergund zeigt alle Punkte (Regionen) die der Klasse versicolor, bzw. virginica zugeordnet werden würden

Iris Daten (2 Klassen) mit unterschiedlichen k Werten









Welches k?

Bedeutung von k

- Vorhersage ist quasi *Mehrheitsentscheid* (*Majority Vote*)
- Je größer k, desto kleiner der Einfluss *einzelner* Datenpunkte
- Größeres k führt zu weniger Inseln, geglätteten Entscheidungslinien

Trade-Off: Generalisierbarkeit und Spezialisierung

- Wie geht k-NN für verschiedene k mit “Ausnahmen” um?

Bedeutung von k

- Vorhersage ist quasi *Mehrheitsentscheid* (*Majority Vote*)
- Je größer k, desto kleiner der Einfluss *einzelner* Datenpunkte
- Größeres k führt zu weniger Inseln, geglätteten Entscheidungslinien

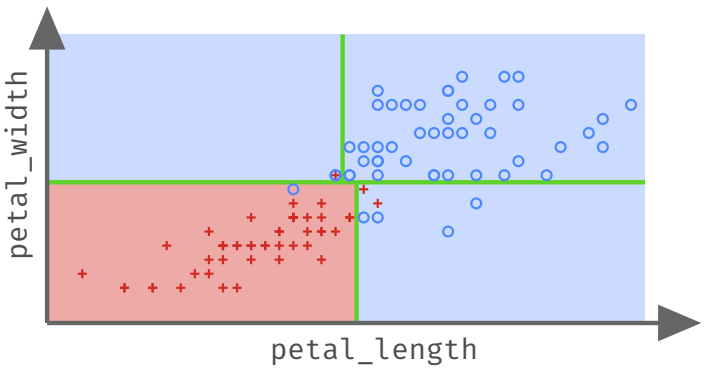
Trade-Off: Generalisierbarkeit und Spezialisierung

- Wie geht k-NN für verschiedene k mit “Ausnahmen” um?

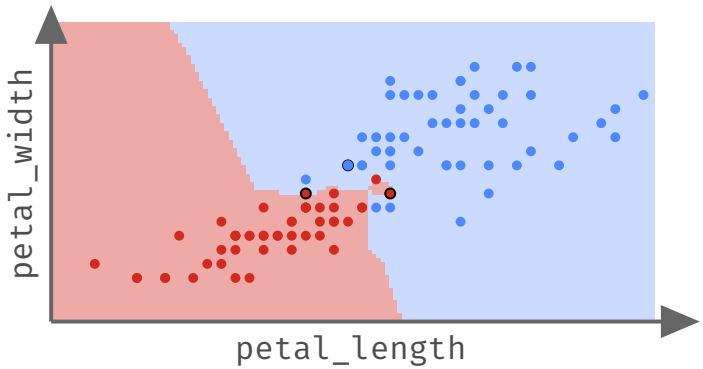
Schauen Sie sich vor dem Hintergrund
dieser Punkte nochmal die Folien 16 an!

Wo besteht der Unterschied zu Entscheidungsbäumen?

- Entscheidungslinien parallel zu den Achsen
- Schrittweise Aufteilung nach jeweils nur *einem* Attribut



- Nachbarschaftsansatz führt zu *Bereichen* für jede Klasse
- Entscheidung nach Distanz über alle Attribute (Mehrheit)



Distanzen und Metriken

Was ist eine Distanz? Was ist eine Metrik?

Sei V eine Menge.
Ein Distanzmaß *dist* ist eine Funktion, die zwei Punkten $p, q \in V$ einen Abstand zuordnet

$$dist : V \times V \to \mathbb{R}$$

und dabei die folgenden Eigenschaften hat:

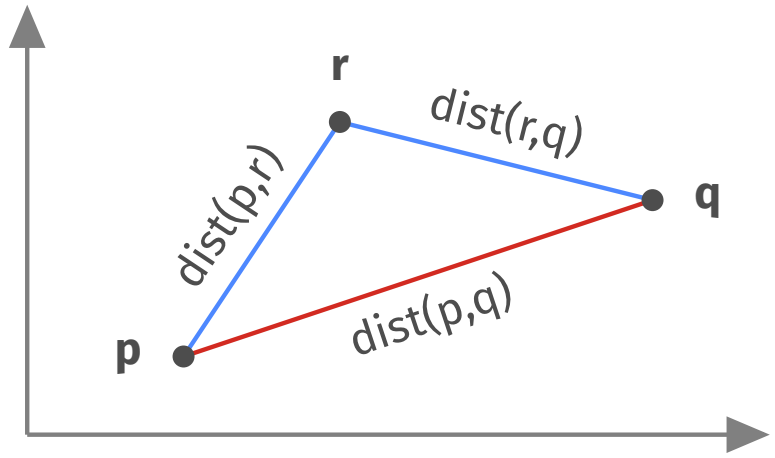
1. dist(p, q) = dist(q, p)
2. dist(p, q) $\geq$ 0 und dist(p, q) = 0 $\Leftrightarrow p = q$

Was ist eine Distanz? Was ist eine Metrik?

Ein Distanzmaß ist eine Metrik, wenn zusätzlich die sogenannte Dreiecks-Ungleichung gilt:

3. $\text{dist}(p, q) \leq \text{dist}(p, r) + \text{dist}(r, q)$

Anschaulich: "Der direkte Weg ist immer der kürzeste!"



Welche Distanzen/Metriken gibt es?

Manhattan Distanz (1-Norm)

$$dist_{L_1}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{d} |x_i - y_i|$$

Euklidische Distanz (2-Norm)

$$dist_{L_2}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{d} (x_i - y_i)^2}$$

Minkowski Distanz (p-Norm)

$$dist_{L_p}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \left[\sum_{i=1}^{d} |x_i - y_i|^p \right]^{1/p}$$

Distanzen funktionieren nur auf metrischen, skalierten Variablen

Datensätze bisher:

- Iris-Daten, Attribute waren Maße in Zentimetern
- Ball-Daten, Attribute in Gramm und Zentimetern

Frage: Was bedeutet $dist(p, q) = 10$ bei den Ball-Daten?

$$\sqrt{\underbrace{(p_1 - q_1)}_{Umfang}^2 + \underbrace{(p_2 - q_2)}_{Gewicht}^2} = 10$$

0 cm	10 g	Gleicher Umfang, 10g schwerer
10 cm	0 g	10cm größer, gleiches Gewicht

Distanzen funktionieren nur auf metrischen, skalierten Variablen

Datensätze bisher:

- Iris-Daten, Attribute waren Maße in Zentimetern
- Ball-Daten, Attribute in Gramm und Zentimetern

Frage: Was bedeutet $dist(p, q) = 10$ bei den Ball-Daten?

$$\sqrt{\underbrace{(p_1 - q_1)}_{Umfang}^2 + \underbrace{(p_2 - q_2)}_{Gewicht}^2} = 10$$

0 cm	10 g	Gleicher Umfang, 10g schwerer
10 cm	0 g	10cm größer, gleiches Gewicht

Wertebereich *Umfang*: 48,57 cm bis 83,97 cm

Wertebereich *Gewicht*: **315,64** g bis **686,33** g

Frage: Was bedeutet $dist(p, q) = 10$ bei den Ball-Daten?

$$\sqrt{\underbrace{(p_1 - q_1)}_{Umfang}^2 + \underbrace{(p_2 - q_2)}_{Gewicht}^2} = 10$$

0 cm	10 g	Gleicher Umfang, 10g schwerer
10 cm	0 g	10cm größer, gleiches Gewicht

Frage: Was bedeutet $dist(p, q) = 10$ bei den Ball-Daten?

$$\sqrt{\underbrace{(p_1 - q_1)}_{\textit{Umfang}}^2 + \underbrace{(p_2 - q_2)}_{\textit{Gewicht}}^2} = 10$$

0 cm	10 g	Gleicher Umfang, 10g schwerer
10 cm	0 g	10cm größer, gleiches Gewicht

Wertebereich *Umfang*: 48,57 cm bis 83,97 cm

Wertebereich *Gewicht*: **315,64** g bis **686,33** g

Frage: Was bedeutet $dist(p, q) = 10$ bei den Ball-Daten?

$$\sqrt{\underbrace{(p_1 - q_1)}_{\textit{Umfang}}^2 + \underbrace{(p_2 - q_2)}_{\textit{Gewicht}}^2} = 10$$

0 cm	10 g	Gleicher Umfang, 10g schwerer
10 cm	0 g	10cm größer, gleiches Gewicht

Wertebereich *Umfang*: 48,57 cm bis 83,97 cm

Wertebereich *Gewicht*: **315,64** g bis **686,33** g

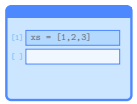
Die Metrik behandelt beide Variablen gleich.
Das macht eventuell nicht immer so viel Sinn!

Bezug z.B. zur Wirtschaftsstatistik

Charakterisierung von Attributen/Merkmalen/Variablen durch

- Minimum, Maximum
- Mittelwert, Standardabweichung

In welcher Relation steht dist(p,q) = 10 zu Umfang/Gewicht?



◀ Probieren Sie es im Notebook aus!

Notebook: Kurse/DataScience1/V6-Wertebereiche.ipynb

Idee: Normalisierung der Attribute/Variablen

- Anpassung der Werte auf gleichen Wertebereich
- z.B. Skalierung jeder Spalte auf [0,1]

Min-Max-Normalisierung einer Variablen X

$$X' = \frac{X - min(X)}{max(X) - min(X)}$$

```
zaehler = df['Umfang'] - min(df['Umfang'])
nenner = max(df['Umfang']) - min(df['Umfang'])

df['Umfang'] = zaehler / nenner
```

Frage: Was ist mit der Verteilung der Attribute?

- Wertebereiche mit Min/Max auf [0,1] normalisiert
- Variablen haben aber ggf. unterschiedliche Mittelwerte/Std-Abweichung?

Z-Normalisierung einer Variablen X

$$X'' = \frac{X - \mu(X)}{\sigma(X)}$$

ergibt eine Variable X'' mit Mittelwert 0 und Standardabweichung etwa bei 1.

Overfitting: Wie genau müssen wir sein?

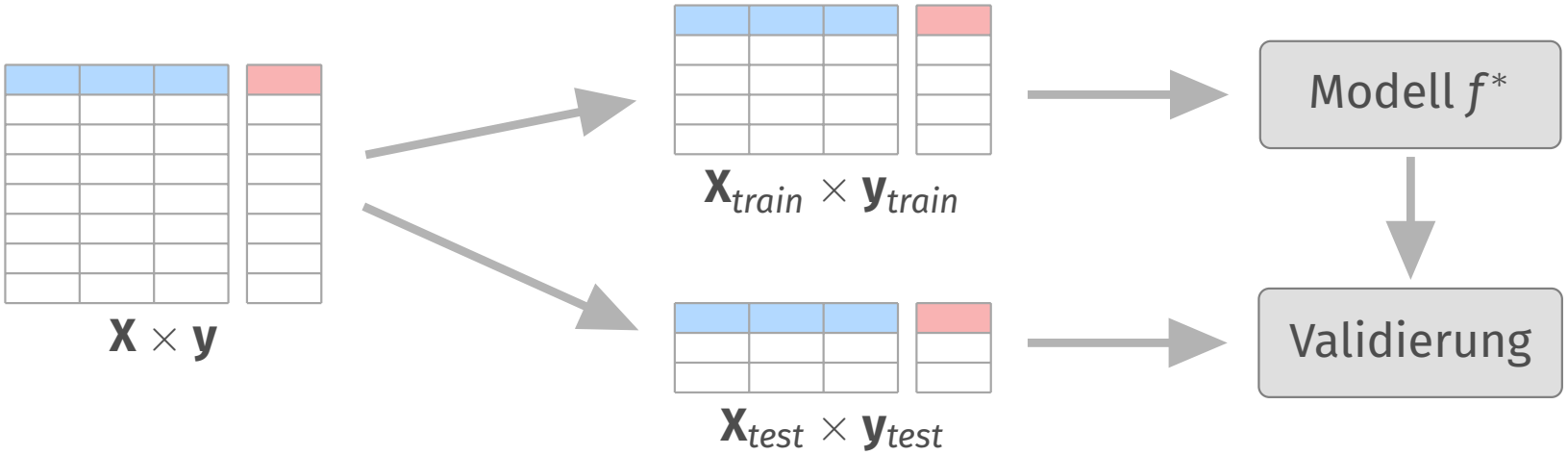
Diskussion: Wie genau müssen wir sein?

Diskussion: Wie genau müssen wir sein?

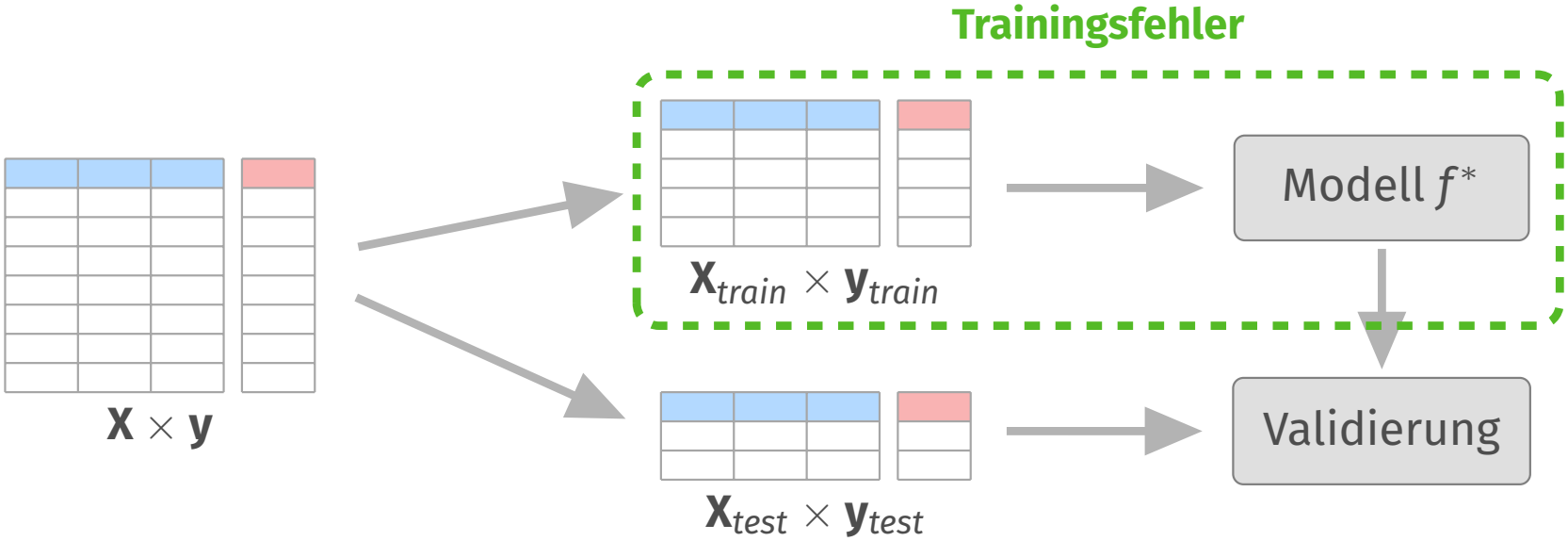
Diskussion: Wie genau müssen wir sein?

Diskussion: Wie genau müssen wir sein?

Diskussion: Wie genau müssen wir sein?

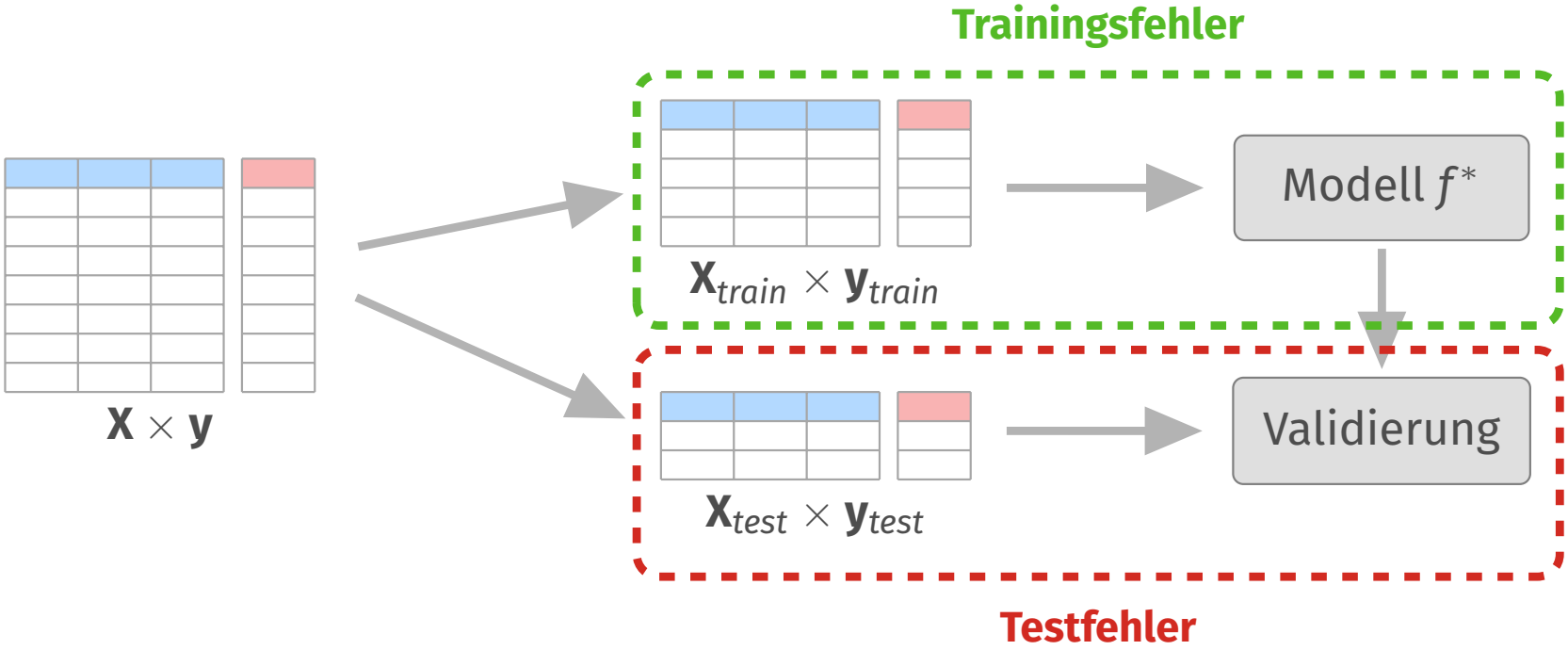


Diskussion: Wie genau müssen wir sein?



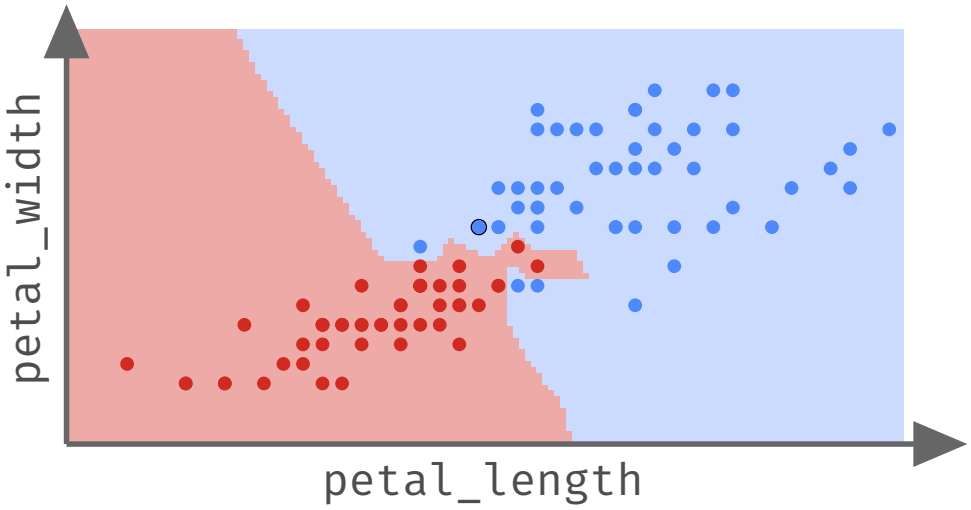
- Trainingsfehler: Modell an Trainingsdaten anpassen

Diskussion: Wie genau müssen wir sein?

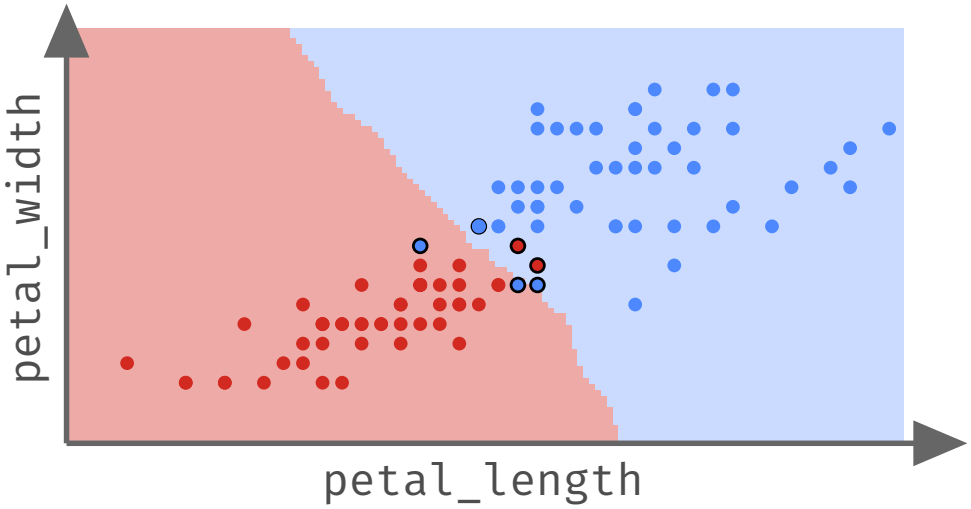


- Trainingsfehler: Modell an Trainingsdaten anpassen
- Testfehler: Modell auf unbekannten Daten (auch: Generalisierungsfehler)

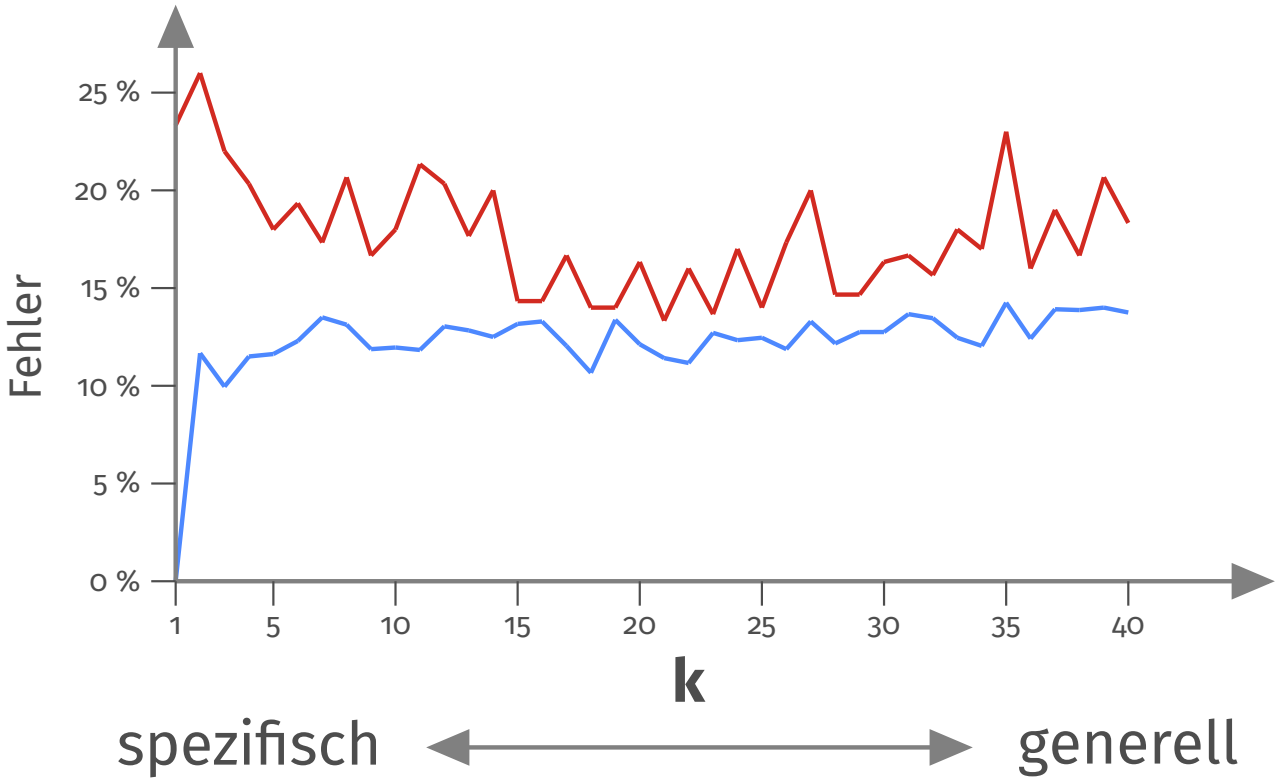
k=1



k=16



Training und Test-Fehler auf generiertem Datensatz (k-NN)



Overfitting

“Das Modell passt nur zu den Trainingsdaten.”

Overfitting

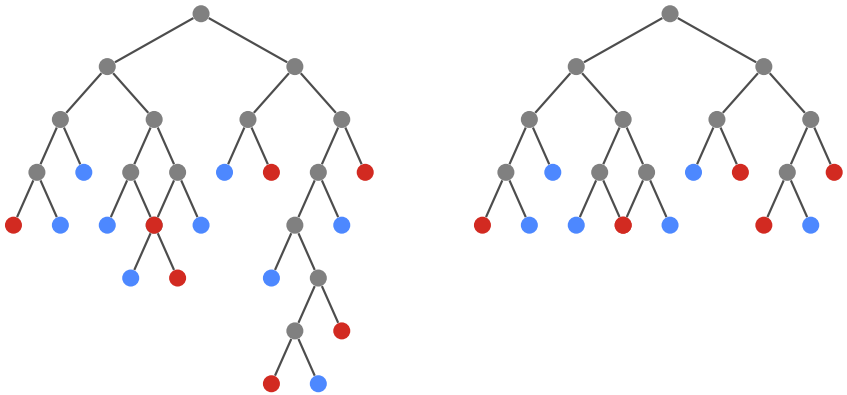
"Das Modell passt nur zu den Trainingsdaten."

	Trainingsfehler **klein**	Trainingsfehler **groß**
Testfehler **klein**	Das sieht gut aus!	
Testfehler **groß**	**Overfitting!**	Das Modell lernt nicht!?

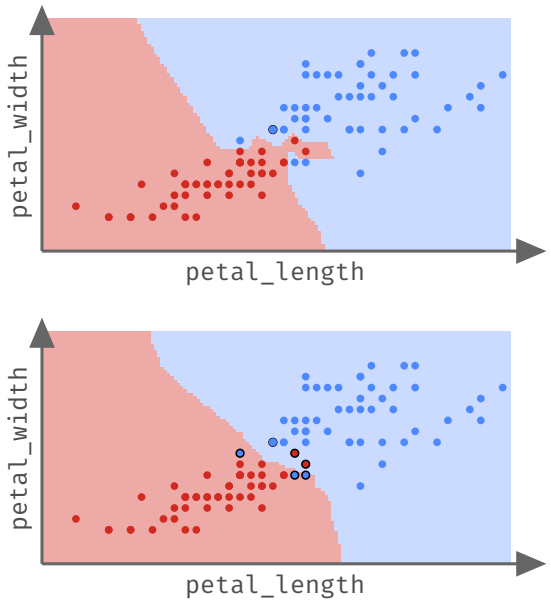
Overfitting - zu spezifisches Modell

- Modell zu sehr an die Trainingsdaten angepasst
- Vorhersage auf unbekannten Daten schlechter
- Modellkomplexität begrenzen (generelleres Modell)

Tiefe bei Bäumen beschränken



k bei k-NN erhöhen



A capella Song zum Thema Overfitting

https://youtu.be/DQWI1kvmwRg