KLASSIFIKATION

Joern Ploennigs · AI4SC

Die Klassifikation ist die zweite wichtige Problemstellung im Supervised Learning deren Ziel es ist für eine Menge an Daten vorher bekannte Klassen zu lernen und diese für neue Datensätze vorherzusagen. Bei den Klassen kann es sich um binäre Daten handeln (z.B. Ja/Nein - Erkennung, ob ein Bauteil intakt oder beschädigt ist, Ein/Aus - Aktivität von Anlagen) oder kategorische Daten (z.B. Kategorisierung von Rissen: fein, mittel, grob). Sie können aber auch zur Klassifikation genutzt werden – auch wenn die mathematische Struktur Regressionsmodellen ähnelt - genauso wie logistische Regressionsmodelle, die speziell für binäre Klassifikation gedacht sind verwendet werden können.

ENTSCHEIDUNGSBÄUME ZUR KLASSIFIKATION

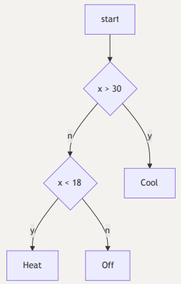
Entscheidungsbäume (en. *Decission Trees*) sind eine beliebte Methode des maschinellen Lernens zur Klassifizierung von Datenpunkten, da sie intuitiv und leicht verständlich sind. Das macht sie zu einem guten Werkzeug für Anfänger und Experten gleichermaßen. Sie können numerische und kategorische Daten als Eingangsvariablen verarbeiten.

Das Grundelement eines Entscheidungsbaum ist eine einfache Wenn-Dann-Sonst-Verzweigung (if-else), die wir aus der Programmierung kennen. Hierbei wird auf einer Eingangsgrößen eine Bedingung definiert und für die beiden Antwortvarianten werden unterschiedliche Rückgabewerte ausgegeben.

```
if x > 30:
  y = "Cool"
else:
  if x < 18:
    y = "Heat"
  else:
    y = "off"
```

Durch Verschachteln der Bedingungen entsteht eine Baumstruktur, die wir in einem Flussdiagramm darstellen können. Das Flussdiagramm besteht aus Knoten, Kanten und Blättern:

- **Knoten**: Ein Punkt im Baum, an dem eine Entscheidung getroffen wird, basierend auf einem Eingangswert.
- **Kanten**: Verbindungen zwischen den Knoten, die den Entscheidungsfluss darstellen.
- **Blätter**: Endknoten des Baumes, die eine Klassifikation oder Vorhersage darstellen.



Erstellen eines Entscheidungsbaums

Sind die Regeln bekannt, kann der Entscheidungsbaum, wie im obigen Beispiel gezeigm, manuell definiert werden. Im Machine Learning besteht allerdings die Zielstellung diesen Entscheidungsbaum automatisch aus den Trainingsdaten abzuleiten. Das geschieht in drei Schritten:

01 Auswahl des besten Attributs zur Trennung der Daten.

02 Aufteilung des Datensatzes basierend auf dem ausgewählten Attribut.

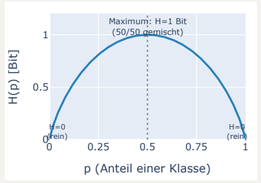
03 Wiederholung des Prozesses für jeden Teilbaum, bis ein Abbruchkriterium erfüllt ist.

Auswahl des besten Attributes

Die Auswahl des besten Attributs erfolgt typischerweise durch Maximierung eines Kriteriums wie dem Informationsgewinn oder der Gini-Impurity.

Informationsgewinn: Der Informationsgewinn basiert auf dem Konzept der Entropie. Die Entropie misst, wie viel Unsicherheit oder Unreinheit eine Klassenverteilung enthält. Die Entropie $H(S)$ einer Variable S wird wie folgt berechnet:

$$H(S) = -\sum_{k=1}^{c} p_k \log_2(p_k)$$



wobei c die Anzahl der Klassen und p_k der Anteil der Klasse k ist, also $p_k = \frac{|C_k|}{|S|}$, wobei C_k die Menge der Instanzen der Klasse k ist.

Der Term $-\log_2(p_k)$ misst den **Informationsgehalt** in **Bit**, je seltener ein Ereignis, desto überraschender:

- $p_k = 1$: $-\log_2(\frac{1}{1}) = 0$ Bit — keine Überraschung
- $p_k = \frac{1}{2}$: $-\log_2(\frac{1}{2}) = 1$ Bit — ein Münzwurf
- $p_k = \frac{1}{4}$: $-\log_2(\frac{1}{4}) = 2$ Bit — seltener Ausgang

Die Entropie ist der **Erwartungswert** dieses Informationsgehalts über alle Klassen.

Der Informationsgewinn $IG(T, A)$ eines Attributs A für den Datensatz T wird dann berechnet als:

$$\overbrace{IG(T, A)}^{\text{Informationsgewinn}} = \overbrace{H(T)}^{\text{Entropy des Knoten}} - \sum_{v \in Values(A)} \overbrace{\frac{|T_v|}{|T|} H(T_v)}^{\text{Entropy aller Subknoten}}$$

wobei $Values(A)$ die möglichen Werte von Attribut A sind und T_v der Teil des Datensatzes T ist, bei dem Attribut A den Wert v hat. Der Informationsgewinn misst somit wie viel Entropie ein Knoten zu dem finalen Datensatz beiträgt.

Gini-Impurity: Die Gini-Impurity eines Datensatzes S wird wie folgt berechnet:

$$Gini(S) = 1 - \sum_{i=1}^{c} p_i^2$$

Der Gini-Gewinn wird ähnlich wie der Informationsgewinn berechnet, wobei anstelle der Entropie die Gini-Impurity verwendet wird.

Beispiel

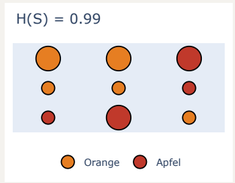
Label:	Orange	Orange	Apfel	Orange	Orange	Apfel	Apfel	Apfel	Orange
Farbe :	orange	rot	rot	orange	orange	rot	rot	rot	orange
Größe :	groß	groß	groß	klein	klein	klein	klein	groß	klein

Betrachten wir ein einfaches Beispiel zur Veranschaulichung. Angenommen, wir haben den obigen Datensatz mit den Klassen “Apfel” und “Orange” und den Attributen “Farbe” und “Größe”. Unser Ziel ist es, einen Entscheidungsbaum zu erstellen, der die Früchte klassifiziert.

Berechnung der Entropie des gesamten Datensatzes

Entsprechend der obigen Abbildung enthält der Datensatz 4 Äpfel und 5 Orangen. Die Entropie des gesamten Datensatzes ist folglich:

$$H(S) = -\left(\underbrace{\frac{5}{9}\log_2\frac{5}{9}}_{\text{5 Orangen}} + \underbrace{\frac{4}{9}\log_2\frac{4}{9}}_{\text{4 Äpfel}} \right) = 0.99$$

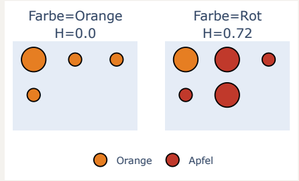


Berechnung der Entropie für jedes Attribut

Wir berechnen nun für jeden möglichen Split der Daten den resultierenden Informationsgewinn. Wir haben können den Datensatz anhand des Attributs `Farbe` splitten oder anhand des Attributs `Größe`. Splitten wir den Datensatz auf Basis der Farbe so haben wir 5 Objekte mit der Farbe “orange” und 4 mit der Farbe “rot”.

Wir berechnen die Entropie nach der Aufteilung auf Basis der Farbe:

$$H(\text{Farbe=Rot}) = -\left(\underbrace{\frac{1}{5}\log_2\frac{1}{5}}_{\text{1 Orange}} + \underbrace{\frac{4}{5}\log_2\frac{4}{5}}_{\text{4 Äpfel}}\right) = 0.72$$

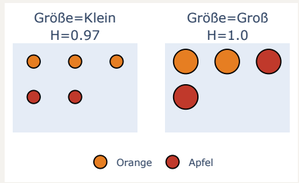


$$H(\text{Farbe=Orange}) = -\left(\underbrace{\frac{4}{4}\log_2\frac{4}{4}}_{\text{4 Orangen}}\right) = 0.0$$

$$IG(\text{Farbe}) = H(S) - \frac{5}{9}H(\text{Farbe=Rot}) - \frac{4}{9}H(\text{Farbe=Orange})$$

$$= 0.99 - \frac{5}{9}0.72 - \frac{4}{9}0.0 = 0.59$$

Jetzt berechnen wir die Entropie nach der Aufteilung auf Basis der Größe:



$$H(\text{Größe=Klein}) = -\left(\underbrace{\frac{2}{5}}_{\text{2 Äpfel}}\log_2\frac{2}{5} + \underbrace{\frac{3}{5}}_{\text{3 Orangen}}\log_2\frac{3}{5}\right) = 0.97$$

$$H(\text{Größe=Gross}) = -\left(\underbrace{\frac{2}{4}}_{\text{2 Äpfel}}\log_2\frac{2}{4} + \underbrace{\frac{2}{4}}_{\text{2 Orangen}}\log_2\frac{2}{4}\right) = 1.0$$

$$IG(\text{Größe}) = H(S) - \frac{5}{9}H(\text{Größe=Klein}) - \frac{4}{9}H(\text{Größe=Gross})$$

$$= 0.99 - \frac{5}{9}0.97 - \frac{4}{9}1.0 = 0.01$$

Es zeigt sich, dass der Informationsgewinn bei der *Farbe* deutlich höher ist als bei der *Größe*, weshalb es sinnvoll ist diesen als ersten Knoten im Entscheidungsbaum zu wählen.

Entscheidungsbäume in SciKit-Learn

Entscheidungsbäume können unter andrem mit SciKit-Learn erstellt werden. Hierfür erstellen wir wie gewohnt eine Modellklasse und können dabei auch das Kriterium angeben

```
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier

clf = DecisionTreeClassifier(criterion="entropy")
```

Erstellen wir uns als nächstes den Beispieldatensatz as Pandas Dataframe

```
import numpy as np # Import von NumPy
import pandas as pd # Import von Pandas
df=pd.DataFrame([
    ["Orange","Gross","Orange"], ["Rot","Gross","Orange"], ["Rot","Gross","Apfel"],
    ["Orange","Klein","Orange"], ["Orange","Klein","Orange"], ["Rot","Klein","Apfel"],
    ["Rot","Klein","Apfel"], ["Rot","Gross","Apfel"], ["Orange","Klein","Orange"]
],columns=["Color","Size","Typ"])
df
```

	Color	Size	Typ
0	Orange	Gross	Orange
1	Rot	Gross	Orange
2	Rot	Gross	Apfel
3	Orange	Klein	Orange
4	Orange	Klein	Orange
5	Rot	Klein	Apfel
6	Rot	Klein	Apfel
7	Rot	Gross	Apfel
8	Orange	Klein	Orange

Hier ist wieder zu beachten das SciKit-Learn nicht direkt auf kategorischen Spalten mit Text arbeitet, sondern binäre oder numerische Spalten erwartet. Wir können binäre Variablen mit der Methode `get_dummies` erzeugen:

```
dfD= pd.get_dummies(df,columns=["Color","Size","Typ"],drop_first=False)
dfD.head(2)
```

	Color_Orange	Color_Rot	Size_Gross	Size_Klein	Typ_Apfel	Typ_Orange
0	True	False	True	False	False	True
1	False	True	True	False	False	True

Oder alternativ numerische Variablen mit der Funktion `pd.factorize` erzeugen. Das bietet sich hier mehr an, da es eine kompaktere Darstellung ist

```
dfF=df.copy()
dfF["Color"], df_map_col = pd.factorize(df["Color"])
dfF["Size"], df_map_size = pd.factorize(df["Size"])
dfF["Typ"], df_map_typ = pd.factorize(df["Typ"])
dfF, df_map_col, df_map_size, df_map_typ
```

```
(   Color  Size  Typ
 0      0     0    0
 1      1     0    0
 2      1     0    1
 3      0     1    0
 4      0     1    0
 5      1     1    1
 6      1     1    1
 7      1     0    1
 8      0     1    0,
 Index(['Orange', 'Rot'], dtype='str'),
 Index(['Gross', 'Klein'], dtype='str'),
 Index(['Orange', 'Apfel'], dtype='str'))
```

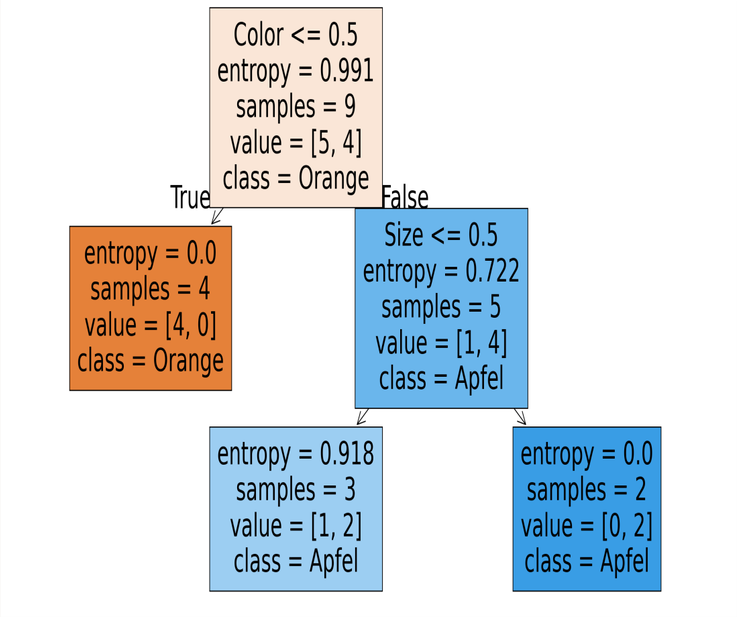
Modelltraining und Visualisierung

Mit der Modellmethode `fit` können wir wieder das Modell trainieren, indem wir die Eingänge `x` und die Zielvariable `y` spezifizieren.

```
x=dfF[['Color','Size']]
y=dfF["Typ"]

clf.fit(x, y)
```

Mit der Funktion `plot_tree` können wir uns den Entscheidungsbaum anzeigen lassen:

```
from sklearn.tree import plot_tree
import matplotlib.pyplot as plt

plt.figure(figsize=(20,10))
plot_tree(clf, filled=True, feature_names=['Color','Size'], class_names=df_map_typ)
plt.show()
```



Mit der bekannten Methode `predict` können wir eine Vorhersage treffen. Also ein Objekt das Orange (0) ist und Klein (1) ist eine Orange (0).

```
clf.predict([[0,1]])
```

```
array([0])
```

Prüfen wir das Modell einmal an dem uns bekannten Energie- und Wetterdatensatz. Wir laden den Datensatz und fügen eine Spalte für den Wochentag (gleich numerisch) hinzu und ob der `EV_HT_740` -Verbraucher an ist. Wir brauchen in diesem Fall die fehlenden `NaN` Werte nicht entfernen.

```
egywth = pd.read_csv("../data/UROS/Energy1D_weather_clean.csv", parse_dates=[0])
egywth["Weekday"] = egywth["Date"].dt.dayofweek
egywth["EV_HT_740_IS_ON"] = egywth.EV_HT_740==0
```

Wir wollen ein Modell für die Temperaturklasse und den Heiztage und Kühltage bestimmen, um zu sehen ob die originalen Grenzen aus dem Notebook zur Datenvorverarbeitung erkannt werden. Hierfür wandeln wir die Spalten zuerst in Numerische Kategorien um.

```
egywth["TemperaturKlasseN"], TK_map = pd.factorize(egywth["TemperaturKlasse"])
egywth["HeizKuehlTageN"], HKT_map = pd.factorize(egywth["HeizKuehlTage"])
TK_map,HKT_map
```

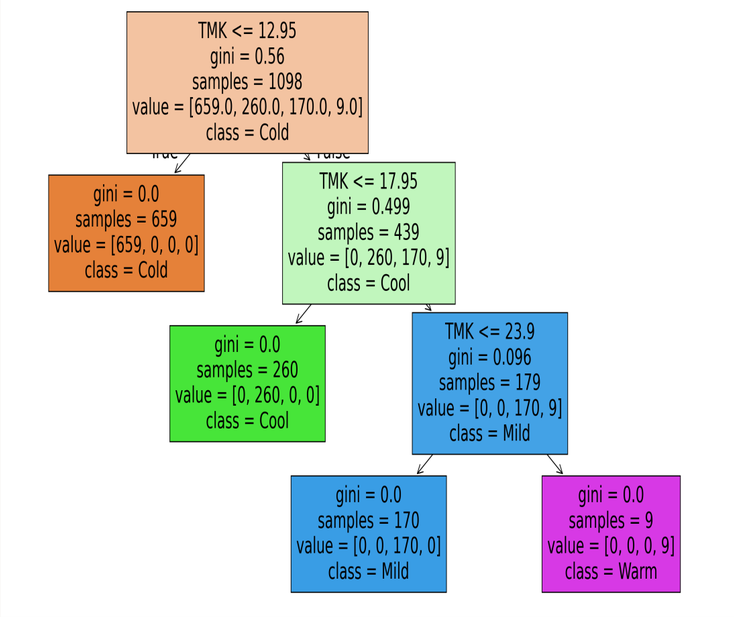
```
(Index(['Cold', 'Cool', 'Mild', 'Warm'], dtype='str'),
 Index(['Heizgradtag', 'Normaltag', 'Kühlgradtag'], dtype='str'))
```

Dann trainieren und visualisieren wir die Entscheidungsbäume.

```
clfTK = DecisionTreeClassifier()
clfTK.fit(egywth[['TMK']], egywth[['TemperaturKlasseN']])
clfTK.get_depth()
```

```
3
```

```
plt.figure(figsize=(20,10))
plot_tree(clfTK, filled=True, feature_names=['TMK'], class_names=TK_map)
plt.show()
```

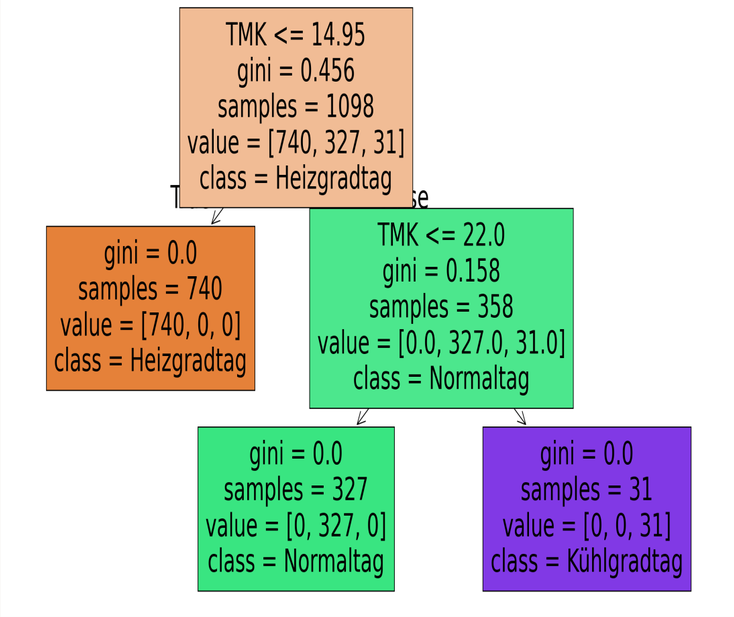


Dann trainieren und visualisieren wir die Entscheidungsbäume.

```
clfHKT = DecisionTreeClassifier()
clfHKT.fit(egywth[['TMK']], egywth[['HeizKuehlTageN']])
clfHKT.get_depth()
```

```
2
```

```
plt.figure(figsize=(20,10))
plot_tree(clfHKT, filled=True, feature_names=['TMK'], class_names=HKT_map)
plt.show()
```



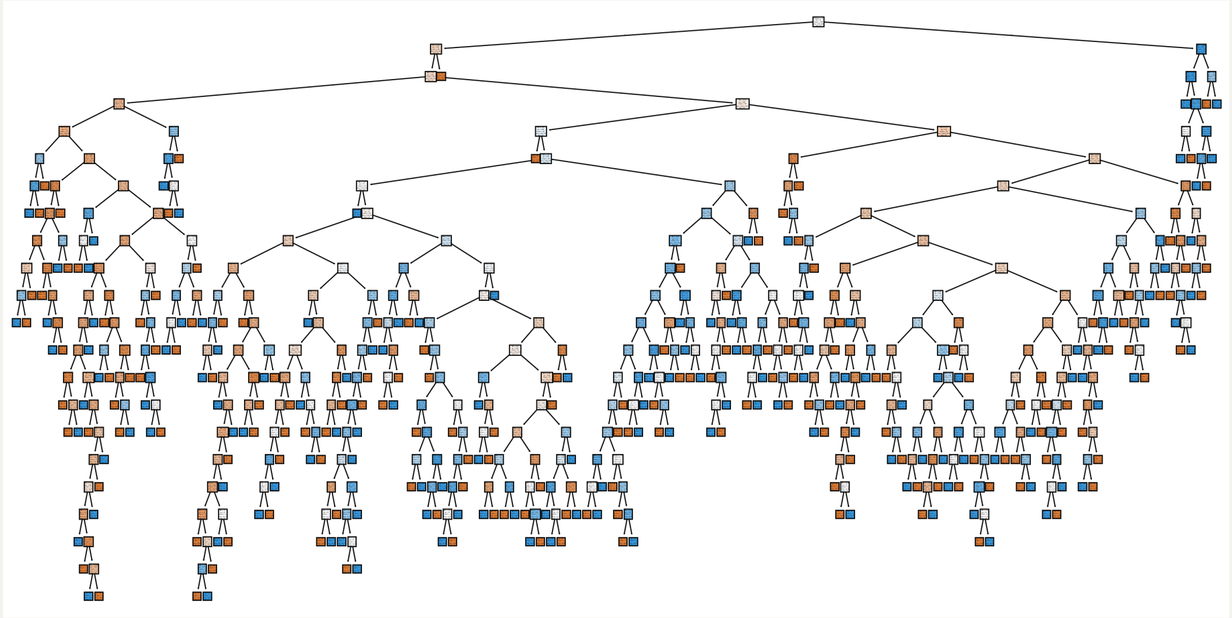
Es zeigt sich, dass die originalen Grenzen und die Folge der Werte durchaus gut identifiziert werden, wenn auch nicht ganz präzise, da entsprechende Samples im Datensatz fehlen.

Trainieren wir einen Entscheidungsbaum für die Aktivität des `EV_HT_740` -Verbrauches, wie bei der logistischen Regression.

```
clfHT = DecisionTreeClassifier()
clfHT.fit(egywth[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth[['EV_HT_740_IS_ON']])
clfHT.get_depth()
```

```
21
```

```
plt.figure(figsize=(20,10))
plot_tree(clfHT, filled=True, feature_names=["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"], class_names=['Off',"On"])
plt.show()
```



Das resultiert in einen deutlich komplexeren Entscheidungsbaum mit einer Tiefe von 21 Knoten.

Prüfen wir einmal die Vorhersagequalität, indem wir den Trainingsdatensatz vorhersagen.

```
egywth["pred_DT"] = clfHT.predict(egywth[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
```

Als Vergleichsmetriken für Entscheidungsbäume die kategorische Werte vorhersagen, verwendet man die Metriken, die wir für die Logistische Regression diskutiert haben.

```
from sklearn.metrics import accuracy_score, f1_score

print('Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth.pred_DT)))
print('F1-Score: {:.2f}'.format(f1_score(egywth.EV_HT_740_IS_ON, egywth.pred_DT)))
```

```
Accuracy: 1.00
F1-Score: 1.00
```

Hier zeigt sich, dass der Entscheidungsbaum den Ein/Aus-Zustand perfekt vorhersagen kann. Die Logistischen Regressionsmodelle im Vergleich erreichten nur eine Genauigkeit von 54% und 60%.

Es ist zu beachten, dass Modelle mit dieser perfekten Qualität meist nicht gewollt sind, da sie Überfitten (Overfitting) und dann nicht gut generalisieren. Generalisierung bedeutet, dass das Modell auch gut anwendbar auf neue Datensätze ist.

OVERFITTING, TRAIN-TEST-SPLIT UND KREUZ-VALIDATION

Um das Überfitting besser zu erkennen und die Generalisierbarkeit eines Modelles zu bewerten, verwendet man üblicherweise zur Bewertung und zum Vergleich von Modellen nicht einfach den Trainingsdatensatz, sondern teilt die Daten in einen Datensatz zum Trainieren und einem zum Testen (Train-Test-Split). Dabei darf der Testdatensatz keine Trainingsdaten enthalten.

Teilen wir den Datensatz einmal in einen Test- und einen Trainingsdatensatz mit jeweils 60% und 40% Daten auf und trainieren das Modell nur auf dem Trainingsdatensatz.

```
egywth_train=egywth.head(int(egywth.shape[0]*6/10)).copy()
egywth_test=egywth.tail(int(egywth.shape[0]*4/10)).copy()
```

```
clfHT_T = DecisionTreeClassifier()
clfHT_T.fit(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth_train[['EV_HT_740_IS_ON']])
clfHT_T.get_depth()
```

```
13
```

```
egywth_train["pred_DT"] = clfHT_T.predict(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Train Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_train.pred_DT)))
```

```
Train Accuracy: 1.00
```

Wir erhalten wieder ein Modell, das zu 100% korrekt vorhersagt.

Wenden wir das Modell einmal auf dem Testdatensatz an.

```
egywth_test["pred_DT"] = clfHT_T.predict(egywth_test[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Test Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_test.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_test.pred_DT)))
```

```
Test Accuracy: 0.16
```

Wir sehen jetzt, dass das Modell auf einmal sehr schlecht ist mit einer Genauigkeit von nur 16% (wir bedenken, dass eine Zufallswahl bereits 50% Genauigkeit hat). Das Modell, das also im Training perfekt war, ist im Test komplett schlecht. Das liegt zum einen daran, dass wir in der Logistischen Regression bereits gesehen haben, dass der Energieverbrauch im hinteren Bereich nahezu immer aktiv ist, also der Testdatensatz nicht dem Trainingsdatensatz gut entspricht. Dadurch lernt das Modell ein Verhalten, das im Testdatensatz gar nicht mehr vorkommt.

Dies können wir verhindern, indem wir die Trainings und Testdaten zufällig auswählen. Wenn die Zielklassen unausgeglichen sind, ist es zudem sinnvoll, die Aufteilung zu stratifizieren, damit Trainings- und Testdatensatz eine ähnliche Klassenverteilung behalten.

```
from sklearn.model_selection import train_test_split

egywthN=egywth.dropna()  # Wir entfernen hier wieder die NaN Werte, da einige Ensemble-Methoden keine NaN Werte unterstützen
egywth_train, egywth_test = train_test_split(egywthN, test_size=0.4, stratify=egywthN["EV_HT_740_IS_ON"], random_state=42)
```

```
clfHT_T = DecisionTreeClassifier()
clfHT_T.fit(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth_train[['EV_HT_740_IS_ON']])
clfHT_T.get_depth()
```

```
22
```

Wenden wir das Modell zum Vergleich auf den Trainings- und Testdatensatz an.

```
egywth_train["pred_DT"] = clfHT_T.predict(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Train Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_train.pred_DT)))
```

```
Train Accuracy: 1.00
```

```
egywth_test["pred_DT"] = clfHT_T.predict(egywth_test[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Test Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_test.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_test.pred_DT)))
```

```
Test Accuracy: 0.61
```

Um abzusichern, dass man nicht zufällig einen besonders guten oder schlechten Trainings- und Testdatensatz auswählt, empfiehlt es sich, das Sampling und Training systematisch auf mehreren Teilmengen zu wiederholen. Dieses Verfahren nennt man k-Kreuzvalidation (k-Cross-Validation), wobei k die Anzahl der Folds beziehungsweise Teilmengen angibt. Auch hierfür bietet `sklearn` eine vorhandene Unterstützungsfunktion an.

```
from sklearn.model_selection import cross_val_score

cross_val_score(clfHT_T, egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth_train[['EV_HT_740_IS_ON']], cv=5)
```

```
array([0.58181818, 0.59090909, 0.58181818, 0.54545455, 0.66055046])
```

Hier sehen, wir das trotz der Zufallsauswahl das für die Trainingsdaten ideale Modell immer noch nicht gut die Testdaten vorhersagen kann, es also nicht nur daran liegt, das nicht genug Daten verfügbar sind, sondern, das overfitted Modell einfach sich relativ schlecht generalisieren lässt. Das ist eine typische Eigenschaft von Entscheidungsbäumen.

Das Problem lässt sich reduzieren, wenn man die Tiefe der Bäume reduziert.

```
clfHT_T2 = DecisionTreeClassifier(max_depth=10)
clfHT_T2.fit(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth_train[['EV_HT_740_IS_ON']])
clfHT_T2.get_depth()
```

```
10
```

Wenden wir das Modell wieder zum Vergleich auf den Trainings- und Testdatensatz an.

```
egywth_train["pred_DT2"] = clfHT_T2.predict(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Train Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_train.pred_DT2)))
```

```
Train Accuracy: 0.87
```

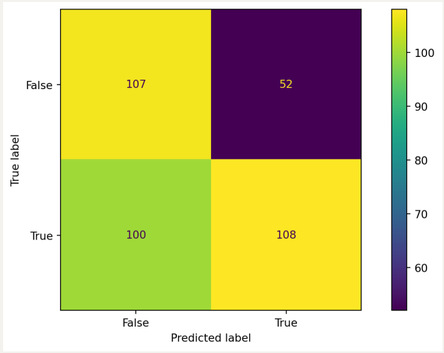
```
egywth_test["pred_DT2"] = clfHT_T2.predict(egywth_test[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Test Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_test.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_test.pred_DT2)))
```

```
Test Accuracy: 0.59
```

Auswirkungen von Overfitting auf die Vorhersagequalität

Zur genaueren Beurteilung betrachten wir zusätzlich eine *Confusion Matrix*. Sie zeigt, welche Klassen richtig erkannt wurden und bei welchen Klassenarten das Modell häufiger Fehler macht.

```
from sklearn.metrics import ConfusionMatrixDisplay

ConfusionMatrixDisplay.from_predictions(
    egywth_test.EV_HT_740_IS_ON,
    egywth_test.pred_DT2
)
plt.show()
```



Dadurch wird zwar die Qualität des Modells auf dem Trainingsdatensatz schlechter, aber überraschenderweise steigt meist die Qualität auf dem Testdatensatz.

KOMBINATIONSMODELLE (ENSEMBLE MODELS)

Es gibt verschiedene Ansätze zur Erstellung von Ensemble-Modellen, die sich in der Art und Weise unterscheiden, wie die einzelnen Modelle kombiniert werden:

- **Bagging (Bootstrap Aggregation):** Mehrere Modelle werden unabhängig voneinander auf verschiedenen Stichproben des Trainingsdatensatzes trainiert, die durch Ziehen mit Zurücklegen (Bootstrap-Sampling) erzeugt werden.
- **Boosting:** Modelle werden sequenziell trainiert, wobei jedes neue Modell darauf abzielt, die Fehler der vorherigen Modelle zu korrigieren. Jedes Modell wird somit fokussierter und trägt dazu bei, die Gesamtleistung zu verbessern.
- **Stacking:** Mehrere Modelle unterschiedlichen Typs (Basislerner) werden parallel trainiert um ihre Stärken zu kombinieren. Dieses Metamodell lernt, die Vorhersagen der Basislerner zu kombinieren, um eine endgültige Vorhersage zu treffen.
- **Voting:** Die Vorhersagen mehrerer Modelle werden kombiniert, indem über die Vorhersagen abgestimmt wird. Für Klassifikationsprobleme kann dies Mehrheitsabstimmung (die Klasse mit den meisten Stimmen wird ausgewählt) sein, während für Regressionsprobleme eine Mittelung der Vorhersagen vorgenommen werden kann.

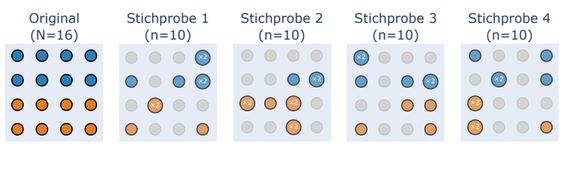
Bagging/Bootstrap - Random Forest

Random Forests ist eine der beliebtesten Ensemble-Modelle. Es ist eine Bagging-Variante eines Entscheidungsbaumes, bei dem mehrere kleinere Bäume auf zufällige Ausschnitte des Datensatzes trainiert, dadurch soll das Overfitting vermieden werden und somit die Genauigkeit bei der Generalisierung verbessert werden. Wir können uns prinzipiell einen Random Forest selbst aus einzelnen Entscheidungsbäumen erstellen.

```
forest=[]
for i in range(50):
    egywth_train_sub=egywth_train.sample(int(0.2*egywth_train.shape[0]))
    tree = DecisionTreeClassifier(max_depth=4)
    tree.fit(egywth_train_sub[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth_train_sub.EV_HT_740_IS_ON.values)
    forest.append(tree)
```

Wir sehen, dass die einzelnen Bäume kleiner sind, da sie einzeln weniger Fälle modellieren müssen.

Beim Bootstrap-Sampling wird jede Stichprobe durch Ziehen **mit Zurücklegen** erzeugt — jeder Baum sieht einen anderen Ausschnitt des Datensatzes:



Grau = nicht in Stichprobe · ×2 = doppelt gezogen · im Schnitt ~63% eindeutige Punkte pro Stichprobe

Zur Vorhersage berechnen wir das Mehrheitsvotum der Vorhersage aller Bäume bei diskreten Daten und den Mittelwert der Vorhersage der einzelnen Bäume bei numerischen Daten bei Regressionsmodellen.

```
pred=np.zeros(egywth_train.shape[0])
for tree in forest:
    pred += tree.predict(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]]).astype(int)
egywth_train['pred_forest']= pred > len(forest)/2 # da dies eine binäre vorhersage ist berechnen wir den Mehreitsv

print('Train Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_train.pred_forest
```

```
Train Accuracy: 0.67
```

```
pred=np.zeros(egywth_test.shape[0])
for tree in forest:
    pred += tree.predict(egywth_test[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
egywth_test['pred_forest']= pred > len(forest)/2 # Mehreitsvote

print('Test Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_test.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_test.pred_forest)))
```

```
Test Accuracy: 0.57
```

In der Praxis nutzt man den fertigen Wald aus `sklearn.ensemble`, welche standartmäßig mit 100 Bäumen arbeitet.

```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
clf_RF = RandomForestClassifier()
clf_RF.fit(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values)
```

Mit der bekannten Predict Methode können wir die Vorhersage treffen und die Genauigkeit berechnen.

```
egywth_train["pred_RF"] = clf_RF.predict(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Train Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_train.pred_RF)))
```

```
Train Accuracy: 1.00
```

```
egywth_test["pred_RF"] = clf_RF.predict(egywth_test[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Test Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_test.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_test.pred_RF)))
```

```
Test Accuracy: 0.58
```

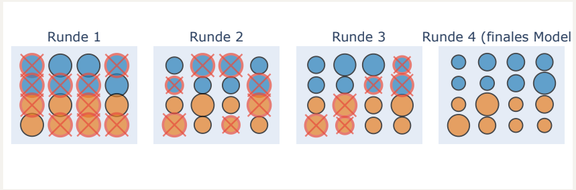
Das Ergebnis ist schon besser als der einfache Entscheidungsbaum.

Boosting

Boosting ist eine andere Methode zum Erstellen von Ensemble-Modellen, bei der eine Reihe schwacher Modelle (d. h. Modelle, die nur geringfügig besser als Zufallsvorhersagen sind) sequenziell trainiert und kombiniert werden, um ein starkes Modell zu erstellen. Die Grundidee besteht darin, aufeinanderfolgende Modelle so zu trainieren, dass sie die Fehler der vorhergehenden Modelle korrigieren.

Aber Achtung: Da Boosting-Algorithmen stark auf schwerwiegende Fehler fokussieren, können sie empfindlich gegenüber Ausreißern sein.

Jedes Modell trainiert auf dem **gesamten** Datensatz, aber mit angepassten Gewichten: falsch klassifizierte Punkte erhalten mehr Gewicht und werden im nächsten Modell stärker berücksichtigt:



Punktgröße ∝ Gewicht · Rote Umrandung + × = in dieser Runde falsch klassifiziert (erhält höheres Gewicht)

AdaBoost

AdaBoost ist eines der bekanntesten boosting Modelle. Es beginnt mit einem schwachen Modell, das auf den gesamten Datensatz trainiert wird. In den folgenden Iterationen werden die Gewichte der falsch klassifizierten Datenpunkte erhöht und ein neues Modell wird trainiert. Dies wiederholt sich, und die Modelle werden so kombiniert, dass sie schwerwiegendere Fehler korrigieren. AdaBoost ist einfach zu implementieren und funktioniert gut mit vielen Basislernern, wie Entscheidungsstümpfen (einfachen Entscheidungsbäumen).

```
from sklearn.ensemble import AdaBoostClassifier
clf_AB = AdaBoostClassifier()
clf_AB.fit(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values)
```

Wenden wir das Modell auf den Trainings- und Testdatensatz an.

```
egywth_train["pred_AB"] = clf_AB.predict(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Train Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_train.pred_AB)))
```

```
Train Accuracy: 0.63
```

```
egywth_test["pred_AB"] = clf_AB.predict(egywth_test[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Test Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_test.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_test.pred_AB)))
```

```
Test Accuracy: 0.61
```

Gradient Boosting

Gradient Boosting optimiert ein beliebiges Verlustmaß (z. B. die quadratische Fehlerfunktion bei Regression oder die logarithmische Verlustfunktion bei Klassifikation) durch iteratives Hinzufügen von Modellen, die die negativen Gradienten (Richtungen des steilsten Abstiegs) der Verlustfunktion vorhersagen. Gradient Boosting ist flexibler und leistungsfähiger als AdaBoost, da es eine bessere Optimierung des Verlustmaßes ermöglicht.

```
from sklearn.ensemble import GradientBoostingClassifier
clf_GB = GradientBoostingClassifier()
clf_GB.fit(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values)
```

Wir vergleichen das Modell auf den Trainings- und Testdatensatz an.

```
egywth_train["pred_GB"] = clf_GB.predict(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Train Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_train.pred_GB)))
```

```
Train Accuracy: 0.87
```

```
egywth_test["pred_GB"] = clf_GB.predict(egywth_test[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Test Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_test.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_test.pred_GB)))
```

```
Test Accuracy: 0.62
```

XGBoost

XGBoost ist eine erweiterte Version des Gradient Boosting, die auf Effizienz und Geschwindigkeit optimiert ist. Es verwendet Techniken wie Sparsity Awareness, paralleles Tree-Boosting und reguläre Begriffe, um Overfitting zu vermeiden. XGBoost ist sehr beliebt bei großen Datensätzen aufgrund seiner hohen Leistung und Effizienz.

XGBoost ist direkt nicht in `sklearn` verfügbar. Das `xgboost` bietet aber die gleiche API an.

```
import xgboost as xgb

clf_XGB = xgb.XGBClassifier()
clf_XGB.fit(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values)
```

Vergleichen wir das Modell auf den Trainings- und Testdatensatz an.

```
egywth_train["pred_XGB"] = clf_XGB.predict(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Train Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_train.pred_XGB)))
```

```
Train Accuracy: 1.00
```

```
egywth_test["pred_XGB"] = clf_XGB.predict(egywth_test[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_test.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_test.pred_XGB)))
```

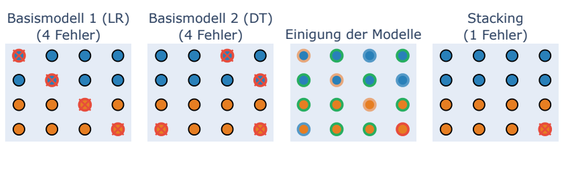
```
Accuracy: 0.61
```

Stacking

Beim Stacking kombiniert man einfach mehrere Modelle durch ein weiteres einfaches Modell. Zum Beispiel wollen wir die Vorhersage des Logistischen Regressionsmodells mit dem Decission Tree kombinieren innerhalb eines weiteren Logistischen Modells kombinieren. Hier können wir insbesondere gut ausnutzen, dass `sklearn` immer die gleiche API anbietet, wir können also das Training und die Vorhersage einfach als Loop implementieren.

```
from sklearn.linear_model import LogisticRegression

# 1. Basismodel
clfLR = LogisticRegression()
# 2. Basismodel
clfDT = DecisionTreeClassifier()
# Stacking
stack=[clfLR, clfDT]
```

Das Meta-Modell lernt, **welchem Basismodell es wann vertrauen soll** — je nach Muster der Basisvorhersagen:



Grüner Rand = beide Modelle korrekt · Blau/Orange = nur ein Modell richtig, Meta-Modell wählt das bessere · Roter Rand = beide falsch (nicht korrigierbar)

Wir trainineren alle Basismodelle

```
for model in stack:
    model.fit(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values)
```

Die Modelle kombinieren wir nun in einem Stackingmodell, was meist ein sehr einfaches logistisches oder lineares Modell ist. Hierfür berechnen wir erst für den Trainingsdatensatz die Vorhersagen und geben die in ein neues gestacktes Modell, das nur die Vorhersagen enthält. Dadurch gewichten wir einfach die Basismodelle in ihrer Güte.

```
pred_train={}
for i,model in enumerate(stack):
    pred_train[f"pred{i}"]=model.predict(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
pred_train=pd.DataFrame(pred_train)
```

```
# 4. Stacking Model
clfST = LogisticRegression()
clfST.fit(pred_train, egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values)
```

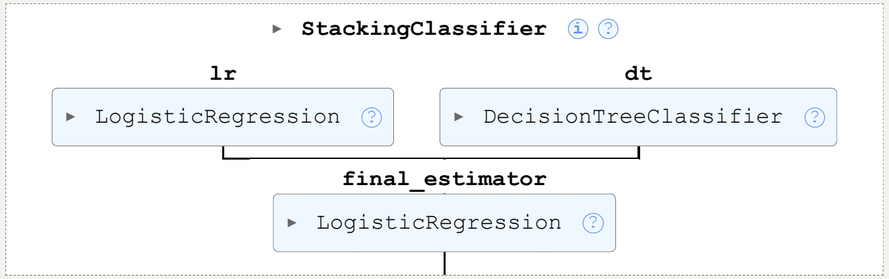
Bei der Vorhersage machen wir das gleiche und berechnen erst die Vorhersage der Basismodell und kombinieren dann diese in einer Vorhersage durch das Stackingmodell.

```
pred_test={}
for i,model in enumerate(stack):
    pred_test[f"pred{i}"]=model.predict(egywth_test[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
pred_test=pd.DataFrame(pred_test)
egywth_test['pred_stack_lm']= clfST.predict(pred_test)

print('Test Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_test.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_test.pred_stack_lm)))
```

```
Test Accuracy: 0.60
```

Auch hierfür bietet `sklearn` eine einfache Funktion an. Anstatt eines Mehrheitsvotums kombinieren wir die einzelnen Modelle hier allerdings mit einem Logistischen Modell, wodurch die Modelle in ihrer Qualität gewichtet werden und das Gesamtergebnis besser wird.

```
from sklearn.ensemble import StackingClassifier

clf_STK = StackingClassifier(estimators=[('lr', LogisticRegression()),('dt',DecisionTreeClassifier())], final_estimator=LogisticRegression())
clf_STK.fit(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values)
```



Vergleichen wir das Modell auf den Trainings- und Testdatensatz an.

```
egywth_train["pred_STK"] = clf_STK.predict(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Train Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_train.pred_STK)))
```

```
Train Accuracy: 0.91
```

```
egywth_test["pred_STK"] = clf_STK.predict(egywth_test[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Test Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_test.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_test.pred_STK)))
```

```
Test Accuracy: 0.62
```

Voting

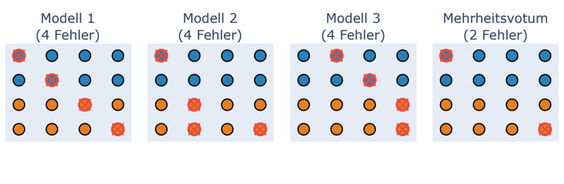
Beim Voting kombinieren wir mehrere Basismodelle durch Mehrheitsabstimmung oder Median/Mittelwertbestimmung.

Wir können zum Beispiel die Basismodelle aus dem Stacking durch Mehrheitsabstimmung kombinieren.

```
pred=np.zeros(egywth_test.shape[0])
for model in stack:
    pred += model.predict(egywth_test[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
egywth_test['pred_stack_vote']= pred > len(forest)/2 # Mehreitsvote

print('Test Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_test.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_test.pred_stack_vote)))
```

```
Test Accuracy: 0.43
```

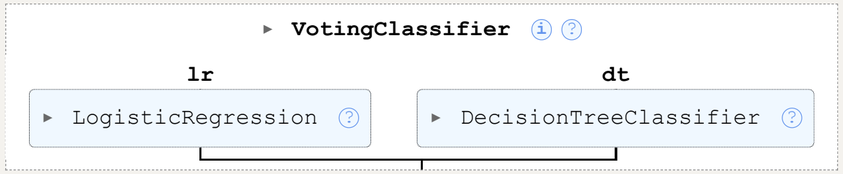
Jedes Modell macht **andere** Fehler — der Mehrheitsentscheid hebt sie gegenseitig auf:



Rote Umrandung + × = Fehler · Punkte 0 und 15 werden von ≥2 Modellen falsch klassifiziert und bleiben auch im Votum falsch

Auch hierfür bietet `sklearn` eine Methode an.

```
from sklearn.ensemble import VotingClassifier
clf_VK = VotingClassifier(estimators=[('lr', LogisticRegression()),('dt',DecisionTreeClassifier())], voting='hard')
clf_VK.fit(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values)
```



Wie performt das Modell auf den Trainings- und Testdatensatz:

```
egywth_train["pred_VK"] = clf_VK.predict(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Train Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_train.pred_VK)))
```

```
Train Accuracy: 0.86
```

```
egywth_test["pred_VK"] = clf_VK.predict(egywth_test[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Test Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_test.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_test.pred_VK)))
```

```
Test Accuracy: 0.61
```

SUPPORT VECTOR MACHINES

Lineare SVM

Für ein einfaches binäres Klassifizierungsproblem mit zwei Klassen $y_i \in \{-1, 1\}$ und Datenpunkten $\bar{x}_i \in \mathrm{R}^n$, suchen wir eine Hyperebene, die die Daten trennt. Bei linearen SVM wir diese Hyperebene durch ein lineares Modell beschrieben:

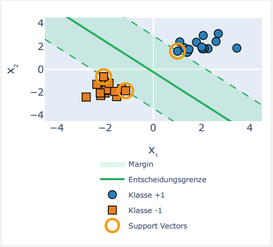
$$b + \bar{w} \cdot \bar{x} = 0$$

Dabei ist $\bar{w}$ der Normalenvektor zur Hyperebene und b ist der Bias (Verschiebungsterm). Damit sind lineare Kernel dem logistischen Regressionsmodell sehr ähnlich und zeigt eine ähnliche lineare Entscheidungsgrenze.

Der Hyperebene teilt den Raum so, dass das Vorzeichen

- positiv ist mit $b + \vec{w} \cdot \vec{x}_i \geq 0$ für $y_i = 1$
- negativ ist mit $b + \vec{w} \cdot \vec{x}_i < 0$ für $y_i = -1$

Der Abstand zwischen den beiden nächsten Punkten beider Klassen (die als **Support Vectors** bezeichnet werden) und der Hyperebene wird als **Margin** bezeichnet. Die SVM maximiert diese Margin, was gleichbedeutend mit der Minimierung von $|\bar{w}|$ ist. Die Optimierungsaufgabe lautet daher:



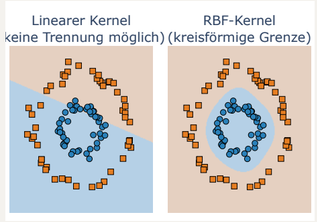
$$\min_{\bar{w},b} \frac{1}{2}\|$$

unter den Nebenbedingungen

\quad y_i (b + \bar{w} \cdot \bar{x}_i) \geq 1, \, \forall i.

Der Kerneltrick bei nicht-lineare SVM

Für nicht-lineare Probleme können wir die Datenpunkte in einen höherdimensionalen Raum transformieren, wo sie linear trennbar sind, so dass wir dort weiterhin ein Lineares Model nutzen können. Diese Transformation wird durch den sogenannten *Kerneltrick* erreicht. Ein Kernel ist eine Funktion $K(\bar{x}_i, \bar{x}_j)$, die das Skalarprodukt der Datenpunkte im höherdimensionalen Raum berechnet, ohne dass die Transformation explizit durchgeführt werden muss. Beliebte Kernelfunktionen sind:



- Linearkern: $K(\bar{x}_i, \bar{x}_j) = \bar{x}_i \cdot \bar{x}_j$
- Polynomkern: $K(\bar{x}_i, \bar{x}_j) = (\bar{x}_i \cdot \bar{x}_j + 1)^d$
- RBF-Kern (Radial Basis Function): $K(\bar{x}_i, \bar{x}_j) = \exp(-\gamma \|\bar{x}_i - \bar{x}_j\|^2)$

Damit ist der Kernel vom Prinzip vergleichbar mit der Transferfunktion in einem GAM-Model, mit dem Unterschied, dass der Kernel das Skalarprodukt transformiert.

Um den Kernelfunktionen Rechnung zu tragen, ändert sich das Optimierungsproblem zu:

$$\min_{\bar{w}, b} \frac{1}{2} \|\bar{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^n \xi_i$$

unter den Nebenbedingungen

$$y_i (b + \bar{w} \cdot \phi(\bar{x}_i)) \geq 1 - \xi_i, \, \xi_i \geq 0, \, \forall i$$

Dabei ist $\phi(\bar{x})$ die Abbildung in den höheren dimensionsunabhängigen Raum und ξ_i sind die Schlupfvariablen. Diese sind notwendig, um bei nicht vollständig linear trennbaren Daten, die Fehlklassifikationen zu modellieren (gleich dem Fehlerterm ε).

Das Optimierungsproblems wird als *Duales Problem* gelöst. Die duale Formulierung ermöglicht es, die Berechnungen nur in Form von Skalarprodukten (oder Kernelfunktionen) durchzuführen:

$$\max_{\alpha} \sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(\bar{x}_i, \bar{x}_j)$$

mit den Lagrange-Multiplikatoren α_i und unter den Nebenbedingungen

$$\quad 0 \leq \alpha_i \leq C, \, \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0.$$

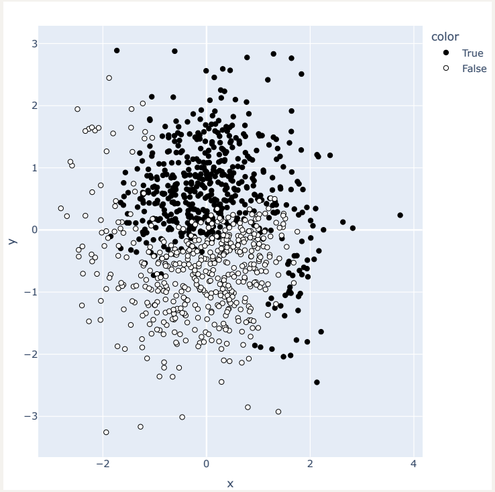
Die Entscheidungsfunktion im Dualraum wird durch die Lagrange-Multiplikatoren und Kernelfunktion ausgedrückt:

$$\bar y = \text{sign}\left(b + \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i K(\bar{x}_i, \bar{x}) \right).$$

SVM in SciKit

Wir betrachten als illustratives Beispiel einmal ein zufällig erzeugtes Yin-Yang-Muster. Dies ist ein 2D-Datensatz, bei dem verschiedene Punkte unterschiedlich eingefärbt sind, und die Aufgabe besteht darin, die richtige Farbe basierend auf dem Punkt zu vorhersagen. Es handelt sich also um eine grundlegendes Klassifikationsproblem. Um die Aufgabe jedoch hinreichend komplex zu gestalten, führen wir die Farben in einem Spiralmuster ein. Wir erstellen die Daten wie folgt:

```
import plotly.express as px

np.random.seed(33)
N = 1000  # Anzahl der Punkte
X1 = np.random.normal(size=N)
X2 = np.random.normal(size=N)
X = np.column_stack((X1, X2))
y = X1 + X2 - 1.7*np.sin(1.2*(X1 - X2)) + np.random.normal(scale=0.5, size=N) > 0

fig=px.scatter(x=X1, y=X2, color=y, width=600, height=600, color_discrete_sequence=["black", "white"])
fig.update_traces(marker_line=dict(width=.3, color="black"))
fig.show()
```



Das Bild zeigt weiße und schwarze Punkte, die ein unvollkommenes Yin-Yang-Muster mit einer unscharfen Grenze zwischen den Klassen bilden.

Der SVM-Klassifikator `SVC` ist im Paket `sklearn.svm` implementiert. Der Konstruktor der Klasse akzeptiert eine Anzahl von Argumenten, von denen die wichtigsten `kernel` sind, um verschiedene Kernel auszuwählen, sowie die entsprechenden Parameter für verschiedene Kernel, z.B. `degree` für den Polynomgrad und `gamma` für den radialen Skalierungsparameter.

Die Erstellung, das Fitting und Scoring des Modells folgen dem bekannten Muster

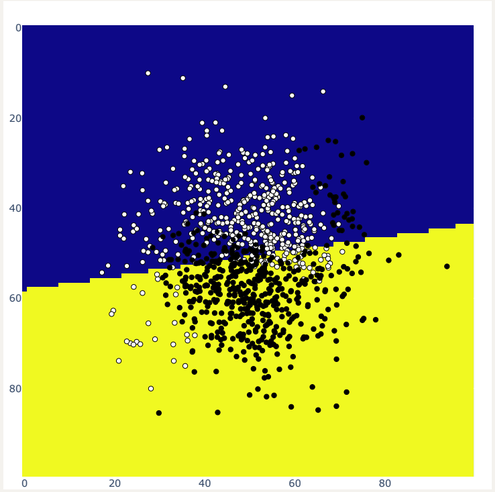
```
from sklearn.svm import SVC

m = SVC(kernel="linear")
_ = m.fit(X, y)
m.score(X, y)  # on training data
```

```
0.82
```

Wir erstellen uns eine Visualisierungsfunktion, um die Grenzen besser zu erkennen.

```
def DBPlot(m, X, y, nGrid = 100):
    x1_min, x1_max = X[:, 0].min() - 1, X[:, 0].max() + 1
    x2_min, x2_max = X[:, 1].min() - 1, X[:, 1].max() + 1
    xx1, xx2 = np.meshgrid(np.linspace(x1_min, x1_max, nGrid),
                           np.linspace(x2_min, x2_max, nGrid))
    XX = np.column_stack((xx1.ravel(), xx2.ravel()))
    hatyy = m.predict(XX).reshape(xx1.shape)
    fig = px.imshow(hatyy, width=600, height=600)
    fig.add_scatter(x=X[:,0]/(x1_max-x1_min)*100+50, y=X[:,1]/(x2_max-x2_min)*100+50, mode="markers",
        marker=dict(color='white', line=dict(width=.3, color="black")))
    fig.add_scatter(x=X[y,0]/(x1_max-x1_min)*100+50, y=X[y,1]/(x2_max-x2_min)*100+50, mode="markers",
        marker=dict(color='black'))
    fig.update_coloraxes(showscale=False)
    fig.update_layout(showlegend=False)
    fig.show()
```

```
m = SVC(kernel="linear")  # linear kernel does not have important parameters
_ = m.fit(X, y)
DBPlot(m, X, y)
```

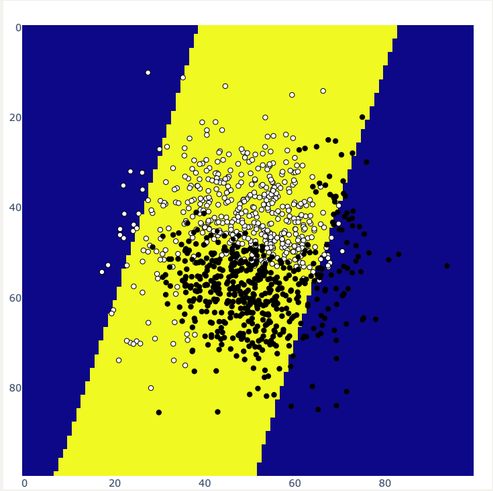


Das Ergebnis ist nicht zu schlecht - es erfasst den groben Unterschied der weißen und schwarzen Punkte, aber kann nicht den Kopf des Yin und Yangs modellieren.

Als nächstes wollen wir dies mit einem Polynomkern zweiten Grades probieren.

```
m = SVC(kernel="poly", degree=2)
_ = m.fit(X, y)
DBPlot(m, X, y)
m.score(X, y)
```

```
0.82
```

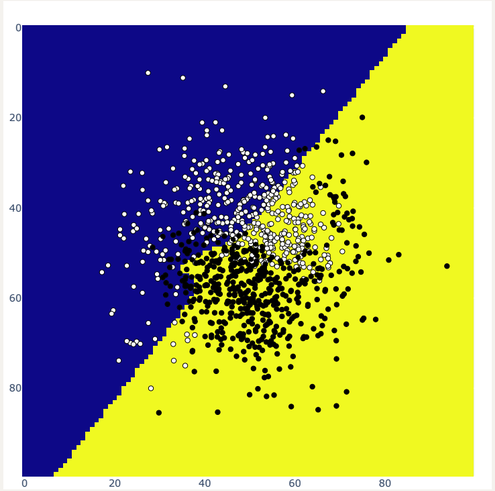


Wie Sie sehen können, ist der Polynomkern (2) in der Lage, ein blaues Band auf einem gelben Hintergrund darzustellen. Es ist fraglich, ob dies besser ist als das, was der lineare Kern leisten kann, aber man kann leicht erkennen, dass ein solches Band eine gute Darstellung für andere Arten von Daten wäre.

Als nächstes, repliziere das oben Genannte mit einem Grad-3-Kernel:

```
m = SVC(kernel="poly", degree=3)
_ = m.fit(X, y)
DBPlot(m, X, y)
m.score(X, y)
```

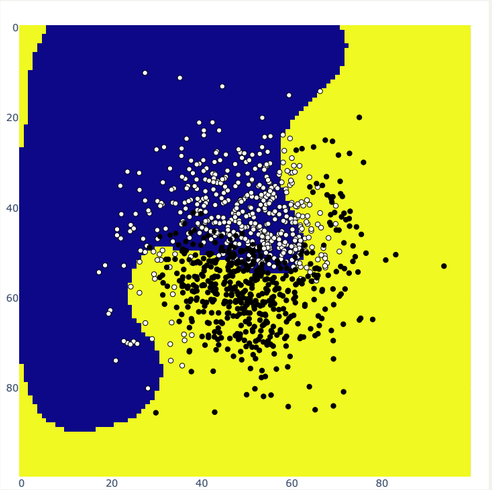
```
0.516
```



Und schließlich mit einem radialen Kernel:

```
m = SVC(kernel="rbf", gamma=1)
_ = m.fit(X, y)
DBPlot(m, X, y)
m.score(X, y)
```

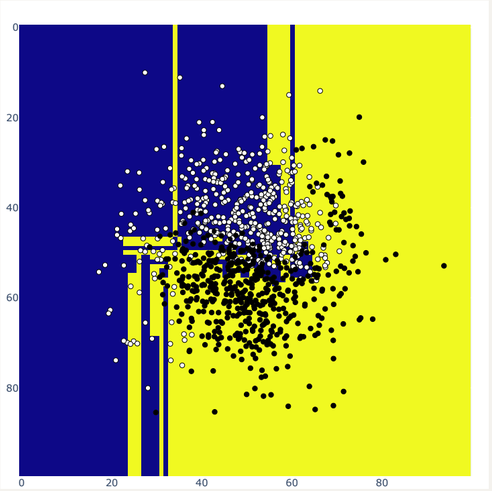
```
0.727
```



Vergleichen wir diese mit den Entscheidungsbäumen und Ensamble-Modellen so sehen wir, dass diese den Trainingsdatensatz inklusiver der Ausnahmen gut erlernen, dadurch allerdings keine stetigen Grenzen erkennen.

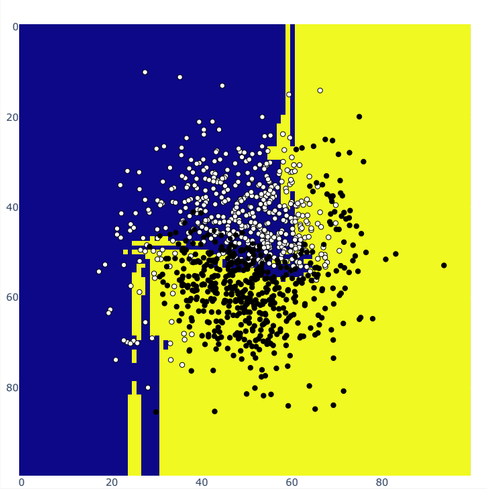
```
m = DecisionTreeClassifier()
_ = m.fit(X, y)
DBPlot(m, X, y)
m.score(X, y)
```

```
0.907
```



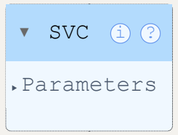
```
m = RandomForestClassifier()
_ = m.fit(X, y)
DBPlot(m, X, y)
m.score(X, y)
```

```
1.0
```



Als nächstes testen wir die SVM-Modelle einmal auf der Energievorhersage.

```
clf_SVCL = SVC(kernel="linear")
clf_SVCL.fit(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values)
```



Wir vergleichen das Modell auf den Trainings- und Testdatensatz an.

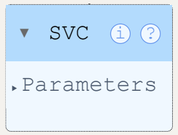
```
egywth_train["pred_SVCL"] = clf_SVCL.predict(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Train Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_train.pred_SVCL))
```

```
Train Accuracy: 0.57
```

```
egywth_test["pred_SVCL"] = clf_SVCL.predict(egywth_test[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Test Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_test.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_test.pred_SVCL)))
```

```
Test Accuracy: 0.57
```

```
clf_SVCP = SVC(kernel="poly", degree=3)
clf_SVCP.fit(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values)
```



Wir vergleichen das Modell auf den Trainings- und Testdatensatz an.

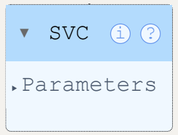
```
egywth_train["pred_SVCP"] = clf_SVCP.predict(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Train Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_train.pred_SVCP)))
```

```
Train Accuracy: 0.58
```

```
egywth_test["pred_SVCP"] = clf_SVCP.predict(egywth_test[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Test Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_test.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_test.pred_SVCP)))
```

```
Test Accuracy: 0.57
```

```
clf_SVCR = SVC(kernel="rbf", gamma=1)
clf_SVCR.fit(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]], egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values)
```



Wir vergleichen das Modell auf den Trainings- und Testdatensatz an.

```
egywth_train["pred_SVCR"] = clf_SVCR.predict(egywth_train[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Train Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_train.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_train.pred_SVCR)))
```

```
Train Accuracy: 0.98
```

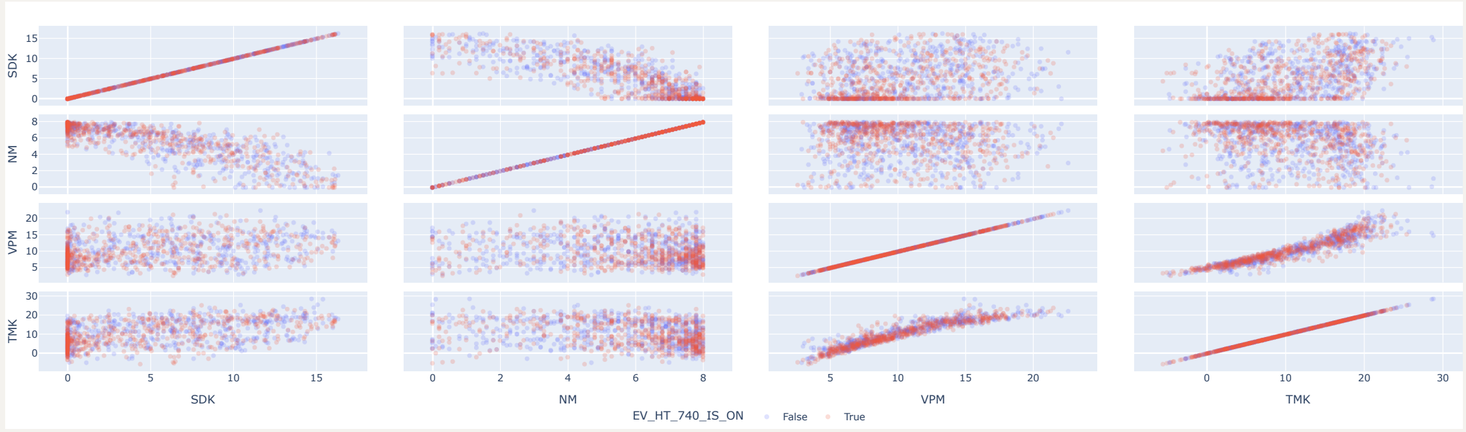
```
egywth_test["pred_SVCR"] = clf_SVCR.predict(egywth_test[["SDK", "NM", "VPM", "TMK", "Weekday"]])
print('Test Accuracy: {:.2f}'.format(accuracy_score(egywth_test.EV_HT_740_IS_ON.values, egywth_test.pred_SVCR)))
```

```
Test Accuracy: 0.54
```

Die Vorhersagequalität dieser Modelle ist nicht sehr hoch. Das liegt daran, dass Trennlinien im Datensatz nicht gegeben sind. In solchen Fällen sind Entscheidungsbäume und Ensambles besser geeignet, obwohl sie wie gezeigt schnell zum Overfitting neigen. Dennoch gehören SVM mit zu den beliebtesten Modellen.

Deshalb empfiehlt es sich immer vorher ein Scatter-Diagramm mit der Zielklasse als Farbcode zu erstellen, um zu sehen, ob sich Grenzen erkennen lassen.

```
fig=px.scatter_matrix(egywth, dimensions=["SDK", "NM", "VPM", "TMK"], opacity=.2, color="EV_HT_740_IS_ON")
fig.update_layout(legend=dict(orientation="h",yanchor="top",y=-0.1,xanchor="center",x=0.5))
fig.show()
```



REGRESSIONSBÄUME UND REGRESSIONS-ENSEMBLE-MODELLE

Wir können Entscheidungsbäume und Ensemble-Modelle auch als Regressionsmodell benutzen. Hierbei soll nicht eine spezifische Klasse einer kategorischen Variable vorhergesagt werden, sondern eine numerische Variable. Das Prinzip der Regressionsvarianten ist das gleiche wie beiden diskreten Modellen, nur werden die Ergebnisse nicht durch Mehrheitsabstimmung kombiniert, sondern linear addiert.

Vergleichen wir die oben genannten Varianten einmal in ihren Modell-Varianten und sagen den Energieverbrauch `ES_Lab` voraus.

▶ Code

```
pd.DataFrame(resdf)
```

	type	train.MSE	train.RMSE	train.R2	test.MSE	test.RMSE	test.R2	fittime	predtime
0	Linear Model	160.535	12.670	0.868	135.032	11.620	0.878	0.002	0.001
1	Decision Tree	0.000	0.000	1.000	229.763	15.158	0.793	0.002	0.001
2	Random Forest	20.043	4.477	0.983	129.328	11.372	0.883	0.081	0.013
3	Gradient Boost	62.037	7.876	0.949	123.967	11.134	0.888	0.038	0.002
4	XGBoost	0.153	0.391	1.000	149.610	12.232	0.865	0.190	0.002
5	Stack	111.975	10.582	0.908	125.673	11.210	0.887	0.015	0.002
6	Vote	40.134	6.335	0.967	137.036	11.706	0.876	0.002	0.001
7	BoostStack	53.125	7.289	0.956	119.286	10.922	0.892	1.556	0.014
8	SVM_l	163.019	12.768	0.866	133.849	11.569	0.879	0.008	0.004
9	SVM_p	214.008	14.629	0.824	176.615	13.290	0.841	0.007	0.004
10	SVM_r	250.421	15.825	0.794	211.702	14.550	0.809	0.004	0.013
11	SVMStack	51.329	7.164	0.958	121.138	11.006	0.891	1.755	0.019

Hier sehen wir, wieder das Overfitten der Entscheidungsbäume im Trainingsdatensatz, aber schlechter als Regressionsmodelle abschneiden im Testdatensatz. Wir sehen auch, dass die Regressions-Ensamble-Modelle sogar besser abschneiden als die klassischen linearen Regressionsmodelle. Das liegt daran das die zugrundeliegenden Entscheidungsbäume vom Normalen linearen Verhalten abweichende Ausnahmen besser erfassen können. Die Stacking Varianten schneiden zum Teil am besten ab, aber weisen auch die größten Trainingszeiten auf.

QUESTIONS