

# Analyse und Vorhersage von Diamant-Preisen

Projekt für Angewandte Programmierung

## Inhalt

- [Business Understanding](#)
- [Data Understanding](#)
- [Data Preparation](#)
- [Modeling und Evaluation](#)
- [Rücksprung und weitere Iteration zur Optimierung](#)
- [Ergebnis](#)
- [Quellenverzeichnis](#)

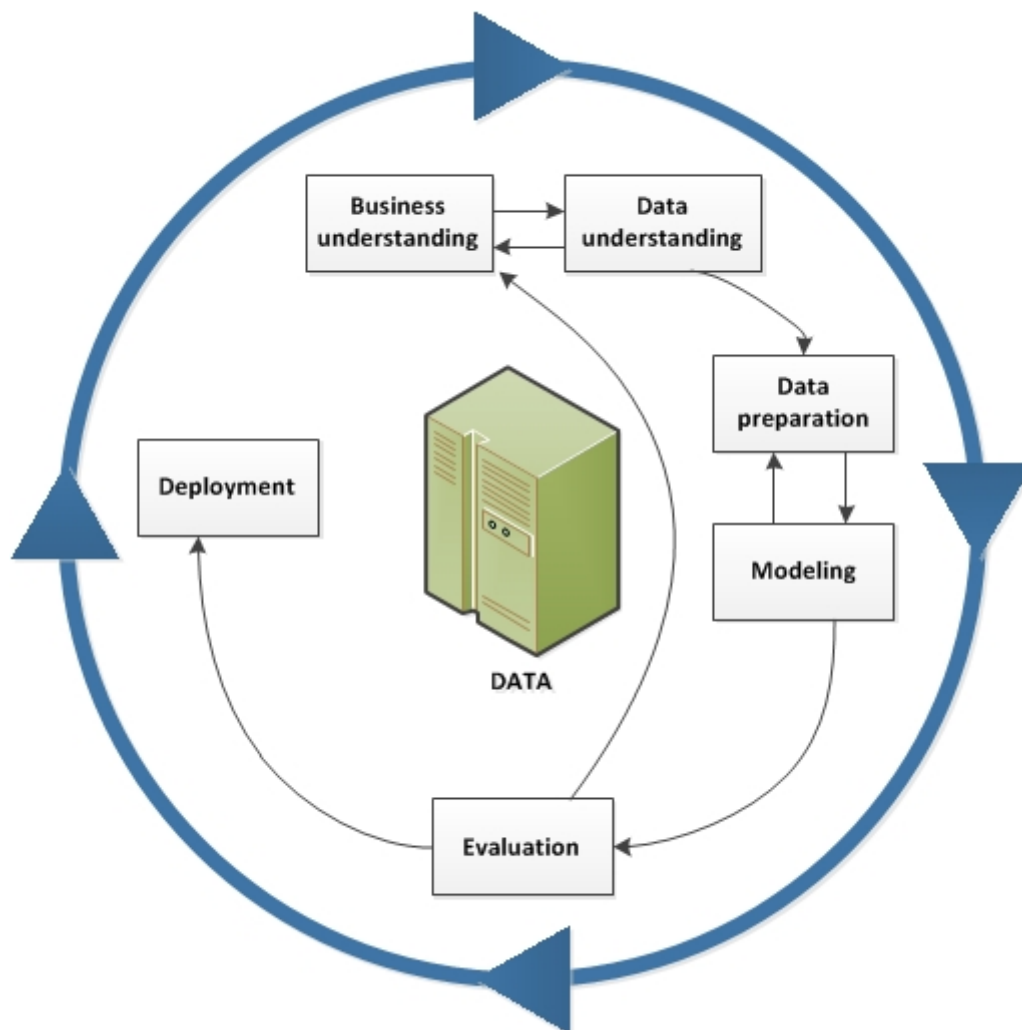
# Business Understanding

Die Bestimmung des Preises eines Diamanten erfolgt anhand verschiedener Merkmale, die Aufschluss über die Qualität und Beschaffenheit des jeweiligen Diamanten geben. Die wichtigsten Faktoren sind die sogenannten vier C's: Carat (Karat/Gewicht), Color (Farbe), Cut (Schliff) und Clarity (Reinheit). Daneben gibt es allerdings noch weitere Faktoren. [1]

Durch eine automatisierte Preisbestimmung kann auf verschiedene Weise Business Value schaffen. Zunächst kann die Automatisierung Personalkosten einsparen Aufwände reduzieren, da die Preise nicht mehr manuell bestimmt werden müssen. Ein Algorithmus kann aber auch von potenziellen Kunden genutzt werden. Diese haben oft keine Fachexpertise und können Preise von Diamanten, die beispielsweise von Juwelieren ausgegeben werden, schwer überprüfen. Dadurch sind Kunden anfällig für überhöhte oder viel zu niedrige Preise.

Ziel ist es daher, ein Regressionsmodell zu erstellen, in das verschiedene Merkmale des Diamanten eingegeben werden. Das Regressionsmodell soll dann einen Preis für den jeweiligen Diamanten berechnen. Wenn beispielsweise ein Kunde einen Diamanten bei einem Juwelier kaufen oder verkaufen möchte, kann auf diese Weise eine Orientierungshilfe für den Preis ermittelt werden, damit der jeweilige Diamant nicht signifikant über oder unter Wert gehandelt wird. Eine exakte Vorhersage der Diamantenpreise wird aufgrund der geringen Menge an Daten und Attributen sowie der Komplexität des Sachverhalts vermutlich nicht möglich sein. Das Modell soll stattdessen nur eine Orientierungshilfe sein. Daher sollen die vom Modell ermittelten Preise nicht mehr als 15% vom tatsächlichen Preis des Diamanten abweichen.

Die Erstellung des Modells erfolgt nach der CRISP-DM-Modell [2]:



1. Business Understanding: Definition der Ziele und Anforderungen
2. Data Understanding: Analyse der Daten auf Qualität und Zusammenhänge
3. Data Preparation: Erstellung eines finalen Datensatzes für weitere Bearbeitung
4. Modeling: Erstellung und Optimierung eines Modells
5. Evaluation: Beurteilung des Modells und Abgleich mit den Anforderungen
6. Deployment: Einführung des Modells[3]

Die Phasen Modeling und Evaluation werden hier in einer Phase zusammengefasst, um eine einfachere Betrachtung zu ermöglichen. Das Deployment ist nicht Teil der Betrachtung.

Das [vorliegende Datenset](https://www.kaggle.com/shivam2503/diamonds) (<https://www.kaggle.com/shivam2503/diamonds>) enthält Daten von circa 54.000 Diamanten mit jeweils neun Merkmalen und dem jeweiligen Preis und stammt von der Data Science Plattform Kaggle[4].

In [3]:

```
#Alle verwendeten Importe und Einstellungen
import pandas as pd
pd.set_option('display.expand_frame_repr', False)

import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline

import seaborn as sns

import numpy as np
np.set_printoptions(edgeitems=30, linewidth=100000, formatter=dict(float=lambda x: "%.3g" % x))

import scipy

import warnings
warnings.filterwarnings('ignore')

from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures

from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.model_selection import cross_validate, RepeatedKFold
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
from sklearn.model_selection import RandomizedSearchCV

from sklearn.linear_model import LinearRegression, Ridge, Lasso, ElasticNet, SGDRegressor
from sklearn.ensemble import RandomForestRegressor, AdaBoostRegressor
from sklearn.neighbors import KNeighborsRegressor
from sklearn.neural_network import MLPRegressor
from sklearn.svm import SVR

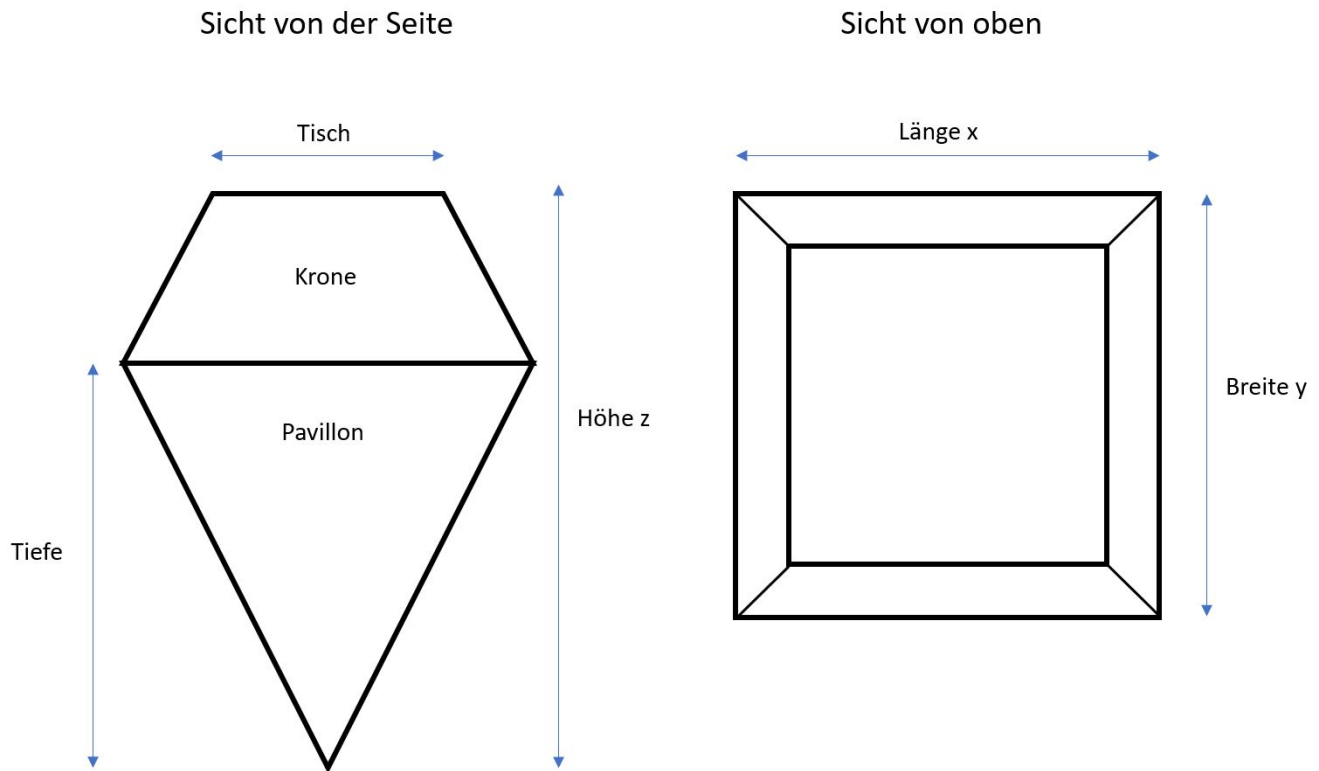
from sklearn.metrics import r2_score, mean_absolute_error, mean_squared_error, make_scorer
```

# Data Understanding

Der vorliegende Datensatz fasst insgesamt 53.941 Diamanten mit folgenden Attributen:

- Price: Preis in US-Dollar
- Carat: Karat (Gewicht)
- Cut: Schliff
- Color: Farbe
- Clarity: Reinheit
- X: Länge
- Y: Breite
- Z: Höhe
- Depth: Anteil des Pavillions an der Höhe (%)
- Table: Anteil des Tisches an der Länge (%)

## Abmessungen des Diamanten<sup>[5]</sup>



Zunächst sollen die einzelnen Merkmale univariat analysiert werden, anschließend erfolgt dann eine multivariate Analyse.

Zielvariable ist dabei der Preis.

In [15]:

```
#Datensatz laden
data = pd.read_csv('diamonds.csv') #https://www.kaggle.com/shivam2503/diamonds
data = data.drop('Unnamed: 0', 1) #Zeilennummer in CSV-Datei, kann daher entfernt werden
print(data.head(20))
```

	carat	cut	color	clarity	depth	table	price	x	y	z
0	0.23	Ideal	E	SI2	61.5	55.0	326	3.95	3.98	2.43
1	0.21	Premium	E	SI1	59.8	61.0	326	3.89	3.84	2.31
2	0.23	Good	E	VS1	56.9	65.0	327	4.05	4.07	2.31
3	0.29	Premium	I	VS2	62.4	58.0	334	4.20	4.23	2.63
4	0.31	Good	J	SI2	63.3	58.0	335	4.34	4.35	2.75
5	0.24	Very Good	J	VVS2	62.8	57.0	336	3.94	3.96	2.48
6	0.24	Very Good	I	VVS1	62.3	57.0	336	3.95	3.98	2.47
7	0.26	Very Good	H	SI1	61.9	55.0	337	4.07	4.11	2.53
8	0.22	Fair	E	VS2	65.1	61.0	337	3.87	3.78	2.49
9	0.23	Very Good	H	VS1	59.4	61.0	338	4.00	4.05	2.39
10	0.30	Good	J	SI1	64.0	55.0	339	4.25	4.28	2.73
11	0.23	Ideal	J	VS1	62.8	56.0	340	3.93	3.90	2.46
12	0.22	Premium	F	SI1	60.4	61.0	342	3.88	3.84	2.33
13	0.31	Ideal	J	SI2	62.2	54.0	344	4.35	4.37	2.71
14	0.20	Premium	E	SI2	60.2	62.0	345	3.79	3.75	2.27
15	0.32	Premium	E	I1	60.9	58.0	345	4.38	4.42	2.68
16	0.30	Ideal	I	SI2	62.0	54.0	348	4.31	4.34	2.68
17	0.30	Good	J	SI1	63.4	54.0	351	4.23	4.29	2.70
18	0.30	Good	J	SI1	63.8	56.0	351	4.23	4.26	2.71
19	0.30	Very Good	J	SI1	62.7	59.0	351	4.21	4.27	2.66

# Univariate Analyse

Zunächst sollen die Daten univariat analysiert werden.

Bei metrischen Merkmalen werden drei Diagramme gezeichnet. Mit einem Verteilungsdiagramm[6] wird die Verteilung dargestellt. Ausreißer und Quantile werden mittels eines Boxplot[7] dargestellt. Außerdem wird ein möglicher (linearer) Einfluss des Merkmals auf den Preis der Diamanten mittels Regressionsplots[8] analysiert.

Neben den Diagrammen werden auch die Korrelationskoeffizienten nach Spearman und Pearson berechnet. Der Koeffizient nach Pearson untersucht die Daten auf eine lineare Beziehung. Der Koeffizient nach Spearman untersucht die Daten auf monotone Beziehungen und kann mit Ausreißern und nicht-normalverteilten Daten besser umgehen als der Koeffizient nach Pearson. Die Nullhypothese  $H_0$  beider Tests geht von keinem Zusammenhang der Daten aus. Als Signifikanzniveau werden 5 % festgelegt. Der p-Wert muss also unter 0,05 liegen, damit die Nullhypothese verworfen und von einem Zusammenhang (Alternativhypothese  $H_1$ ) ausgegangen werden kann. Andernfalls wird die Nullhypothese beibehalten. Je näher die Koeffizienten bei eins 1 liegen, desto stärker ist der positive Zusammenhang und je näher die Koeffizienten bei -1 liegen, desto stärker ist der negative Zusammenhang. Liegen die Koeffizienten nahe bei 0, gibt es keinen Zusammenhang[9]. Die Berechnung des Spearman-Koeffizienten[10] und Pearson-Koeffizienten[11] erfolgt mit der Python-Bibliothek scipy.

Ausreißer werden mit der IQR-Methode („Interquartile Range“) bestimmt. Dabei werden zunächst das erste und das dritte Quartil bestimmt (25 % und 75%) und dann der Abstand dazwischen bestimmt. Vom unteren Quartil wird dann das eineinhalbfache des Abstands subtrahiert und zum oberen Quartil das eineinhalbfache des Abstands addiert. Die sich daraus ergebenden Werte dienen dann als Ober- bzw. Untergrenze für Ausreißer. Alle Werte die darüber bzw. darunter liegen, gelten als Ausreißer[12].

Bei kategorialen Merkmalen werden ebenfalls drei Diagramme gezeichnet. Die Verteilung wird mittels Countplot[13] dargestellt. Für jede Kategorie wird dann ein Boxplot mit den jeweiligen Preisen erstellt. Außerdem wird der durchschnittliche Preis für Diamanten der jeweiligen Kategorie mit einem Barplot[14] gezeigt.

Die Beziehung zum Preis wird mit der Varianzanalyse untersucht. Dabei wird geprüft, ob sich die Mittelwerte von unabhängigen Stichproben, die durch eine unabhängige Variable definiert werden, unterscheiden. Die Nullhypothese  $H_0$  geht von keinem Unterschied in den Gruppen aus. Als Signifikanzniveau werden 5 % festgelegt. Der p-Wert muss also unter 0,05 liegen, damit die Nullhypothese verworfen und von einem Unterschied (Alternativhypothese  $H_1$ ) ausgegangen werden kann. Andernfalls wird die Nullhypothese beibehalten[15].

## Target: price

- Preis in US-Dollar
- Zielvariable/Target für die Regression
- Skala: metrisch/verhältnisskaliert

### Beobachtung

- Stark rechtsschiefe Verteilung
- Ausreißer: Nach IQR-Methode ab 11.885 -> insgesamt 3.540 Ausreißer

In [10]:

```

print("Zusammenfassung:")
print(data["price"].describe())

print("\nAusreißer: ", len(data[data.price > 11885]), "\n")

fig, (ax1,ax2) = plt.subplots(2,2, figsize=(24,8))

#Distplot
plt.subplot(1,3,1)
sns.distplot(data['price'], kde = False, bins = 50)
plt.xlabel('Preis')
plt.ylabel('Häufigkeit')
plt.title('Verteilungsdiagramm: Preise')

#Boxplot
plt.subplot(1,3,2)
sns.boxplot(data['price'])
plt.ylabel('Preis')
plt.title('Boxplot: Preise')

plt.show()

```

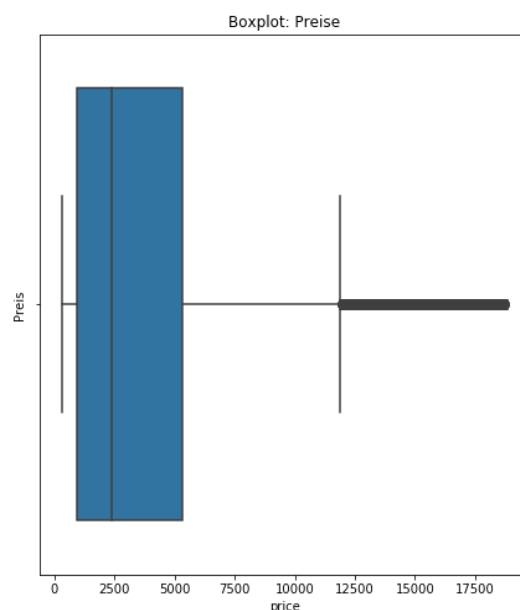
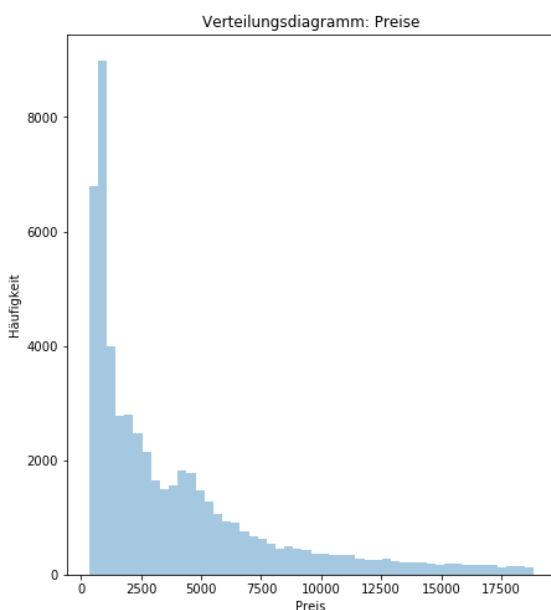
Zusammenfassung:

```

count    53940.000000
mean      3932.799722
std       3989.439738
min        326.000000
25%        950.000000
50%       2401.000000
75%       5324.250000
max      18823.000000
Name: price, dtype: float64

```

Ausreißer: 3540





## Feature: carat

Das Gewicht von Diamanten wird in Karat gemessen. Ein Karat entspricht 0,2 Gramm. Generell sind schwerere Diamanten aufgrund ihrer Seltenheit überproportional teurer<sup>[16]</sup>.

Skala: metrisch/verhältnisskaliert

### Beobachtung

- Rechtsschiefe Verteilung
- Ausreißer: Nach IQR-Methode ab 1,9 -> insgesamt 2.196 Ausreißer
- Positiver Zusammenhang zum Preis erkennbar

### Fazit:

- Preis und Karat korrelieren
- Ausreißer sollten entfernt werden

In [12]:

```
print("Zusammenfassung:")
print(data["carat"].describe())

print("\nAusreißer: ", len(data[data.carat > 1.9]))

print("\nKorrelationskoeffizienten:")

spearman = scipy.stats.spearmanr(data['carat'], data['price'])
pearson = scipy.stats.pearsonr(data['carat'], data['price'])

print("Spearman:", spearman.correlation, "\tp-Wert: ", spearman.pvalue)
print("Pearson: ", pearson[0], "\tp-Wert: ", pearson[1])

print("\n\n")

fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(2, 2, figsize=(24, 8))

#Distplot
plt.subplot(1, 3, 1)
sns.distplot(data['carat'], kde = False, bins = 25)
plt.xlabel('Karat')
plt.ylabel('Häufigkeit')
plt.title('Verteilungsdiagramm: Karat')

#Boxplot
plt.subplot(1, 3, 2)
sns.boxplot(data['carat'])
plt.xlabel('Karat')
plt.title('Boxplot: Karat')

#Regplot
plt.subplot(1, 3, 3)
sns.regplot(x = 'carat', y = 'price', data = data, scatter_kws = {'color': 'blue'}, line_kws = {'color': 'red'})
plt.ylim(0, 20000)
plt.xlabel('Karat')
plt.ylabel('Preis')
plt.title('Regressionsplot: Preis ~ Karat')

plt.show()
```

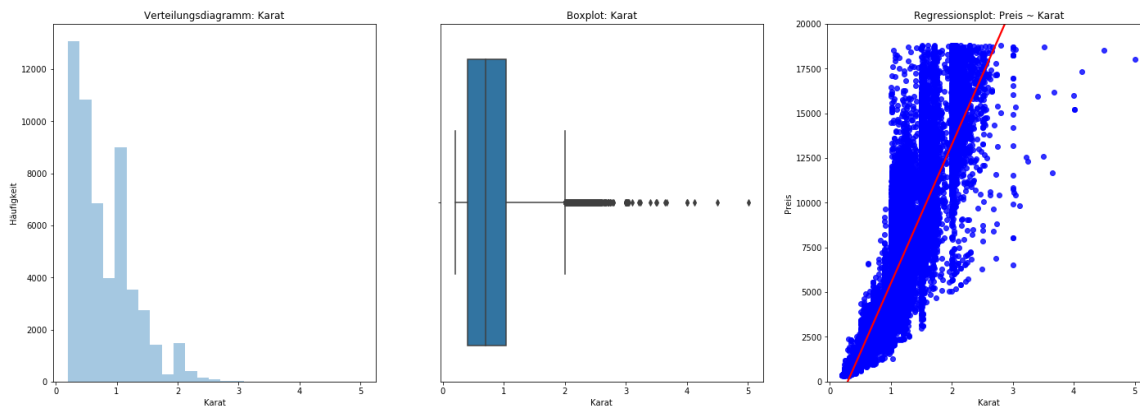
## Zusammenfassung:

```
count    53940.000000
mean      0.797940
std       0.474011
min       0.200000
25%       0.400000
50%       0.700000
75%       1.040000
max       5.010000
Name: carat, dtype: float64
```

Ausreißer: 2196

## Korrelationskoeffizienten:

```
Spearman: 0.9628827988813001    p-Wert: 0.0
Pearson:  0.9215913011935009    p-Wert: 0.0
```



[Marker für Präsentation: Zu Pairplots](#)

## Feature: cut

Der Schliff beeinflusst die Lichtbrechung und damit das Funkeln bzw. das sogenannte „Feuer“ des Diamanten. Je besser der Schnitt, desto besser scheint und funkelt der Diamant und desto hochwertiger und ist er<sup>[17]</sup>. Die Reihenfolge der Merkmalsausprägungen ist absteigend sortiert<sup>[18]</sup>:

Ideal

Premium

Very Good

Good

Fair

Skala: kategorial/ordinalskaliert

Beobachtung

- Ungleiche Verteilung
- Ausreißer in jeder Gruppe nach oben
- Preis steigt mit abnehmender Qualität

Fazit:

- Preis und Schliff scheinen nicht wie erwartet zu korrelieren, genauere Prüfung notwendig
- Möglicherweise sind Diamanten mit hochwertigen Schliff kleiner, was den Preis dann wieder mindert

In [15]:

```
print("Zusammenfassung:")
print(data["cut"].describe())

print("\nVarianzanalyse:")

anova = scipy.stats.f_oneway(data['price'][data['cut'] == 'Ideal'],
                             data['price'][data['cut'] == 'Premium'],
                             data['price'][data['cut'] == 'Very Good'],
                             data['price'][data['cut'] == 'Good'],
                             data['price'][data['cut'] == 'Fair'])

print("p-Wert: ", anova.pvalue)

print("\n\n")

fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(2, 2, figsize=(24, 8))

#Countplot
plt.subplot(1, 3, 1)
sns.countplot(x = data['cut'], order = ["Fair", "Good", "Very Good", "Premium", "Ideal"])
plt.xlabel('Schliff')
plt.ylabel('Häufigkeit')
plt.title('Countplot: Schliff')

#Boxplot
plt.subplot(1, 3, 2)
sns.boxplot(x = data['cut'], y = data['price'], order = ["Fair", "Good", "Very Good", "Premium", "Ideal"])
plt.xlabel('Schliff')
plt.ylabel('Preis')
plt.title('Boxplot: Preis ~ Schliff')

#Verteilung
plt.subplot(1, 3, 3)
sns.barplot(x = data['cut'], y = data['price'], order = ["Fair", "Good", "Very Good", "Premium", "Ideal"])
plt.xlabel('Schliff')
plt.ylabel('Durchschnittlicher Preis')
plt.title('Barplot: Preis ~ Schliff')

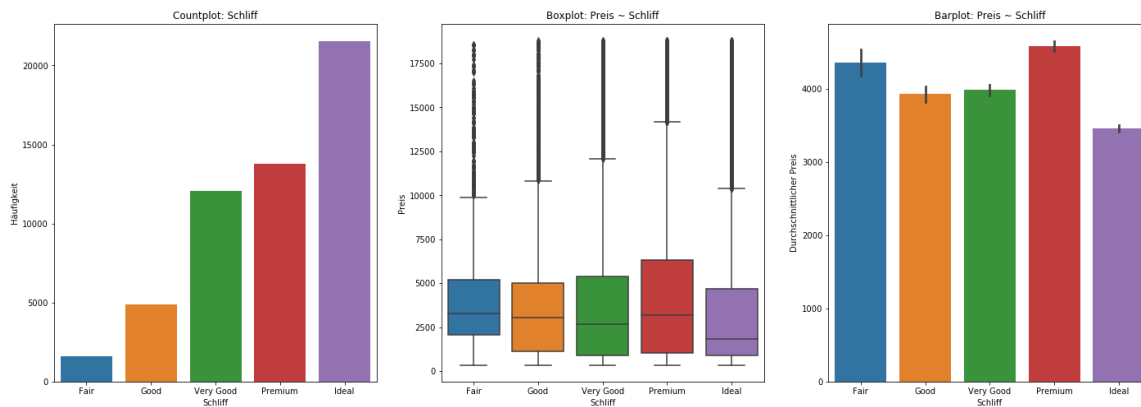
plt.show()
```

## Zusammenfassung:

count 53940  
unique 5  
top Ideal  
freq 21551  
Name: cut, dtype: object

## Varianzanalyse:

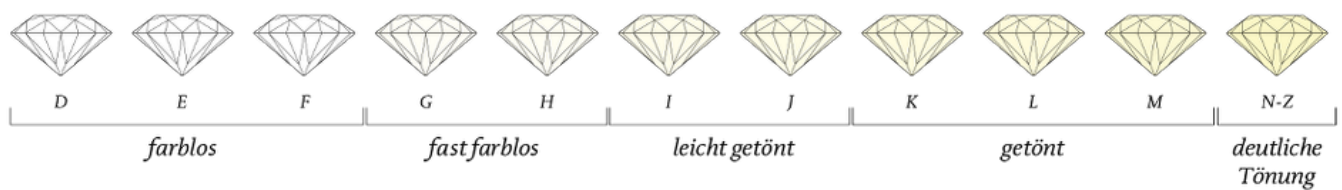
p-Wert: 8.42830730759452e-150



## Feature: color

Die Farbe des Diamanten richtet sich nach der Klarheit. Je klarer und durchsichtiger der Diamant ist, desto hochwertiger ist der Diamant. Leichte, meist gelbliche Verfärbungen mindern die Qualität. Die Reihenfolge der Merkmalsausprägungen ist absteigend sortiert<sup>[19]</sup>:

D  
E  
F  
G  
H  
I  
J  
K  
L  
M  
N-Z



Skala: kategorial/ordinalskaliert

Beobachtung

- Ungleiche Verteilung
- Ausreißer in jeder Gruppe nach oben
- Preis steigt mit abnehmender Qualität

Fazit:

- Preis und Farbe scheinen nicht wie erwartet zu korrelieren, genauere Prüfung notwendig
- Geringerer Preis bei besserer Farbe kann durch andere Qualitätsmängel begründet sein

In [14]:

```
print("Zusammenfassung:")
print(data["color"].describe())

print("\nVarianzanalyse:")

anova = scipy.stats.f_oneway(data['price'][data['color'] == 'D'],
                             data['price'][data['color'] == 'E'],
                             data['price'][data['color'] == 'F'],
                             data['price'][data['color'] == 'G'],
                             data['price'][data['color'] == 'H'],
                             data['price'][data['color'] == 'I'],
                             data['price'][data['color'] == 'J'])

print("p-Wert: ", anova.pvalue)

print("\n\n")

fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(2, 2, figsize=(24, 8))

#Countplot
plt.subplot(1, 3, 1)
sns.countplot(x = data['color'], order = ["J", "I", "H", "G", "F", "E", "D"])
plt.xlabel('Farbe')
plt.ylabel('Häufigkeit')
plt.title('Countplot: Farbe')

#Boxplot
plt.subplot(1, 3, 2)
sns.boxplot(x = data['color'], y = data['price'], order = ["J", "I", "H", "G", "F", "E", "D"])
plt.xlabel('Farbe')
plt.ylabel('Preis')
plt.title('Boxplot: Preis ~ Farbe')

#Verteilung
plt.subplot(1, 3, 3)
sns.barplot(x = data['color'], y = data['price'], order = ["J", "I", "H", "G", "F", "E", "D"])
plt.xlabel('Farbe')
plt.ylabel('Durchschnittlicher Preis')
plt.title('Barplot: Preis ~ Farbe')

plt.show()
```



**Zusammenfassung:**

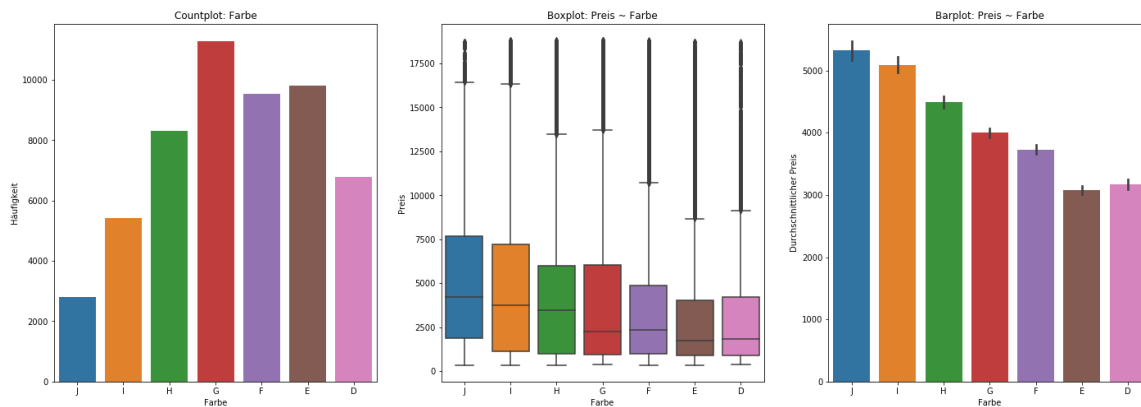
```

count      53940
unique       7
top         G
freq       11292
Name: color, dtype: object

```

**Varianzanalyse:**

p-Wert: 0.0

**Feature: clarity**

Die Reinheit des Diamanten gibt an, wie durchsichtig der Diamant ist. Risse oder Verunreinigungen durch andere Mineralien können die Durchsichtigkeit bzw. die Reinheit und damit die Qualität mindern. Die Reihenfolge der Merkmalsausprägungen ist absteigend sortiert<sup>[20]</sup>:

IF (internally flawless)

VSS1 (very, very small inclusions 1)

VSS2 (very, very small inclusions 2)

VS1 (very small inclusions 1)

VS2 (very small inclusions 2)

SI1 (small inclusions 1)

SI2 (small inclusions 2)

I1 (inclusions 1)

Skala: kategorial/ordinalskaliert

**Beobachtung**

- Ungleiche Verteilung
- Ausreißer in jeder Gruppe nach oben
- Preis steigt mit abnehmender Qualität

**Fazit:**

- Preis und Reinheit scheinen nicht wie erwartet zu korrelieren, genauere Prüfung notwendig
- Geringerer Preis bei besserer Farbe kann durch andere Qualitätsmängel begründet sein

In [16]:

```

print("Zusammenfassung:")
print(data["clarity"].describe())

print("\nVarianzanalyse:")

anova = scipy.stats.f_oneway(data['price'][data['clarity'] == 'IF'],
                             data['price'][data['clarity'] == 'VVS1'],
                             data['price'][data['clarity'] == 'VVS2'],
                             data['price'][data['clarity'] == 'VS1'],
                             data['price'][data['clarity'] == 'VS2'],
                             data['price'][data['clarity'] == 'SI1'],
                             data['price'][data['clarity'] == 'SI2'],
                             data['price'][data['clarity'] == 'I1'])

print("p-Wert: ", anova.pvalue)

print("\n\n")

fig, (ax1,ax2) = plt.subplots(2,2, figsize=(24,8))

#Countplot
plt.subplot(1,3,1)
sns.countplot(x = data['clarity'], order = ["I1","SI2","SI1","VS2","VS1","VVS2","VVS1",
"IF"])
plt.xlabel('Reinheit')
plt.ylabel('Häufigkeit')
plt.title('Countplot: Reinheit')

#Boxplot
plt.subplot(1,3,2)
sns.boxplot(x = data['clarity'], y = data['price'], order = ["I1","SI2","SI1","VS2","VS1",
"VVS2","VVS1","IF"])
plt.xlabel('Reinheit')
plt.ylabel('Preis')
plt.title('Boxplot: Preis ~ Reinheit')

#Verteilung
plt.subplot(1,3,3)
sns.barplot(x = data['clarity'], y = data['price'], order = ["I1","SI2","SI1","VS2","VS1",
"VVS2","VVS1","IF"])
plt.xlabel('Reinheit')
plt.ylabel('Durchschnittlicher Preis')
plt.title('Barplot: Preis ~ Reinheit')

plt.show()

```

**Zusammenfassung:**

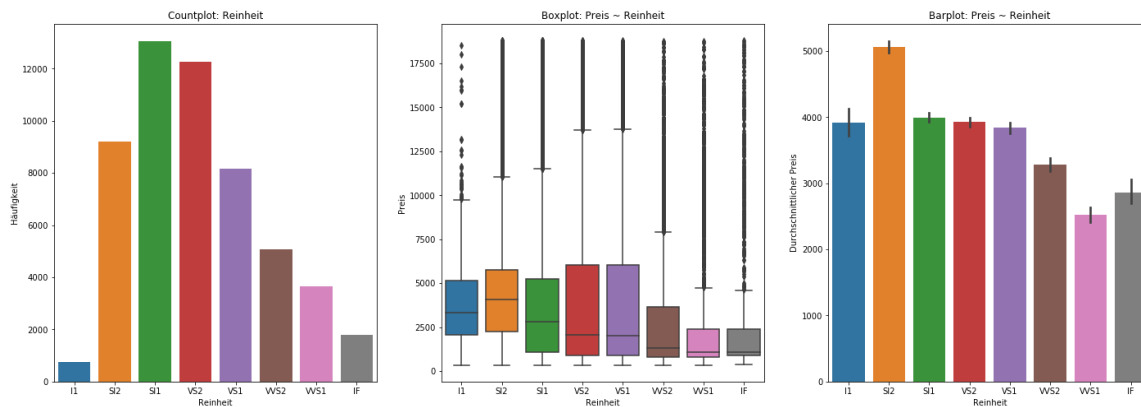
```

count      53940
unique       8
top         SI1
freq       13065
Name: clarity, dtype: object

```

**Varianzanalyse:**

p-Wert: 1.9190895e-316

**Feature: x**

Die Länge des Diamanten wird in Millimetern angegeben.

Skala: metrisch/verhältnisskaliert

**Beobachtung**

- Annähernde Normalverteilung
- Ausreißer: Nach IQR-Methode unter ~2,0 und über ~9,3 -> insgesamt 32 Ausreißer
- Minimum ist 0, muss aber > 0 sein, daher sind offensichtlich falsche Datensätze enthalten
- Positiver Zusammenhang zum Preis erkennbar

**Fazit:**

- Preis und Länge korrelieren
- Ausreißer sollten eventuell entfernt werden, falsche Datensätze müssen entfernt werden

In [18]:

```
print("Zusammenfassung:")
print(data["x"].describe())

print("\nAusreißer: ", (len(data[data.x > 9.285])+ len(data[data.x < 1.965])))

print("\nKorrelationskoeffizienten:")

spearman = scipy.stats.spearmanr(data['x'], data['price'])
pearson = scipy.stats.pearsonr(data['x'], data['price'])

print("Spearman:", spearman.correlation, "\tp-Wert: ", spearman.pvalue)
print("Pearson: ", pearson[0], "\tp-Wert: ", pearson[1])

print("\n\n")

fig, (ax1,ax2) = plt.subplots(2,2, figsize=(24,8))

#Distplot
plt.subplot(1,3,1)
sns.distplot(data['x'], kde = False, bins = 25)
plt.xlabel('X (Länge)')
plt.ylabel('Häufigkeit')
plt.title('Verteilungsdiagramm: X (Länge)')

#Boxplot
plt.subplot(1,3,2)
sns.boxplot(data['x'])
plt.xlabel('X (Länge)')
plt.title('Boxplot: X (Länge)')

#Regplot
plt.subplot(1,3,3)
sns.regplot(x = 'x', y = 'price', data = data, scatter_kws = {'color': 'blue'}, line_kws = {'color': 'red'})
plt.ylim(0,20000)
plt.xlabel('X (Länge)')
plt.ylabel('Preis')
plt.title('Regressionsplot: Preis ~ X (Länge)')

plt.show()
```

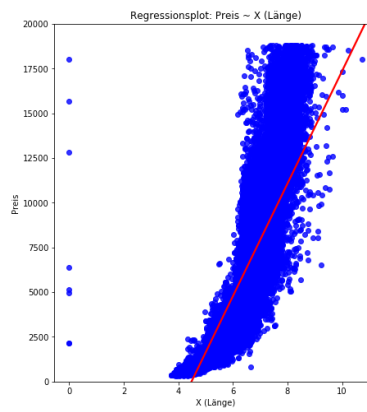
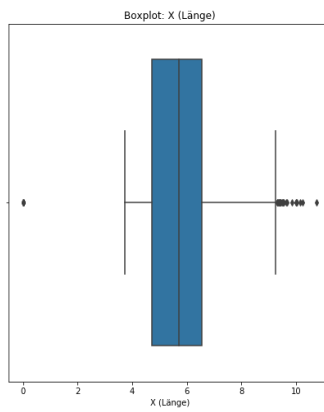
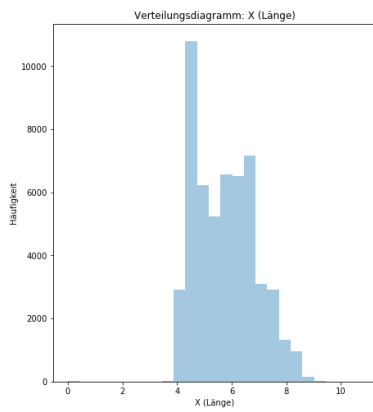
## Zusammenfassung:

```
count    53940.000000
mean      5.731157
std       1.121761
min       0.000000
25%       4.710000
50%       5.700000
75%       6.540000
max       10.740000
Name: x, dtype: float64
```

Ausreißer: 32

## Korrelationskoeffizienten:

```
Spearman: 0.9631961087113347    p-Wert: 0.0
Pearson:  0.8844351610161139    p-Wert: 0.0
```



## Feature: y

Die Breite des Diamanten in Millimetern angegeben.

Skala: metrisch/verhältnisskaliert

### Beobachtung

- Rechtsschiefe Verteilung (ohne Ausreißer eher normalverteilt)
- Ausreißer: Nach IQR-Methode unter  $\sim 2,0$  und über  $\sim 9,3$  -> insgesamt 29 Ausreißer
- Minimum ist 0, muss aber  $> 0$  sein, daher sind offensichtlich falsche Datensätze enthalten
- Positiver Zusammenhang zum Preis erkennbar
- Die Ausreißer mindern die Aussagekraft der Diagramme

### Fazit:

- Preis und Breite korrelieren
- Ausreißer sollten entfernt werden (vielleicht erst ab 12 mm), falsche Datensätze müssen entfernt werden

In [35]:

```
print("Zusammenfassung:")
print(data["y"].describe())

print("\nAusreißer: ", (len(data[data.y > 9.27])+ len(data[data.y < 2.01])))

print("\nKorrelationskoeffizienten:")

spearman = scipy.stats.spearmanr(data['y'], data['price'])
pearson = scipy.stats.pearsonr(data['y'], data['price'])

print("Spearman:", spearman.correlation, "\tp-Wert: ", spearman.pvalue)
print("Pearson: ", pearson[0], "\tp-Wert: ", pearson[1])

print("\n\n")

fig, (ax1,ax2) = plt.subplots(2,3, figsize=(24,14))

#Distplot
plt.subplot(2,3,1)
sns.distplot(data['y'], kde = False, bins = 25)
plt.xlabel('Y (Breite)')
plt.ylabel('Häufigkeit')
plt.title('Verteilungsdiagramm: Y (Breite)')

#Boxplot
plt.subplot(2,3,2)
sns.boxplot(data['y'])
plt.xlabel('Y (Breite)')
plt.title('Boxplot: Y (Breite)')

#Regplot
plt.subplot(2,3,3)
sns.regplot(x = 'y', y = 'price', data = data, scatter_kws = {'color': 'blue'}, line_kws = {'color': 'red'})
plt.ylim(0,20000)
plt.xlabel('Y (Breite) ohne extreme Ausreißer')
plt.ylabel('Preis')
plt.title('Regressionsplot: Preis ~ Y (Breite)')

#Ohne extreme Ausreißer nach oben

#Distplot
plt.subplot(2,3,4)
sns.distplot(data['y'], kde = False, bins = 25)
plt.xlabel('Y (Breite) ohne extreme Ausreißer')
plt.ylabel('Häufigkeit')
plt.xlim(0,12)
plt.title('Verteilungsdiagramm: Y (Breite)')

#Boxplot
plt.subplot(2,3,5)
sns.boxplot(data['y'])
plt.xlabel('Y (Breite)')
plt.xlim(0,12)
plt.title('Boxplot: Y (Breite)')

#Regplot
plt.subplot(2,3,6)
sns.regplot(x = 'y', y = 'price', data = data, scatter_kws = {'color': 'blue'}, line_kws = {'color': 'red'})
```

```
s = {'color': 'red'})
plt.ylim(0,20000)
plt.xlim(0,12)
plt.xlabel('Y (Breite) ohne extreme Ausreißer')
plt.ylabel('Preis')
plt.title('Regressionsplot: Preis ~ Y (Breite)')

plt.show()
```

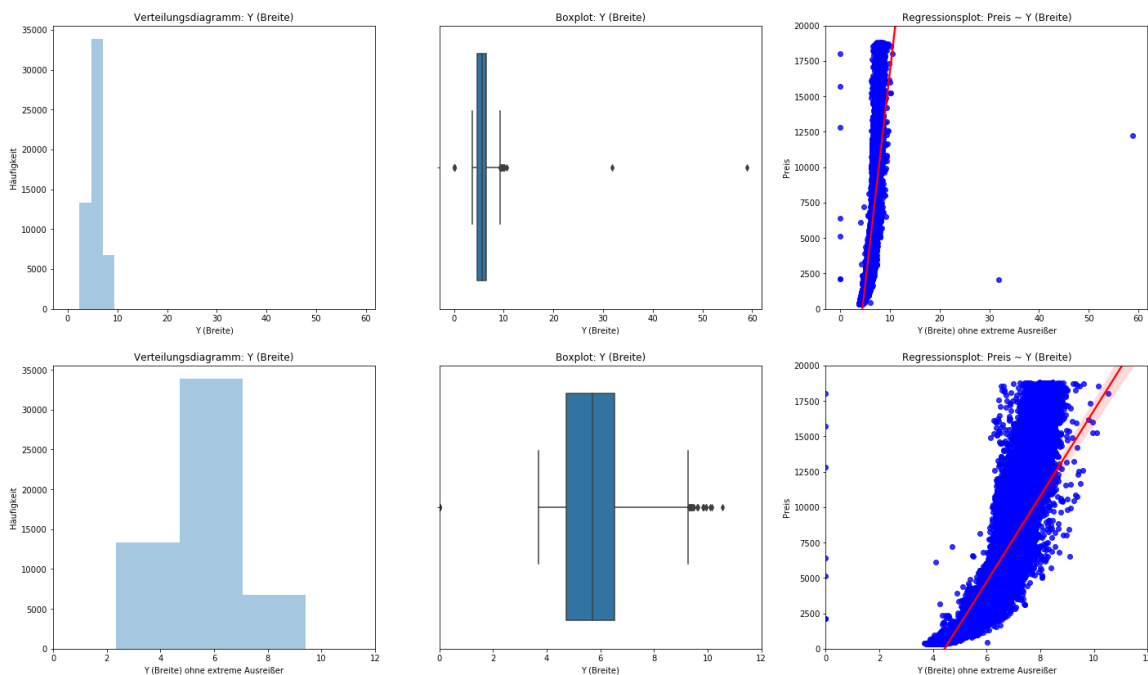
#### Zusammenfassung:

```
count    53940.000000
mean      5.734526
std       1.142135
min       0.000000
25%      4.720000
50%      5.710000
75%      6.540000
max      58.900000
Name: y, dtype: float64
```

Ausreißer: 29

#### Korrelationskoeffizienten:

```
Spearman: 0.9627188193892315    p-Wert: 0.0
Pearson:  0.8654208978641903    p-Wert: 0.0
```





## Feature: z

Die Höhe des Diamanten wird in Millimetern angegeben

Skala: metrisch/verhältnisskaliert

### Beobachtung

- Rechtsschiefe Verteilung (ohne Ausreißer eher normalverteilt)
- Ausreißer: Nach IQR-Methode unter  $\sim 1,2$  und über  $\sim 5,7$  -> insgesamt 49 Ausreißer
- Minimum ist 0, muss aber  $> 0$  sein, daher sind offensichtlich falsche Datensätze enthalten
- Positiver Zusammenhang zum Preis erkennbar

### Fazit:

- Preis und Höhe korrelieren
- Ausreißer sollten entfernt werden (vielleicht erst ab 8 mm), falsche Datensätze müssen entfernt werden

In [33]:

```
print("Zusammenfassung:")
print(data["z"].describe())

print("\nAusreißer: ", (len(data[data.z > 5.735]) + len(data[data.z < 1.215])))

print("\nKorrelationskoeffizienten:")

spearman = scipy.stats.spearmanr(data['z'], data['price'])
pearson = scipy.stats.pearsonr(data['z'], data['price'])

print("Spearman:", spearman.correlation, "\tp-Wert: ", spearman.pvalue)
print("Pearson: ", pearson[0], "\tp-Wert: ", pearson[1])

print("\n\n")

fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(2, 3, figsize=(24, 14))

#Distplot
plt.subplot(2, 3, 1)
sns.distplot(data['z'], kde = False, bins = 25)
plt.xlabel('Z (Höhe)')
plt.ylabel('Häufigkeit')
plt.title('Verteilungsdiagramm: Z (Höhe)')

#Boxplot
plt.subplot(2, 3, 2)
sns.boxplot(data['z'])
plt.xlabel('Z (Höhe)')
plt.title('Boxplot: Z (Höhe)')

#Regplot
plt.subplot(2, 3, 3)
sns.regplot(x = 'z', y = 'price', data = data, scatter_kws = {'color': 'blue'}, line_kws = {'color': 'red'})
plt.ylim(0, 20000)
plt.xlabel('Z (Höhe)')
plt.ylabel('Preis')
plt.title('Regressionsplot: Preis ~ Z (Höhe)')

#Ohne extreme Ausreißer nach oben

#Distplot
plt.subplot(2, 3, 4)
sns.distplot(data['z'], kde = False, bins = 25)
plt.xlabel('Z (Höhe) ohne extreme Ausreißer')
plt.ylabel('Häufigkeit')
plt.xlim(0, 10)
plt.title('Verteilungsdiagramm: Z (Höhe)')

#Boxplot
plt.subplot(2, 3, 5)
sns.boxplot(data['z'])
plt.xlabel('Z (Höhe) ohne extreme Ausreißer')
plt.xlim(0, 10)
plt.title('Boxplot: Z (Höhe)')

#Regplot
plt.subplot(2, 3, 6)
sns.regplot(x = 'z', y = 'price', data = data, scatter_kws = {'color': 'blue'}, line_kws = {'color': 'red'})
```

```
s = {'color': 'red'})
plt.ylim(0,20000)
plt.xlabel('Z (Höhe)')
plt.ylabel('Preis')
plt.xlim(0,10)
plt.title('Regressionsplot: Preis ~ Z (Höhe) ohne extreme Ausreißer')

plt.show()
```

## Zusammenfassung:

```

count    53940.000000
mean      3.538734
std       0.705699
min       0.000000
25%       2.910000
50%       3.530000
75%       4.040000
max       31.800000
Name: z, dtype: float64

```

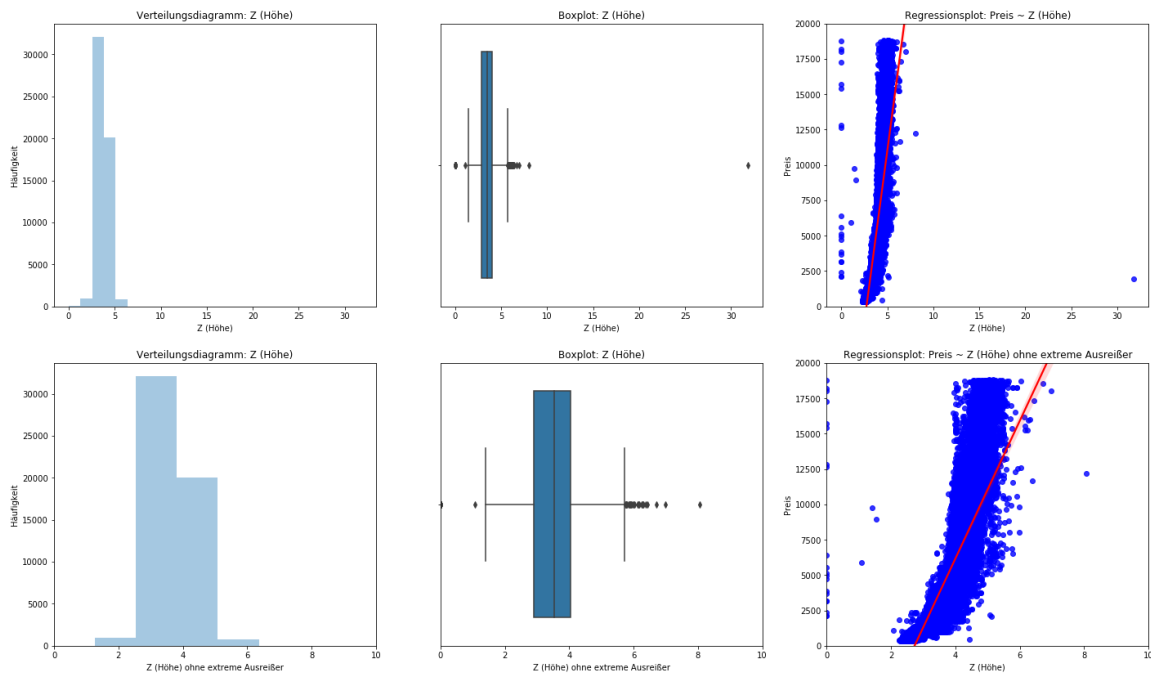
Ausreißer: 49

## Korrelationskoeffizienten:

```

Spearman: 0.9572322686120686    p-Wert: 0.0
Pearson:  0.861249443851434    p-Wert: 0.0

```



## Feature: depth

Die Tiefe des Diamanten ergibt sich aus dem Anteil des Pavillons an der Höhe (z), hier als prozentualer Anteil angegeben.

Skala: metrisch/verhältnisskaliert

Beobachtung

- normalverteilt
- Ausreißer: Nach IQR-Methode unter ~59 und über ~65 -> insgesamt 2.545 Ausreißer
- Kein Zusammenhang erkennbar

Fazit:

- Preis und Tiefe korrelieren nicht direkt sichtbar
- Kann möglicherweise aus Daten entfernt werden

In [25]:

```
print("Zusammenfassung:")
print(data["depth"].describe())

print("\nAusreißer: ", (len(data[data.depth > 64.75]) + len(data[data.depth < 58.75])))

print("\nKorrelationskoeffizienten:")

spearman = scipy.stats.spearmanr(data['depth'], data['price'])
pearson = scipy.stats.pearsonr(data['depth'], data['price'])

print("Spearman:", spearman.correlation, "\t\t p-Wert: ", spearman.pvalue)
print("Pearson: ", pearson[0], "\t\t p-Wert: ", pearson[1])

print("\n\n")

fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(2, 2, figsize=(24, 8))

#Distplot
plt.subplot(1, 3, 1)
sns.distplot(data['depth'], kde = False, bins = 25)
plt.xlabel('Tiefe')
plt.ylabel('Häufigkeit')
plt.title('Verteilungsdiagramm: Tiefe')

#Boxplot
plt.subplot(1, 3, 2)
sns.boxplot(data['depth'])
plt.xlabel('Tiefe')
plt.title('Boxplot: Tiefe')

#Regplot
plt.subplot(1, 3, 3)
sns.regplot(x = 'depth', y = 'price', data = data, scatter_kws = {'color': 'blue'}, line_kws = {'color': 'red'})
plt.ylim(0, 20000)
plt.xlabel('Tiefe')
plt.ylabel('Preis')
plt.title('Regressionsplot: Preis ~ Tiefe')

plt.show()
```

**Zusammenfassung:**

```

count    53940.000000
mean      61.749405
std       1.432621
min       43.000000
25%       61.000000
50%       61.800000
75%       62.500000
max       79.000000
Name: depth, dtype: float64

```

Ausreißer: 2545

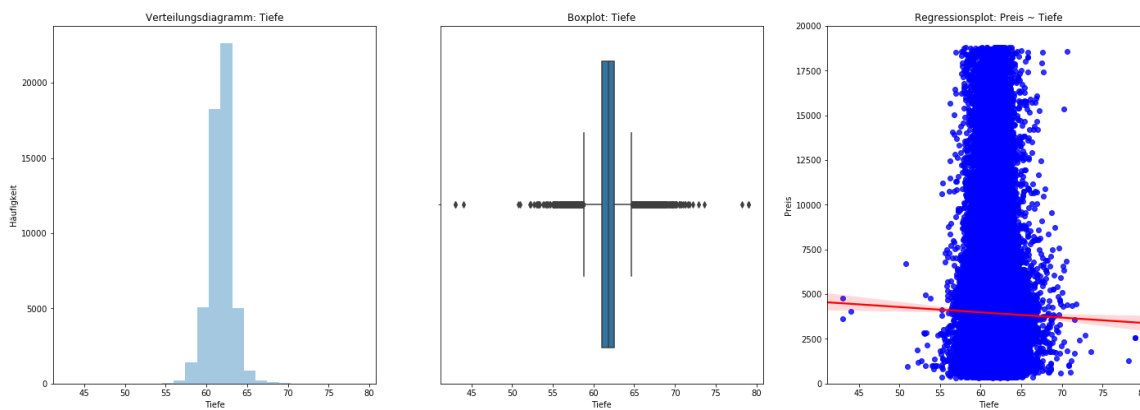
**Korrelationskoeffizienten:**

Spearman: 0.01001966963455154

p-Wert: 0.019961465178476374

Pearson: -0.010647404584142647

p-Wert: 0.013403249011912978

**Feature: table**

Die obere Fläche der Krone wird als Tisch bezeichnet. In den Daten wird der Tisch als prozentualer Anteil der Länge (x) angegeben.

Skala: metrisch/verhältnisskaliert

**Beobachtung**

- normalverteilt/leicht rechtsschief
- Ausreißer: Nach IQR-Methode unter ~53 und über ~62 -> insgesamt 22.438 Ausreißer
- Kein Zusammenhang erkennbar

**Fazit:**

- Preis und Tisch korrelieren nicht direkt sichtbar
- Kann möglicherweise aus Daten entfernt werden

In [27]:

```
print("Zusammenfassung:")
print(data["table"].describe())

print("\nAusreißer: ", (len(data[data.depth > 62]) + len(data[data.depth < 53])))

print("\nKorrelationskoeffizienten:")

spearman = scipy.stats.spearmanr(data['table'], data['price'])
pearson = scipy.stats.pearsonr(data['table'], data['price'])

print("Spearman:", spearman.correlation, "\tp-Wert: ", spearman.pvalue)
print("Pearson: ", pearson[0], "\tp-Wert: ", pearson[1])

print("\n\n")

fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(2, 2, figsize=(24, 8))

#Distplot
plt.subplot(1, 3, 1)
sns.distplot(data['table'], kde = False, bins = 25)
plt.xlabel('Tisch')
plt.ylabel('Häufigkeit')
plt.title('Verteilungsdiagramm: Tisch')

#Boxplot
plt.subplot(1, 3, 2)
sns.boxplot(data['table'])
plt.xlabel('Tisch')
plt.title('Boxplot: Tisch')

#Regplot
plt.subplot(1, 3, 3)
sns.regplot(x = 'table', y = 'price', data = data, scatter_kws = {'color': 'blue'}, line_kws = {'color': 'red'})
plt.ylim(0, 20000)
plt.xlabel('Tisch')
plt.ylabel('Preis')
plt.title('Regressionsplot: Preis ~ Tisch')

plt.show()
```



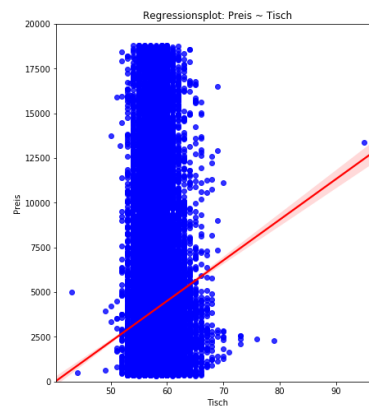
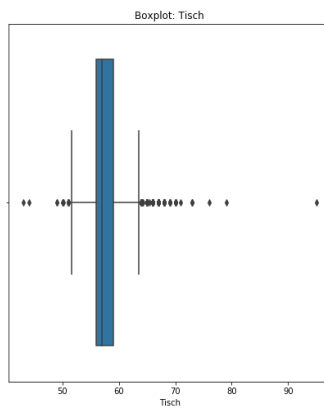
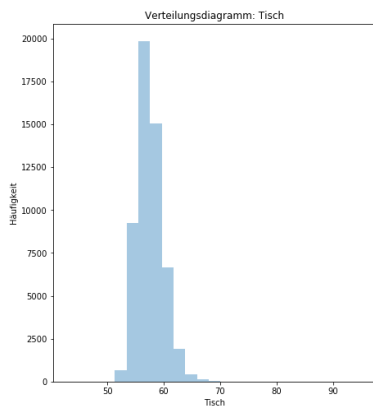
## Zusammenfassung:

```
count    53940.000000
mean      57.457184
std       2.234491
min       43.000000
25%       56.000000
50%       57.000000
75%       59.000000
max       95.000000
Name: table, dtype: float64
```

Ausreißer: 22438

## Korrelationskoeffizienten:

```
Spearman: 0.17178447793764812    p-Wert: 0.0
Pearson: 0.1271339021217424    p-Wert: 3.761533913245548e-193
```



## Fazit der univarianten Analyse der einzelnen Merkmale

Die Merkmale carat, x, y und z beeinflussen den Preis der Diamanten positiv. Das ist zu erwarten, da das Gewicht bzw. die Größe stark zusammenhängen und als wichtigstes Merkmal für die Bestimmung des Preises gelten. Bei der ersten Analyse fällt allerdings auf, dass qualitativ hochwertigere Merkmalsausprägungen bei den Merkmalen cut, color und clarity anscheinend einen negativen Einfluss auf den Preis der Diamanten haben. Dieser Sachverhalt entspricht nicht der Erwartung und der Recherche und muss daher genauer analysiert werden.

Die Merkmale table und depth sollten keinen oder nur sehr geringen Einfluss auf den Preis haben, was sich auch in den Daten widerspiegelt. Daher werden diese beiden Merkmale nicht weiter betrachtet und aus den Daten entfernt.

Bei den Merkmalen x, y und z müssen einige falsche Datensätze sowie die mit der IQR-Methode berechneten Ausreißer entfernt werden. Um nicht zu viele Datensätze zu entfernen, werden die Datensätze folgendermaßen bereinigt: Bei dem Merkmal Karat werden Ausreißer mit einem Wert von über 2,0 entfernt. Bei dem Merkmal Tiefe werden Ausreißer mit einem Wert von unter 50 und über 70 entfernt. Bei dem Merkmal Tisch werden Ausreißer mit einem Wert von unter 53 und über 65 entfernt. Damit werden dann insgesamt 2.170 Datensätze entfernt.

In [45]:

```
initialLength = len(data)

#Falsche Daten und Ausreißer aus x, y und z entfernen
data = data[data['x'] > 1.965]
data = data[data['x'] < 9.285]
data = data[data['y'] > 2.01]
data = data[data['y'] < 9.27]
data = data[data['z'] > 1.215]
data = data[data['z'] < 5.735]

#Ausreißer aus Karat entfernen (größer als 2,0)
data = data[data['carat'] <= 2.0]

#Ausreißer aus Tiefe entfernen (größer als 70 und kleiner als 50)
data = data[data['depth'] <= 70]
data = data[data['depth'] >= 50]

#Ausreißer aus Tisch entfernen (größer als 65 und kleiner als 53)
data = data[data['table'] <= 65]
data = data[data['table'] >= 53]

print(initialLength, "Datensätze vor Bereinigung")
print("", initialLength - len(data), "Datensätze entfernt")
print(len(data), "Datensätze nach Bereinigung\n")
```

```
53940 Datensätze vor Bereinigung
2170 Datensätze entfernt
51770 Datensätze nach Bereinigung
```

## Unerwartete negative Korrelation von Farbe, Schliff und Reinheit mit Preis

Aus der bisherigen Analyse hat sich ergeben, dass sich höherwertige Merkmalsausprägungen der Merkmale Farbe, Schliff und Preis negativ auf den Preis auszuwirken scheinen. Es werden daher zwei Annahmen untersucht, die diesen unterwarteten Zusammenhang erklären könnten.

Das wichtigste Kriterium bei der Bestimmung des Preises eines Diamanten ist das Gewicht. Es ist möglich, dass ansonsten höherwertige Diamanten häufig ein sehr geringes Gewicht haben und dass schwere bzw. große Diamanten zwar niedrigere andere Qualitätsmerkmale aufweisen, diese mangelnde Qualität aber mit ihrem Gewicht so stark kompensieren, dass sie insgesamt teurer sind.

Andernfalls könnte eine mögliche Erklärung in der Verteilung der Daten liegen. Die Daten bzw. die Preise der Diamanten sind sehr ungleich verteilt. Es gibt wesentlich mehr Diamanten in den unteren Preissegmenten als in den oberen. Die Ungleichverteilung der Daten könnte die durchschnittlichen Preise der Merkmalsausprägungen verzerren.

Die Daten werden zunächst anhand des wichtigsten Merkmals (Karat) in die vier Quantile aufgeteilt. Danach werden die Merkmale Farbe, Schliff und Reinheit in den vier Quantilen separat auf die Verteilung und den Zusammenhang mit dem Preis untersucht.

In [8]:

```
print("Zusammenfassung:")  
print(data["price"].describe())
```

Zusammenfassung:

```
count    51770.000000  
mean      3531.642032  
std       3415.692287  
min        326.000000  
25%       926.000000  
50%      2282.000000  
75%      4959.000000  
max     18818.000000  
Name: price, dtype: float64
```

In [5]:

```
#Aufteilung der Daten in Quantile
data_q1 = data[data["carat"] <= 0.39]

data_q2 = data[data["carat"] > 0.39]
data_q2 = data_q2[data_q2["carat"] <= 0.7]

data_q3 = data[data["carat"] > 0.7]
data_q3 = data_q3[data_q3["carat"] <= 1.02]

data_q4 = data[data["carat"] > 1.02]

print("Diamanten Quantil 1: ", len(data_q1))
print("Diamanten Quantil 2: ", len(data_q2))
print("Diamanten Quantil 3: ", len(data_q3))
print("Diamanten Quantil 4: ", len(data_q4))
```

```
Diamanten Quantil 1: 13092
Diamanten Quantil 2: 14070
Diamanten Quantil 3: 12401
Diamanten Quantil 4: 14377
```

In [6]:

```
fig, (ax1,ax2) = plt.subplots(2,3, figsize=(24,16))

print("Diamanten 1. Quantil")

#Diagramme
plt.subplot(2,3,1)
sns.barplot(x = data_q1['cut'], y = data_q1['price'], order = ["Fair","Good","Very Good",
"Premium","Ideal"])
plt.xlabel("Schnitt")
plt.ylabel("Preis")
plt.title('Barplot: Preis ~ Schliff')

plt.subplot(2,3,2)
sns.barplot(x = data_q1['color'], y = data_q1['price'], order = ["J","I","H","G","F",
"E","D"])
plt.xlabel("Farbe")
plt.ylabel("Preis")
plt.title('Barplot: Preis ~ Farbe')

plt.subplot(2,3,3)
sns.barplot(x = data_q1['clarity'], y = data_q1['price'], order = ["I1","SI2","SI1","VS
2","VS1","VVS2","VVS1","IF"])
plt.xlabel("Reinheit")
plt.ylabel("Preis")
plt.title('Barplot: Preis ~ Reinheit')

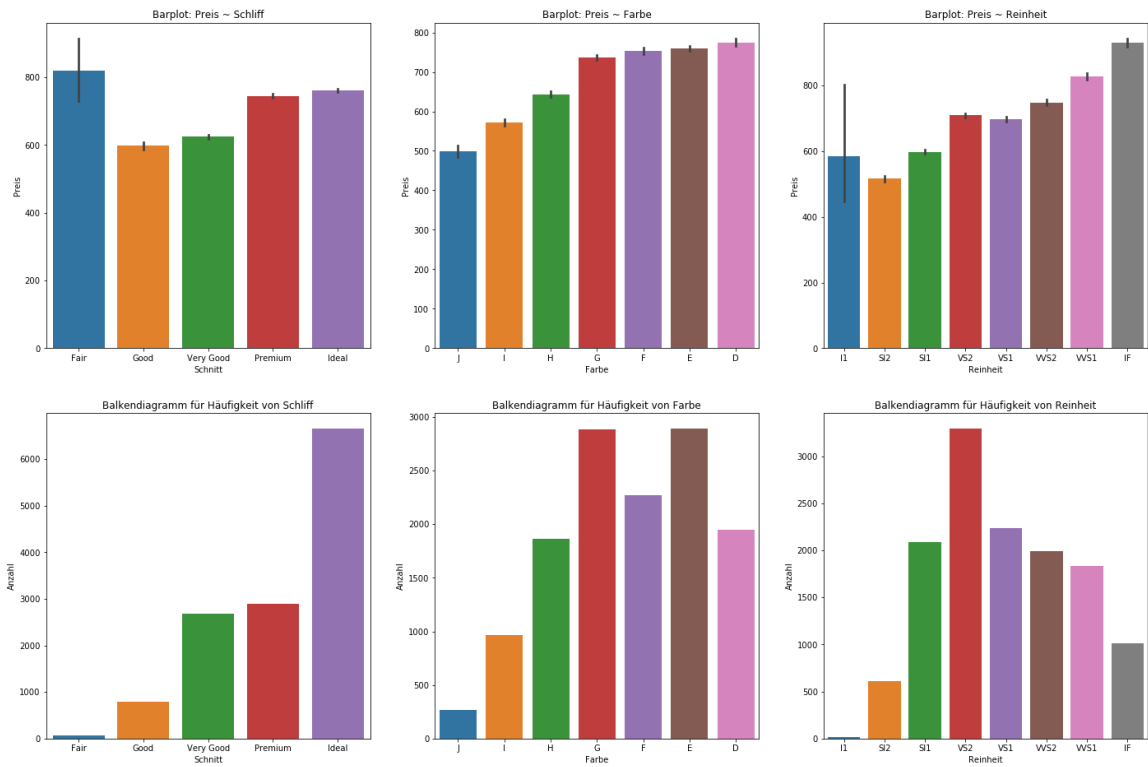
plt.subplot(2,3,4)
sns.countplot(x = data_q1['cut'], order = ["Fair","Good","Very Good","Premium","Ideal"
])
plt.xlabel("Schliff")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Balkendiagramm für Häufigkeit von Schliff')

plt.subplot(2,3,5)
sns.countplot(x = data_q1['color'], order = ["J","I","H","G","F","E","D"])
plt.xlabel("Farbe")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Balkendiagramm für Häufigkeit von Farbe')

plt.subplot(2,3,6)
sns.countplot(x = data_q1['clarity'], order = ["I1","SI2","SI1","VS2","VS1","VVS2","VVS
1","IF"])
plt.xlabel("Reinheit")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Balkendiagramm für Häufigkeit von Reinheit')

plt.show()
```

Diamanten 1. Quantil



In [7]:

```
fig, (ax1,ax2) = plt.subplots(2,3, figsize=(24,16))

print("Diamanten 2. Quantil")

#Diagramme
plt.subplot(2,3,1)
sns.barplot(x = data_q2['cut'], y = data_q2['price'], order = ["Fair","Good","Very Good",
"Premium","Ideal"])
plt.xlabel("Schliff")
plt.ylabel("Preis")
plt.title('Barplot: Preis ~ Schliff')

plt.subplot(2,3,2)
sns.barplot(x = data_q2['color'], y = data_q2['price'], order = ["J","I","H","G","F",
"E","D"])
plt.xlabel("Farbe")
plt.ylabel("Preis")
plt.title('Barplot: Preis ~ Farbe')

plt.subplot(2,3,3)
sns.barplot(x = data_q2['clarity'], y = data_q2['price'], order = ["I1","SI2","SI1","VS
2","VS1","VVS2","VVS1","IF"])
plt.xlabel("Reinheit")
plt.ylabel("Preis")
plt.title('Barplot: Preis ~ Reinheit')

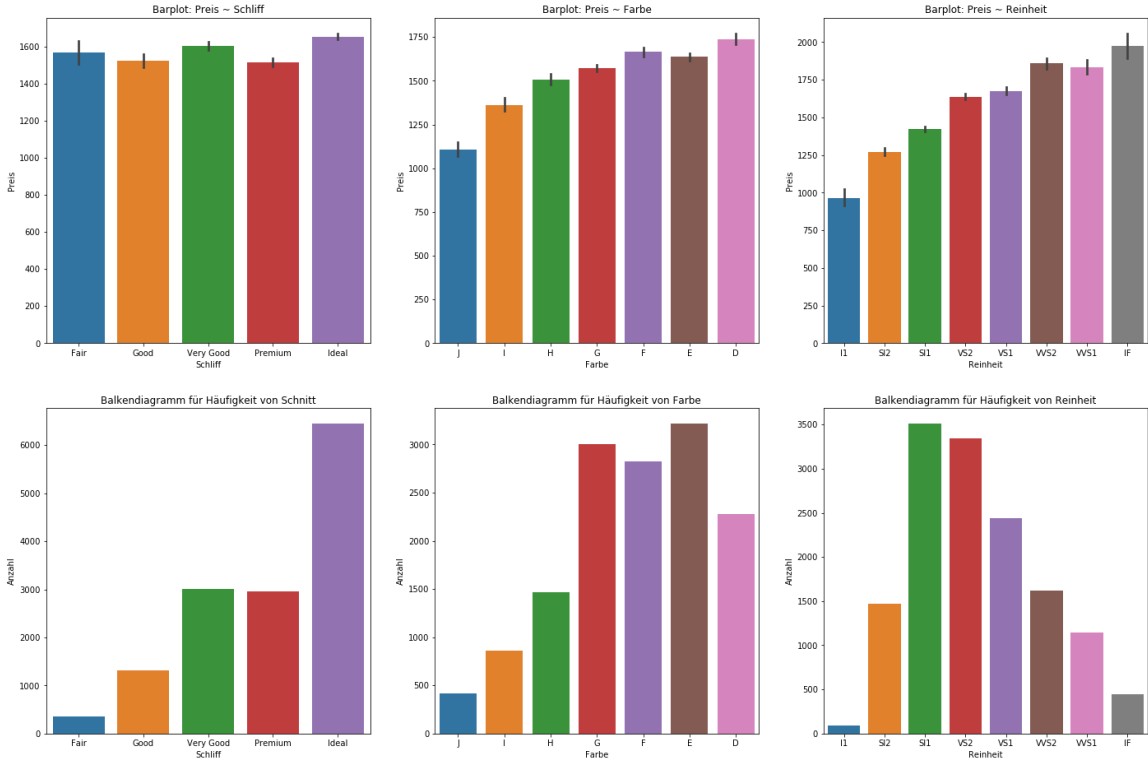
plt.subplot(2,3,4)
sns.countplot(x = data_q2['cut'], order = ["Fair","Good","Very Good","Premium","Ideal"
])
plt.xlabel("Schliff")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Balkendiagramm für Häufigkeit von Schnitt')

plt.subplot(2,3,5)
sns.countplot(x = data_q2['color'], order = ["J","I","H","G","F","E","D"])
plt.xlabel("Farbe")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Balkendiagramm für Häufigkeit von Farbe')

plt.subplot(2,3,6)
sns.countplot(x = data_q2['clarity'], order = ["I1","SI2","SI1","VS2","VS1","VVS2","VVS
1","IF"])
plt.xlabel("Reinheit")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Balkendiagramm für Häufigkeit von Reinheit')

plt.show()
```

Diamanten 2. Quantil





In [8]:

```
fig, (ax1,ax2) = plt.subplots(2,3, figsize=(24,16))

print("Diamanten 3. Quantil")

#Diagramme
plt.subplot(2,3,1)
sns.barplot(x = data_q3['cut'], y = data_q3['price'], order = ["Fair","Good","Very Good",
"Premium","Ideal"])
plt.xlabel("Schliff")
plt.ylabel("Preis")
plt.title('Barplot: Preis ~ Schliff')

plt.subplot(2,3,2)
sns.barplot(x = data_q3['color'], y = data_q3['price'], order = ["J","I","H","G","F",
"E","D"])
plt.xlabel("Farbe")
plt.ylabel("Preis")
plt.title('Barplot: Preis ~ Farbe')

plt.subplot(2,3,3)
sns.barplot(x = data_q3['clarity'], y = data_q3['price'], order = ["I1","SI2","SI1","VS
2","VS1","VVS2","VVS1","IF"])
plt.xlabel("Reinheit")
plt.ylabel("Preis")
plt.title('Barplot: Preis ~ Reinheit')

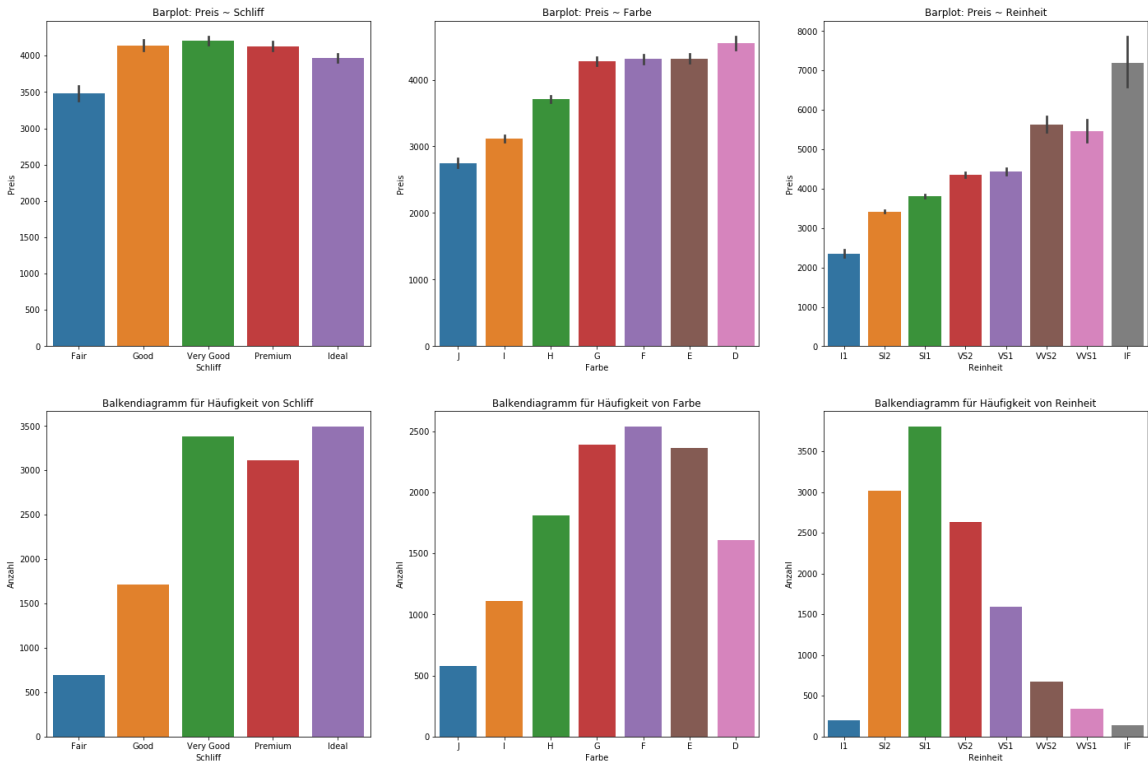
plt.subplot(2,3,4)
sns.countplot(x = data_q3['cut'], order = ["Fair","Good","Very Good","Premium","Ideal"
])
plt.xlabel("Schliff")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Balkendiagramm für Häufigkeit von Schliff')

plt.subplot(2,3,5)
sns.countplot(x = data_q3['color'], order = ["J","I","H","G","F","E","D"])
plt.xlabel("Farbe")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Balkendiagramm für Häufigkeit von Farbe')

plt.subplot(2,3,6)
sns.countplot(x = data_q3['clarity'], order = ["I1","SI2","SI1","VS2","VS1","VVS2","VVS
1","IF"])
plt.xlabel("Reinheit")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Balkendiagramm für Häufigkeit von Reinheit')

plt.show()
```

Diamanten 3. Quantil



In [9]:

```
fig, (ax1,ax2) = plt.subplots(2,3, figsize=(24,16))

print("Diamanten 4. Quantil")

#Diagramme
plt.subplot(2,3,1)
sns.barplot(x = data_q4['cut'], y = data_q4['price'], order = ["Fair","Good","Very Good",
"Premium","Ideal"])
plt.xlabel("Schliff")
plt.ylabel("Preis")
plt.title('Barplot: Preis ~ Schliff')

plt.subplot(2,3,2)
sns.barplot(x = data_q4['color'], y = data_q4['price'], order = ["J","I","H","G","F",
"E","D"])
plt.xlabel("Farbe")
plt.ylabel("Preis")
plt.title('Barplot: Preis ~ Farbe')

plt.subplot(2,3,3)
sns.barplot(x = data_q4['clarity'], y = data_q4['price'], order = ["I1","SI2","SI1","VS
2","VS1","VVS2","VVS1","IF"])
plt.xlabel("Reinheit")
plt.ylabel("Preis")
plt.title('Barplot: Preis ~ Reinheit')

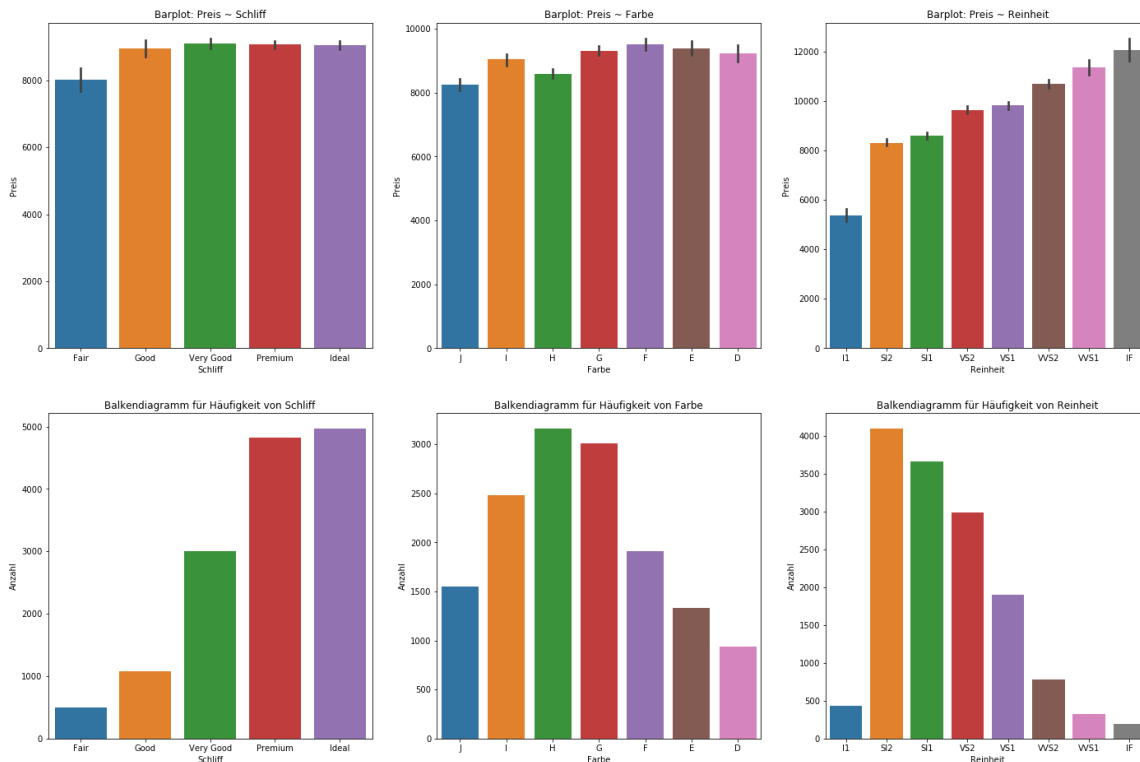
plt.subplot(2,3,4)
sns.countplot(x = data_q4['cut'], order = ["Fair","Good","Very Good","Premium","Ideal"
])
plt.xlabel("Schliff")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Balkendiagramm für Häufigkeit von Schliff')

plt.subplot(2,3,5)
sns.countplot(x = data_q4['color'], order = ["J","I","H","G","F","E","D"])
plt.xlabel("Farbe")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Balkendiagramm für Häufigkeit von Farbe')

plt.subplot(2,3,6)
sns.countplot(x = data_q4['clarity'], order = ["I1","SI2","SI1","VS2","VS1","VVS2","VVS
1","IF"])
plt.xlabel("Reinheit")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Balkendiagramm für Häufigkeit von Reinheit')

plt.show()
```

## Diamanten 4. Quantil



Zunächst ist auffällig, dass der Zusammenhang von Farbe, Reinheit und Schliff innerhalb der Quantile grundsätzlich wie erwartet ist (bis auf einige Ausnahmen, vermutlich durch Zufall oder Schwankungen entstehen). Das bedeutet, dass der Preis ähnlich schwerer Diamanten wie erwartet positiv durch höherwertige Qualitätsmerkmale beeinflusst wird.

Allerdings kann man auch erkennen, dass leichte Diamanten in den unteren Quantilen häufiger höherwertige Merkmale bei Schliff, Farbe und Reinheit aufweisen. Die höherwertigen Diamanten sind also überwiegend in den unteren Gewichtsklassen, wohingegen Diamanten mit schlechteren Qualitätsmerkmalen in den oberen Gewichtsklassen zu finden sind. Durch das Gewicht werden übrige Qualitätsunterschiede allerdings mehr als kompensiert, wodurch der Durchschnittspreis innerhalb der Merkmale dann verzerrt wird.

Deutlich wird die anhand des Beispiels Reinheit (siehe unten). Es gibt besonders viele Diamanten mit der Reinheit „Internally flawless“ (der hochwertigsten Stufe) in den unteren Gewichtsklassen. Der Durchschnittspreis ist aber aufgrund des Gewichtes bei schwereren Diamanten höher. Bei Diamanten der Reinheit SI2 („small inclusions“, weniger hochwertig) ist es genau anders herum. Es gibt vergleichsweise sehr viele Diamanten in den oberen Gewichtsklassen, die dementsprechend teurer sind. Dadurch werden die Durchschnittswerte stark verzerrt.

Zusammengefasst lässt sich feststellen, dass das Gewicht einen sehr starken Einfluss auf den Preis hat. Der unerwartete, negative Zusammenhang der Merkmale Farbe, Schliff und Reinheit ist auf die ungleiche Verteilung zurückzuführen. Diamanten mit höherwertigen Qualitätsmerkmalen sind überwiegend in niedrigen Gewichtsklassen zu finden, wohingegen die höheren Gewichtsklassen relativ viele ansonsten weniger hochwertige Diamanten fassen. Durch das Gewicht wird dieser Qualitätsunterschied jedoch mehr als ausgeglichen, wodurch bei Betrachtung aller Gewichtsklassen zusammen der Eindruck entsteht, dass höherwertige Qualitätsmerkmale zu niedrigeren Preisen führen.

In [10]:

```
fig, (ax1,ax2) = plt.subplots(2,2, figsize=(24,16))

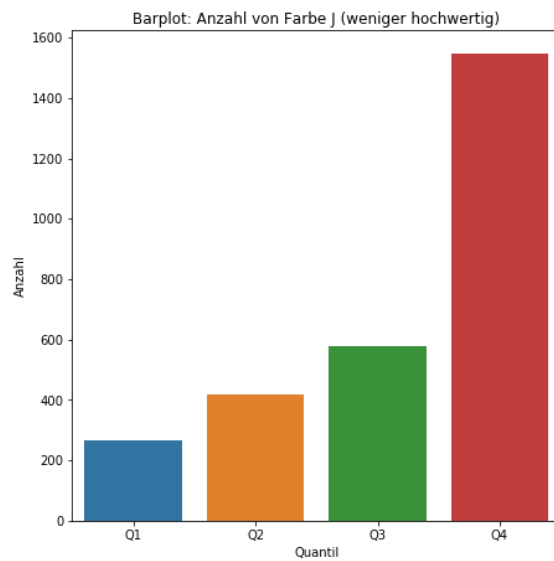
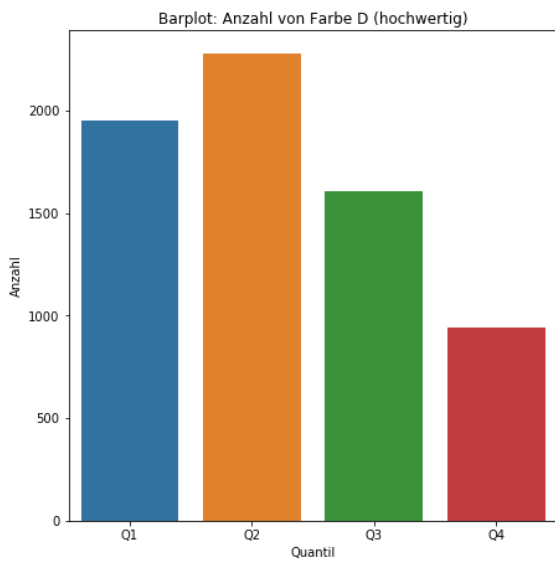
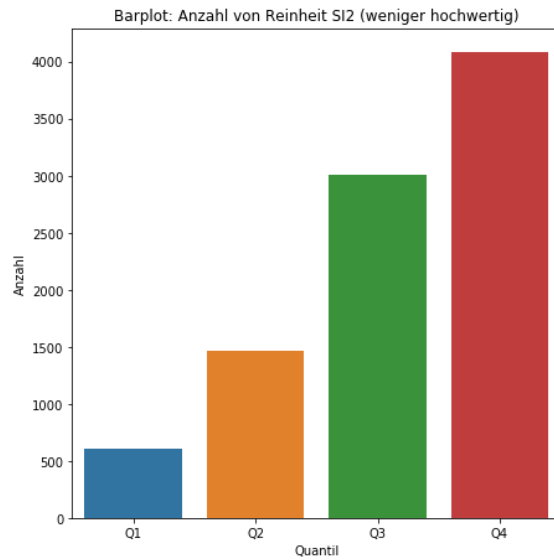
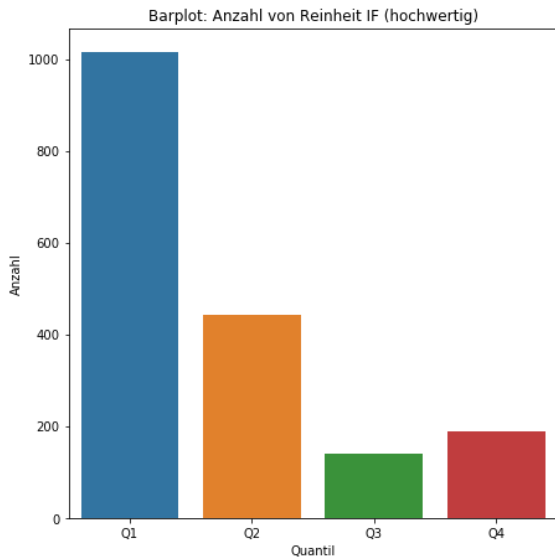
#Diagramme
plt.subplot(2,3,1)
sns.barplot(x = ["Q1",
                 "Q2",
                 "Q3",
                 "Q4"],
            y = [len(data_q1[data_q1['clarity'] == "IF"]),
                 len(data_q2[data_q2['clarity'] == "IF"]),
                 len(data_q3[data_q3['clarity'] == "IF"]),
                 len(data_q4[data_q4['clarity'] == "IF"])]))
plt.xlabel("Quantil")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Barplot: Anzahl von Reinheit IF (hochwertig)')

plt.subplot(2,3,2)
sns.barplot(x = ["Q1",
                 "Q2",
                 "Q3",
                 "Q4"],
            y = [len(data_q1[data_q1['clarity'] == "SI2"]),
                 len(data_q2[data_q2['clarity'] == "SI2"]),
                 len(data_q3[data_q3['clarity'] == "SI2"]),
                 len(data_q4[data_q4['clarity'] == "SI2"])]))
plt.xlabel("Quantil")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Barplot: Anzahl von Reinheit SI2 (weniger hochwertig)')

plt.subplot(2,3,4)
sns.barplot(x = ["Q1",
                 "Q2",
                 "Q3",
                 "Q4"],
            y = [len(data_q1[data_q1['color'] == "D"]),
                 len(data_q2[data_q2['color'] == "D"]),
                 len(data_q3[data_q3['color'] == "D"]),
                 len(data_q4[data_q4['color'] == "D"])]))
plt.xlabel("Quantil")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Barplot: Anzahl von Farbe D (hochwertig)')

plt.subplot(2,3,5)
sns.barplot(x = ["Q1",
                 "Q2",
                 "Q3",
                 "Q4"],
            y = [len(data_q1[data_q1['color'] == "J"]),
                 len(data_q2[data_q2['color'] == "J"]),
                 len(data_q3[data_q3['color'] == "J"]),
                 len(data_q4[data_q4['color'] == "J"])]))
plt.xlabel("Quantil")
plt.ylabel("Anzahl")
plt.title('Barplot: Anzahl von Farbe J (weniger hochwertig)')

plt.show()
```



## Korrelationsmatrix

Für die weitere Betrachtung müssen die ordinalen Daten der Merkmale Farbe, Schliff und Reinheit in numerische Werte umgewandelt werden. Dafür wird die qualitativ niedrigste Merkmalsausprägung mit dem Wert 1 gemappt und von dann aufsteigend jede weitere, höherwertige Ausprägung mit der nächsten ganzen Zahl gemappt. Dadurch soll die Reihenfolge beziehungsweise die Hierarchie in den Daten erhalten bleiben.

In [46]:

```
data['cut'] = data['cut'].apply(lambda x: 1 if x=='Fair'
                                else(2 if x=='Good'
                                else(3 if x=='Very Good'
                                else(4 if x=='Premium' else 5))))

data['color'] = data['color'].apply(lambda x: 1 if x=='J'
                                    else(2 if x=='I'
                                    else(3 if x=='H'
                                    else(4 if x=='G'
                                    else(5 if x=='F'
                                    else(6 if x=='E' else 7))))))

data['clarity'] = data['clarity'].apply(lambda x: 1 if x=='I1'
                                        else(2 if x=='SI2'
                                        else(3 if x=='SI1'
                                        else(4 if x=='VS2'
                                        else(5 if x=='VS1'
                                        else(6 if x=='VVS2'
                                        else 7 if x=='VVS1' else 8))))))

print(data.head(10))
```

	carat	cut	color	clarity	depth	table	price	x	y	z
0	0.23	5	6	2	61.5	55.0	326	3.95	3.98	2.43
1	0.21	4	6	3	59.8	61.0	326	3.89	3.84	2.31
2	0.23	2	6	5	56.9	65.0	327	4.05	4.07	2.31
3	0.29	4	2	4	62.4	58.0	334	4.20	4.23	2.63
4	0.31	2	1	2	63.3	58.0	335	4.34	4.35	2.75
5	0.24	3	1	6	62.8	57.0	336	3.94	3.96	2.48
6	0.24	3	2	7	62.3	57.0	336	3.95	3.98	2.47
7	0.26	3	3	3	61.9	55.0	337	4.07	4.11	2.53
8	0.22	1	6	4	65.1	61.0	337	3.87	3.78	2.49
9	0.23	3	3	5	59.4	61.0	338	4.00	4.05	2.39

Die Beziehungen der Daten untereinander werden mittels einer Korrelationsmatrix analysiert. Die Korrelationsmatrix wird vom DataFrame[\[21\]](#) berechnet und mittels Seaborn[\[22\]](#) dargestellt. Positive Korrelationen werden grün dargestellt, negative Korrelationen werden rot dargestellt.

In der Korrelationsmatrix lässt sich der leicht negative Zusammenhang der Merkmale Schliff, Farbe und Reinheit mit dem Preis erkennen. Dieser unerwartete Zusammenhang muss weiter analysiert werden.

Bei den Merkmalen Tisch und Tiefe lässt sich kein starker Zusammenhang mit anderen Merkmalen erkennen.

Zu erkennen ist allerdings auch, dass die Merkmale x (Länge), y (Breite) und z (Höhe) sehr stark miteinander positiv korrelieren. Aufgrund dieses sehr starken linearen Zusammenhangs werden die Merkmale in einem neuen Merkmal Volumen zusammengefasst, welches durch  $x \cdot y \cdot z$  berechnet wird. (Das Merkmal wird im weiteren Verlauf der Einfachheit halber als Volumen bezeichnet, entspricht aber natürlich nicht dem mathematisch korrekten Volumen)

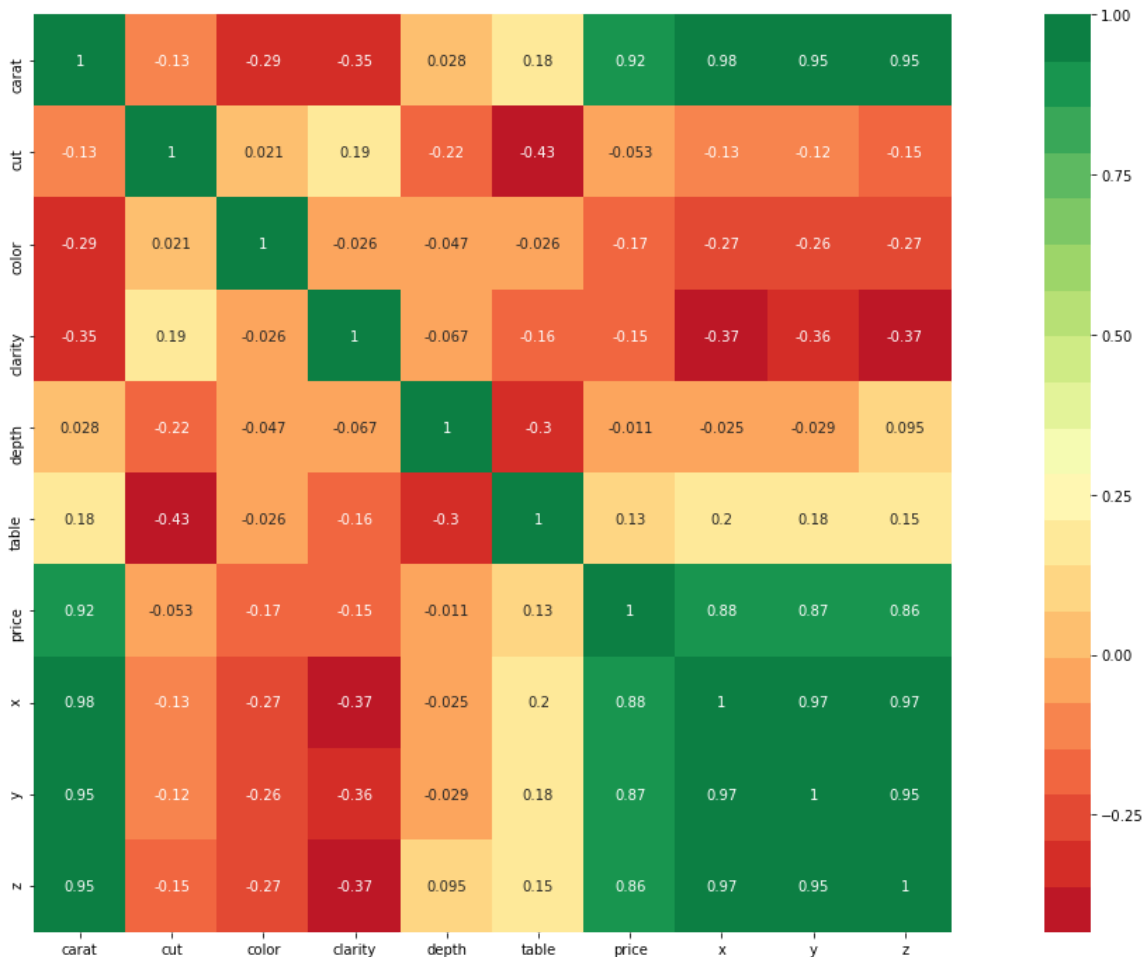
In [4]:

```
plt.figure(figsize = (24,12))

correlation = data.corr()
sns.heatmap(correlation, vmax=1, annot=True, square=True, cmap = sns.color_palette("RdYlGn", 20))
```

Out[4]:

&lt;matplotlib.axes.\_subplots.AxesSubplot at 0x24ae0cb3710&gt;



## Feature: volume

Das berechnete Volumen des Diamanten in Quadratmillimetern

Skala: mertisch/verhältnisskaliert

Beobachtung

- Rechtsschiefe Verteilung
- Positiver Zusammenhang zum Preis erkennbar

Fazit:

- Preis und Volumen korrelieren



In [16]:

```

data['volume'] = data['x']*data['y']*data['z']
data.drop(['x','y','z'], axis=1, inplace=True)
print(data.head(10))

fig, (ax1,ax2) = plt.subplots(2,2, figsize=(24,8))

#Distplot
plt.subplot(1,3,1)
sns.distplot(data['volume'], kde = False, bins = 25)
plt.xlabel('Volumen')
plt.ylabel('Häufigkeit')
plt.title('Verteilungsdiagramm: Volumen')

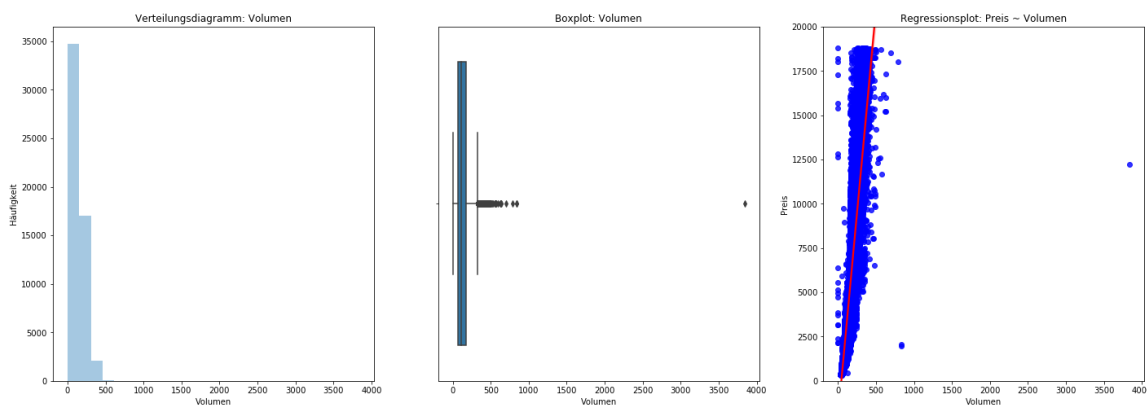
#Boxplot
plt.subplot(1,3,2)
sns.boxplot(data['volume'])
plt.xlabel('Volumen')
plt.title('Boxplot: Volumen')

#Regplot
plt.subplot(1,3,3)
sns.regplot(x = 'volume', y = 'price', data = data, scatter_kws = {'color': 'blue'}, li
ne_kws = {'color': 'red'})
plt.ylim(0,20000)
plt.xlabel('Volumen')
plt.ylabel('Preis')
plt.title('Regressionsplot: Preis ~ Volumen')

plt.show()

```

	carat	cut	color	clarity	depth	table	price	volume
0	0.23	Ideal	E	SI2	61.5	55.0	326	38.202030
1	0.21	Premium	E	SI1	59.8	61.0	326	34.505856
2	0.23	Good	E	VS1	56.9	65.0	327	38.076885
3	0.29	Premium	I	VS2	62.4	58.0	334	46.724580
4	0.31	Good	J	SI2	63.3	58.0	335	51.917250
5	0.24	Very Good	J	VVS2	62.8	57.0	336	38.693952
6	0.24	Very Good	I	VVS1	62.3	57.0	336	38.830870
7	0.26	Very Good	H	SI1	61.9	55.0	337	42.321081
8	0.22	Fair	E	VS2	65.1	61.0	337	36.425214
9	0.23	Very Good	H	VS1	59.4	61.0	338	38.718000



## Multivariate Analyse

Bei der multivariaten Analyse wird der Zusammenhang von mehreren Merkmalen in Bezug auf den Preis analysiert.

Die Analyse erfolgt mittels Pairplots[23], wobei immer zwei Merkmale in einem Diagramm dargestellt werden. Die Punkte werden je nach Preis dann unterschiedlich eingefärbt. Die Färbung erfolgt von rot (besonders günstig) nach grün (besonders teuer).

Zur Vereinfachung der Darstellung und Performanz werden die Preise auf ganze Tausender gerundet.

In [18]:

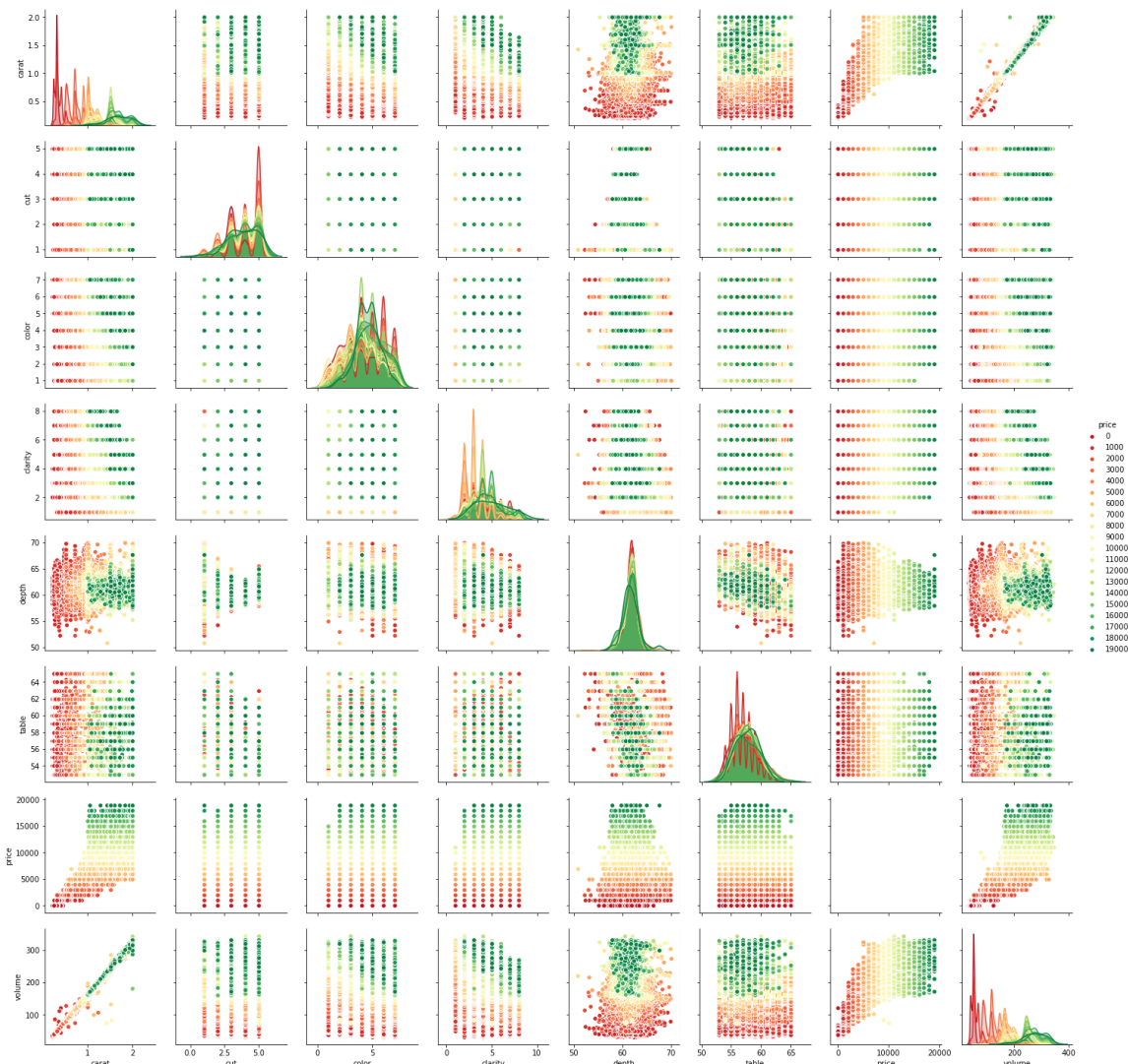
```
data_rounded = data.copy()

#Funktion zum Runden der Daten
def custom_round(x, base=1000):
    return int(base * round(float(x)/base))

#Daten auf 1.000er runden
data_rounded['price'] = data_rounded['price'].apply(lambda x: custom_round(x, base=1000))
```

In [13]:

```
sns.pairplot(data_rounded, hue = 'price', palette = sns.color_palette("RdYlGn", 20))
plt.show()
```

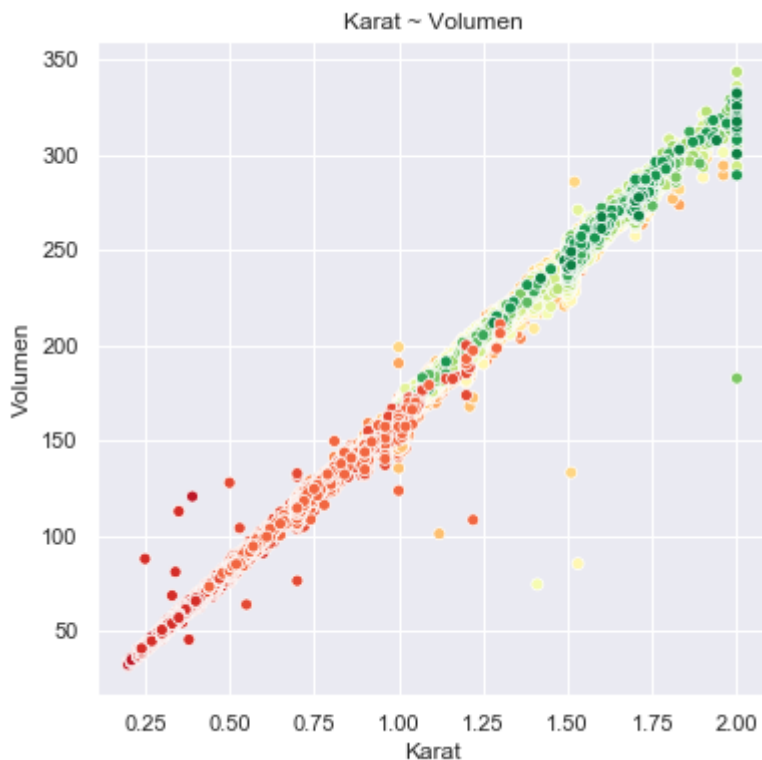


Marker für Präsentation (bitte ignorieren)

Zunächst ist ein sehr starker (fast perfekter) linearer Zusammenhang zwischen Karat und Volumen erkennbar. Die Visualisierung wurde mittels Scatterplot<sup>[24]</sup> vergrößert:

In [54]:

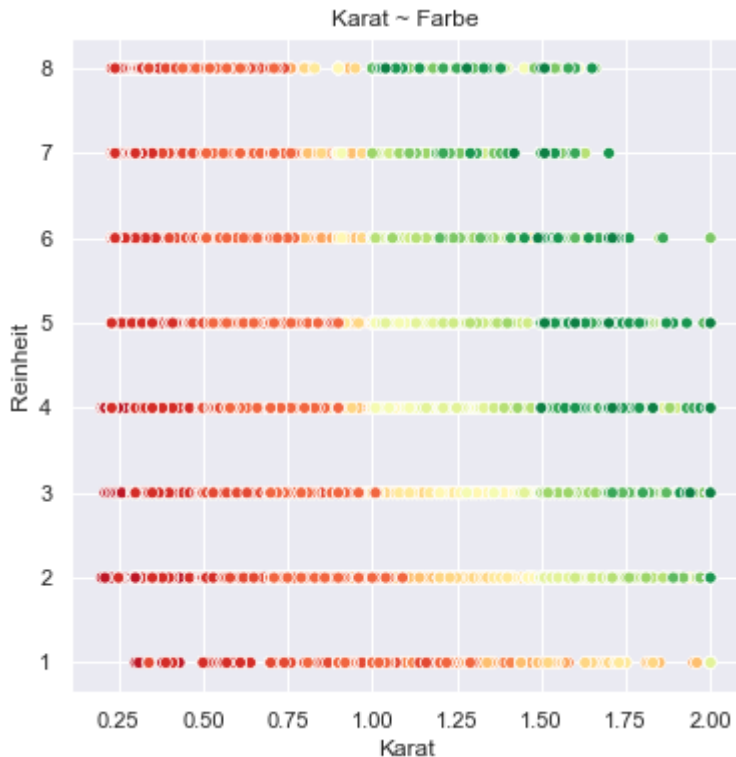
```
sns.scatterplot(data = data_rounded, x = 'carat', y = 'volume', hue = 'price', palette = sns.color_palette("RdYlGn", 20), legend = False)
plt.xlabel('Karat')
plt.ylabel('Volumen')
plt.title('Karat ~ Volumen')
plt.show()
```



Außerdem zeigt sich hier der oben genannte Zusammenhang: Betrachtet man Diamanten mit etwa einem Karat, fällt auf, dass die Diamanten mit einer hochwertigeren Farbe teurer sind als mit einer weniger hochwertigen Farbe. Allerdings zeigt sich auch, dass hochkarätige Diamanten (bspw. Mit Karat von 2) fast immer im grünen und damit teuren Bereich liegen.

In [55]:

```
sns.scatterplot(data = data_rounded, x = 'carat', y = 'clarity', hue = 'price', palette = sns.color_palette("RdYlGn", 20), legend = False)
plt.xlabel('Karat')
plt.ylabel('Reinheit')
plt.title('Karat ~ Farbe')
plt.show()
```



Allgemein sind verschiedene, teils lineare Zusammenhänge in den Daten erkennbar. Die Merkmale Tisch und Tiefe scheinen allerdings den Preis nur bedingt zu beeinflussen.

## Data Preparation

Bei den Merkmalen x, y und z müssen einige falsche Datensätze sowie die mit der IQR-Methode berechneten Ausreißer entfernt werden. Um nicht zu viele Datensätze zu entfernen, werden die Datensätze folgendermaßen bereinigt: Bei dem Merkmal Karat werden Ausreißer mit einem Wert von über 2,0 entfernt. Bei dem Merkmal Tiefe werden Ausreißer mit einem Wert von unter 50 und über 70 entfernt. Bei dem Merkmal Tisch werden Ausreißer mit einem Wert von unter 53 und über 65 entfernt. Die ordinalen Merkmale Farbe, Schliff und Reinheit werden wie bereits erklärt in numerische Werte umgewandelt. Die Merkmale x, y und z werden im neuen Merkmal Volumen zusammengefasst und entfernt. Zusätzlich werden die Merkmale mittels StandardScaler[25] standardisiert.

In [60]:

```
#Daten neu einlesen
data = pd.read_csv('diamonds.csv') #https://www.kaggle.com/shivam2503/diamonds
data = data.drop('Unnamed: 0', 1) #Zeilennummer in CSV-Datei, kann daher entfernt werden

print("Vor Datenvorbereitung:\n")
print(data.head(10))

#Falsche Daten und Ausreißer aus x, y und z entfernen
data = data[data['x'] > 1.965]
data = data[data['x'] < 9.285]
data = data[data['y'] > 2.01]
data = data[data['y'] < 9.27]
data = data[data['z'] > 1.215]
data = data[data['z'] < 5.735]

#Ausreißer aus Karat entfernen (größer als 2,0)
data = data[data['carat'] <= 2.0]

#Ausreißer aus Tiefe entfernen (größer als 70 und kleiner als 50)
data = data[data['depth'] <= 70]
data = data[data['depth'] >= 50]

#Ausreißer aus Tisch entfernen (größer als 65 und kleiner als 53)
data = data[data['table'] <= 65]
data = data[data['table'] >= 53]

#Volumen erzeugen und x, y und z entfernen
data['volume'] = data['x']*data['y']*data['z']
data.drop(['x','y','z'], axis=1, inplace=True)

#Ordinale Merkmale kodieren
data['cut'] = data['cut'].apply(lambda x: 1 if x=='Fair'
                               else(2 if x=='Good'
                                   else(3 if x=='Very Good'
                                       else(4 if x=='Premium' else 5))))

data['color'] = data['color'].apply(lambda x: 1 if x=='J'
                                    else(2 if x=='I'
                                        else(3 if x=='H'
                                            else(4 if x=='G'
                                                else(5 if x=='F'
                                                    else(6 if x=='E' else 7))))))

data['clarity'] = data['clarity'].apply(lambda x: 1 if x=='I1'
                                         else(2 if x=='SI2'
                                             else(3 if x=='SI1'
                                                  else(4 if x=='VS2'
                                                      else(5 if x=='VS1'
                                                          else(6 if x=='VVS2'
                                                              else 7 if x=='VVS1' else 8))))))

print("\nNach Bereinigung:\n")
print(data.head(10))

#Merkmale und Zielvariable trennen
y = data['price']
X = data.drop(['price'], axis = 1)
```

```
#Standardisierung
scaler = StandardScaler()
X = scaler.fit_transform(X)

print("\nNach Skalierung:\n")
print(X[:10])
```

Vor Datenvorbereitung:

	carat	cut	color	clarity	depth	table	price	x	y	z
0	0.23	Ideal	E	SI2	61.5	55.0	326	3.95	3.98	2.43
1	0.21	Premium	E	SI1	59.8	61.0	326	3.89	3.84	2.31
2	0.23	Good	E	VS1	56.9	65.0	327	4.05	4.07	2.31
3	0.29	Premium	I	VS2	62.4	58.0	334	4.20	4.23	2.63
4	0.31	Good	J	SI2	63.3	58.0	335	4.34	4.35	2.75
5	0.24	Very Good	J	VVS2	62.8	57.0	336	3.94	3.96	2.48
6	0.24	Very Good	I	VVS1	62.3	57.0	336	3.95	3.98	2.47
7	0.26	Very Good	H	SI1	61.9	55.0	337	4.07	4.11	2.53
8	0.22	Fair	E	VS2	65.1	61.0	337	3.87	3.78	2.49
9	0.23	Very Good	H	VS1	59.4	61.0	338	4.00	4.05	2.39

Nach Bereinigung:

	carat	cut	color	clarity	depth	table	price	volume
0	0.23	5	6	2	61.5	55.0	326	38.202030
1	0.21	4	6	3	59.8	61.0	326	34.505856
2	0.23	2	6	5	56.9	65.0	327	38.076885
3	0.29	4	2	4	62.4	58.0	334	46.724580
4	0.31	2	1	2	63.3	58.0	335	51.917250
5	0.24	3	1	6	62.8	57.0	336	38.693952
6	0.24	3	2	7	62.3	57.0	336	38.830870
7	0.26	3	3	3	61.9	55.0	337	42.321081
8	0.22	1	6	4	65.1	61.0	337	36.425214
9	0.23	3	3	5	59.4	61.0	338	38.718000

Nach Skalierung:

```
[[-1.29 0.976 0.913 -1.28 -0.182 -1.12 -1.29]
 [-1.34 0.0691 0.913 -0.672 -1.41 1.68 -1.35]
 [-1.29 -1.74 0.913 0.545 -3.51 3.55 -1.29]
 [-1.14 0.0691 -1.47 -0.0637 0.469 0.279 -1.16]
 [-1.09 -1.74 -2.06 -1.28 1.12 0.279 -1.08]
 [-1.26 -0.837 -2.06 1.15 0.759 -0.188 -1.28]
 [-1.26 -0.837 -1.47 1.76 0.397 -0.188 -1.28]
 [-1.21 -0.837 -0.874 -0.672 0.107 -1.12 -1.22]
 [-1.31 -2.65 0.913 -0.0637 2.42 1.68 -1.32]
 [-1.29 -0.837 -0.874 0.545 -1.7 1.68 -1.28]]
```

# Modeling und Evaluation

Die Erstellung des Modells erfolgt in drei Schritten. Zunächst wird ein möglichst gut geeignetes Modell für den Anwendungsfall ausgewählt. Dieses Modell wird dann mittels Hyperparameter optimiert. Anschließend wird das fertige Modell (sofern möglich) visualisiert.

## Auswahl eines geeigneten Algorithmus

Die Auswahl eines möglichst geeigneten Modells erfolgt durch Ausprobieren verschiedener Algorithmen. Die Güte der Modelle wird anhand folgender Metriken bewertet:

- Bestimmtheitsmaß  $r^2$  [26]
- Durchschnittlicher Absoluter Fehler [27]
- Durchschnittlicher Quadrierter Fehler [28]
- Durchschnittliche Abweichung

Die durchschnittliche Abweichung berechnet sich, in dem die prozentuale Abweichung vom echten zum vorhergesagten Wert für jede Vorhersage berechnet wird. Damit sich negative und positive Werte nicht gegenseitig ausgleichen, werden negative Werte in positive Werte umgewandelt. Aus diesen Werten wird dann der Durchschnitt gebildet. Dieses Qualitätsmaß soll bei der Beurteilung des Modells mit Blick auf die Zielsetzung unterstützen. Die Berechnung wurde selbst implementiert und wird mittels `make_scorer` [29] von scikit-learn eingebunden.

Dem Algorithmus werden bei der Erstellung des Modells nicht alle Daten zur Verfügung gestellt. Die Daten, mit denen das Modell erstellt wird, werden Trainingsdaten genannt. Ein Teil der Daten wird dem Modell allerdings vorenthalten. Diese Daten werden dann verwendet, um das Modell (mit dem Modell unbekannten Daten) zu testen und zu bewerten. Das Vorenthalten von Daten mindert jedoch die Qualität des Modells. Um diesen Zustand zu kompensieren, wird die sogenannte Kreuzvalidierung angewandt. Dabei werden die Daten in verschiedene Teildatenmengen aufgeteilt, im konkreten Fall werden fünf Teilmengen erstellt (fünffache Kreuzvalidierung). Das Modell wird dann fünf Mal erstellt, wobei immer vier Teildatenmengen als Trainingsdaten und eine Teildatenmenge als Testdaten verwendet wird. Die einzelnen Qualitätsmaße werden jedes Mal berechnet. Am Ende werden dann die Durchschnittswerte der berechneten Qualitätsmaße als Endergebnis zurückgegeben[30].

Dafür wird die von scikit-learn bereitgestellte Implementierung `cross_validate` [31] genutzt. Außerdem wird hier die scikit-learn-eigene Implementierung `RepeatedKfold`[32] benutzt. Dabei wird die Kreuzvalidierung für jedes Modell drei mal wiederholt. Insgesamt wird jedes Modell also fünfzehn Mal erstellt und bewertet, um zufällige günstige oder ungünstige Verteilungen auszuschließen und die Qualitätsmaße möglichst realitätsnah zu berechnen.

In [3]:

```
def mean_absolute_deviation(y_true_list, y_pred_list):  
    sum_deviation = 0  
    for y_true, y_pred in zip(y_true_list, y_pred_list):  
        deviation = ((y_pred / y_true) - 1) * 100  
        if deviation >= 0:  
            sum_deviation += deviation  
        if deviation < 0:  
            sum_deviation += (deviation * -1)  
    return (sum_deviation / len(y_true_list))  
  
kfold = RepeatedKfold(n_splits = 5, n_repeats = 3)  
  
scorer = { 'r2' : 'r2',  
           'neg_mean_absolute_error' : 'neg_mean_absolute_error',  
           'neg_mean_squared_error' : 'neg_mean_squared_error',  
           'mean_absolute_deviation' : make_scorer(mean_absolute_deviation, greater_is_  
better = False)}
```

Es werden folgende Algorithmen getestet[33]:

- Lineare Regression
- Ridge-Regression
- Lasso-Regression
- ElasticNet-Regression
- RandomForestRegressor
- AdaBoostRegressor
- SGDRegressor
- KNeighborsRegressor
- MLPRegressor
- Quadratische Regression



In [6]:

```

results = pd.DataFrame(columns=("Algorithmus", "Bestimmtheitsmaß (R²)", "Durchschn. Abs. Fehler", "Durchschn. Quad. Fehler"))

models = {LinearRegression(), Ridge(), Lasso(), ElasticNet(), RandomForestRegressor(),
AdaBoostRegressor(), SGDRegressor(), KNeighborsRegressor(), MLPRegressor()}

for model in models:

    cv_results = cross_validate(model, X, y, cv = kfold, scoring = scorer, return_train_score = True, n_jobs = -1)

    results = results.append({"Algorithmus" : model.__class__.__name__,
                             "Bestimmtheitsmaß (R²)" : np.mean(cv_results["test_r2"]),
                             "Durchschn. Abs. Fehler" : np.mean(cv_results["test_neg_mean_absolute_error"]*-1),
                             "Durchschn. Quad. Fehler" : np.mean(cv_results["test_neg_mean_squared_error"]*-1),
                             "Durchschn. Abweichung" : np.mean(cv_results['test_mean_absolute_deviation']*-1)},
                             ignore_index = True)

del models

#Polynomische Regression (Quadratisch)
polynomial_features = PolynomialFeatures(degree=2)
X_poly = polynomial_features.fit_transform(X)

cv_results = cross_validate(LinearRegression(), X_poly, y, cv = kfold, scoring = scorer, return_train_score = True, n_jobs = -1)

results = results.append({"Algorithmus" : "Quadratische Regression",
                             "Bestimmtheitsmaß (R²)" : np.mean(cv_results["test_r2"]),
                             "Durchschn. Abs. Fehler" : np.mean(cv_results["test_neg_mean_absolute_error"]*-1),
                             "Durchschn. Quad. Fehler" : np.mean(cv_results["test_neg_mean_squared_error"]*-1),
                             "Durchschn. Abweichung" : np.mean(cv_results['test_mean_absolute_deviation']*-1)},
                             ignore_index = True)

print(results)

```

	Algorithmus	Bestimmtheitsmaß ( $R^2$ )	Durchschn. Abs. Fehler
Durchschn. Quad. Fehler	Durchschn. Abweichung		
0	SGDRegressor	-5.431578e+18	6.336526e+12
6.273127e+25	3.432677e+11		
1	AdaBoostRegressor	9.004647e-01	8.599110e+02
1.160840e+06	4.676213e+01		
2	ElasticNet	8.909325e-01	7.770958e+02
1.272508e+06	4.323808e+01		
3	RandomForestRegressor	9.813584e-01	2.505905e+02
2.174321e+05	8.451065e+00		
4	LinearRegression	8.935264e-01	7.942470e+02
1.242139e+06	4.890222e+01		
5	Ridge	8.935372e-01	7.942022e+02
1.242210e+06	4.888872e+01		
6	Lasso	8.934418e-01	7.940681e+02
1.243018e+06	4.876612e+01		
7	KNeighborsRegressor	9.622249e-01	3.451436e+02
4.406971e+05	1.023038e+01		
8	MLPRegressor	9.529746e-01	4.358981e+02
5.486650e+05	1.591190e+01		
9	Quadratische Regression	9.642499e-01	4.309644e+02
4.170493e+05	2.139329e+01		

Algorithmus Bestimmtheitsmaß ( $R^2$ ) Durchschn. Abs. Fehler Durchschn. Quad. Fehler Durchschn. Abweichung

0 SGDRegressor -5.431578e+18 6.336526e+12 6.273127e+25 3.432677e+11

1 AdaBoostRegressor 0.9004647 859.9110 1160840 46.76213

2 ElasticNet 0.8909325 777.0958 1272508 43.23808

3 RandomForestRegressor 0.9813584 250.5905 217432 8.451065

4 LinearRegression 0.8935264 794.2470 1242139 48.90222

5 Ridge 0.8935372 794.2022 1242210 48.88872

6 Lasso 0.8934418 794.0681 1243018 48.76612

7 KNeighborsRegressor 0.9622249 345.1436 440697 10.23038

8 MLPRegressor 0.9529746 435.8981 548665 15.91190

9 Quadratische Regression 0.9642499 430.9644 417049 21.39329

Der RandomForestRegressor schneidet bei allen Qualitätsmaßen bei weitem am besten ab. Ausnahme ist hier nur das Bestimmtheitsmaß, was allerdings nur leicht unter den Ergebnissen einiger anderer Algorithmen liegt. Vor allem der niedrige durchschnittliche quadrierte Fehler und die niedrige durchschnittliche Abweichung sprechen für den RandomForestRegressor. Daher wird dieser Algorithmus für die weitere Bearbeitung verwendet.

Normalerweise spielt eine Standardisierung für den RandomForestRegressor[34] keine Rolle. Von daher wird geprüft, ob die Standardisierung die Ergebnisse beeinflusst. Dafür wird je ein Modell mit standardisierten und nicht-standardisierten Daten erstellt und verglichen:

In [61]:

```
#Merkmale und Zielvariable trennen (ohne Skalierung)
y = data['price']
X = data.drop(['price'], axis = 1)
```

In [8]:

```

results = pd.DataFrame(columns=("Algorithmus", "Bestimmtheitsmaß (R²)", "Durchschn. Abs. Fehler", "Durchschn. Quad. Fehler"))

model = RandomForestRegressor()

cv_results = cross_validate(model, X, y, cv = kfold, scoring = scorer, return_train_score = True, n_jobs = -1)

results = results.append({"Algorithmus" : model.__class__.__name__,
                          "Bestimmtheitsmaß (R²)" : np.mean(cv_results["test_r2"]),
                          "Durchschn. Abs. Fehler" : np.mean(cv_results["test_neg_mean_absolute_error"]*-1),
                          "Durchschn. Quad. Fehler" : np.mean(cv_results["test_neg_mean_squared_error"]*-1),
                          "Durchschn. Abweichung" : np.mean(cv_results['test_mean_absolute_deviation']*-1)},
                          ignore_index = True)

print(results)

```

	Algorithmus	Bestimmtheitsmaß (R²)	Durchschn. Abs. Fehler	Durchschn. Quad. Fehler	Durchschn. Abweichung
0	RandomForestRegressor	0.981445	250.649046	216444.715789	8.466576

Algorithmus Bestimmtheitsmaß (R²) Durchschn. Abs. Fehler Durchschn. Quad. Fehler Durchschn. Abweichung  
 Ohne Standardisierung 0.981445 250.649046 216444.715789 8.466576 Mit Standardisierung 0.9813584 250.5905 217432.1 8.451065

Es zeigt sich, dass eine Standardisierung keine Vorteile bringt. Zur besseren Interpretierbarkeit des Modells wird daher mit den nicht-standardisierten Daten fortgefahren.

## Hyperparameter-Optimierung

Beim RandomForestRegressor werden mehrere Entscheidungsbäume in einem Modell vereint. Bei einem Entscheidungsbaum versucht das Modell, die Daten an jedem Knoten anhand eines Merkmals in möglichst ähnliche in Teilmengen aufzuteilen. Diese Teilmengen werden dann am nächsten Knoten erneut aufgeteilt und so weiter. Wenn die Daten innerhalb eines Knotens sehr ähnlich sind und eine weitere Teilung keinen zusätzlichen Mehrwert bringt, wird aus dem Knoten ein Blatt. Das Blatt bekommt dann einen bestimmten Wert zugewiesen.

Wenn der Entscheidungsbaum dann eine Instanz übergeben bekommt, durchläuft die Instanz den Entscheidungsbaum und endet an einem Blatt. Der dem Blatt zugewiesene Wert wird dann als Ergebnis zurückgegeben.

Bei einem RandomForest werden mehrere Entscheidungsbäume erstellt, wobei jede Instanz von jedem Baum bewertet wird. Die Werte werden dann zu einem Ergebnis kombiniert, das das Modell zurückgibt[35].

Der RandomForest bietet verschiedene Einstellungsmöglichkeiten, mit der man das Modell verändern und optimieren kann. Die beiden wichtigsten sind:

- criterion: Das Entscheidungskriterium, mit dem die Daten an Knoten geteilt werden
- n\_estimators: Die Anzahl an Entscheidungsbäumen

Diese beiden Parameter werden durch die sogenannte GridSearch[36] optimiert. Dabei werden nacheinander verschiedene Parameter ausprobiert. Der Parameter, bei dem das Modell die besten Ergebnisse liefert, wird dann beibehalten.

In [9]:

```
params = {'criterion': ['mse', 'mae']}

model = RandomForestRegressor(random_state = 0)

grid_search = GridSearchCV(model, params, cv = kfold, scoring = "r2", n_jobs = -1, verbose = 3)

grid_search.fit(X, y)

print(grid_search.best_params_)
print(grid_search.best_score_)
print("\n")
```

Fitting 15 folds for each of 2 candidates, totalling 30 fits

```
[Parallel(n_jobs=-1)]: Using backend LokyBackend with 12 concurrent worker
s.
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 18 out of 30 | elapsed: 7.8min remaining:
5.2min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 30 out of 30 | elapsed: 10.1min finished

{'criterion': 'mse'}
0.9815350596311757
```

Bei der Bestimmung der Anzahl der Entscheidungsbäume im Random Forest handelt es sich um einen Trade-Off. Generell gilt, dass jeder zusätzliche Baum die Güte (mit abnehmenden Grenznutzen) verbessert. Theoretisch kann der Random Forest aus endlos vielen Bäumen bestehen. Dies ist allerdings aufgrund der verfügbaren Hardware-Ressourcen nicht möglich. Es muss also ein Punkt gefunden werden, an dem weitere Bäume das Modell nicht mehr signifikant verbessern, um so einen optimalen Mittelweg zwischen der Güte des Modells und den verfügbaren Ressourcen zu gehen.

In [10]:

```
params = {'n_estimators': [50,100,150,200,250,300,350,400,450,500,550,600]}

model = RandomForestRegressor(criterion = 'mse', random_state = 0)

grid_search = GridSearchCV(model, params, cv = kfold, scoring = "r2", n_jobs = -1, verbose = 3)

grid_search.fit(X, y)

print(grid_search.best_params_)
print(grid_search.best_score_)
print("\n")

plt.figure(figsize = (24,12))
plt.plot(params['n_estimators'], grid_search.cv_results_['mean_test_score'])
plt.xlabel("Anzahl Entscheidungsbäume")
plt.ylabel("Ergebnis: Bestimmtheitsmaß R2")
plt.title("Validierungskurve für n_estimators")
plt.show()
```

Fitting 15 folds for each of 12 candidates, totalling 180 fits

[Parallel(n\_jobs=-1)]: Using backend LokyBackend with 12 concurrent worker  
S.

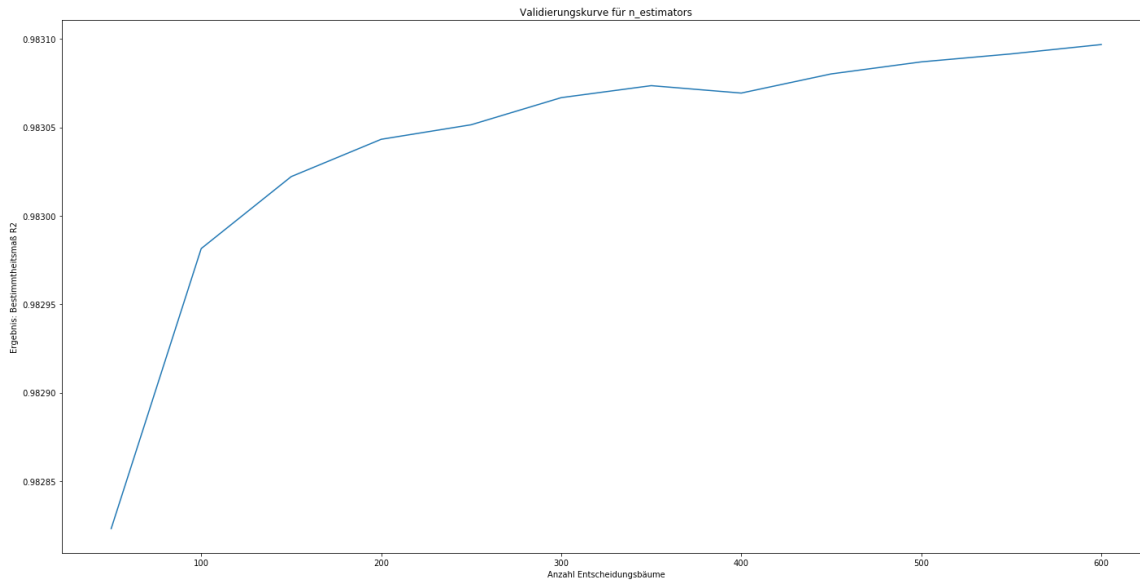
[Parallel(n\_jobs=-1)]: Done 8 tasks | elapsed: 7.4s

[Parallel(n\_jobs=-1)]: Done 104 tasks | elapsed: 6.4min

[Parallel(n\_jobs=-1)]: Done 180 out of 180 | elapsed: 22.8min finished

{'n\_estimators': 600}

0.9830969295954861



In [29]:

```
print("n_estimators\t r2\t\t\t Durch. Abs. Fehler \t Duch. Quad. Fehler \t Durch. Abs.
Abweichung")

for i in range(0,len(params['n_estimators'])):

    print(params['n_estimators'][i], "\t\t", cv_results['test_r2'][i], "\t", (cv_results['test_neg_mean_absolute_error'][i])*-1, "\t", (cv_results['test_neg_mean_squared_error'][i])*-1, "\t", (cv_results['test_mean_absolute_deviation'][i])*-1)
```

n_estimators	r2	Durch. Abs. Fehler	Duch. Qua
d. Fehler	Durch. Abs. Abweichung		
50	0.9805872549672703	253.69047065413926	227180.19
319731378	8.458809854662663		
100	0.9803613601754738	252.4811687799516	228077.62
70400752	8.480474227968084		
150	0.982396419748296	253.4253730442341	214724.14
516576086	8.515823041591533		
200	0.9826096339916432	242.75914665676328	194292.86
208504823	8.46422258447171		
250	0.9819453346623852	249.52579749103944	210121.13
164555817	8.52440409513244		
300	0.9804803286755083	250.74890426520233	223463.85
08146406	8.533188144473728		
350	0.9811873240626459	252.27345239245014	221056.81
9817027	8.481922966671425		
400	0.9808553154272515	255.69018863195268	228350.39
517194364	8.430655344999824		
450	0.9827115155766065	244.3994673326159	200029.54
80508532	8.4912817247506		
500	0.981682263172746	249.9263173269436	213122.66
233460148	8.315348709103464		
550	0.9806177314879313	246.89221795656	223014.42
58530275	8.426915992390562		
600	0.9809339864421373	257.9468964222093	224358.17
863134484	8.506583949399465		

Wie in der Validierungskurve und der Auflistung erkennbar, sind 200 Entscheidungsbäume ein guter Mittelweg zwischen Güte und Leistungsintensivität des Modells. Der Parameter `n_estimators` wird also auf 200 gesetzt.

Außerdem soll das Modell auf mögliche Über- oder Unteranpassungen untersucht werden. Dafür wird das Modell mit Trainingsdaten erstellt. Danach wird das Modell sowohl mit unbekannten Daten (Testdaten) als auch mit den bekannten Trainingsdaten getestet. Die Testergebnisse werden dann verglichen.

Bei einer Überanpassung generalisiert das Modell die Daten nicht ausreichend, stattdessen werden die Daten einfach „auswendig gelernt“. Dies führt zu einer sehr guten Performanz bei den Trainingsdaten, allerdings ist die Performanz dann bei den unbekannten Testdaten signifikant schlechter. Dies kann häufig gut durch die Hyperparameter kompensiert werden.

Bei einer Unteranpassung generalisiert das Modell die Daten zu stark, weshalb die Performanz allgemein (bei Test- und Trainingsdaten) abnimmt. Dies kann oft nur durch zusätzliche Daten behoben werden[37].



In [32]:

```
results = pd.DataFrame(columns=("Algorithmus", "Bestimmtheitsmaß (R²)", "Durchschn. Abs. Fehler", "Durchschn. Quad. Fehler"))

model = RandomForestRegressor(n_estimators = 200, criterion = 'mse', random_state = 0)

cv_results = cross_validate(model, X, y, cv = kfold, scoring = scorer, return_train_score = True, n_jobs = -1)

print("Qualitätsmaß\t\t", "Trainingsdaten\t\t", "Testdaten\t")
print("Bestimmtheitsmaß (R²)\t", np.mean(cv_results["train_r2"]), "\t", np.mean(cv_results["test_r2"]))
print("Durchschn. Abs. Fehler\t", np.mean(cv_results["train_neg_mean_absolute_error"]*-1), "\t", np.mean(cv_results["test_neg_mean_absolute_error"]*-1))
print("Durchschn. Quad. Fehler\t", np.mean(cv_results["train_neg_mean_squared_error"]*-1), "\t", np.mean(cv_results["test_neg_mean_squared_error"]*-1))
print("Durchschn. Abs. Abw.\t", np.mean(cv_results["train_mean_absolute_deviation"]*-1), "\t", np.mean(cv_results["test_mean_absolute_deviation"]*-1))
```

Qualitätsmaß	Trainingsdaten	Testdaten
Bestimmtheitsmaß (R²)	0.9975916899719522	0.9830650075886597
Durchschn. Abs. Fehler	93.20384154199913	238.61187582563505
Durchschn. Quad. Fehler	28097.552817198262	197607.34410150346
Durchschn. Abs. Abw.	3.545298014347235	8.167285654853398

Sowohl der durchschnittliche absolut Fehler als auch der durchschnittliche quadrierte Fehler liegen bei den Trainingsdaten deutlich unter den Ergebnissen bei den Testdaten. Es zeigt sich eine leichte Überanpassung, d.h., das Modell passt sich leicht an die Trainingsdaten an. Die soll mittels der drei folgenden Hyperparameter kompensiert werden:

- `max_depth` (Anzahl der Ebenen im Entscheidungsbaum)
- `min_samples_split` (Mindestanzahl an Instanzen pro Teilung an Knoten)
- `min_samples_leaf` (Mindestanzahl an Instanzen pro Blatt)
- `min_impurity_decrease` (Gibt an, wie ähnlich sich die Daten für eine Teilung am Knoten sein müssen)

Da eine Optimierung dieser Parameter mittels GridSearch zu leistungsintensiv ist und die verfügbaren Ressourcen nicht ausreichend sind, wird die RandomizedSearch[38] verwendet. Dabei werden die bestmöglichen Parameter näherungsweise durch zufälliges Ausprobieren bestimmt.

In [1]:

```
params = {'max_depth': [10,20,30,40,50,60,70,80,90,100],
          'min_samples_split' : [2,4,6,8,10,12,14,16,18,20,40],
          'min_samples_leaf' : [2,4,6,8,10,12,14,16,18,20,40],
          'min_impurity_decrease' : [0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9]}

model = RandomForestRegressor(n_estimators = 200, criterion = 'mse', random_state = 0)

random_search = RandomizedSearchCV(model, params, cv = kfold, scoring = "r2", n_iter =
500, n_jobs = -1, verbose = 3)

random_search.fit(X, y)

print(random_search.best_params_)
print(random_search.best_score_)
print("\n")
```

[Parallel(n\_jobs=-1)]: Using backend LokyBackend with 12 concurrent worker  
s.

[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 8 tasks	elapsed: 23.3s
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 104 tasks	elapsed: 2.7min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 264 tasks	elapsed: 6.6min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 488 tasks	elapsed: 12.0min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 776 tasks	elapsed: 19.3min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 1544 tasks	elapsed: 37.5min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 2024 tasks	elapsed: 48.7min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 2568 tasks	elapsed: 62.0min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 3176 tasks	elapsed: 76.5min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 3848 tasks	elapsed: 92.7min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 4584 tasks	elapsed: 110.1min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 5384 tasks	elapsed: 130.0min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 7176 tasks	elapsed: 174.4min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 7500 out of 7500	elapsed: 182.4min finished

Im Folgenden wird das Modell eingestellt mit:

- n\_estimators = 200
- max\_depth = 90
- min\_samples\_split = 4
- min\_samples\_leaf = 2
- min\_impurity\_decrease = 0.7
- criterion = 'mse'

Es ist allerdings auch zu erwähnen, dass sich die Güte des Modells durch die Optimierung nur geringfügig verbessert hat:

In [6]:

```

model = RandomForestRegressor(n_estimators = 200, max_depth = 90, min_samples_split = 4
, min_samples_leaf = 2, min_impurity_decrease = 0.7, criterion = 'mse', random_state =
0)

cv_results = cross_validate(model, X, y, cv = kfold, scoring = scorer, return_train_score = True, n_jobs = -1)

print("Qualitätsmaß\t\t", "Trainingsdaten\t\t", "Testdaten\t")
print("Bestimmtheitsmaß (R²)\t", np.mean(cv_results["train_r2"]), "\t", np.mean(cv_results["test_r2"]))
print("Durchschn. Abs. Fehler\t", np.mean(cv_results["train_neg_mean_absolute_error"]*-1), "\t", np.mean(cv_results["test_neg_mean_absolute_error"]*-1))
print("Durchschn. Quad. Fehler\t", np.mean(cv_results["train_neg_mean_squared_error"]*-1), "\t", np.mean(cv_results["test_neg_mean_squared_error"]*-1))
print("Durchschn. Abs. Abw.\t", np.mean(cv_results["train_mean_absolute_deviation"]*-1), "\t", np.mean(cv_results["test_mean_absolute_deviation"]*-1))

```

Qualitätsmaß	Trainingsdaten	Testdaten
Bestimmtheitsmaß (R²)	0.9952990552642744	0.9829783543598964
Durchschn. Abs. Fehler	128.57517980919442	237.39332788262618
Durchschn. Quad. Fehler	54845.11041474597	198616.04563960637
Durchschn. Abs. Abw.	5.002653146512258	7.7944347623540695

Nun wird ein Modell mit allen verfügbaren Daten erstellt und anschließend mit allen Trainingsdaten getestet.

In [31]:

```

model = RandomForestRegressor(n_estimators = 200, max_depth = 90, min_samples_split = 4
, min_samples_leaf = 2, min_impurity_decrease = 0.7, criterion = 'mse', random_state =
0)

model.fit(X, y)
preds = model.predict(X)

```

Die Bedeutung der einzelnen Merkmale für das Modell kann aus dem Modell ausgelesen werden. Hierdurch wird aufgezeigt, welche Merkmale vom Modell für die Teilung der Datenmengen an Knoten verwendet werden. Es ist dabei zu erkennen, dass vor allem Karat und Volumen eine besondere Rolle spielen. Reinheit und Farbe sind nur bedingt wichtig. Schliff, Tiefe und Tisch werden kaum verwendet.

In [34]:

```
characteristics = X.columns
importances = list(model.feature_importances_)
characteristics_importances = [(characteristic, round(importance, 2)) for characteristic, importance in zip(characteristics, importances)]
characteristics_importances = sorted(characteristics_importances, key = lambda x: x[1], reverse = True)
[print('Variable: {:20} Importance: {}'.format(*pair)) for pair in characteristics_importances];
```

Variable: carat	Importance: 0.64
Variable: volume	Importance: 0.23
Variable: clarity	Importance: 0.08
Variable: color	Importance: 0.04
Variable: cut	Importance: 0.0
Variable: depth	Importance: 0.0
Variable: table	Importance: 0.0

Abschließend wird der Test mit den Trainingsdaten ausgewertet. Jedes Merkmal wird zusammen mit dem Preis in einem Scatterplot als blauer Punkt abgetragen. Die Vorhersage für den jeweiligen Diamanten wird dann in rot eingetragen. Die Vorhersagen des Modells werden also über die tatsächlichen Daten gelegt. Ziel ist es, bestimmte Bereiche zu erkennen, in denen die Vorhersagen des Modells besonders schlecht sind. Zu erkennen sind diese Bereiche, wenn viele blaue Punkte gesammelt in einem Bereich sind.

In [44]:

```
plt.scatter(X.carat, y, c = 'b', alpha = 0.5, marker = '.', label = 'Real')
plt.scatter(X.carat, preds, c = 'r', alpha = 0.5, marker = '.', label = 'Predicted')
plt.xlabel('Carat')
plt.ylabel('Price')
plt.grid(color = '#D3D3D3', linestyle = 'solid')
plt.legend(loc = 'lower right')
plt.show()

plt.scatter(X.volume, y, c = 'b', alpha = 0.5, marker = '.', label = 'Real')
plt.scatter(X.volume, preds, c = 'r', alpha = 0.5, marker = '.', label = 'Predicted')
plt.xlabel('Volume')
plt.ylabel('Price')
plt.grid(color = '#D3D3D3', linestyle = 'solid')
plt.legend(loc = 'lower right')
plt.show()

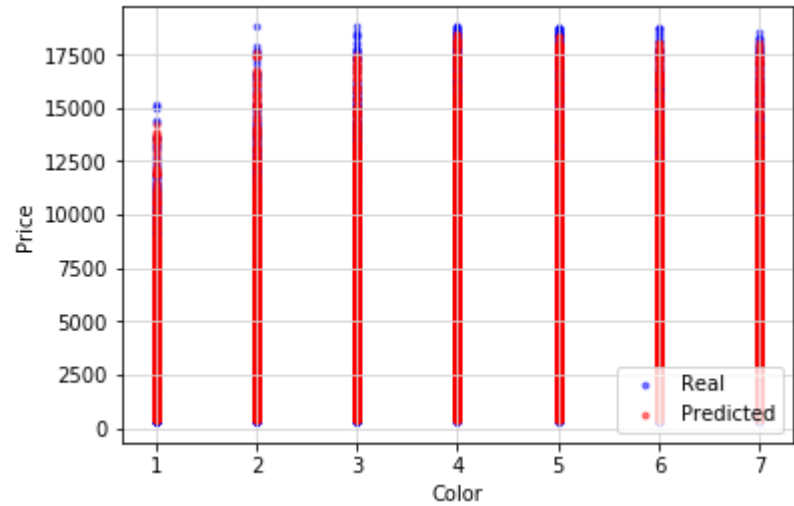
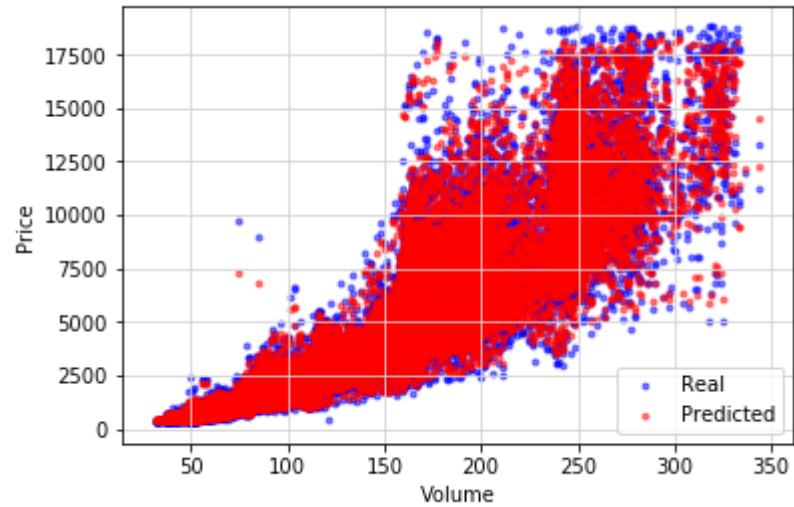
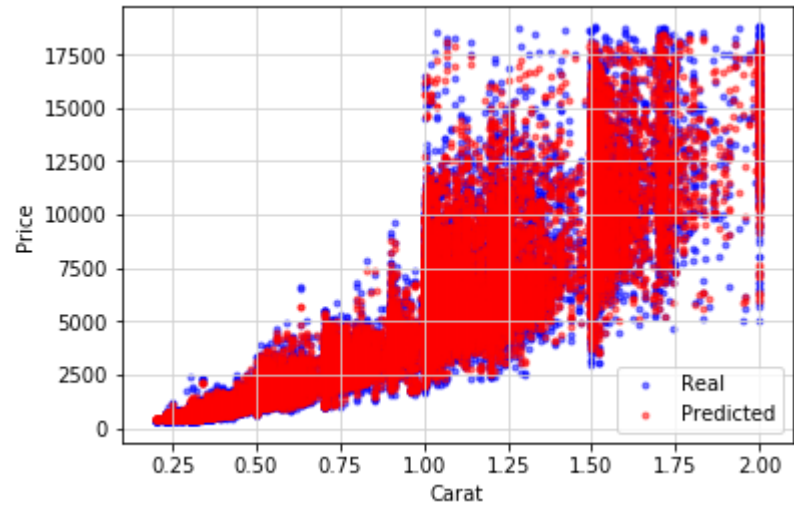
plt.scatter(X.color, y, c = 'b', alpha = 0.5, marker = '.', label = 'Real')
plt.scatter(X.color, preds, c = 'r', alpha = 0.5, marker = '.', label = 'Predicted')
plt.xlabel('Color')
plt.ylabel('Price')
plt.grid(color = '#D3D3D3', linestyle = 'solid')
plt.legend(loc = 'lower right')
plt.show()

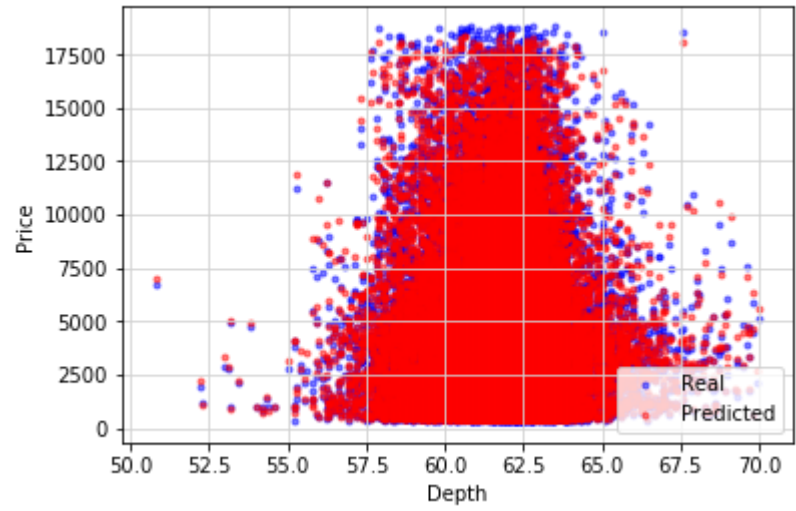
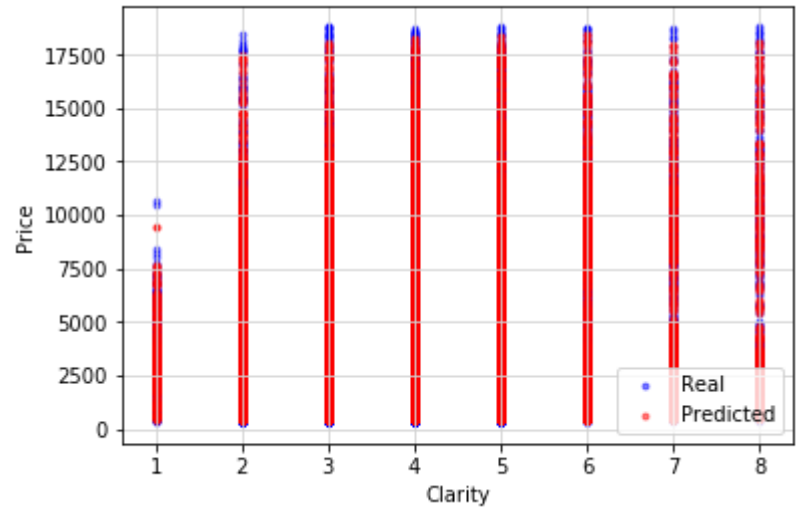
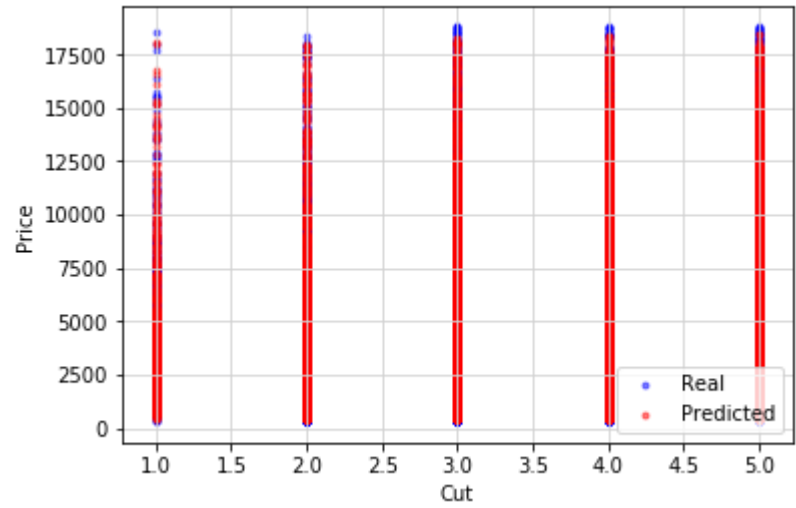
plt.scatter(X.cut, y, c = 'b', alpha = 0.5, marker = '.', label = 'Real')
plt.scatter(X.cut, preds, c = 'r', alpha = 0.5, marker = '.', label = 'Predicted')
plt.xlabel('Cut')
plt.ylabel('Price')
plt.grid(color = '#D3D3D3', linestyle = 'solid')
plt.legend(loc = 'lower right')
plt.show()

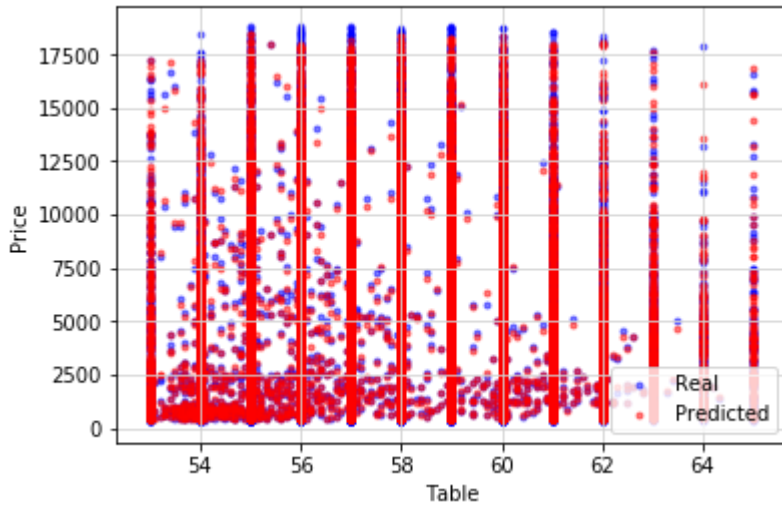
plt.scatter(X.clarity, y, c = 'b', alpha = 0.5, marker = '.', label = 'Real')
plt.scatter(X.clarity, preds, c = 'r', alpha = 0.5, marker = '.', label = 'Predicted')
plt.xlabel('Clarity')
plt.ylabel('Price')
plt.grid(color = '#D3D3D3', linestyle = 'solid')
plt.legend(loc = 'lower right')
plt.show()

plt.scatter(X.depth, y, c = 'b', alpha = 0.5, marker = '.', label = 'Real')
plt.scatter(X.depth, preds, c = 'r', alpha = 0.5, marker = '.', label = 'Predicted')
plt.xlabel('Depth')
plt.ylabel('Price')
plt.grid(color = '#D3D3D3', linestyle = 'solid')
plt.legend(loc = 'lower right')
plt.show()

plt.scatter(X.table, y, c = 'b', alpha = 0.5, marker = '.', label = 'Real')
plt.scatter(X.table, preds, c = 'r', alpha = 0.5, marker = '.', label = 'Predicted')
plt.xlabel('Table')
plt.ylabel('Price')
plt.grid(color = '#D3D3D3', linestyle = 'solid')
plt.legend(loc = 'lower right')
plt.show()
```







In fast allen Scatterplots lässt sich erkennen, dass die Performance im oberen Preissegment ab circa 17.000 Dollar abnimmt. Eine Idee zur Optimierung ist also, die besonders teuren Diamanten zu entfernen, da diese schlecht vorhergesagt werden und die Güte des Modells dadurch mindern.

## Rücksprung und weitere Iteration zur Optimierung

### Business und Data Understanding

Wie bereits in der ersten Analyse festgestellt, ist bei den Merkmalen Tisch und Tiefe kein direkter Zusammenhang zu Preis erkennbar. Da das Modell die Merkmale nicht verwendet, sollten sie für die weitere Bearbeitung entfernt werden.

### Data Preparation

Die Merkmale Tisch und Tiefe werden entfernt. Diamanten mit einem Preis ab 11.885 Dollar gelten nach IQR-Methode als Ausreißer und werden aus den Daten entfernt.



In [50]:

```

data_reduced = data.copy()

print(len(data_reduced))

data_reduced = data_reduced.drop(['depth', 'table'], axis = 1)

data_reduced = data_reduced[data_reduced['price'] <= 11885]

print(len(data_reduced))
print(data_reduced.head(10))

y_reduced = data_reduced['price']
X_reduced = data_reduced.drop('price', axis = 1)

```

51770

49917

	carat	cut	color	clarity	price	volume
0	0.23	5	6	2	326	38.202030
1	0.21	4	6	3	326	34.505856
2	0.23	2	6	5	327	38.076885
3	0.29	4	2	4	334	46.724580
4	0.31	2	1	2	335	51.917250
5	0.24	3	1	6	336	38.693952
6	0.24	3	2	7	336	38.830870
7	0.26	3	3	3	337	42.321081
8	0.22	1	6	4	337	36.425214
9	0.23	3	3	5	338	38.718000

## Modeling und Evaluation

Zunächst werden der Parameter `n_estimators` durch GridSearch optimiert:

In [52]:

```

params = {'n_estimators': [50,100,150,200,250,300,350,400,450,500,550,600]}

model = RandomForestRegressor(criterion = 'mse', random_state = 0)

grid_search = GridSearchCV(model, params, cv = kfold, scoring = "r2", n_jobs = -1, verbose = 3)

grid_search.fit(X_reduced, y_reduced)

print(grid_search.best_params_)
print(grid_search.best_score_)
print("\n")

plt.figure(figsize = (24,12))
plt.plot(params['n_estimators'], grid_search.cv_results_['mean_test_score'])
plt.xlabel("Anzahl Entscheidungsbäume")
plt.ylabel("Ergebnis: Bestimmtheitsmaß R2")
plt.title("Validierungskurve für n_estimators")
plt.show()

```

Fitting 15 folds for each of 12 candidates, totalling 180 fits

```

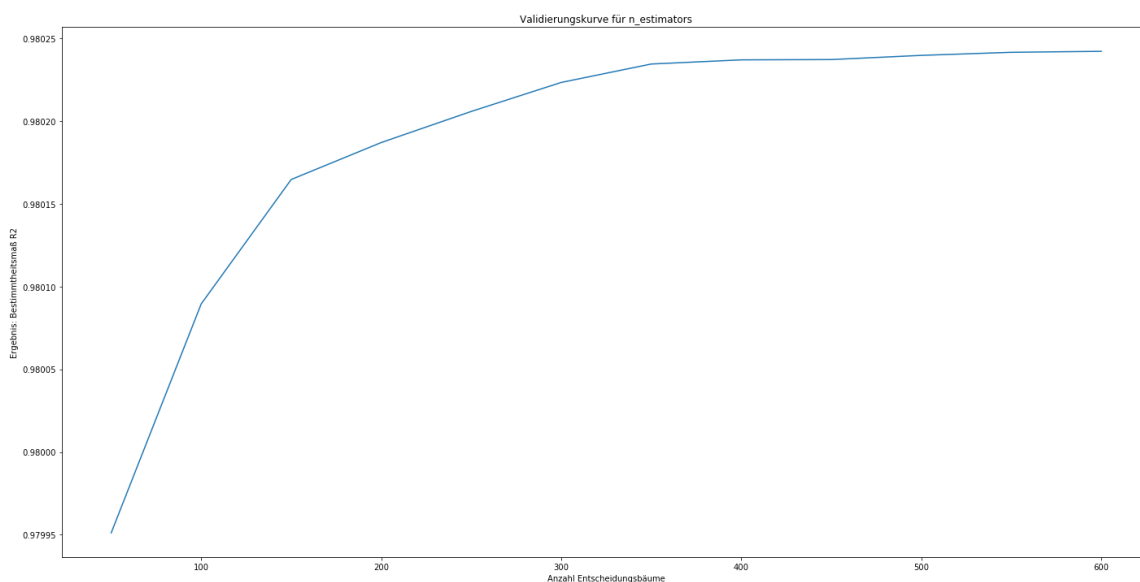
[Parallel(n_jobs=-1)]: Using backend LokyBackend with 12 concurrent worker
s.
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done   8 tasks      | elapsed:   12.8s
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 104 tasks     | elapsed:   5.9min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 180 out of 180 | elapsed: 22.7min finished

```

```

{'n_estimators': 600}
0.9802421745852581

```



Bei 350 Bäumen konvergiert die Validierungskurve. Hier ist also ein guter Mittelweg zwischen Performance und Güte des Modells gefunden worden. Das Modell wird erneut auf eine Über- oder Unteranpassung untersucht:

In [55]:

```
model = RandomForestRegressor(n_estimators = 350, criterion = 'mse', random_state = 0)

cv_results = cross_validate(model, X_reduced, y_reduced, cv = kfold, scoring = scorer,
return_train_score = True, n_jobs = -1)

print("Qualitätsmaß\t\t", "Trainingsdaten\t\t", "Testdaten\t")
print("Bestimmtheitsmaß (R²)\t", np.mean(cv_results["train_r2"]), "\t", np.mean(cv_results["test_r2"]))
print("Durchschn. Abs. Fehler\t", np.mean(cv_results["train_neg_mean_absolute_error"]*-1), "\t", np.mean(cv_results["test_neg_mean_absolute_error"]*-1))
print("Durchschn. Quad. Fehler\t", np.mean(cv_results["train_neg_mean_squared_error"]*-1), "\t", np.mean(cv_results["test_neg_mean_squared_error"]*-1))
print("Durchschn. Abs. Abw.\t", np.mean(cv_results["train_mean_absolute_deviation"]*-1), "\t", np.mean(cv_results["test_mean_absolute_deviation"]*-1))
```

Qualitätsmaß	Trainingsdaten	Testdaten
Bestimmtheitsmaß (R²)	0.997186090371724	0.9802622013485706
Durchschn. Abs. Fehler	87.32895199046143	222.0826931543168
Durchschn. Quad. Fehler	21066.955859747333	147763.8405610573
Durchschn. Abs. Abw.	3.755112879130475	8.647891146469153

Es zeigt sich erneut eine leichte Überanpassung, allerdings weniger stark als bei den nicht reduzierten Daten. Daher werden erneut folgende Parameter mit der RandomizedGridSearch optimiert:

- max\_depth
- min\_samples\_split
- min\_samples\_leaf
- min\_impurity\_decrease

In [54]:

```
params = {'max_depth': [30,40,50,60,70,80,90,100,110],
          'min_samples_split' : [2,3,4,6,8,10,12,14],
          'min_samples_leaf' : [2,3,4,6,8,10,12,14],
          'min_impurity_decrease' : [0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9]}

model = RandomForestRegressor(n_estimators = 350, criterion = 'mse', random_state = 0)

random_search = RandomizedSearchCV(model, params, cv = kfold, scoring = "r2", n_iter =
250, n_jobs = -1, verbose = 3)

random_search.fit(X_reduced, y_reduced)

print(random_search.best_params_)
print(random_search.best_score_)
print("\n")
```

Fitting 15 folds for each of 250 candidates, totalling 3750 fits

[Parallel(n\_jobs=-1)]: Using backend LokyBackend with 12 concurrent worker  
s.

```
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done   8 tasks      | elapsed:   38.0s
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 104 tasks     | elapsed:   3.8min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 264 tasks     | elapsed:   9.0min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 488 tasks     | elapsed:  16.5min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 1128 tasks    | elapsed:  37.5min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 2024 tasks    | elapsed:  67.6min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 2568 tasks    | elapsed:  85.1min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 3176 tasks    | elapsed: 104.7min
[Parallel(n_jobs=-1)]: Done 3750 out of 3750 | elapsed: 123.1min finished
```

```
{'min_samples_split': 12, 'min_samples_leaf': 2, 'min_impurity_decrease':
0.9, 'max_depth': 60}
0.9810941680866445
```

Im Folgenden wird das Modell eingestellt mit:

- n\_estimators = 200
- max\_depth = 90
- min\_samples\_split = 4
- min\_samples\_leaf = 2
- min\_impurity\_decrease = 0.7
- criterion = 'mse'

Auch hier konnte wieder nur eine geringfügige Verbesserung erzielt werden:

In [56]:

```
model = RandomForestRegressor(n_estimators = 350, max_depth = 60, min_samples_split = 12, min_samples_leaf = 2, min_impurity_decrease = 0.9, criterion = 'mse', random_state = 0)

cv_results = cross_validate(model, X_reduced, y_reduced, cv = kfold, scoring = scorer, return_train_score = True, n_jobs = -1)

print("Qualitätsmaß\t\t", "Trainingsdaten\t\t", "Testdaten\t")
print("Bestimmtheitsmaß (R²)\t", np.mean(cv_results["train_r2"]), "\t", np.mean(cv_results["test_r2"]))
print("Durchschn. Abs. Fehler\t", np.mean(cv_results["train_neg_mean_absolute_error"]*-1), "\t", np.mean(cv_results["test_neg_mean_absolute_error"]*-1))
print("Durchschn. Quad. Fehler\t", np.mean(cv_results["train_neg_mean_squared_error"]*-1), "\t", np.mean(cv_results["test_neg_mean_squared_error"]*-1))
print("Durchschn. Abs. Abw.\t", np.mean(cv_results["train_mean_absolute_deviation"]*-1), "\t", np.mean(cv_results["test_mean_absolute_deviation"]*-1))
```

Qualitätsmaß	Trainingsdaten	Testdaten
Bestimmtheitsmaß (R²)	0.9897586809598157	0.9811042568880483
Durchschn. Abs. Fehler	163.0923084681741	216.24534365320315
Durchschn. Quad. Fehler	76674.4375943686	141457.53050647143
Durchschn. Abs. Abw.	6.421544718106531	7.994499225084064

Die Verbesserung nach der Entfernung der teuren Diamanten ist nur sehr gering. Das Bestimmtheitsmaß hat sich nur gering verbessert, die durchschnittliche absolute Abweichung hat sich sogar minimal verschlechtert. Sowohl der durchschnittliche absolute und durquadierte Fehler haben sich zwar verbessert, die kann allerdings nicht zwangsweise auf ein besseres Modell zurückgeführt werden. Bei teureren Diamanten führt eine Abweichung von etwa 8 Prozent zu nominell größeren Werten als bei günstigen Diamanten. Wenn nun die teureren Diamanten entfernt werden, sinken der durchschnittliche und der absolute Fehler, obwohl die Vorhersagen nicht zwangsweise besser sind.

Die Optimierung hat also zu keiner Verbesserung des Modells geführt und wird daher zurückgenommen.

## Ergebnis

Der folgende Quelltext liest die Daten ein und führt eine korrekte Datenvorbereitung durch und implementiert die Methode zur Berechnung der durchschnittlichen absoluten Abweichung:

In [67]:

```

#Daten neu einlesen
data = pd.read_csv('diamonds.csv') #https://www.kaggle.com/shivam2503/diamonds
data = data.drop('Unnamed: 0', 1) #Zeilennummer in CSV-Datei, kann daher entfernt werden
n

print("Vor Datenvorbereitung:\n")
print(data.head(10))

#Falsche Daten und Ausreißer aus x, y und z entfernen
data = data[data['x'] > 1.965]
data = data[data['x'] < 9.285]
data = data[data['y'] > 2.01]
data = data[data['y'] < 9.27]
data = data[data['z'] > 1.215]
data = data[data['z'] < 5.735]

#Ausreißer aus Karat entfernen (größer als 2,0)
data = data[data['carat'] <= 2.0]

#Ausreißer aus Tiefe entfernen (größer als 70 und kleiner als 50)
data = data[data['depth'] <= 70]
data = data[data['depth'] >= 50]

#Ausreißer aus Tisch entfernen (größer als 65 und kleiner als 53)
data = data[data['table'] <= 65]
data = data[data['table'] >= 53]

#Volumen erzeugen und x, y und z entfernen
data['volume'] = data['x']*data['y']*data['z']
data.drop(['x','y','z'], axis=1, inplace=True)

#Ordinale Merkmale kodieren
data['cut'] = data['cut'].apply(lambda x: 1 if x=='Fair'
                                else(2 if x=='Good'
                                else(3 if x=='Very Good'
                                else(4 if x=='Premium' else 5))))

data['color'] = data['color'].apply(lambda x: 1 if x=='J'
                                    else(2 if x=='I'
                                    else(3 if x=='H'
                                    else(4 if x=='G'
                                    else(5 if x=='F'
                                    else(6 if x=='E' else 7))))))

data['clarity'] = data['clarity'].apply(lambda x: 1 if x=='I1'
                                        else(2 if x=='SI2'
                                        else(3 if x=='SI1'
                                        else(4 if x=='VS2'
                                        else(5 if x=='VS1'
                                        else(6 if x=='VVS2'
                                        else 7 if x=='VVS1' else 8))))))

print("\nNach Bereinigung:\n")
print(data.head(10))

#Merkmale und Zielvariable trennen
y = data['price']
X = data.drop(['price'], axis = 1)

```

```
def mean_absolute_deviation(y_true_list, y_pred_list):

    sum_deviation = 0

    for y_true, y_pred in zip(y_true_list, y_pred_list):

        deviation = (((y_pred / y_true) - 1) * 100)

        if deviation >= 0:

            sum_deviation += deviation

        if deviation < 0:

            sum_deviation += (deviation * -1)

    return (sum_deviation / len(y_true_list))
```

Vor Datenvorbereitung:

	carat	cut	color	clarity	depth	table	price	x	y	z
0	0.23	Ideal	E	SI2	61.5	55.0	326	3.95	3.98	2.43
1	0.21	Premium	E	SI1	59.8	61.0	326	3.89	3.84	2.31
2	0.23	Good	E	VS1	56.9	65.0	327	4.05	4.07	2.31
3	0.29	Premium	I	VS2	62.4	58.0	334	4.20	4.23	2.63
4	0.31	Good	J	SI2	63.3	58.0	335	4.34	4.35	2.75
5	0.24	Very Good	J	VVS2	62.8	57.0	336	3.94	3.96	2.48
6	0.24	Very Good	I	VVS1	62.3	57.0	336	3.95	3.98	2.47
7	0.26	Very Good	H	SI1	61.9	55.0	337	4.07	4.11	2.53
8	0.22	Fair	E	VS2	65.1	61.0	337	3.87	3.78	2.49
9	0.23	Very Good	H	VS1	59.4	61.0	338	4.00	4.05	2.39

Nach Bereinigung:

	carat	cut	color	clarity	depth	table	price	volume
0	0.23	5	6	2	61.5	55.0	326	38.202030
1	0.21	4	6	3	59.8	61.0	326	34.505856
2	0.23	2	6	5	56.9	65.0	327	38.076885
3	0.29	4	2	4	62.4	58.0	334	46.724580
4	0.31	2	1	2	63.3	58.0	335	51.917250
5	0.24	3	1	6	62.8	57.0	336	38.693952
6	0.24	3	2	7	62.3	57.0	336	38.830870
7	0.26	3	3	3	61.9	55.0	337	42.321081
8	0.22	1	6	4	65.1	61.0	337	36.425214
9	0.23	3	3	5	59.4	61.0	338	38.718000

Als Modell wird ein RandomForestRegressor mit folgender Konfiguration verwendet:

- n\_estimators = 350
- max\_depth = 60
- min\_samples\_split = 12
- min\_samples\_leaf = 2
- min\_impurity\_decrease = 0.9
- criterion = 'mse'

In [64]:

```
model = RandomForestRegressor(n_estimators = 350, max_depth = 60, min_samples_split = 12,
min_samples_leaf = 2, min_impurity_decrease = 0.9, criterion = 'mse', random_state = 0)
model.fit(X, y)

preds = model.predict(X)
```

In [110]:

```
print(model)
```

```
RandomForestRegressor(bootstrap=True, criterion='mse', max_depth=60,
max_features='auto', max_leaf_nodes=None,
min_impurity_decrease=0.9, min_impurity_split=None,
min_samples_leaf=2, min_samples_split=12,
min_weight_fraction_leaf=0.0, n_estimators=350, n_jobs=None,
oob_score=False, random_state=0, verbose=0, warm_start=False)
```

In [68]:

```
print("Qualitätsmaß\t\t", "Ergebnis")
print("Bestimmtheitsmaß (R²)\t", r2_score(y, preds))
print("Durchschn. Abs. Fehler\t", mean_absolute_error(y, preds))
print("Durchschn. Quad. Fehler\t", mean_squared_error(y, preds))
print("Durchschn. Abs. Abw.\t", mean_absolute_deviation(y, preds))
```

Qualitätsmaß	Ergebnis
Bestimmtheitsmaß (R²)	0.9919930869273788
Durchschn. Abs. Fehler	167.67552627962226
Durchschn. Quad. Fehler	93414.48044322399
Durchschn. Abs. Abw.	5.9693011542081535

Das Modell bildet die Daten zu etwa 99 % ab.

Vorhersagen liegen im Durchschnitt um etwa 167 Dollar bzw. 6,0 Prozent daneben.

Damit ist das Ziel von maximal 15 % Abweichung erfüllt.

In [69]:

```
characteristics = X.columns
importances = list(model.feature_importances_)
characteristics_importances = [(characteristic, round(importance, 2)) for characteristi
c, importance in zip(characteristics, importances)]
characteristics_importances = sorted(characteristics_importances, key = lambda x: x[1],
reverse = True)
[print('Variable: {:20} Importance: {}'.format(*pair)) for pair in characteristics_imp
ortances];
```

Variable: carat	Importance: 0.64
Variable: volume	Importance: 0.23
Variable: clarity	Importance: 0.08
Variable: color	Importance: 0.04
Variable: cut	Importance: 0.0
Variable: depth	Importance: 0.0
Variable: table	Importance: 0.0



Das Modell basiert zu 64 % auf dem Merkmal carat und zu 23 % auf dem Merkmal volume. Diese beiden Merkmale hängen jeweils selbst stark zusammen. Man erkennt also auch hier, dass das Gewicht bzw. die Größe des Diamanten der mit Abstand wichtigste Faktor für den Preis eines Diamanten ist.

Abschließend wird eine Stichprobe aus den Daten mit dem Modell vorhergesagt. Die Abweichungen können der Tabelle entnommen werden.

In [109]:

```

test_data = data.sample(10)
y_test_data = test_data['price']
X_test_data = test_data.drop(['price'], axis = 1)

test_preds = model.predict(X_test_data)

print("Qualitätsmaß\t\t", "Ergebnis")
print("Bestimmtheitsmaß (R²)\t", r2_score(y_test_data, test_preds))
print("Durchschn. Abs. Fehler\t", mean_absolute_error(y_test_data, test_preds))
print("Durchschn. Quad. Fehler\t", mean_squared_error(y_test_data, test_preds))
print("Durchschn. Abs. Abw.\t", mean_absolute_deviation(y_test_data, test_preds))

test_results = X_test_data.copy()

test_results["price"] = y_test_data
test_results["Vorhersage"] = test_preds
test_results["Verhältnis"] = round((((test_preds / y_test_data) - 1) * 100), 2)
test_results["Differenz"] = y_test_data - test_preds

print("\n\n")
print(test_results)

```

Qualitätsmaß	Ergebnis
Bestimmtheitsmaß (R²)	0.9947325094692051
Durchschn. Abs. Fehler	106.88320535308966
Durchschn. Quad. Fehler	39480.360112750524
Durchschn. Abs. Abw.	3.660973864395524

	carat	cut	color	clarity	depth	table	volume	price	Vorh
ersage	Verhältnis		Differenz						
47931	0.56	4	6	4	61.8	59.0	92.305104	1915	1854.
472174		-3.16	60.527826						
52375	0.71	3	5	3	59.0	61.0	118.813632	2505	2497.
377033		-0.30	7.622967						
43575	0.41	5	6	7	60.9	55.0	67.929120	1431	1424.
293005		-0.47	6.706995						
47594	0.53	4	7	4	62.4	59.0	85.733144	1877	1841.
309119		-1.90	35.690881						
49549	0.59	5	4	5	61.3	55.0	98.184384	2129	2004.
246165		-5.86	124.753835						
28925	0.30	5	4	6	61.5	55.0	49.226400	684	734.
839519		7.43	-50.839519						
40368	0.50	5	2	5	61.9	54.0	84.013056	1130	1222.
183913		8.16	-92.183913						
22740	1.01	5	7	6	61.7	57.0	165.576358	10761	11358.
020980		5.55	-597.020980						
2100	0.86	3	3	3	63.8	56.0	140.220850	3115	3102.
266366		-0.41	12.733634						
51670	0.72	5	6	2	62.3	54.0	119.313650	2398	2478.
751503		3.37	-80.751503						

## Quellen

[1] renesim GmbH (2020): Vier C – Carat, Clarity, Colour und Cut, abgerufen am 01.06.2020 unter:

<https://www.renesim.com/de/de/wissen/diamantenlexikon/vier-c/die-vier-c>  
(<https://www.renesim.com/de/de/wissen/diamantenlexikon/vier-c/die-vier-c>)

[2] IBM Knowledge Center (2020): CRISP-DM-Hilfe - Übersicht, abgerufen am 01.06.2020 unter:

[https://www.ibm.com/support/knowledgecenter/de/SS3RA7\\_sub/modeler\\_crispdm\\_ddita/clementine/crisp\\_help](https://www.ibm.com/support/knowledgecenter/de/SS3RA7_sub/modeler_crispdm_ddita/clementine/crisp_help)  
([https://www.ibm.com/support/knowledgecenter/de/SS3RA7\\_sub/modeler\\_crispdm\\_ddita/clementine/crisp\\_help](https://www.ibm.com/support/knowledgecenter/de/SS3RA7_sub/modeler_crispdm_ddita/clementine/crisp_help))

[3] Luber, Stefan; Litzel, Nico (2019): Was ist CRISP-DM?, abgerufen am 01.06.2020 unter:

<https://www.bigdata-insider.de/was-ist-crisp-dm-a-815478/> (<https://www.bigdata-insider.de/was-ist-crisp-dm-a-815478/>)

[4] Kaggle (2020): Diamonds, abgerufen am 01.05.2020 unter:

<https://www.kaggle.com/shivam2503/diamonds> (<https://www.kaggle.com/shivam2503/diamonds>)

[5] Eigene Darstellung basierend auf: Kaggle (2020): Diamonds, abgerufen am 01.06.2020 unter:

<https://www.kaggle.com/shivam2503/diamonds> (<https://www.kaggle.com/shivam2503/diamonds>)

[6] seaborn (2020): seaborn.distplot, abgerufen am 01.06.2020 unter:

<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.distplot.html#>  
(<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.distplot.html#>)

[7] seaborn (2020): seaborn.boxplot, abgerufen am 01.06.2020 unter:

<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.boxplot.html>  
(<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.boxplot.html>)

[8] seaborn (2020): seaborn.regplot, abgerufen am 01.06.2020 unter:

<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.regplot.html>  
(<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.regplot.html>)

[9] Minitab.com: Ein Vergleich der Korrelationsmethode nach Pearson und nach Spearman, abgerufen am 01.06.2020 unter:

<https://support.minitab.com/de-de/minitab/19/help-and-how-to/statistics/basic-statistics/supporting-topics/correlation-and-covariance/a-comparison-of-the-pearson-and-spearman-correlation-methods/>  
(<https://support.minitab.com/de-de/minitab/19/help-and-how-to/statistics/basic-statistics/supporting-topics/correlation-and-covariance/a-comparison-of-the-pearson-and-spearman-correlation-methods/>)

[10] SciPy.org (2019): scipy.stats.spearmanr, abgerufen am 01.06.2020 unter:

<https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.stats.spearmanr.html>  
(<https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.stats.spearmanr.html>)

[11] SciPy.org (2019): scipy.stats.pearsonr, abgerufen am 01.06.2020 unter:

<https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.stats.pearsonr.html>  
(<https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.stats.pearsonr.html>)

- [12] Günter, Prof. Dr. Daniel Rey (2020): Auswertung Ausreißer, abgerufen am 01.06.2020 unter:  
<http://www.elearning-psychologie.de/ausreisser.html> (<http://www.elearning-psychologie.de/ausreisser.html>)
- [13] seaborn (2020): seaborn.countplot, abgerufen am 01.06.2020 unter:  
<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.countplot.html>  
(<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.countplot.html>)
- [14] seaborn (2020): seaborn.barplot, abgerufen am 01.06.2020 unter:  
<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.barplot.html>  
(<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.barplot.html>)
- [15] Universität Zürich (2018): Einfaktorielle Varianzanalyse (ohne Messwiederholung), abgerufen am 01.06.2020 unter:  
[https://www.methodenberatung.uzh.ch/de/datenanalyse\\_spss/unterschiede/zentral/evarianz.html](https://www.methodenberatung.uzh.ch/de/datenanalyse_spss/unterschiede/zentral/evarianz.html)  
([https://www.methodenberatung.uzh.ch/de/datenanalyse\\_spss/unterschiede/zentral/evarianz.html](https://www.methodenberatung.uzh.ch/de/datenanalyse_spss/unterschiede/zentral/evarianz.html))
- [16] renesim GmbH (2020): Karat (Carat), abgerufen am 01.06.2020 unter:  
<https://www.renesim.com/de/de/wissen/diamantenlexikon/vier-c/karat>  
(<https://www.renesim.com/de/de/wissen/diamantenlexikon/vier-c/karat>)
- [17] renesim GmbH (2020): Cut (Schliff), abgerufen am 01.06.2020 unter:  
<https://www.renesim.com/de/de/wissen/diamantenlexikon/vier-c/cut>  
(<https://www.renesim.com/de/de/wissen/diamantenlexikon/vier-c/cut>)
- [18] LooseDiamondsReviews.com (2011): The fourth – and most important – of the Four Cs: Cut, abgerufen am 01.06.2020 unter:  
<https://www.loosediamondsreviews.com/diamondcut.html>  
(<https://www.loosediamondsreviews.com/diamondcut.html>)
- [19] renesim GmbH (2020): Farbe (Colour), abgerufen am 01.06.2020 unter:  
<https://www.renesim.com/de/de/wissen/diamantenlexikon/vier-c/farbe>  
(<https://www.renesim.com/de/de/wissen/diamantenlexikon/vier-c/farbe>)
- [20] renesim GmbH (2020): Clarity (Reinheit), abgerufen am 01.06.2020 unter:  
<https://www.renesim.com/de/de/wissen/diamantenlexikon/vier-c/clarity>  
(<https://www.renesim.com/de/de/wissen/diamantenlexikon/vier-c/clarity>)
- [21] pandas development team (2014): pandas.DataFrame, abgerufen am 01.06.2020 unter:  
<https://pandas.pydata.org/pandas-docs/stable/reference/api/pandas.DataFrame.html>  
(<https://pandas.pydata.org/pandas-docs/stable/reference/api/pandas.DataFrame.html>)
- [22] seaborn (2020): seaborn.heatmap, abgerufen am 01.06.2020 unter:  
<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.heatmap.html>  
(<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.heatmap.html>)

[23] seaborn (2020): seaborn.pairplot, abgerufen am 01.06.2020 unter:

<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.pairplot.html>

(<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.pairplot.html>)

[24] seaborn (2020): seaborn.scatterplot, abgerufen am 01.06.2020 unter:

<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.scatterplot.html>

(<https://seaborn.pydata.org/generated/seaborn.scatterplot.html>)

[25] scikit-learn developers (2019): sklearn.preprocessing.StandardScaler, abgerufen am 01.06.2020 unter:

<https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.preprocessing.StandardScaler.html> ([https://scikit-](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.preprocessing.StandardScaler.html)

[learn.org/stable/modules/generated/sklearn.preprocessing.StandardScaler.html](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.preprocessing.StandardScaler.html))

[26] scikit-learn developers (2019): sklearn.metrics.r2\_score, abgerufen am 01.06.2020 unter:

[https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.r2\\_score.html#sklearn.metrics.r2\\_score](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.r2_score.html#sklearn.metrics.r2_score)

([https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.r2\\_score.html#sklearn.metrics.r2\\_score](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.r2_score.html#sklearn.metrics.r2_score))

[27] scikit-learn developers (2019): sklearn.metrics.mean\_absolute\_error, abgerufen am 01.06.2020 unter:

[https://scikit-](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.mean_absolute_error.html#sklearn.metrics.mean_absolute)

[learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.mean\\_absolute\\_error.html#sklearn.metrics.mean\\_absolute](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.mean_absolute_error.html#sklearn.metrics.mean_absolute)

([https://scikit-](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.mean_absolute_error.html#sklearn.metrics.mean_absolute)

[learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.mean\\_absolute\\_error.html#sklearn.metrics.mean\\_absolute](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.mean_absolute_error.html#sklearn.metrics.mean_absolute)

[28] scikit-learn developers (2019): sklearn.metrics.mean\_squared\_error, abgerufen am 01.06.2020 unter:

[https://scikit-](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.mean_squared_error.html#sklearn.metrics.mean_squared)

[learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.mean\\_squared\\_error.html#sklearn.metrics.mean\\_squared](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.mean_squared_error.html#sklearn.metrics.mean_squared)

([https://scikit-](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.mean_squared_error.html#sklearn.metrics.mean_squared)

[learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.mean\\_squared\\_error.html#sklearn.metrics.mean\\_squared](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.mean_squared_error.html#sklearn.metrics.mean_squared)

[29] scikit-learn developers (2019): sklearn.metrics.make\_scorer, abgerufen am 01.06.2020 unter:

[https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.make\\_scorer.html](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.make_scorer.html) ([https://scikit-](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.make_scorer.html)

[learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.make\\_scorer.html](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.metrics.make_scorer.html))

[30] Raschka, Sebastian/Mirjalili Vahid: Machine Learning mit Python und Scikit-learn und TensorFlow: Das umfassende Praxis-Handbuch für Data Science, Deep Learning und Predictive Analytics, Seite 207 ff.

Frechen: mitp Verlag, 2018

[31] scikit-learn developers (2019): sklearn.model\_selection.cross\_validate, abgerufen am 01.06.2020 unter:

[https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model\\_selection.cross\\_validate.html](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.cross_validate.html) ([https://scikit-](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.cross_validate.html)

[learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model\\_selection.cross\\_validate.html](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.cross_validate.html))

[32] scikit-learn developers (2019): sklearn.model\_selection.RepeatedKFold, abgerufen am 01.06.2020 unter:

[https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model\\_selection.RepeatedKFold.html](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.RepeatedKFold.html) ([https://scikit-](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.RepeatedKFold.html)

[learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model\\_selection.RepeatedKFold.html](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.RepeatedKFold.html))

[33] scikit-learn developers (2019): 1. Supervised learning, abgerufen am 01.06.2020 unter:

[https://scikit-learn.org/stable/supervised\\_learning.html](https://scikit-learn.org/stable/supervised_learning.html) ([https://scikit-learn.org/stable/supervised\\_learning.html](https://scikit-learn.org/stable/supervised_learning.html))

[34] scikit-learn developers (2019): 1. sklearn.ensemble.RandomForestRegressor, abgerufen am 01.06.2020 unter:

<https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.RandomForestRegressor.html>  
(<https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.RandomForestRegressor.html>)

[30] Raschka, Sebastian/Mirjalili Vahid: Machine Learning mit Python und Scikit-learn und TensorFlow: Das umfassende Praxis-Handbuch für Data Science, Deep Learning und Predictive Analytics, Seite 346 ff.

Frechen: mitp Verlag, 2018

[36] scikit-learn developers (2019): sklearn.model\_selection.GridSearchCV, abgerufen am 01.06.2020 unter:

[https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model\\_selection.GridSearchCV.html](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.GridSearchCV.html) ([https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model\\_selection.GridSearchCV.html](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.GridSearchCV.html))

[37] Raschka, Sebastian/Mirjalili Vahid: Machine Learning mit Python und Scikit-learn und TensorFlow: Das umfassende Praxis-Handbuch für Data Science, Deep Learning und Predictive Analytics, Seite 211 ff.

Frechen: mitp Verlag, 2018

[38] scikit-learn developers (2019): sklearn.model\_selection.RandomizedSearchCV, abgerufen am 01.06.2020 unter:

[https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model\\_selection.RandomizedSearchCV.html](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.RandomizedSearchCV.html)  
([https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model\\_selection.RandomizedSearchCV.html](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.RandomizedSearchCV.html))