

### Einführung in Data Science und maschinelles Lernen

### EINFÜHRUNG IN MASCHINELLES LERNEN

- Vorgehen zum Trainieren von maschinellen Lernalgorithmen
- Definition der linearen Regression
- Kostenfunktionen
- Optimierungsfunktionen

#### Wahl eines Prognosemodells



Teilung des Datensatzes (z.B. 70/20/10)

Trainingsdaten

Validierungsdaten

Testdaten



Trainingsdaten

Optimierung der Modellparameter



Hyperparameter (modellzentrierte Optimierung

Verändern der

Validierungsdaten

Optimierung der Hyperparameter



Testdaten

Überprüfung der Modellqualität

Erweiterung/
Verbesserung des
Datensatzes
(datenzentrierte
Optimierung)

# TEILUNG EINES DATENSATZES (OHNE ZEITREIHEN!)

- (1) Mischung der Reihenfolge (Randomisierung)
- (2) Definition der Größen von Trainings-, Validierungs- und Testdatensatz in Prozent
- (3) Teilung des Datensatzes

## TEILUNG EINES DATENSATZES MIT ZEITREIHEN

- (1) Ordnen der Zeitreihe
- (2) Definition der Zeitreihenfenster für Validierungs- und Testdatensatz
- (3) Teilung des Datensatzes

### PROGNOSEMODELLE

In diesem Kurs behandelte:

- Lineares Modell

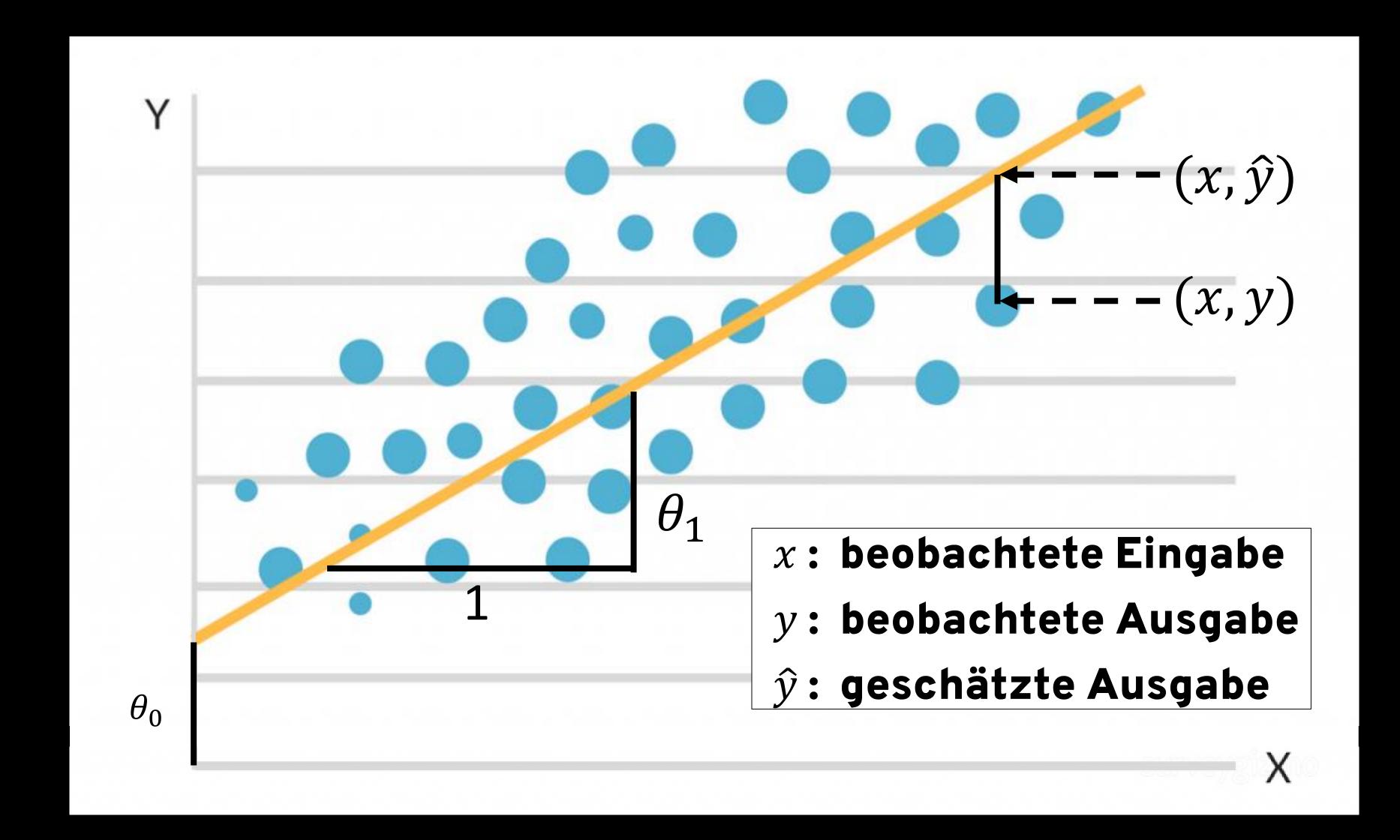
Neuronales Netz

(Support Vektor Maschine)

### LINEARES MODELL

$$\hat{y} = \theta_0 + \theta_1 x$$

$$= h_x (\theta_0, \theta_1)$$



#### KOSTENFUNKTION

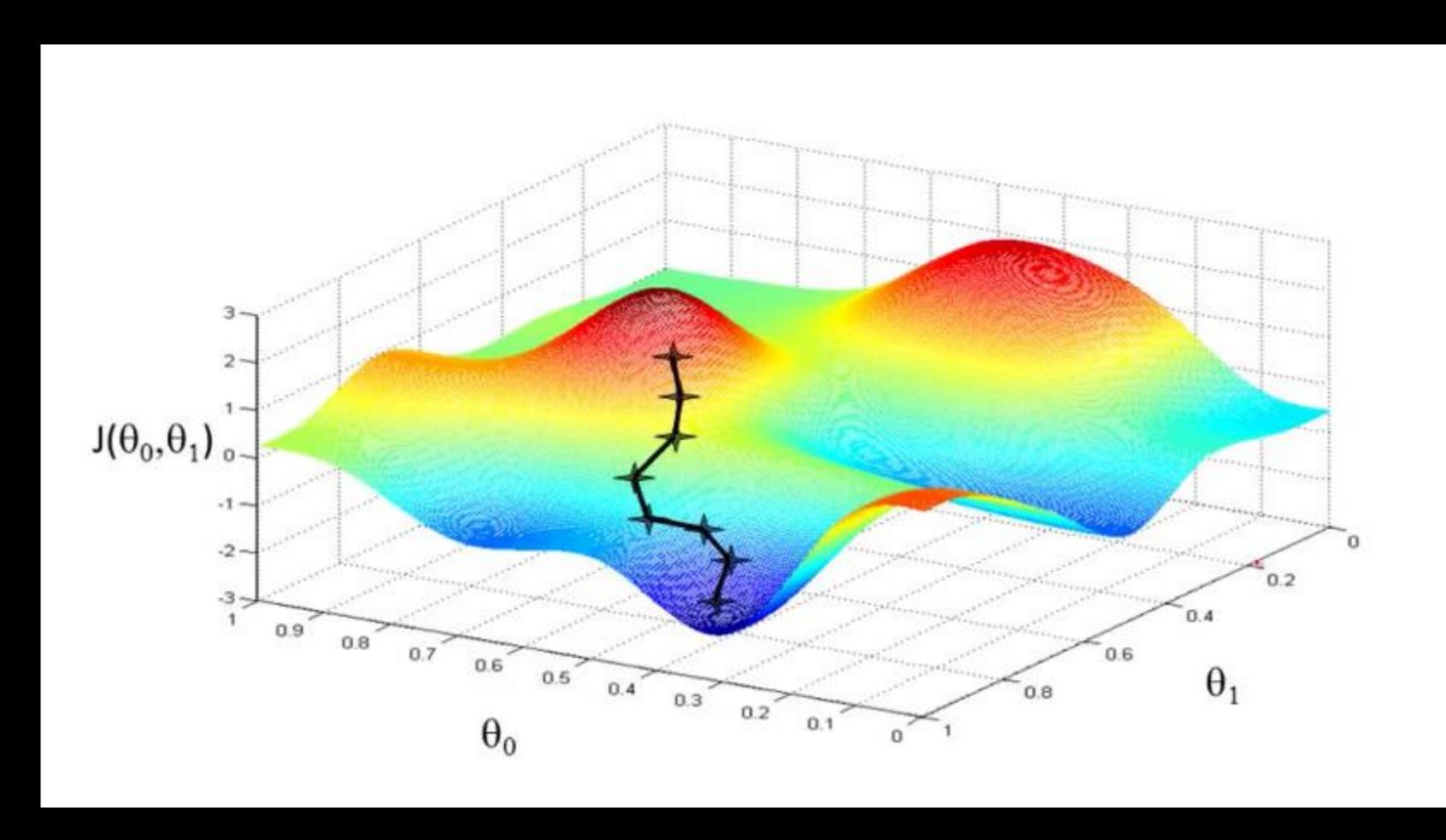
Zur Berechnung der Funktion mit den optimalen Parametern  $\theta_0$  und  $\theta_1$ :

$$J_x(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{m} \sum |h_x(\theta_0, \theta_1) - y|$$

Mean Absolute Error (MAE)

$$J_x(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{m} \sum (h_x(\theta_0, \theta_1) - y)^2$$
 Mean Squared Error (MSE)

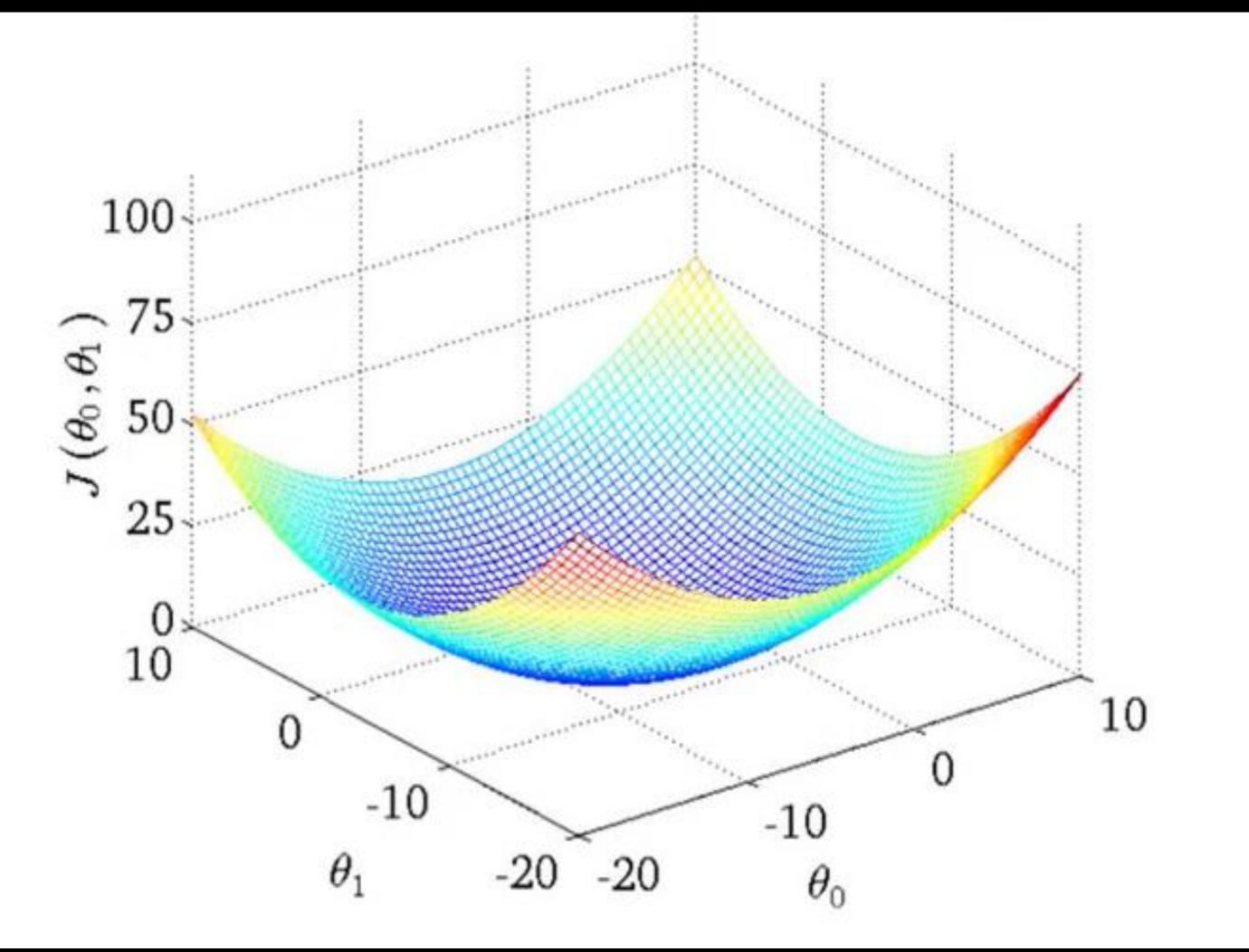
### OPTIMIERUNGSFUNKTION



- Iteratives Verfahren (Gradient Descent), um das Minimum der Kostenfunktion zu finden.
- Schrittgröße zur Annäherung wird durch die Lernrate ("Learning Parameter") kontrolliert

Quelle: <a href="https://www.coursera.org/learn/machine-learning">https://www.coursera.org/learn/machine-learning</a>

#### MINIMIERUNG BEI LINEAREN MODELLEN



- Für lineare Modelle ist die Kostenfunktion konvex und besitzt keine lokalen Minima.
- Hier werden häufig auch andere statistische Verfahren als Gradient Descent genutzt.

(Insbesondere wenn das Modell nur wenige Variablen umfasst.)

Quelle: <a href="https://www.coursera.org/learn/machine-learning">https://www.coursera.org/learn/machine-learning</a>

#### BEISPIEL EINES LINEAREN MODELLS

```
mod <- lm(price ~ sqft_lot15 + as.factor(condition), house_pricing)
summary(mod)</pre>
```

#### ERGEBNIS DES LINEAREN MODELLS

```
Call:
lm(formula = price \sim sqft_lot15 + as.factor(condition), data = house_pricing)
Residuals:
   Min
            1Q Median
                            3Q
                                   Max
-795388 -214555 -85989 101761 7183941
Coefficients:
                       Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
                      3.261e+05 7.049e+04 4.625 3.77e-06 ***
(Intercept)
                      1.138e+00 1.035e-01 11.002 < 2e-16 ***
sqft_lot15
as.factor(condition)2 -2.305e+04 7.690e+04 -0.300 0.764379
as.factor(condition)3 2.031e+05 7.057e+04 2.878 0.004008 **
as.factor(condition)4
                      1.800e+05 7.070e+04 2.546 0.010915 *
                                             3.880 0.000105 ***
as.factor(condition)5
                      2.762e+05
                                7.118e+04
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 366300 on 17284 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.01409, Adjusted R-squared: 0.0138
F-statistic: 49.39 on 5 and 17284 DF, p-value: < 2.2e-16
```

#### KENNWERTE DER REGRESSION

#### p-Wert

- Signifikanzwert
- Wahrscheinlichkeit, dass der zugehörige Wert in der Regression gleich null ist.
- Werte unter 0,05 (entspricht 5%) werden üblicherweise als signifikant betrachtet

#### (Adjustiertes) R<sup>2</sup>

- Kennzahl zur Beurteilung der Güte einer Regression
- Wert zwischen 0 und 1, der der dem Anteil der erklärten Variation entspricht (1 entspricht 100%):

$$R^2 = \frac{\text{Erklärte Varianz}}{\text{Gesamtvarianz}}$$

Das adjustierte R² bestraft das Hinzufügen zusätzlicher Variablen/Parameter

DataCamp Tutorial zur Linearen Modellierung in R: https://www.datacamp.com/community/tutorials/linear-regression-R

# BEISPIEL DATENSATZTEILUNG (KEINE ZEITREIHE)

```
13 🔻 #### Teilen des Datensatzen in Trainings- Validierungs- und Testdatensatz
14 ♥ ```{r}
    # Load the dplyr library
    library(dplyr)
16
17
    # Set a random seed for reproducibility
18
    set.seed(42)
    # Shuffle the data
    data_shuffled <- data %>% sample_frac(1)
22
    # Calculate the number of rows for each dataset
23
    n_total <- nrow(data)
    n_{train} \leftarrow floor(0.7 * n_{total})
    n_validation <- floor(0.20 * n_total)</pre>
27
    # Split the data into training, validation, and test datasets
28
    train_data <- data_shuffled %>% slice(1:n_train)
    validation_data <- data_shuffled %>% slice((n_train + 1):(n_train + n_validation))
    test_data <- data_shuffled %>% slice((n_train + n_validation + 1):n_total)
32
    # Check the dimensions of the datasets
    cat("Training dataset dimensions:", dim(train_data), "\n")
    cat("Validation dataset dimensions:", dim(validation_data), "\n")
    cat("Test dataset dimensions:", dim(test_data), "\n")
36
37
38 🛎
```

## BEISPIEL LINEARE MODELLIERUNG UND VORHERSAGE

```
42 ### Beispiel einer einfachen linearen Regression
43 = ```{r}
      mod <- lm(price ~ sqft_lot15 + as.factor(condition), train_data)</pre>
44
       summary(mod)
45
46
47 🔺
48
49 🐙 ### Nutzung des resultierenden Modells für eine Vohersage
50 v ```{r}
     # Make predictions using the test data
     predicted_values <- predict(mod, newdata = validation_data)</pre>
53
     # Compare the predicted values with the actual values
54
     comparison <- data.frame(Actual = test_data$price, Predicted = predicted_values)</pre>
55
56
     # Calculate the mean squared error (RMSE)
57
    rmse <- sqrt(mean((comparison$Actual - comparison$Predicted)^2))</pre>
58
59
    # Display the comparison and RMSE
    head(comparison)
     cat("Root Mean Squared Error (RMSE):", rmse, "\n")
62
63
64 -
```

#### BREAKOUT

- Splittet Euren Datensatz in Trainings, Validierungs- und Testdatensatz
- Definiert eine lineare Modellgleichung und führt mit Eurem Trainingsdatensatz eine lineare Regression durch. Versucht das adjustierte R<sup>2</sup> des linearen Modells zu maximieren.
- Nutzt das lineare Modell, um eine Vorhersage für den Validierungsdatensatz zu erstellen.

# ABRUFEN DES MAPE FÜR DEN TESTDATENSATZ

```
library(dplyr)
library(readr)
library(httr)
# Dataframe for request must include columns `Datum`, `Warengruppe` und `Umsatz`
predictions <- read_csv("prediction_template.csv")</pre>
# name must not be provided; however, each team must upload at least one not
# anonymous prediction
name <- "Gruppe X"
# Execution of the request
r <- POST("https://bakery-sales-mape-tolicgztog-ey.a.run.app/",</pre>
          body = list(name=name, predictions=predictions),
          encode = "json")
# Output of MAPE in Percent
content(r, "parsed", "application/json")
```

#### AUFGABEN

- Datensatz weiter um zusätzliche Variablen ergänzen, die für die Schätzung des Umsatzes relevant sein könnten.
- Einmal dieses R-Script durchlaufen lassen, um Python (bzw. Miniconda) mit verschiedenen zusätzlichen Funktionspaketen zu installieren.
- Euren Datensatz teilen in einen Trainingsdatensatz vom 01.07.2013 bis 31.03.2019, einem Validierungsdatensatz vom 01.04. bis 08.06.2019 und einem Testdatensatz vom 09.06. bis 30.07.2019
- Eine lineare Modellgleichung aufstellen, die das adjustierte R<sup>2</sup> für Euren Trainingsdatensatz maximiert.
- Zum Thema Overfitting <u>dieses</u> Video (9 Minuten) anschauen.