# TSRI-11

July 23, 2024

## 1 Übung 11

**Gruppenname: TSRI**


- Christian Rene Thelen @cortex359
- Leonard Schiel @leo_paticumbum
- Marine Raimbault @Marine Raimbault
- Alexander Ivanets @sandrium


### 1.0.1 In dieser Übung ...

... werden wir uns mit Merkmalen (Features) und einfachen Modellen Klassifikatoren erzeugen und die Genauigkeit dieser Modelle mit verschiedenen Metriken bewerten. In Übung 11.1 und 11.2 werden wir uns mit Schwellwert-basierten Modellen beschäftigen. Übung 11.3 ist optional und behandelt die Klassifikation über eine einfache Form des Nächste Nachbarn Modells. Ziel aller Übungen ist es, Sie mit daten-getriebener Modellierung und der Evaluation von Klassifikatoren vertraut zu machen.

### 1.0.2 11.1 Frau und Mann (EDA, ROC, AUC)

In dieser Übung werden wir uns mit den Daten des National Health and Nutrition Examination Survey aus den Jahren 2009-2010 beschäftigen, die verschiedene Gesundheitsdaten der amerikanischen Bevölkerung umfassen. Wir werden zunächst in einer explorativen Datenanalyse (EDA) den Datensatz untersuchen. In einem zweiten Schritt werden wir daran arbeiten, mithilfe von Merkmalen (Features) Frauen und Männer zu unterscheiden, ohne dabei die Angabe des Geschlechts (Merkmal *"Gender"*) in den Daten zu nutzen. Das Resultat ist ein ganz einfaches Klassifikationsmodell, dessen Genauigkeit wir mithilfe verschiedener Metriken untersuchen werden.

**Ihre Daten**

- Sie finden die Daten, die Sie für diese Übung benötigen, hier.

**Ihre Aufgaben**

(1) Importieren Sie die Daten und untersuchen Sie: Welche Merkmale (Features) enthält der Datensatz? (Hinweis: Das *Gender*-Merkmal kodiert, ob es sich um einen Mann (1) oder um eine Frau (0) handelt.)

[1]:
```
#!wget https://data.bialonski.de/ds/nhanes-data.csv

import pandas as pd
```

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns

df: pd.DataFrame = pd.read_csv('nhanes-data.csv', delimiter='\t')
```

[2]:
```
df
```

[2]:

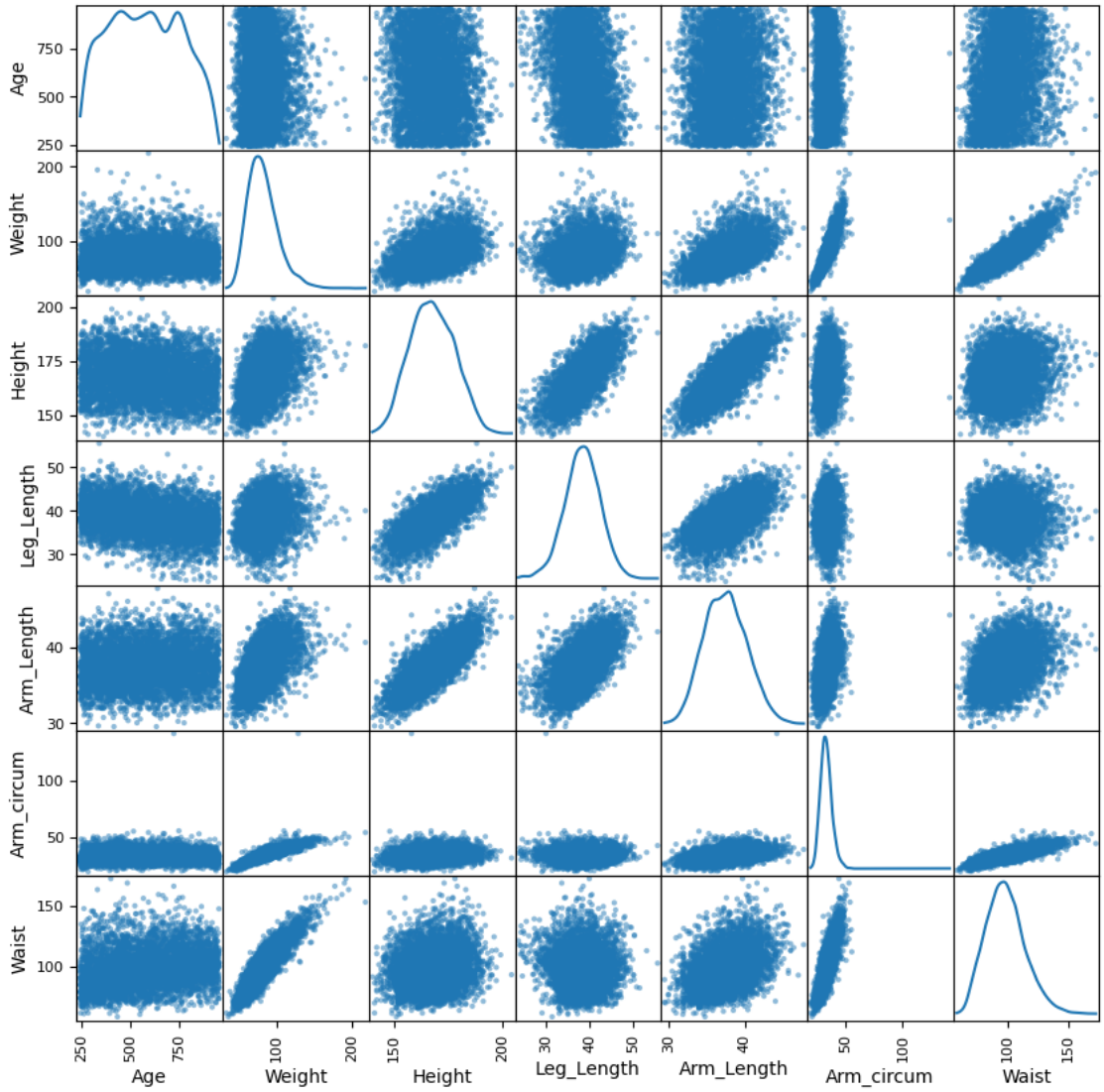
| | Gender | Age | Weight | Height | Leg_Length | Arm_Length | Arm_circum | Waist |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 0 | 241 | 64.7 | 163 | 34.2 | 36.2 | 29.0 | 89.6 |
| 1 | 0 | 241 | 54.0 | 153 | 37.2 | 34.0 | 26.1 | 85.5 |
| 2 | 1 | 241 | 61.4 | 165 | 37.7 | 35.0 | 31.4 | 70.1 |
| 3 | 0 | 241 | 74.0 | 171 | 37.9 | 36.2 | 29.8 | 91.1 |
| 4 | 0 | 241 | 63.6 | 159 | 38.1 | 34.0 | 29.2 | 74.3 |
| … | … | … | … | … | … | … | … | … |
| 4974 | 1 | 958 | 89.5 | 184 | 43.0 | 42.8 | 32.2 | 112.8 |
| 4975 | 0 | 959 | 78.6 | 151 | 35.6 | 34.2 | 33.5 | 114.9 |
| 4976 | 1 | 959 | 86.5 | 175 | 38.6 | 41.5 | 32.8 | 100.2 |
| 4977 | 0 | 959 | 58.0 | 163 | 40.2 | 37.5 | 26.2 | 82.8 |
| 4978 | 1 | 959 | 76.2 | 168 | 40.8 | 39.5 | 29.8 | 103.5 |

[4979 rows x 8 columns]

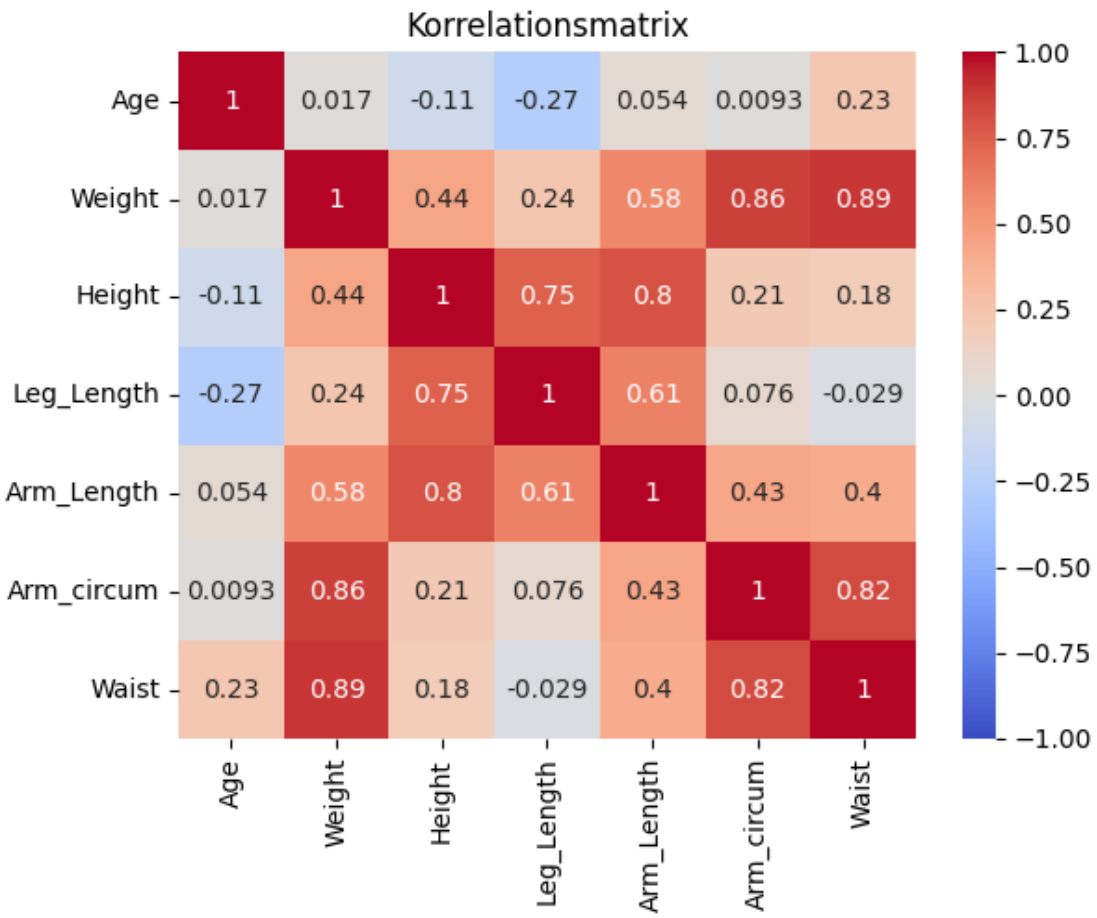
Der Datensatz enthält die Features Gender, Age, Weight, Height, Leg_Length, Arm_Length, Arm_circum und Waist.

(2) Führen Sie eine EDA auf den Daten (zunächst ohne das *Gender* Merkmal) durch. Erstellen Sie unter anderem eine Scattermatrix und erzeugen Sie auch paarweise Korrelationskoeffizienten (Pearson), um zu untersuchen, ob es Zusammenhänge zwischen den Merkmalen gibt. Notieren Sie hier Ihre Beobachtungen.

[3]:
```
pd.plotting.scatter_matrix(df.loc[:, "Age":], figsize=(10, 10), diagonal="kde")
plt.show()
```




[4]:
```
corr = df.loc[:, "Age":].corr(method='pearson', numeric_only=True)

sns.heatmap(corr, annot=True, cmap='coolwarm', vmin=-1, vmax=1)

plt.title("Korrelationsmatrix")
plt.show()
```




Es bestehen stark positive Korrelation $r \geq 0.8$ zwischen den Merkmalen - `Arm_circum` und `Waist` - `Arm_circum` und `Weight` - `Weight` und `Waist` - `Arm_Length` und `Height`

und eine mittlere Korrelation $0.5 \leq |r| < 0.8$ zwischen den Merkmalen - `Weight` und `Arm_Length` - `Height` und `Leg_Length` - `Leg_Length` und `Arm_Length`

(3) Als Fortsetzung zu Schritt (2): Welche Vermutungen haben Sie, die die beobachtete Korrelation zwischen Alter und Körpergröße sowie zwischen Gewicht und Taillenumfang erklären könnte?

Dass nur eine schwach negative Korrelation zwischen Alter und Körpergröße besteht, deutet darauf hin, dass Kinder, Jugendliche und Heranwachsende nicht Teil des Datensatzes sind.

Die starke Korrelation von Gewicht und Taillenumfang (sowie Armumfang) entspricht der Erwartung.

Sie haben bisher die Schritte einer Explorativen Datenanalyse (EDA) nachvollzogen, in der es darum geht, die Daten kennenzulernen (und ggf. interessante Hypothesen und Fragen zu generieren). Im nächsten Schritt wollen wir mit den Daten etwas erreichen: Wir möchten anhand der Merkmale entscheiden können, ob es sich um eine Frau oder einen Mann handelt (unser Ziel ist also eine binäre Klassifikation). Sobald wir mit einem konkreten Ziel an die Daten herantreten, ändert sich

unser Blick auf die Daten. Wir befinden uns in der *Feature Engineering* (Merkmalsgenerierung) Phase, in der wir nach Eigenschaften suchen, um unser Ziel zu erreichen.

(4) Erzeugen Sie jeweils einen DataFrame für die Datensätze aller Frauen sowie für die Datensätze aller Männer. Untersuchen Sie, ob Sie Merkmale (außer *gender*) in den Daten finden, mit denen Sie zwischen den Geschlechtern unterscheiden können. Nutzen Sie dazu die Mittel der EDA, also Summary Statistics, Box-Plots, und so weiter. Notieren Sie sich vielversprechende Merkmale, die Ihnen die Unterscheidung zwischen den Geschlechtern erlauben könnten.

[5]:
```
df_f: pd.DataFrame = df[df["Gender"] == 0].dropna()
df_m: pd.DataFrame = df[df["Gender"] == 1].dropna()
```

[6]:
```
df_f.describe()
```

[6]:

| | Gender | Age | Weight | Height | Leg_Length | \ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| count | 2526.0 | 2526.000000 | 2526.000000 | 2526.000000 | 2526.000000 | |
| mean | 0.0 | 583.213381 | 75.886382 | 160.982185 | 36.329612 | |
| std | 0.0 | 196.841670 | 19.344734 | 7.164715 | 3.572567 | |
| min | 0.0 | 241.000000 | 32.400000 | 140.000000 | 23.700000 | |
| 25% | 0.0 | 416.250000 | 62.100000 | 156.000000 | 34.100000 | |
| 50% | 0.0 | 576.000000 | 72.400000 | 161.000000 | 36.500000 | |
| 75% | 0.0 | 747.000000 | 86.375000 | 166.000000 | 38.700000 | |
| max | 0.0 | 959.000000 | 190.200000 | 194.000000 | 47.700000 | |

| | Arm_Length | Arm_circum | Waist |
|---|---|---|---|
| count | 2526.000000 | 2526.000000 | 2526.000000 |
| mean | 35.961006 | 32.305859 | 96.645606 |
| std | 2.182163 | 5.371440 | 15.887564 |
| min | 29.500000 | 19.500000 | 59.100000 |
| 25% | 34.500000 | 28.500000 | 84.800000 |
| 50% | 36.000000 | 31.600000 | 95.300000 |
| 75% | 37.400000 | 35.400000 | 107.000000 |
| max | 44.000000 | 55.500000 | 168.400000 |

[7]:
```
df_m.describe()
```

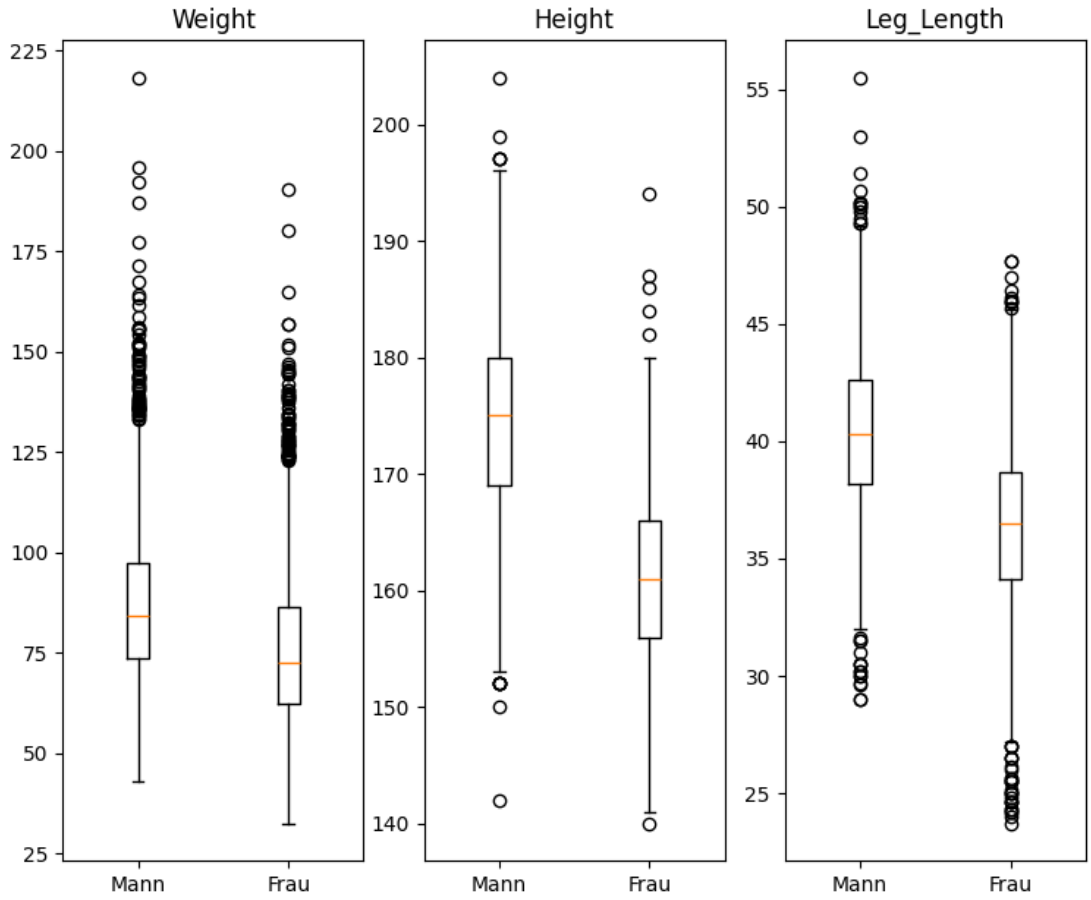
[7]:

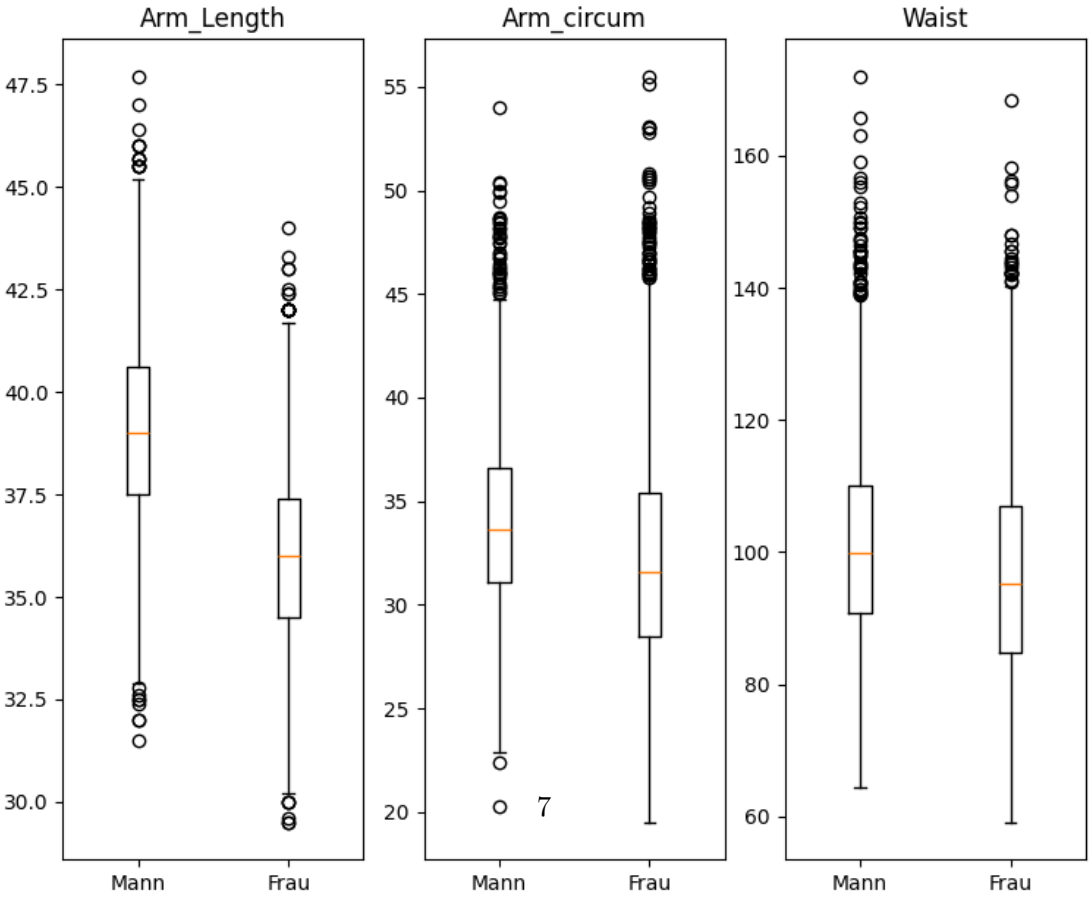
| | Gender | Age | Weight | Height | Leg_Length | \ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| count | 2452.0 | 2452.000000 | 2452.000000 | 2452.000000 | 2452.000000 | |
| mean | 1.0 | 585.944943 | 87.102896 | 174.413540 | 40.387235 | |
| std | 0.0 | 197.574705 | 19.665853 | 7.744141 | 3.394613 | |
| min | 1.0 | 241.000000 | 43.100000 | 142.000000 | 29.000000 | |
| 25% | 1.0 | 419.750000 | 73.475000 | 169.000000 | 38.200000 | |
| 50% | 1.0 | 588.000000 | 84.300000 | 175.000000 | 40.300000 | |
| 75% | 1.0 | 749.000000 | 97.300000 | 180.000000 | 42.600000 | |
| max | 1.0 | 959.000000 | 218.200000 | 204.000000 | 55.500000 | |

| | Arm_Length | Arm_circum | Waist |
|---|---|---|---|
| count | 2452.000000 | 2452.000000 | 2452.000000 |

```
mean     39.043515    34.013825   101.076794
std       2.380436     4.374639    15.460271
min      31.500000    20.300000    64.400000
25%      37.500000    31.100000    90.800000
50%      39.000000    33.600000    99.800000
75%      40.600000    36.600000   110.000000
max      47.700000    54.000000   172.000000
```

[8]:
```python
fig, axs = plt.subplots(2, 3, figsize=(9, 16))

for i, c in enumerate(df.loc[:, "Weight":].columns):
    axs.flat[i].set_title(c)
    axs.flat[i].boxplot([df_m[c], df_f[c]], tick_labels=["Mann", "Frau"])

plt.show()
```


Weight
225
200
175
150
125
100
75
50
25
Mann
Frau
Height
200
190
180
170
160
150
140
Mann
Frau
Leg_Length
55
50
45
40
35
30
25
Mann
Frau

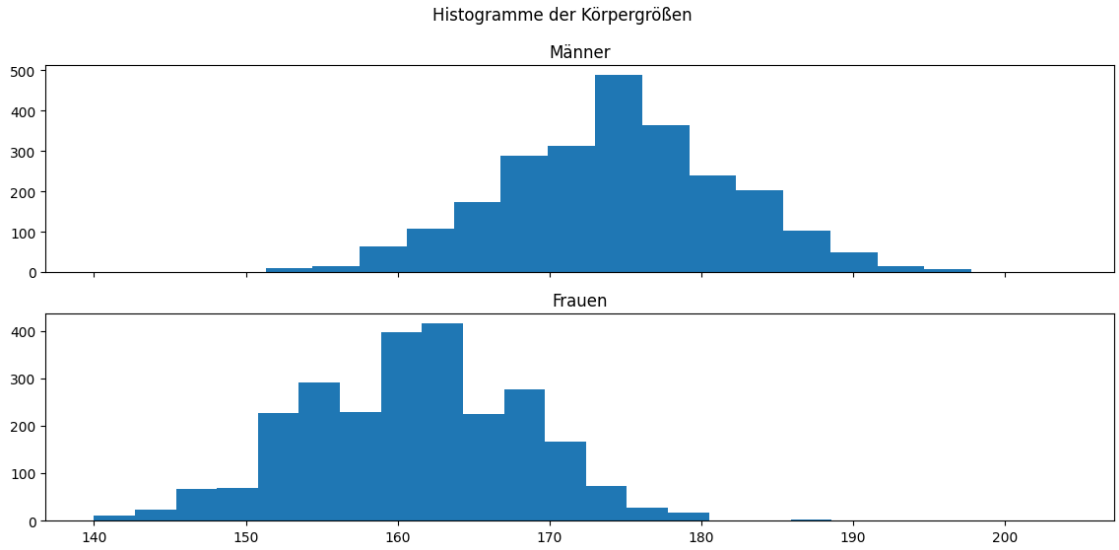

Arm_Length
47.5
45.0
42.5
40.0
37.5
35.0
32.5
30.0
Mann
Frau
Arm_circum
55
50
45
40
35
30
25
20
Mann
Frau
Waist
160
140
120
100
80
60
Mann
Frau

Gut geeignet scheinen `Height`, `Leg_Length` und `Arm_Length` zu sein.

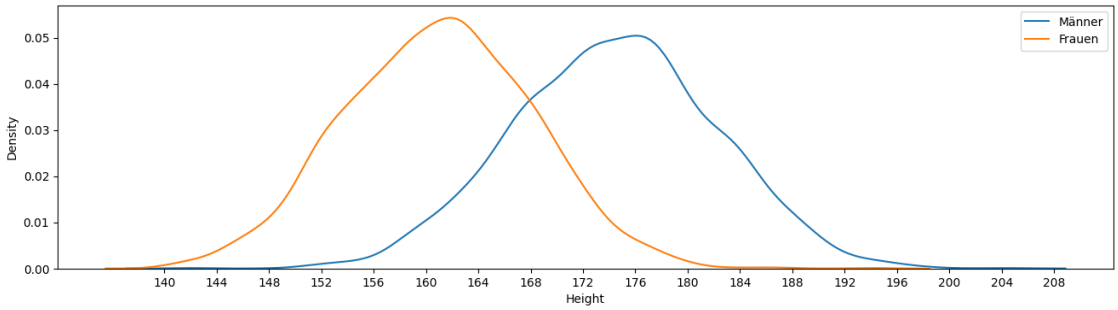
Im nachfolgenden Schritt gebe ich Ihnen ein Merkmal vor, welches Sie sich im Folgenden anschauen werden. Ihre Arbeit in Schritt (4) war aber nicht vergebens. Wir kommen darauf später noch zurück.

(5) Erzeugen Sie ein Histogramm, welches die Verteilung der Körpergrößen von Männern und von Frauen darstellt.

[9]:
```
fig, axs = plt.subplots(2, 1, figsize=(14, 6), sharex=True)

fig.suptitle("Histogramme der Körpergrößen")
axs[0].hist(df_m["Height"], bins=20)
axs[0].set_title("Männer")

axs[1].hist(df_f["Height"], bins=20)
axs[1].set_title("Frauen")
plt.show()
```




[10]:
```
plt.figure(1, (16, 4))
sns.kdeplot(df_m["Height"], label="Männer")
sns.kdeplot(df_f["Height"], label="Frauen")
plt.xticks(np.arange(140, 210, 4))
plt.legend()
plt.show()
```




(6) Wir werden ein einfaches Schwellwert-Modell konstruieren, um zwischen Männern und Frauen zu unterscheiden. Dieser sogenannte Klassifikator wird mithilfe eines Schwellwerts und eines Merkmals entscheiden, ob der Datensatz von einer Frau oder einem Mann stammt. Betrachten Sie die Abbildung aus Schritt (5). Notieren Sie sich hier den Schwellwert, den Sie nutzen würden, um alle Datensätze mit Körpergrößen größer als Ihr Schwellwert als Männer zu klassifizieren.

168cm

Der Schwellwert entscheidet darüber, wie gut oder wie schlecht ihr Klassifikator zwischen Frauen und Männern unterscheiden kann. Wir werden nun untersuchen, welche Genauigkeit unser Klassifikator hat und dabei auch einen Schwellwert finden, der die Genauigkeit des Klassifikators maximiert.

(7) Sie haben in Schritt (5) beobachtet, dass Männer (zumindest in dem von Ihnen untersuchten US-amerikanischen Datensatz) tendenziell etwas größer sind als Frauen. Sei $P$ die Anzahl der Männer und $N$ die Anzahl der Frauen im Datensatz. Bestimmen Sie die Wahr-Positiv-Rate (*True Positive Rate*, TPR) sowie die Falsch-Positiv-Rate (*False Positive Rate*, FPR) für den Schwellwert, für den Sie sich in Schritt (6) entschieden haben. Für die Definition von TPR und FPR schauen Sie bitte in die Vorlesungsfolien. Interpretieren Sie kurz Ihre erhaltenen Werte. (1-2 Sätze).

Das **Precision** (oder auch **Positive Predictive Value**) betrachtet daher nur die Positiven Punkte (und „bestraft“ damit Falsch-Positive).

$$\mathrm{PPV} = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP} + \mathrm{FP}}$$

Der **Recall** (oder auch die **True Positive Rate** oder **Sensitivity**) betrachtet das Verhältnis der Richtig-Positiven zu allen Positiven (und „bestraft“ damit Falsch-Negative).

$$\mathrm{TPR} = \frac{\mathrm{TP}}{P} = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP} + \mathrm{FN}}$$

[11]:
```
def calc_tf_pn(df_p: np.array, df_n: np.array, cutoff: float) -> tuple[int,␣
↪int, int, int]:
    P: int = df_p.size  # Anzahl der Datenpunkte in der vorherzusagenden Klasse␣
↪(Positiv)
```

```
    N: int = df_n.size  # Anzahl der Datenpunkte, die nicht der␣
 ↪vorherzusagenden Klasse entsprechen (Negativ)
    TP: int = df_p[df_p > cutoff].size  # Anzahl der korrekt vorhergesagten␣
 ↪Positiven
    TN: int = df_n[df_n <= cutoff].size # Anzahl der korrekt vorhergesagten␣
 ↪Negativen
    FN: int = df_p[df_p <= cutoff].size # Anzahl der falsch Negativen
    FP: int = df_n[df_n > cutoff].size  # Anzahl der falsch Positiven
    return TP, TN, FN, FP

"""
Errechnet die True Positive Rate (TPR, Recall/Sensitivity) sowie den Positive␣
 ↪Predictive Value (PPV, Precision)
unter der Annahme, dass die positiven Daten P rechts vom Cutoff liegen (also␣
 ↪größer als der Cutoff sind).
"""
def calc_classifier_metrics(df_p: np.array, df_n: np.array, cutoff: float,␣
 ↪output=True) -> tuple[float, float, float, float, float, float]:
    TP, TN, FN, FP = calc_tf_pn(df_p, df_n, cutoff)
    PPV = TP/(TP + FP)  # Positive Predictive Value (Precision)
    TPR = TP/(TP + FN)  # True Positive Rate (Recall/Sensitivity)
    FPR = FP/(TN + FP)  # False Positive Rate

    ACC = (TP + TN)/(TP + TN + FN + FP) # Accuracy
    if PPV+TPR == 0:
        F1 = 0
    else:
        F1 = 2*(PPV*TPR)/(PPV+TPR)      # F1-Score
    J = TPR - FPR                       # Jouden Index

    if output:
        print(f"True PR   TPR = {TPR}")
        print(f"False PR  FPR = {FPR}")
        print(f"Accuracy  ACC = {ACC}")
        print(f"Precision PPV = {PPV}")
        print(f"F1-Score  F_1 = {F1}")
        print(f"Youden I.   J = {J}")

    return TPR, FPR, ACC, PPV, F1, J
```

[12]:
```
calc_classifier_metrics(df_m["Height"].to_numpy(), df_f["Height"].to_numpy(),␣
 ↪168)
```

```
True PR   TPR = 0.7712071778140294
False PR  FPR = 0.1496437054631829
Accuracy  ACC = 0.8113700281237445
Precision PPV = 0.8334067871308947
```

```
F1-Score  F_1 = 0.8011014615547554
Youden I.   J = 0.6215634723508465
```

[12]:
```
(0.7712071778140294,
 0.1496437054631829,
 0.8113700281237445,
 0.8334067871308947,
 0.8011014615547554,
 0.6215634723508465)
```

Eine TPR = 77.12% bedeutet, dass 77.12% aller Männer anhand des Kriteriums der Körpergröße von 168cm richtig erkannt wurden.

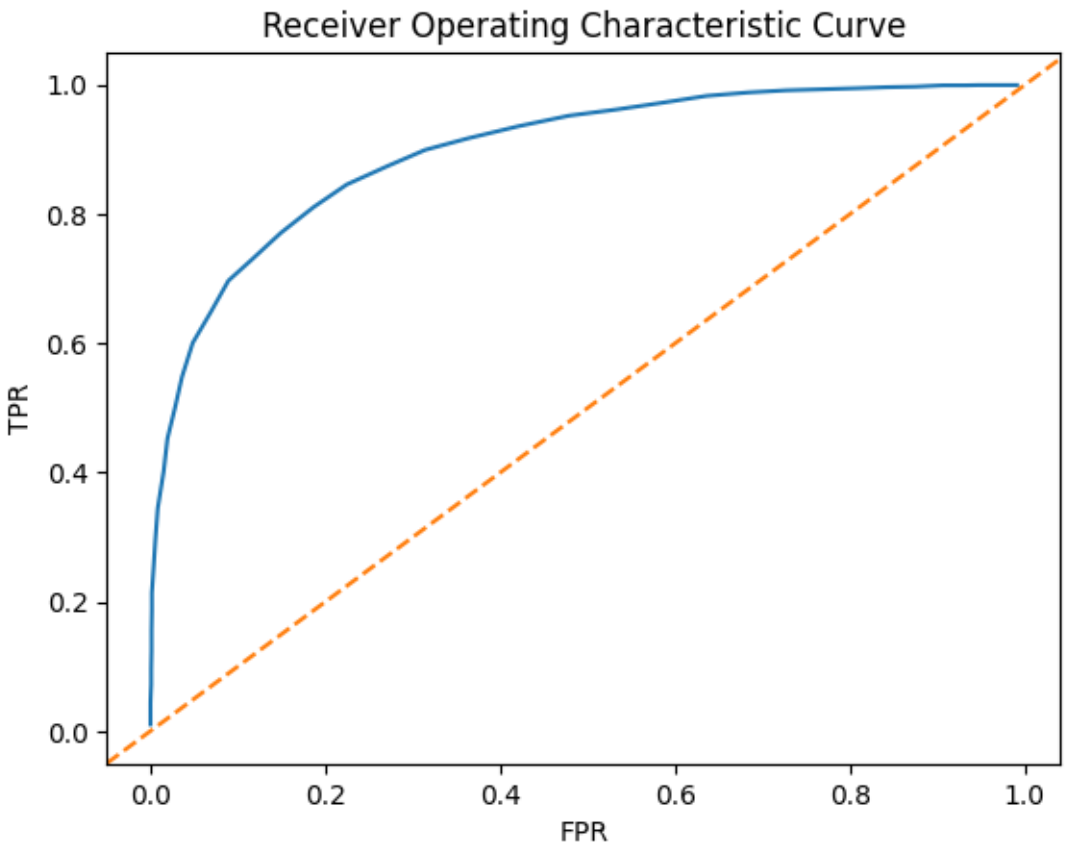
Eine FPR = 14.96% bedeutet, dass mit diesem Kriterium fälschlicherweise auch 14.96% aller Frauen als Männer klassifiziert wurden.

(8) Wir wollen nun untersuchen, wie gut sich die Körpergröße für die Unterscheidung zwischen Männern und Frauen eignet, und welcher Schwellwert hier optimal ist. Dazu werden Sie für eine Menge von Schwellwerten die zugehörigen TPR und FPR-Werte bestimmen. Erstellen Sie zunächst eine Menge von Schwellwerten. Hinweis: Die Daten können Ihnen dabei helfen, Schwellwerte zu definieren.

[13]:
```
schwellwerte: np.ndarray = np.arange(144, 192, 1)
```

(9) Bestimmen Sie TPR und FPR für Ihre Schwellwerte aus Schritt (8). Tragen Sie in einem Plot die TPR-Werte (y-Achse) gegen die FPR-Werte (x-Achse) auf und zeichnen Sie zusätzlich die Raumdiagonale ein. Vergessen Sie nicht, Ihren Plot zu beschriften. Damit haben Sie Ihre *Receiver Operating Characteristic Curve* (ROC) erhalten. Ihre ROC-Kurve wird sich von der Raumdiagonalen unterscheiden. Was bedeutet dies? (1-2 Sätze).

[14]:
```
plt.title("Receiver Operating Characteristic Curve")
roc = []
youdens = []
for s in schwellwerte:
    TPR, FPR, _, _, _, J = calc_classifier_metrics(df_m["Height"].to_numpy(),␣
 ↪df_f["Height"].to_numpy(), s, output=False)
    roc.append([FPR, TPR])
    youdens.append(J)

roc = np.array(roc)
plt.plot(roc[:, 0], roc[:, 1])
plt.xlabel("FPR")
plt.ylabel("TPR")
plt.axline((0, 0), slope=1, c="C1", linestyle="--")
plt.show()
```




Die Raumdiagonale entspricht einem Zufallsprädiktor und ein solcher Verlauf der ROC Kurve würde anzeigen, dass wir eine nicht-trennbare Verteilung vorliegen hätten.

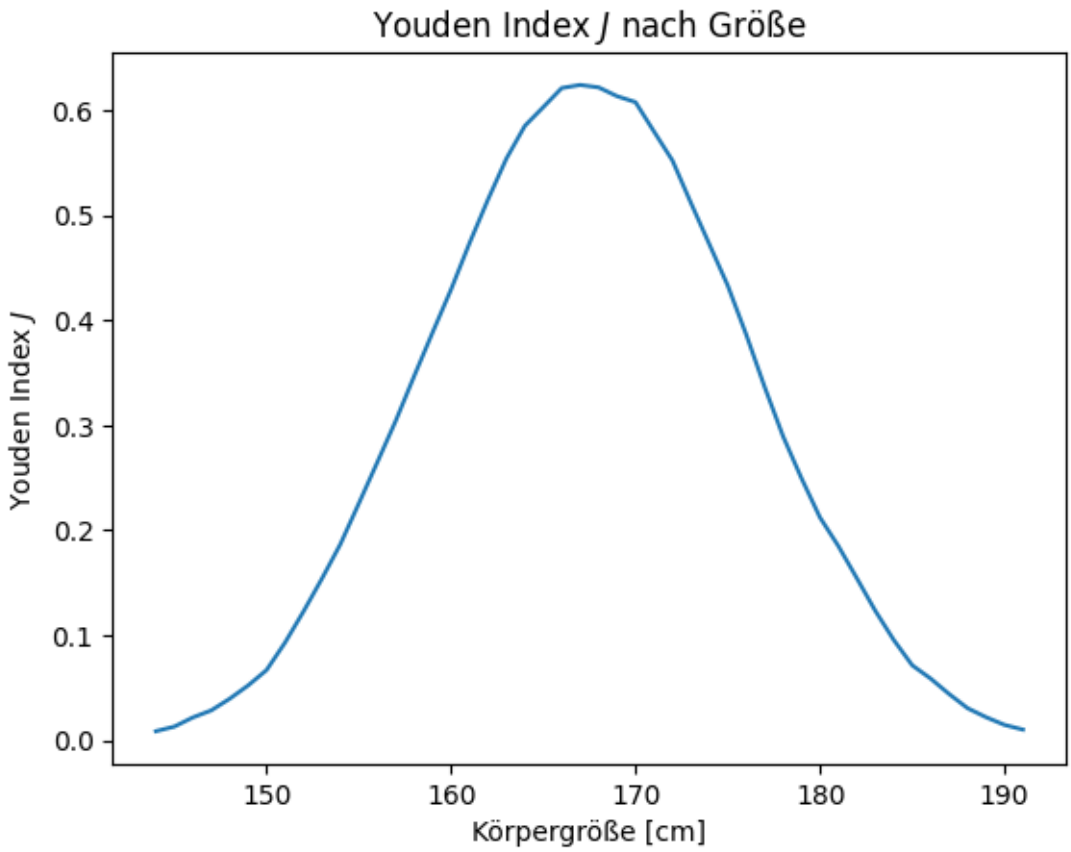
(10) Schlagen Sie den Youden-Index in der Vorlesung nach und bestimmen Sie damit den optimalen Schwellwert zur Unterscheidung zwischen Frauen und Männern mithilfe der Körpergröße. Vergleichen Sie den erhaltenen Wert mit dem Wert, den Sie in Schritt (6) erhalten haben. (1-2 Sätze)

Der Youden Index $J$ mit

$$J = \text{TPR} - \text{FPR}$$

wird an dem Punkt, welcher die größte Distanz zur Raumdiagonalen hat, maximal.

[15]:
```
plt.title("Youden Index $J$ nach Größe")
plt.plot(schwellwerte, youdens)
plt.ylabel("Youden Index $J$")
plt.xlabel("Körpergröße [cm]")
plt.show()
```




[16]:
```
schwellwerte[np.argmax(youdens)]
```

[16]:
```
np.int64(167)
```

Der Optimale Wert liegt bei $\theta = 167$cm, was sehr nach an meiner Schätzung von 168cm liegt.

(11) Wir werden nun die ROC-Kurve durch eine skalare Größe charakterisieren, der *Area Under the Curve* (AUC). Nutzen Sie die Sehnentrapezregel, um die Fläche unter Ihrer ROC-Kurve zu bestimmen und geben Sie den Wert der AUC aus.

- Bevor Sie die AUC bestimmen, stellen Sie sicher, dass die TPR und FPR Werte in der richtigen Reihenfolge vorliegen (Dies kann Ihnen dabei helfen).
- Welchen AUC-Wert würden Sie für einen Zufallsklassifikator (Zufallsprädiktor) erhalten?

[17]:
```
def calc_AUC(roc: np.ndarray) -> float:
    roc = np.flipud(roc)
    auc: float = 0.0
    for i in range(len(roc)-1):
        auc += (roc[i+1, 0] - roc[i, 0]) * (roc[i, 1] + roc[i+1, 1]) / 2
    return auc
```

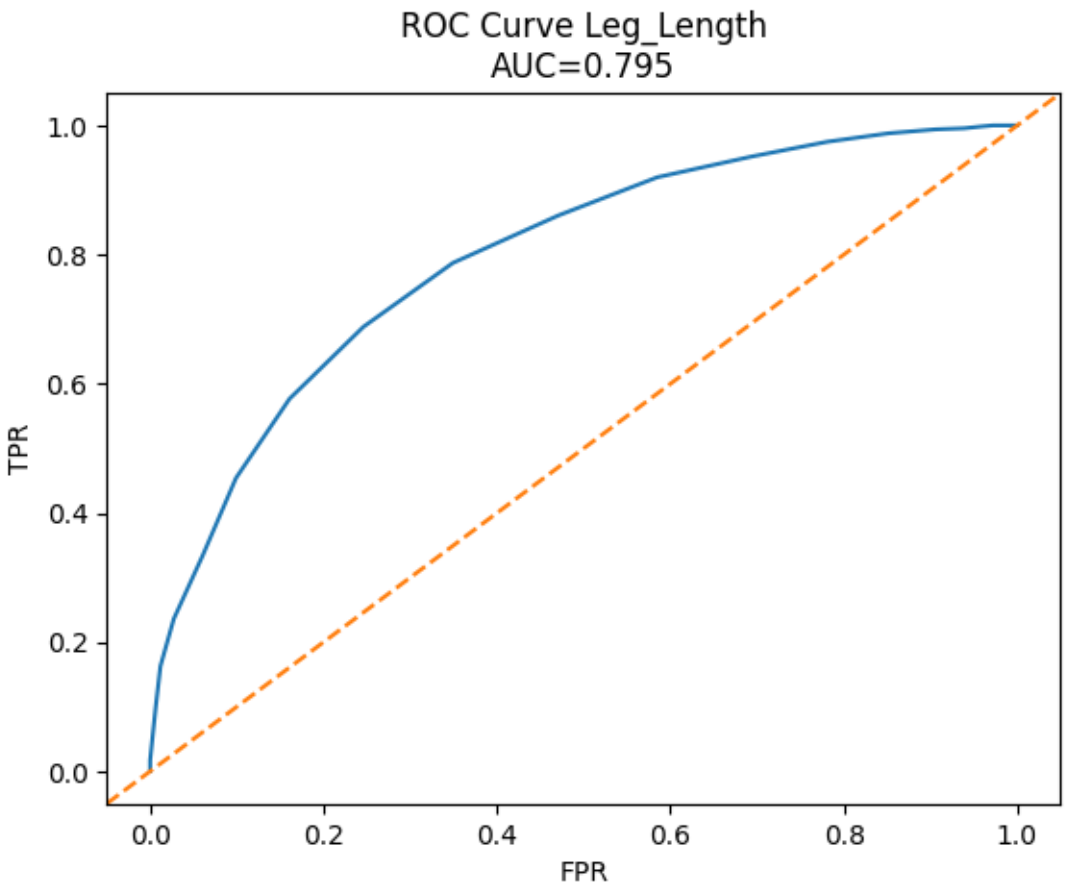
```
# oder mit np.trapezoid:
def calc_AUC(roc: np.ndarray) -> float:
    roc = np.flipud(roc)
    return np.trapezoid(y=roc[:, 1], x=roc[:, 0], dx=1/roc[:, 1].shape[0])

calc_AUC(roc)
```

[17]: `np.float64(0.8887302074735961)`

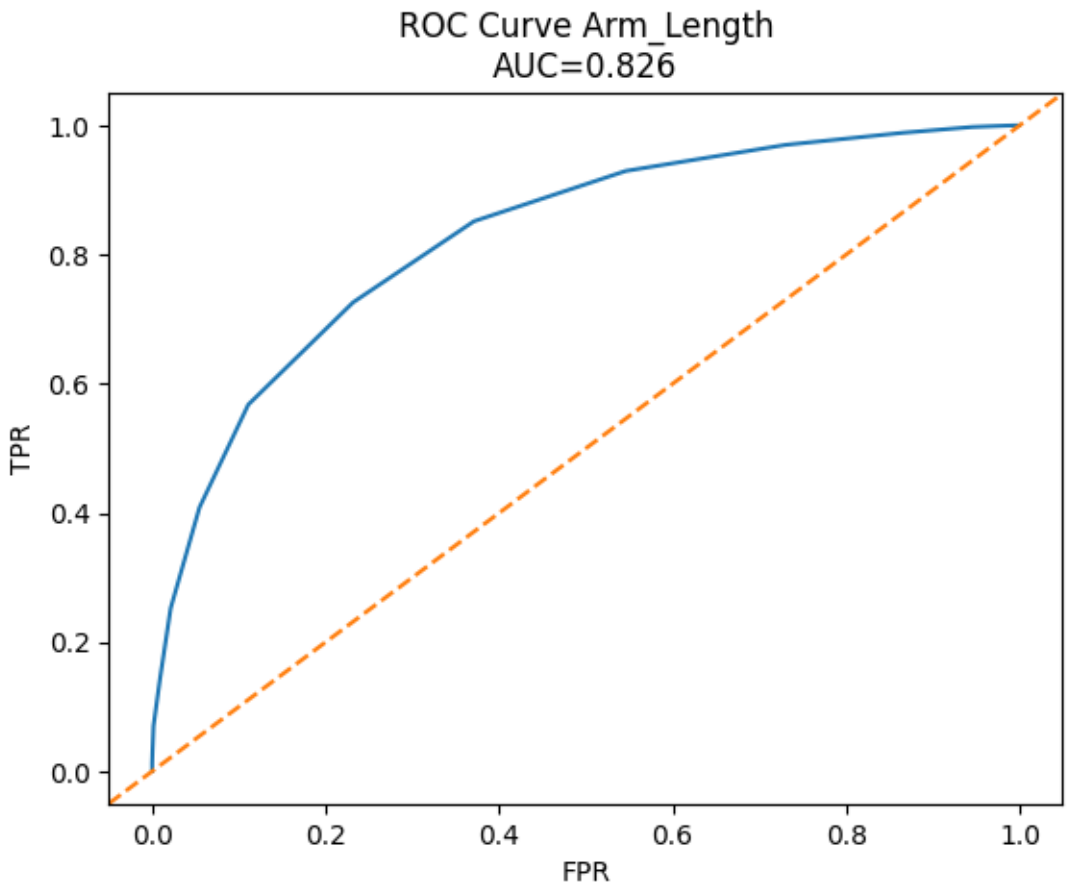
Ein Zufallsklassifikator würde eine AUC von 0.5 liefern, während eine perfekter Prädikator/Klassifikator eine AUC von 1.0 liefern würde.

(12) [Optional] Sie haben in Schritt (4) verschiedene Merkmale notiert, mithilfe derer Sie vermuteten, dass Sie Frauen und Männer voneinander unterscheiden könnten. Wählen Sie aus Schritt (4) ein oder zwei Merkmale heraus, die *nicht* der Körpergröße entsprechen. Bestimmen Sie für diese Merkmale die AUC. Sind Ihre Merkmale besser oder schlechter geeignet, um zwischen Männern und Frauen zu unterscheiden?

[18]:
```
for merkmal in ["Leg_Length", "Arm_Length"]:
    schwellwerte: np.ndarray = np.arange(df[merkmal].min(), df[merkmal].max(),␣
 ↪1)

    roc = []
    for s in schwellwerte:
        TPR, FPR, _, _, _, _ = calc_classifier_metrics(df_m[merkmal].
 ↪to_numpy(), df_f[merkmal].to_numpy(), s, output=False)
        roc.append([FPR, TPR])

    roc = np.array(roc)
    plt.plot(roc[:, 0], roc[:, 1])
    plt.xlabel("FPR")
    plt.ylabel("TPR")
    plt.axline((0, 0), slope=1, c="C1", linestyle="--")
    plt.title(f"ROC Curve {merkmal}\nAUC={calc_AUC(roc):.3f}")
    plt.show()
    print(f"Ein Klassifikator mit dem Merkmal {merkmal} liefert ein AUC =␣
 ↪{calc_AUC(roc)}")
```




Ein Klassifikator mit dem Merkmal Leg_Length liefert ein AUC = 0.7948405102432259




```
Ein Klassifikator mit dem Merkmal Arm_Length liefert ein AUC =
0.8261527100213247
```

[19]:
```python
print("Ein Klassifikator mit dem Merkmal")
for merkmal in df.loc[:, "Weight":].columns:
    schwellwerte: np.ndarray = np.arange(df[merkmal].min() + 2, df[merkmal].
 ↪max() -2, 1)
    roc = []
    for s in schwellwerte:
        try:
            TPR, FPR, _, _, _, _ = calc_classifier_metrics(df_m[merkmal].
 ↪to_numpy(), df_f[merkmal].to_numpy(), s, output=False)
            roc.append([FPR, TPR])
        except ZeroDivisionError:
            continue

    roc = np.array(roc)
    print(f"  - {merkmal:11s} liefert ein AUC von {calc_AUC(roc):.3f}")
```

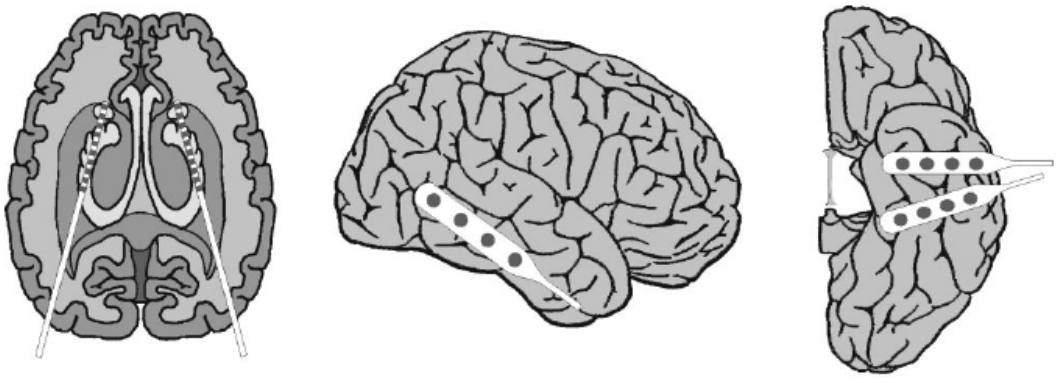
```
Ein Klassifikator mit dem Merkmal
  - Weight      liefert ein AUC von 0.675
  - Height      liefert ein AUC von 0.893
  - Leg_Length  liefert ein AUC von 0.788
  - Arm_Length  liefert ein AUC von 0.811
  - Arm_circum  liefert ein AUC von 0.612
  - Waist       liefert ein AUC von 0.583
```

Somit scheint `Height` das beste Merkmal zur Unterscheidung von Mann und Frau zu sein, gefolgt von `Arm_Length` und `Leg_Length`.

### 1.0.3 11.2 Detektion epileptischer Anfälle (Feature Engineering, ROC, AUC)

1% der Weltbevölkerung leidet unter epileptischen Anfällen. Etwa 25% aller Patienten können mithilfe von Antikonvulsiva die Häufigkeit ihrer epileptischen Anfälle nicht zufriedenstellend senken. Für solche Patienten, wenn sie unter einem besonders hohen Leidensdruck stehen, werden epilepsiechirurgische Eingriffe angedacht, in Rahmen derer Teile des Gehirns entfernt werden, um Anfallsfreiheit zu erreichen. Nur wenige Kliniken führen solche Eingriffe durch. In diesem Zusammenhang zählt die Klinik für Epileptologie Bonn zu einem der wichtigsten europäischen Zentren. Diese Klinik hat auch im Jahr 2001 einen der ersten, öffentlich frei zugänglichen Datensätze geschaffen (den "Bonn Datensatz"), die wir im Rahmen dieser Übung untersuchen werden.

Bevor Patienten Teile des Gehirns operativ entfernt werden, wird untersucht - sehr vereinfacht gesprochen - wo im Gehirn welche Funktionen (beispielsweise Sprache, Muskelsteuerung und so weiter) implementiert sind und in welcher Region (je nach Epilepsietyp) epileptische Anfälle im Gehirn entstehen. Dazu werden den Patienten die Schädeldecke geöffnet, und es werden Elektroden implantiert, um ein sogenanntes intrakranielles EEG aufzuzeichnen. Nachfolgend finden Sie das Implantationsschema für die Daten, die Sie untersuchen werden:



Die linke Abbildung zeigt sogenannte Tiefenelektroden (Stabelektroden), die die Gehirndynamik des Hippocampus erfassen. Der Hippocampus ist Teil des limbischen Systems, das zum Beispiel Emotionen verarbeitet aber auch wichtig für die Gedächtnisbildung ist. Sogenannte Streifenelektroden erfassen die Hirndynamik an lateralen (mittlere Abbildung) und basalen (rechte Abbildung) Stellen des Neokortex. Das Paper von Andrzejak et al, das die Daten beschreibt, finden Sie hier - nur für den Fall, dass Sie neugierig sind (Andrzejak et al (2001). Indications of nonlinear deterministic and finite dimensional structures in time series of brain electrical activity: Dependence on

recording region and brain state, Phys. Rev. E, 64, 061907).

Ein Fernziel aktueller Forschung ist es, Methoden zu entwickeln, um epileptische Anfälle zuverlässig vorherzusagen, um damit die Patienten vor dem Auftreten ihrer Anfälle zu warnen. Die kleine Schwester dieser Forschungsrichtung ist die "Anfallsdetektion", also die zuverlässige Detektion mithilfe von EEG-Aufzeichnungen. Eine zuverlässige Anfallsdetektion wird als wichtiger Zwischenschritt hin zur Anfallsvorhersage erachtet.

**Ihre Daten** * Sie finden die Daten, die Sie für diese Übung benötigen, hier (Datensatz 1) und hier (Datensatz 2).

Daten D und E stammen aus dem "Bonn Datensatz". Datensatz D enthält 100 Zeitreihen von 5 Patienten, die während einer anfallsfreien Phase aufgezeichnet wurden. Datensatz E enthält 100 Zeitreihen von denselben Patienten, die während eines epileptischen Anfalls aufgezeichnet wurden. Alle Zeitreihen wurden mit einer Abtastrate von $f = 173.61$ Hz erfasst.

[20]:
```
#!wget https://data.bialonski.de/ds/bonn_epi_dataset_D.bz2
#!wget https://data.bialonski.de/ds/bonn_epi_dataset_E.bz2
```

**Ihre Aufgaben**

Unser Ziel ist es, ein Merkmal (Feature) zu finden, mit dem wir die Zeitreihen der Anfälle (Daten E) von den "anfallsfreien" Zeitreihen (Daten D) unterscheiden können. Dies ist ein binäres Klassifikationsproblem. Wir gehen dabei ganz ähnlich wie in Aufgabe 11.1 vor.

(1) Importieren Sie die Daten und machen Sie sich mit Ihnen vertraut:

- Was sind die Spalten, was sind die Zeilen der DataFrames, die Sie importiert haben?
- Visualisieren Sie beispielhafte Zeitreihen aus den beiden Datensätzen.

[21]:
```
df_D: pd.DataFrame = pd.read_csv("bonn_epi_dataset_D.bz2", index_col=0)
df_E: pd.DataFrame = pd.read_csv("bonn_epi_dataset_E.bz2", index_col=0)
df_D
```

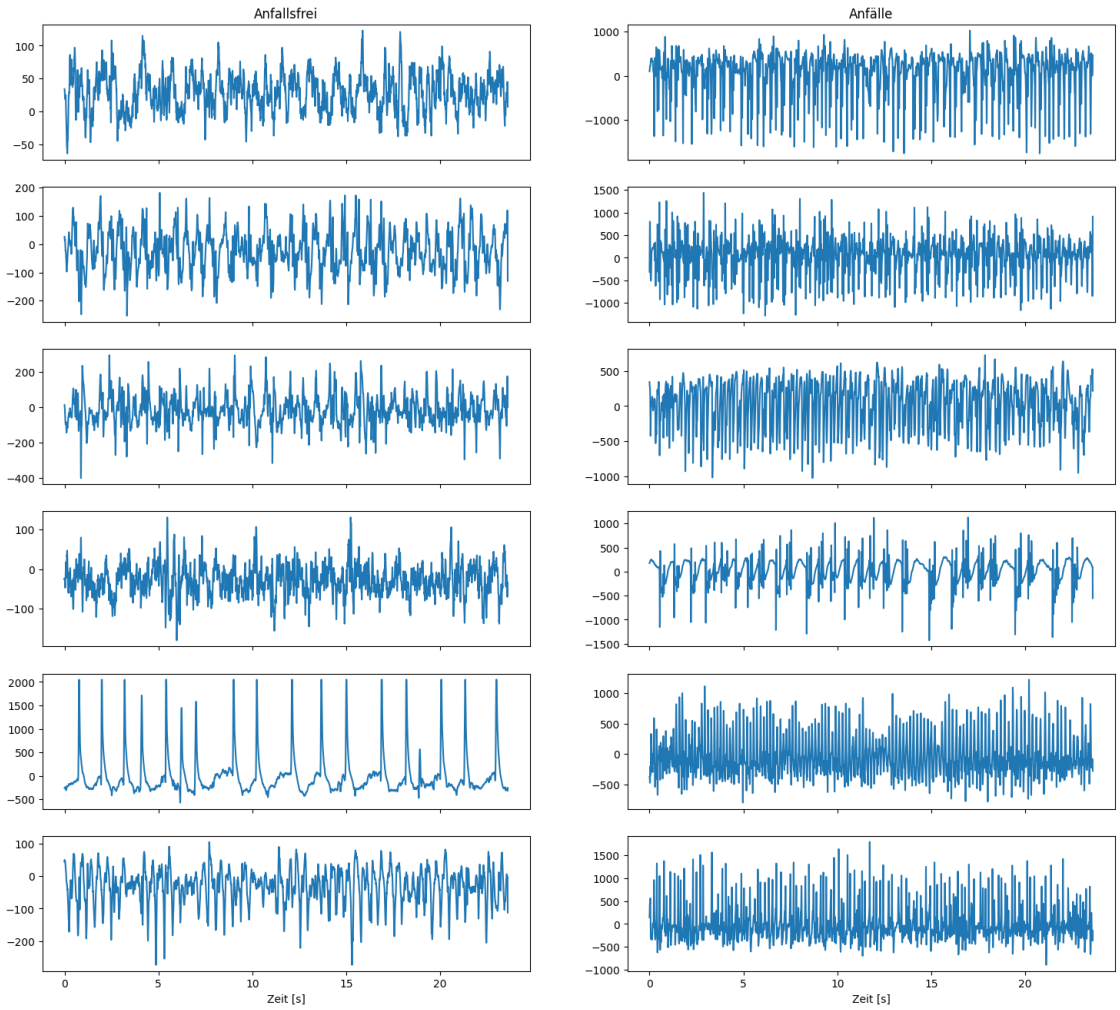
[21]:

| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | … | 91 | 92 | 93 | 94 | 95 | \ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 34 | 60 | 26 | -41 | 13 | -15 | -24 | 23 | -263 | 59 | … | 99 | -131 | 1 | -41 | -39 | |
| 1 | 33 | 47 | 16 | -42 | 6 | -2 | -27 | 17 | -263 | 52 | … | 114 | -153 | -4 | -41 | -27 | |
| 2 | 28 | 38 | 13 | -48 | -1 | 0 | -23 | 10 | -261 | 51 | … | 122 | -177 | -6 | -48 | -16 | |
| 3 | 22 | 29 | 12 | -48 | -13 | 2 | -28 | 10 | -258 | 46 | … | 132 | -194 | -15 | -48 | -3 | |
| 4 | 21 | 28 | 17 | -48 | -29 | -2 | -34 | 7 | -258 | 43 | … | 151 | -204 | -8 | -44 | 17 | |
| … | .. | … | … | .. | … | .. | .. | .. | … | … | … | … | … | .. | .. | .. | |
| 4092 | 40 | 209 | 113 | -23 | 167 | -52 | -70 | 34 | -314 | 109 | … | 55 | -38 | -25 | 16 | -30 | |
| 4093 | 45 | 177 | 119 | -28 | 175 | -53 | -67 | 42 | -319 | 110 | … | 75 | -37 | -13 | 19 | -22 | |
| 4094 | 39 | 149 | 114 | -30 | 161 | -44 | -57 | 41 | -316 | 109 | … | 84 | -41 | -12 | 16 | -34 | |
| 4095 | 41 | 126 | 99 | -23 | 129 | -42 | -33 | 39 | -316 | 104 | … | 83 | -46 | -10 | 12 | -39 | |
| 4096 | 7 | 42 | -130 | -13 | 1 | -25 | -52 | -55 | -254 | -57 | … | 54 | -15 | 22 | -8 | -56 | |

| | 96 | 97 | 98 | 99 | 100 |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 45 | 75 | 67 | 5 | -45 |
| 1 | 52 | 72 | 86 | 2 | -53 |
| 2 | 79 | 72 | 99 | -6 | -51 |

```
3     117   80  109  -4  -52
4     146   81  115  -9  -54
…     …   …   …   ..   …
4092   -9  -46   18  31  -24
4093    0  -56   16  39  -22
4094   18  -40   17  36  -26
4095   28  -43   10  36  -14
4096   35  106   26  -5  -28

[4097 rows x 100 columns]
```

[22]:
```
fig, axs = plt.subplots(6, 2, figsize=(18, 16), sharex=True)
for y in range(6):
    axs[y, 0].plot(df_D.index / 173.61, df_D.iloc[:, y*2])
    axs[y, 1].plot(df_E.index / 173.61, df_E.iloc[:, y*2])

axs[0, 0].set_title("Anfallsfrei")
axs[0, 1].set_title("Anfälle")
axs[5, 0].set_xlabel("Zeit [s]")
axs[5, 1].set_xlabel("Zeit [s]")
plt.show()
```



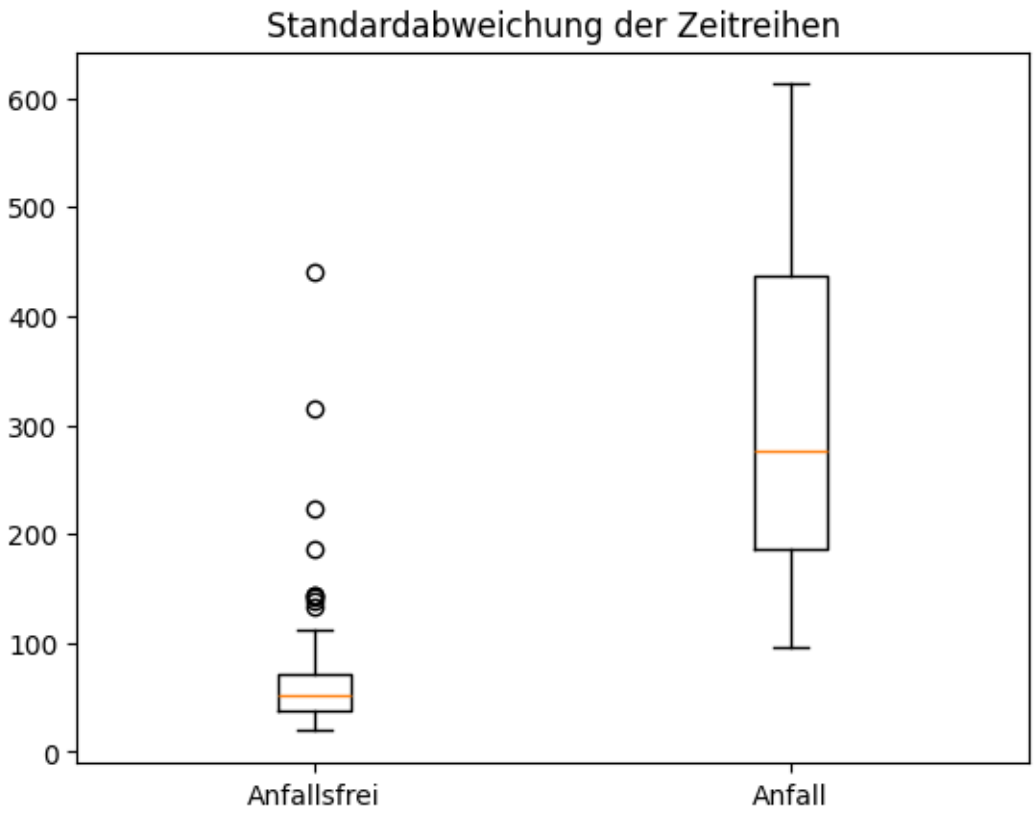

(2) Normieren Sie alle Zeitreihen, sodass jede Zeitreihe den Mittelwert 0 aufweist. Auf diesen Daten werden Sie von nun an weiterarbeiten.

[23]:
```
df_D = df_D - df_D.mean()
df_E = df_E - df_E.mean()
```

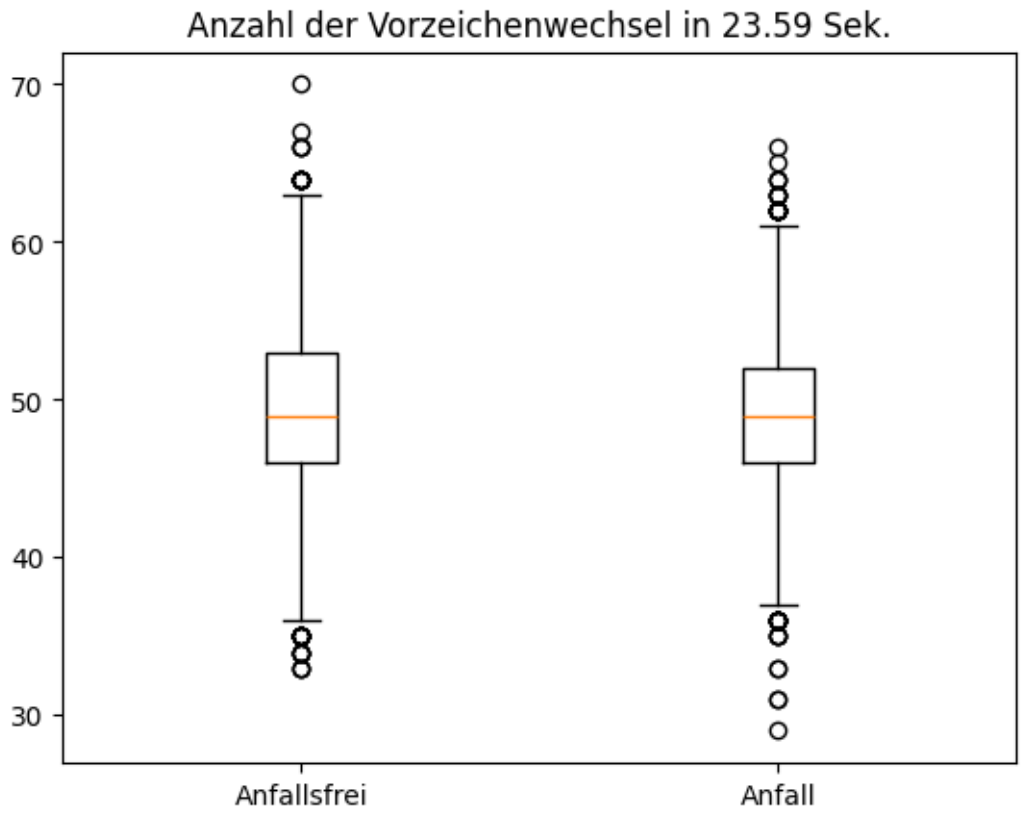
(3) Willkommen im Feature Engineering: Untersuchen Sie mit Mitteln der Explorativen Analyse (EDA), mit welchen Merkmalen sich die beiden Datensätze voneinander gut unterscheiden lassen. Entscheiden Sie sich am Ende für ein Merkmal, mit dem Sie fortfahren wollen.

- Nutzen Sie Boxplots für eine schnelle Einschätzung, ob sich die Verteilung eines Merkmals für Datensatz D von der Verteilung desselben Merkmals für Datensatz E unterscheidet.
- Tipp: Probieren Sie mehrere Ideen aus aber halten Sie es einfach.

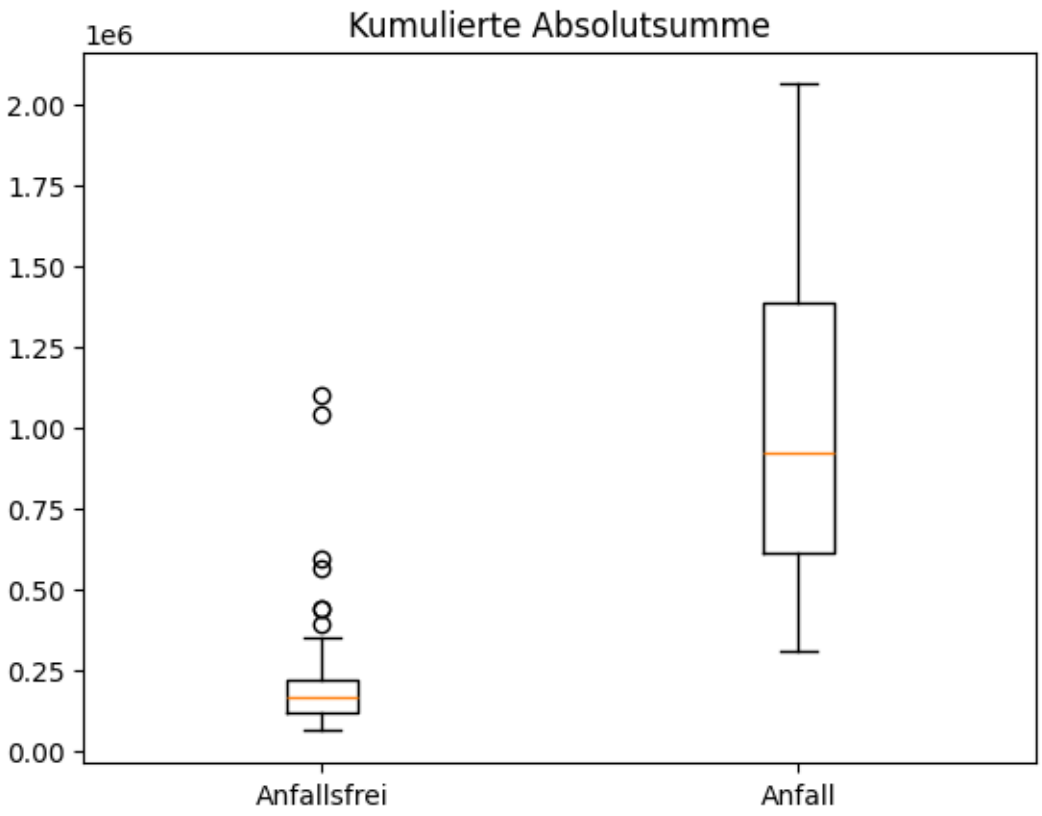
[24]:
```
plt.title("Standardabweichung der Zeitreihen")
plt.boxplot([df_D.std(), df_E.std()], tick_labels=["Anfallsfrei", "Anfall"])
plt.show()
```



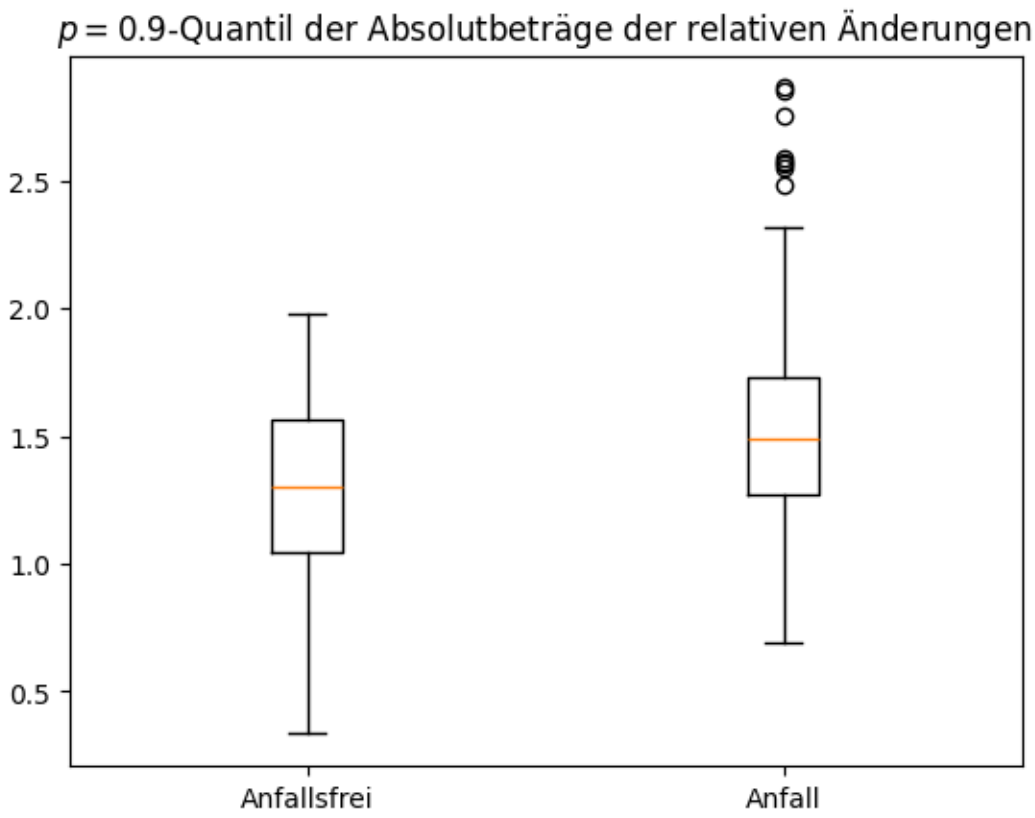

[25]:
```
plt.title(f"Anzahl der Vorzeichenwechsel in {4096/173.61:.2f} Sek.")
def vzw(x: pd.Series) -> float:
    count = 0
    for i in range(len(x) - 1):
        if (x.iloc[i] < 0 < x.iloc[i + 1]) or (x.iloc[i] > 0 > x.iloc[i + 1]):
            count += 1
    return count

plt.boxplot([df_D.agg(vzw, axis="columns"), df_E.agg(vzw, axis="columns")],␣
 ↪tick_labels=["Anfallsfrei", "Anfall"])
plt.show()
```



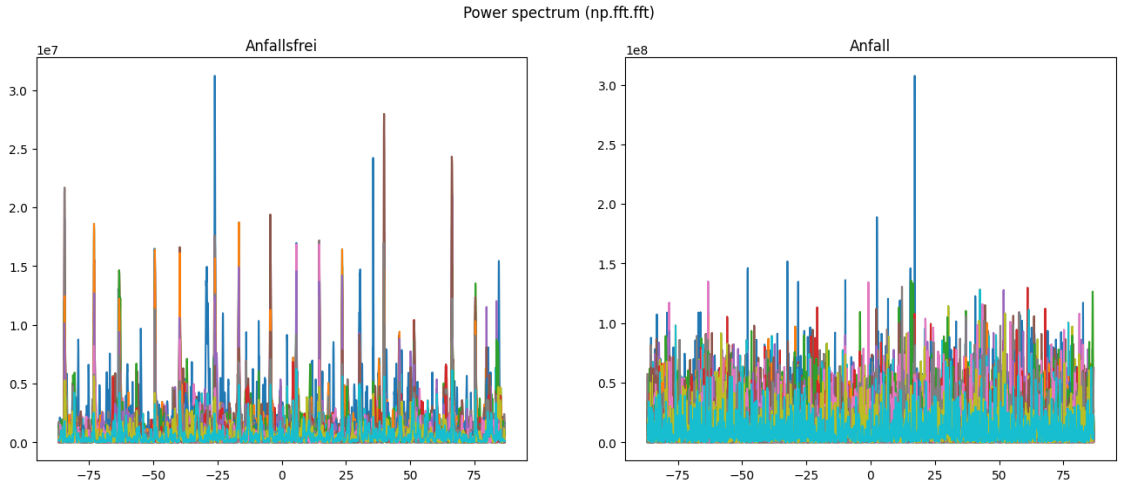

[26]:
```
plt.title(f"Kumulierte Absolutsumme")
plt.boxplot([df_D.abs().sum(), df_E.abs().sum()], tick_labels=["Anfallsfrei",␣
↪"Anfall"])
plt.show()
```



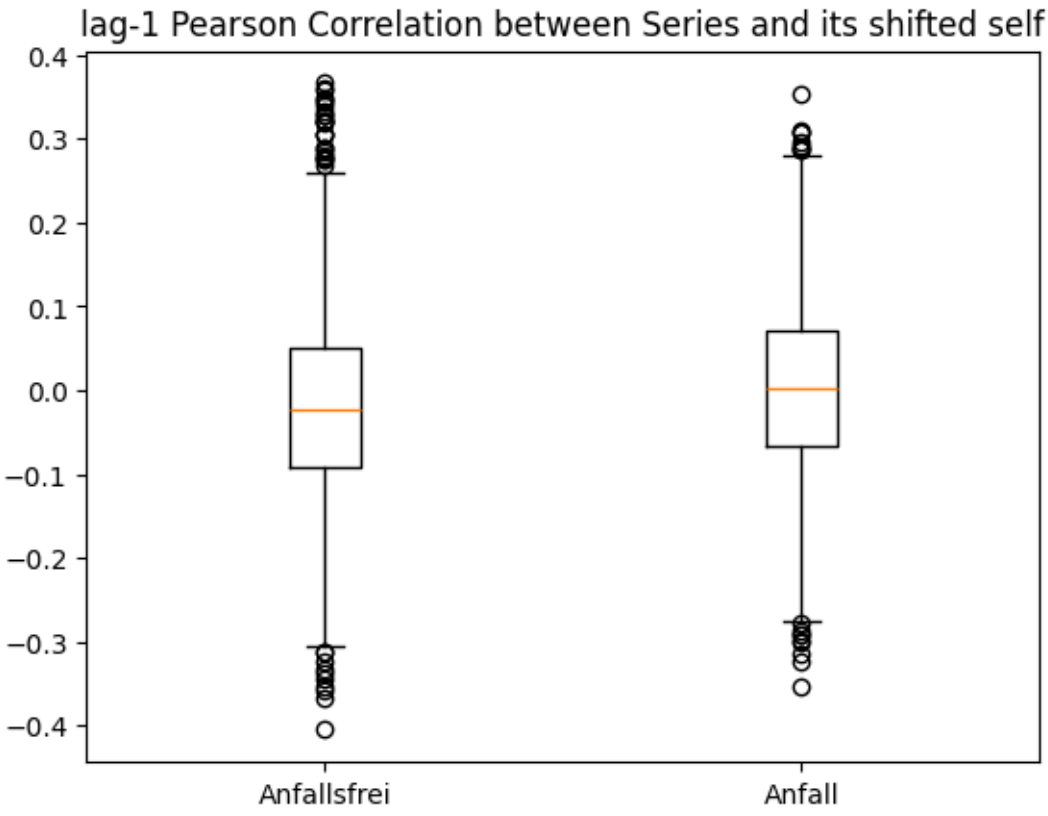

[27]:
```
plt.title(f"$p=0.9$-Quantil der Absolutbeträge der relativen Änderungen")
plt.boxplot([df_D.pct_change().abs().quantile(0.9), df_E.pct_change().abs().
  ↪quantile(0.9)], tick_labels=["Anfallsfrei", "Anfall"])
plt.show()
```




[28]:
```
freqs = np.fft.fftfreq(4096, 1/173.61)
idx = np.argsort(freqs)

ps_D = np.abs(np.fft.fft(df_D)) ** 2
ps_E = np.abs(np.fft.fft(df_E)) ** 2

fig, axs = plt.subplots(1, 2, figsize=(16, 6))

axs[0].plot(freqs[idx], ps_D[idx])
axs[0].set_title("Anfallsfrei")
axs[1].plot(freqs[idx], ps_E[idx])
axs[1].set_title("Anfall")

fig.suptitle('Power spectrum (np.fft.fft)')
plt.show()
```

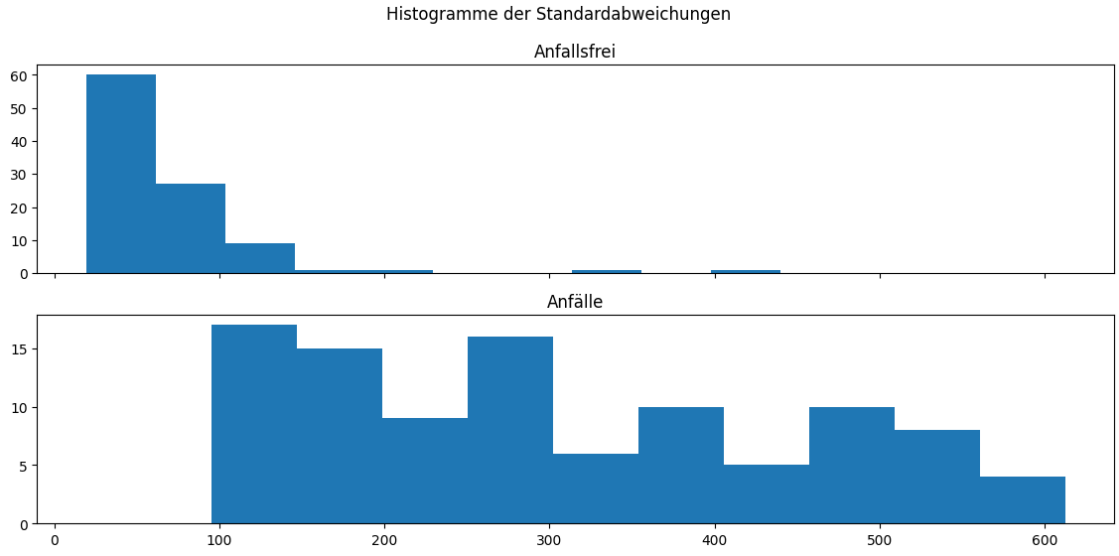



[29]:
```
plt.title("lag-1 Pearson Correlation between Series and its shifted self")
plt.boxplot([df_D.agg(pd.Series.autocorr, axis="columns"), df_E.agg(pd.Series.
  ↪autocorr, axis="columns")], tick_labels=["Anfallsfrei", "Anfall"])
plt.show()
```

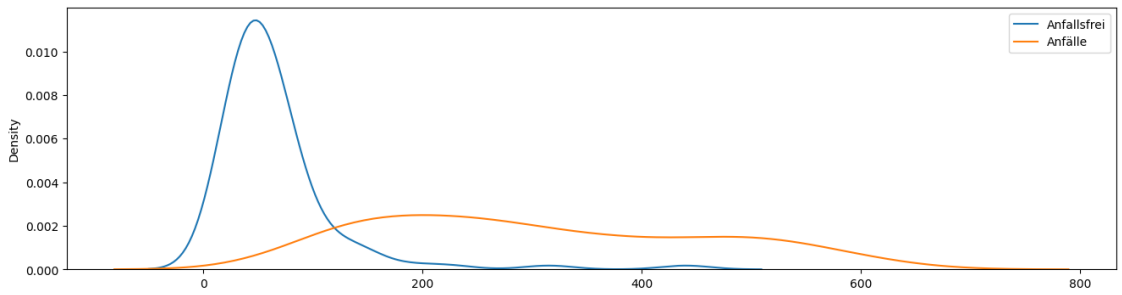


(4) Visualisieren Sie in einem Histogramm die beiden Verteilungen des Merkmals, für das Sie sich in Schritt 3 entschieden haben.

[30]:
```
fig, axs = plt.subplots(2, 1, figsize=(14, 6), sharex=True)

fig.suptitle("Histogramme der Standardabweichungen")
axs[0].hist(df_D.std())
axs[0].set_title("Anfallsfrei")

axs[1].hist(df_E.std())
axs[1].set_title("Anfälle")
plt.show()
```

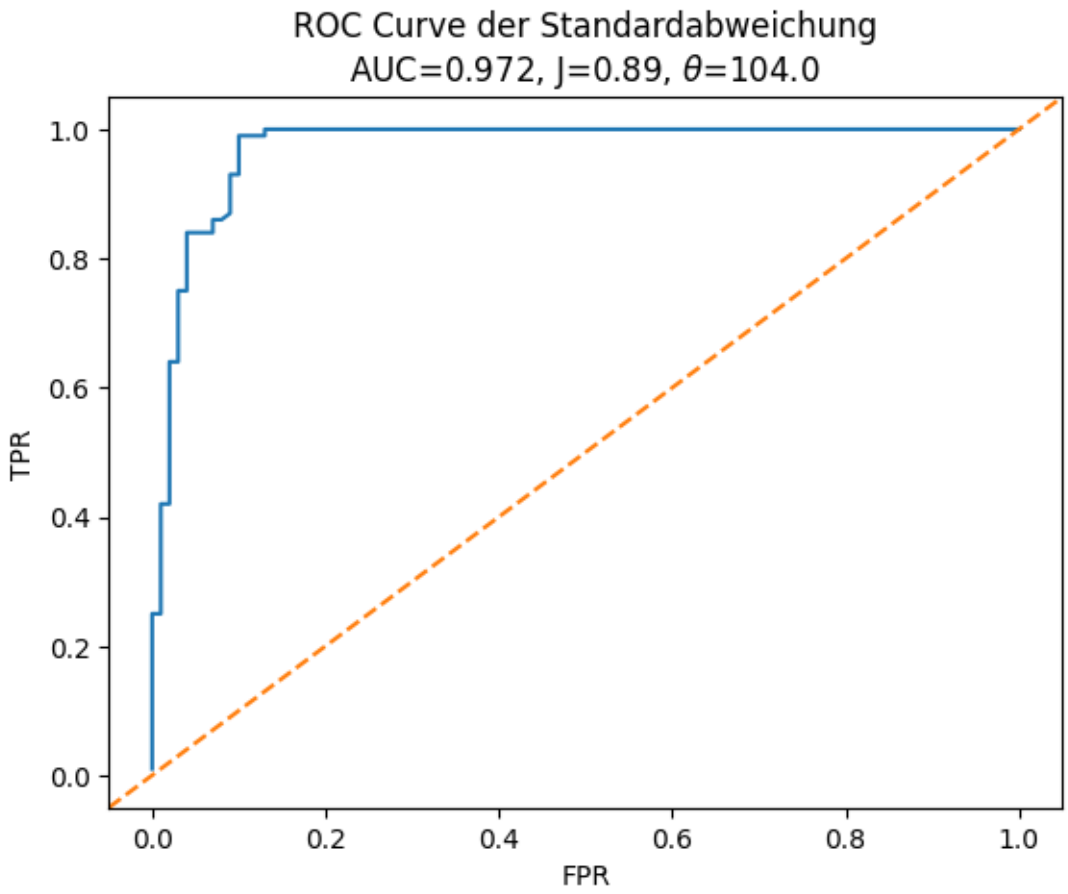



[31]:
```
plt.figure(1, (16, 4))
sns.kdeplot(df_D.std(), label="Anfallsfrei")
sns.kdeplot(df_E.std(), label="Anfälle")
plt.legend()
plt.show()
```



(5) Visualisieren Sie die ROC-Kurve für Ihr Merkmal. Erstellen Sie zunächst eine Liste mit Schwellwerten, die Sie ausprobieren wollen. Nutzen Sie dann Ihren Code aus Aufgabe 11.1, um die ROC-Kurve zu erzeugen und zu visualisieren. Ermitteln Sie mithilfe des Youden-Index den optimalen Schwellwert für Ihr Klassifikationsproblem.

[32]:
```
schwellwerte: np.ndarray = np.arange(-50, 600, 1)

roc = []
youdens = []
for s in schwellwerte:
    TPR, FPR, _, _, _, J = calc_classifier_metrics(df_E.std().to_numpy(), df_D.
 ↪std().to_numpy(), s, output=False)
    roc.append([FPR, TPR])
    youdens.append(J)

roc = np.array(roc)
plt.plot(roc[:, 0], roc[:, 1])
plt.xlabel("FPR")
plt.ylabel("TPR")
plt.axline((0, 0), slope=1, c="C1", linestyle="--")
phi_tilde_idx = np.argmax(youdens)
plt.title(f"ROC Curve der Standardabweichung\nAUC={calc_AUC(roc):.3f},␣
 ↪J={youdens[phi_tilde_idx]:.2f}, $\\theta$={schwellwerte[phi_tilde_idx]:.1f}")
plt.show()

print(f"Ein Klassifikator mit der Standardabweichung liefert ein AUC =␣
 ↪{calc_AUC(roc)}")
print(f"Der optimale Schwellenwert liegt dafür bei␣
 ↪{schwellwerte[phi_tilde_idx]} mit J = {youdens[phi_tilde_idx]}")
```




```
Ein Klassifikator mit der Standardabweichung liefert ein AUC =
0.9720500000000001
Der optimale Schwellenwert liegt dafür bei 104 mit J = 0.89
```

(6) Ermitteln Sie die AUC für das von Ihnen gewählte Merkmal und geben Sie sie an.

$$\text{AUC} = 0.972$$

Damit darf ich Ihnen gratulieren. Sie haben soeben einen Klassifikator erzeugt, der anzeigt, ob wir es mit einem epileptischen Anfall zu tun haben oder nicht. Daneben haben Sie die Qualität des Klassifikators und der Merkmale mithilfe der AUC bewertet.

(7) [Optional] Diese Aufgabe richtet sich nur an die Tüftler und Bastler unter Ihnen, die schon alle anderen Aufgaben dieser Übung gelöst haben und noch Lust und Zeit auf weitere Analysen haben. Ihre Aufgabe ist wie folgt: Ermitteln Sie die AUC für Features, die der Gesamtpower in den EEG-Frequenzbändern Delta (0-4 Hz), Theta (4-8 Hz), Alpha (8-12 Hz), Beta (12-30 Hz) und Gamma (30-45 Hz) entsprechen. Wie bewerten Sie diese Merkmale hinsichtlich ihrer Klassifikationsleistung im Vergleich zu dem von Ihnen gewählten Merkmal aus Schritt (3)?

- Achtung: Sie verlassen in dieser Teilaufgabe den “geführten” Bereich. Das bedeutet: Eigene

Recherche, was eine Fouriertransformation und ein Powerspektrum ist und wie dieses berechnet werden kann. Die folgenden zwei Links können Ihnen dabei helfen: rfft, hamming.

Um die Gesamtpower in den Frequenzbändern zu berechnen, benötigen wir die *Spektrale Leistungsdichte* (oder auch Power Spectral Density, PSD genannt). Diese berechnet sich über

$$G_{xx}(f) = \frac{P(f)}{B_{\text{eff}}}$$

wobei - das Leistungsspektrum $P(f) = \frac{|\underline{X}(f)|^2}{2}$ mit der Fouriertransformierten Zeitreihe $\underline{X}(f)$ - die Effektive Bandbreite $B_{\text{eff}} = \frac{\text{PM}}{T \cdot \text{FM}^2}$ - der Leistungsmittelwert $\text{PM} = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} w^2(k)$ - der Fenstermittelwert $\text{FM} = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} w(k)$ - und $w(n)$ die Hamming Funktion

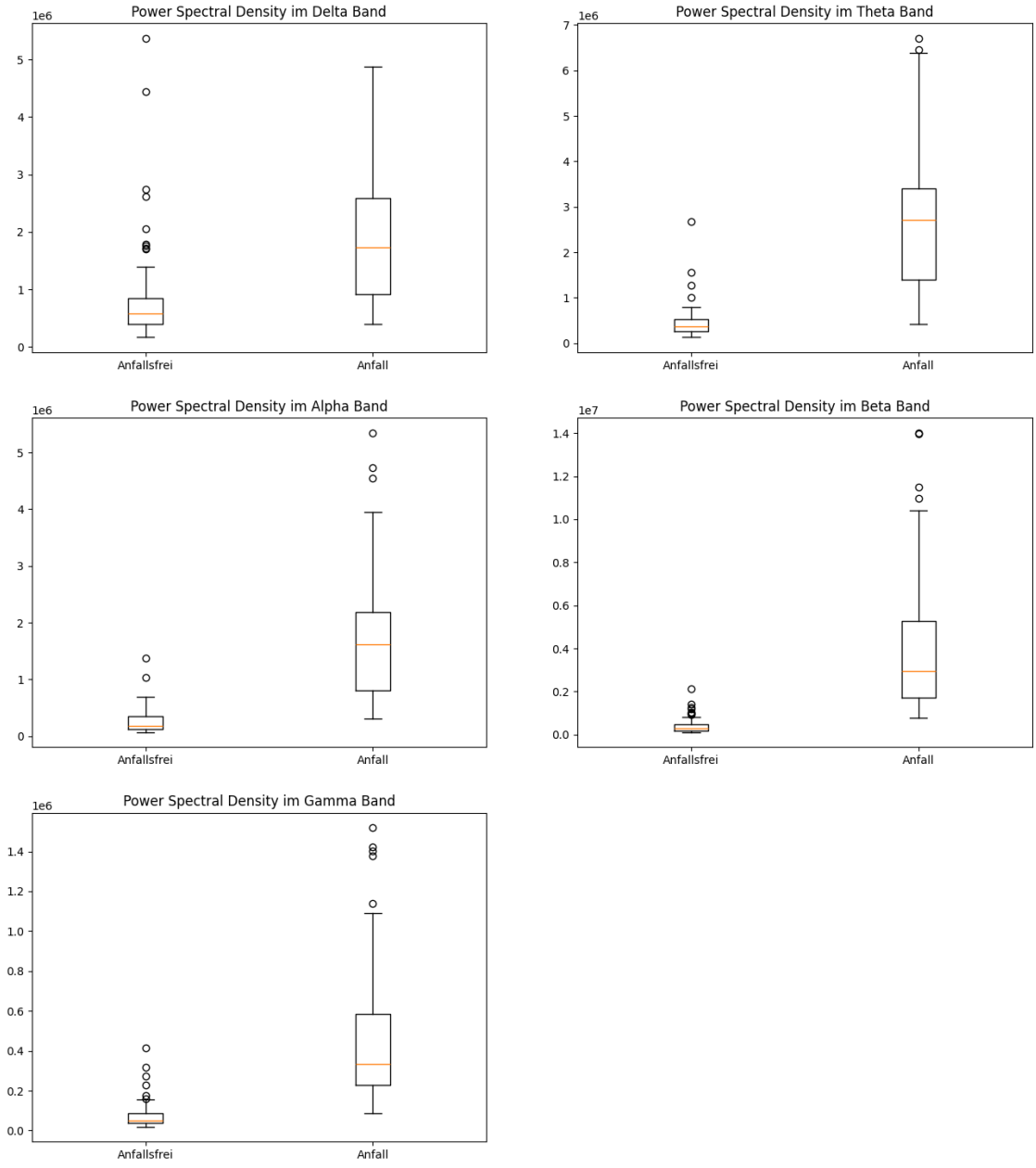
ist. Für uns relevant ist jedoch nur $P(f)$.

Durch Anwendung der Fouriertransformation `np.fft.rfft` transformieren wir von der Zeit- in den Frequenzbereich.

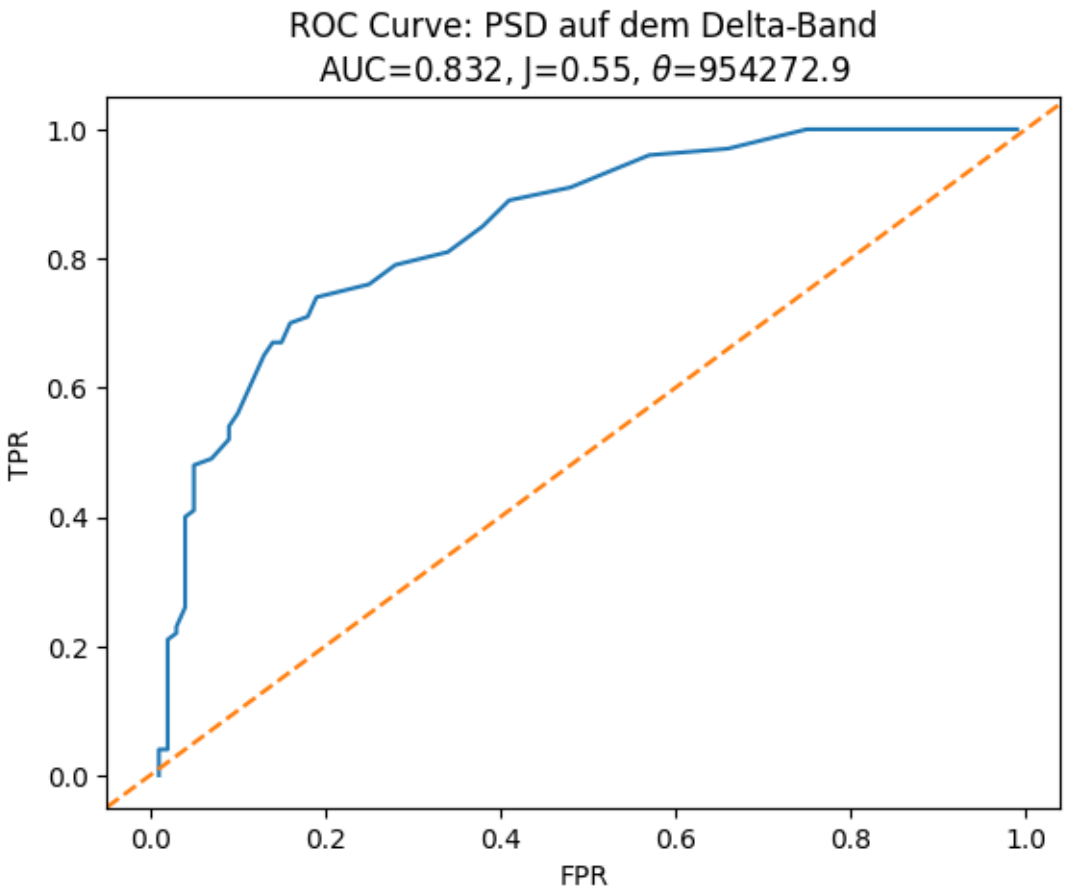
[33]:
```
def calc_power_of_freqbands(df: pd.DataFrame, sample_rate: float) -> pd.
↪DataFrame:
    h = np.hamming(df.shape[0]).reshape(-1, 1)

    # Anwendung einer Fast Fourier Transformation (FFT) auf die Zeitreihen zur␣
↪Extraktion von Frequenzkomponenten
    fourier = np.fft.rfft(df * h, axis=0)
    freqs = np.fft.rfftfreq(df.shape[0], 1./sample_rate)

    # Power-Spektrum aus der FFT berechnen um die, in den verschiedenen␣
↪Frequenzbereichen enthaltene, Leistung zu berechnen
    psd = np.abs(fourier)

    frequency_bands = pd.DataFrame(np.abs(psd), freqs)

    # Frequenzbänder
    freq_bands = {
        "delta": (0, 4),
        "theta": (4, 8),
        "alpha": (8, 12),
        "beta": (12, 30),
        "gamma": (30, 45),
    }
    df_powers = pd.DataFrame()
    for band, (a, b) in freq_bands.items():
        df_powers[band] = frequency_bands.loc[a:b].sum()
    return df_powers
```

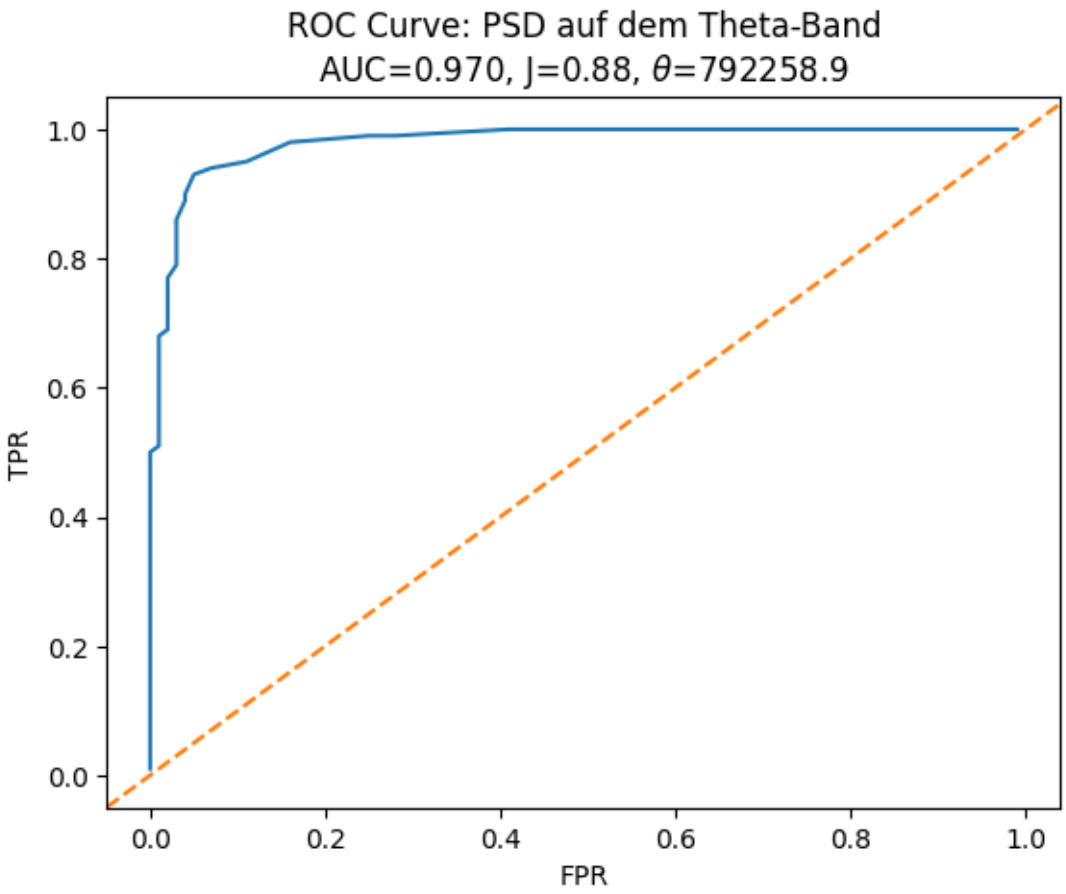
[34]:
```
sample_rate = 173.61
df_Dpow = calc_power_of_freqbands(df_D, sample_rate)
df_Epow = calc_power_of_freqbands(df_E, sample_rate)
```

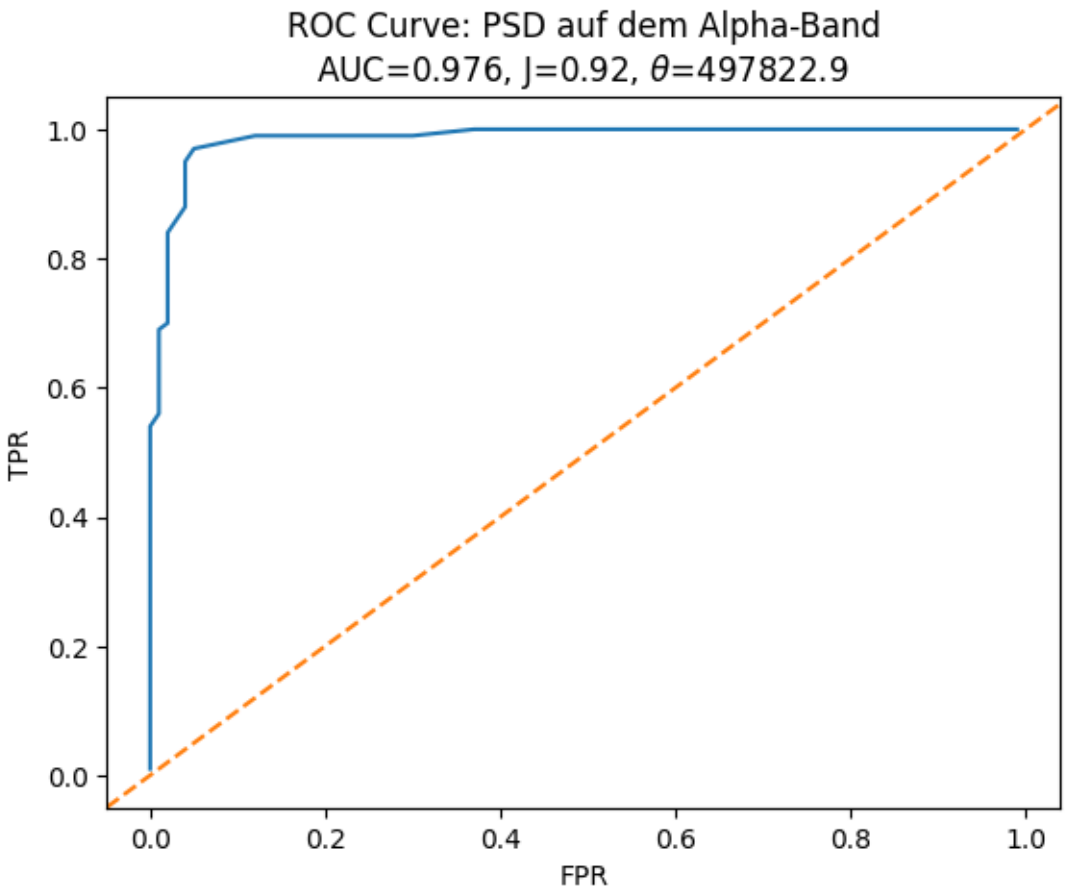
[35]:
```
fig, axs = plt.subplots(3, 2, figsize=(16, 18))
for i, col in enumerate(df_Dpow.columns):
    axs.flat[i].set_title(f"Power Spectral Density im {col.capitalize()} Band")
    axs.flat[i].boxplot([df_Dpow[col], df_Epow[col]],␣
 ↪tick_labels=["Anfallsfrei", "Anfall"])

axs[-1, -1].axis('off')
plt.show()
```

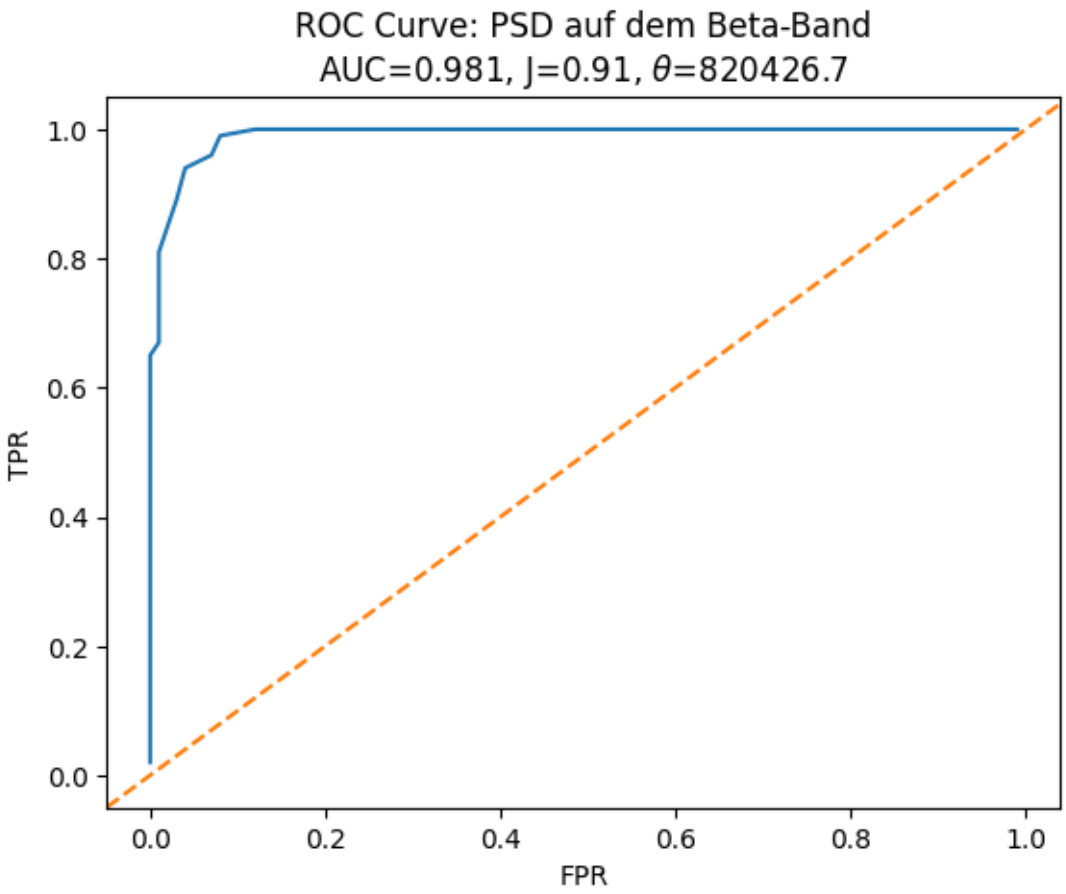


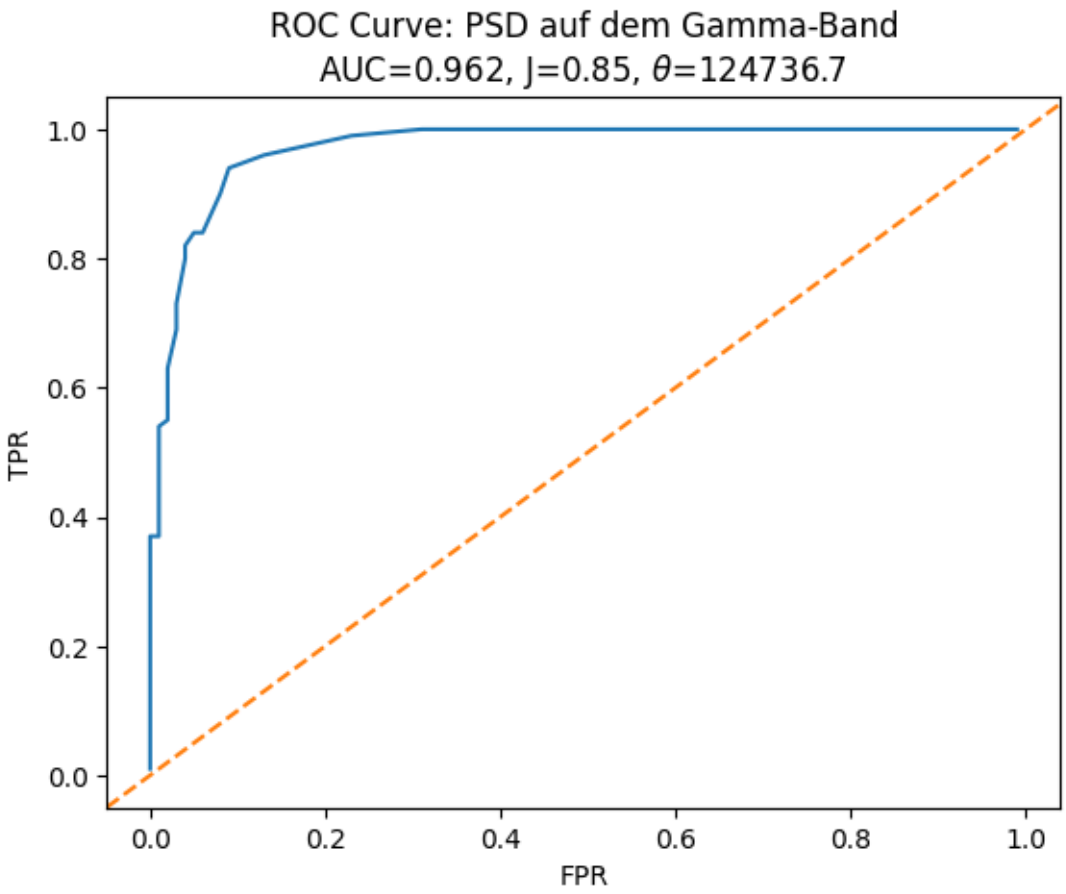
[36]:
```
def roc_plot(df_p, df_n, classifier: str):
    schwellwerte: np.ndarray = np.linspace(min(df_p.min(), df_n.min()),␣
 ↪max(df_p.max(), df_n.max()), 100)

    roc = []
    youdens = []
    for s in schwellwerte:
        try:
            TPR, FPR, _, _, _, J = calc_classifier_metrics(df_p.to_numpy(),␣
 ↪df_n.to_numpy(), s, output=False)
            roc.append([FPR, TPR])
            youdens.append(J)
        except ZeroDivisionError:
            continue

    roc = np.array(roc)
    phi_tilde_idx = np.argmax(youdens)

    plt.plot(roc[:, 0], roc[:, 1])
    plt.title(f"ROC Curve: {classifier}\nAUC={calc_AUC(roc):.3f},␣
 ↪J={youdens[phi_tilde_idx]:.2f}, $\\theta$={schwellwerte[phi_tilde_idx]:.1f}")
    plt.xlabel("FPR")
    plt.ylabel("TPR")
    plt.axline((0, 0), slope=1, c="C1", linestyle="--")
    plt.show()

for i, col in enumerate(df_Dpow.columns):
    roc_plot(df_Epow[col], df_Dpow[col], f"PSD auf dem {col.capitalize()}-Band")
```


ROC Curve: PSD auf dem Delta-Band
AUC=0.832, J=0.55, θ=954272.9
TPR
FPR
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0


ROC Curve: PSD auf dem Theta-Band
AUC=0.970, J=0.88, θ=792258.9
TPR
FPR
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0


ROC Curve: PSD auf dem Alpha-Band
AUC=0.976, J=0.92, θ=497822.9
TPR
FPR
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0


ROC Curve: PSD auf dem Beta-Band
AUC=0.981, J=0.91, θ=820426.7
TPR
FPR
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0




### 1.0.4 11.3 [Optional] Weinqualitäten (Multiklassen-Klassifikation, Feature Engineering)

In dieser Übung werden wir ein Nächste Nachbarn (NN) Modell erstellen, mit dem wir die Klasse eines Weines (d.h. die Kultursorte) aus den Eigenschaften vorhersagen können. Wir werden mit PCA-transformierten Merkmalen arbeiten.

**Ihre Daten**

Zu Beginn der 90er Jahre wurden verschiedene Weinproben in einer Region Italiens untersucht. Die Weine stammen von drei verschiedenen Kultursorten. Diese Kultursorten werden im unten hinterlegten Datensatz als Klasse 1, 2 und 3 (*class labels*) bezeichnet. Unter den 13 untersuchten Merkmalen finden Sie neben chemischen Eigenschaften (Alkoholgehalt, Säuregehalt) auch physikalische Eigenschaften (Farbintensität, etc).

Ich habe Ihnen den Weindatensatz in zwei Teile geteilt: Der erste Datensatz ist der sogenannte Trainingsdatensatz, mithilfe dessen Sie ihr Modell bauen werden. Der zweite Datensatz ist der sogenannte Testdatensatz, auf dem Sie ihr Modell anwenden und testen werden.

**Ihre Aufgaben**

(1) Importieren Sie die Daten, indem Sie die folgende Code-Zelle ausführen.

[37]:
```
import numpy as np
import pandas as pd
from matplotlib import pyplot as plt
from sklearn.decomposition import PCA
from scipy.stats import zscore
from sklearn.model_selection import train_test_split

# import data
column_names = ['Class label', 'Alcohol', 'Malic acid', 'Ash', 'Alcalinity of␣
 ↪ash', 'Magnesium', 'Total phenols', 'Flavanoids',
                'Nonflavanoid phenols', 'Proanthocyanins', 'Color intensity',␣
 ↪'Hue', 'OD280/OD315 of diluted wines', 'Proline']
df = pd.read_csv('wine.data', header=None)
df.columns = column_names

# preprocess data
X, y = df.iloc[:, 1:].values, df.iloc[:, 0].values

X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(
        X, y, test_size=0.4, random_state=10)

X_train, X_test = zscore(X_train), zscore(X_test)

# apply PCA
pca = PCA(n_components=2)
X_train_p = pca.fit_transform(X_train)
X_test_p = pca.transform(X_test)
```

(2) Vergegenwärtigen Sie sich die Eigenschaften des Wein-Datensatzes: Untersuchen Sie dazu das Pandas-Objekt. Welche Eigenschaften wurden für die Weine erfasst? Wie viele Weinproben wurden genommen?

[38]:
```
df.head()
```

[38]:

| | Class label | Alcohol | Malic acid | Ash | Alcalinity of ash | Magnesium | \ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 1 | 14.23 | 1.71 | 2.43 | 15.6 | 127 | |
| 1 | 1 | 13.20 | 1.78 | 2.14 | 11.2 | 100 | |
| 2 | 1 | 13.16 | 2.36 | 2.67 | 18.6 | 101 | |
| 3 | 1 | 14.37 | 1.95 | 2.50 | 16.8 | 113 | |
| 4 | 1 | 13.24 | 2.59 | 2.87 | 21.0 | 118 | |

| | Total phenols | Flavanoids | Nonflavanoid phenols | Proanthocyanins | \ |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 2.80 | 3.06 | 0.28 | 2.29 | |
| 1 | 2.65 | 2.76 | 0.26 | 1.28 | |
| 2 | 2.80 | 3.24 | 0.30 | 2.81 | |
| 3 | 3.85 | 3.49 | 0.24 | 2.18 | |

```
4           2.80        2.69                  0.39             1.82

   Color intensity   Hue  OD280/OD315 of diluted wines  Proline
0             5.64  1.04                          3.92     1065
1             4.38  1.05                          3.40     1050
2             5.68  1.03                          3.17     1185
3             7.80  0.86                          3.45     1480
4             4.32  1.04                          2.93      735
```

Es wurden 13 verschiedene Eigenschaften (`Class label` nicht mitgezählt) für 178 Weinproben erfasst, wobei zwischen 3 Klassen unterschieden wird.

(3) Lesen Sie den Code ab dem Kommentar `# preprocess data`. Was passiert in diesen Code-Zeilen? Welches Feature-Engineering findet statt, bis wir zu den Daten `X_train_p`, `X_test_p` angekommen sind, mit denen Sie dann arbeiten werden? Wie viele Features (Merkmale) haben die transformierten Daten?

Das Dataframe wird in die 13 Features `X` und die Class Labels `y` aufgeteilt. Dann findet ein Split der Daten in das Trainingsset (60%) und das Testset (40%) statt.

Bei der nachfolgenden Normierung der Features werden allerdings die Trainingsdaten und die Testdaten separat voneinander normiert, was zu data leakage führt. Es sollte eine Normierung der Trainingsdaten stattfinden und dann die gleichen Normierungsparameter auf das Testset angewandt werden.

Nach der Normierung findet eine PCA auf $n = 2$ statt.

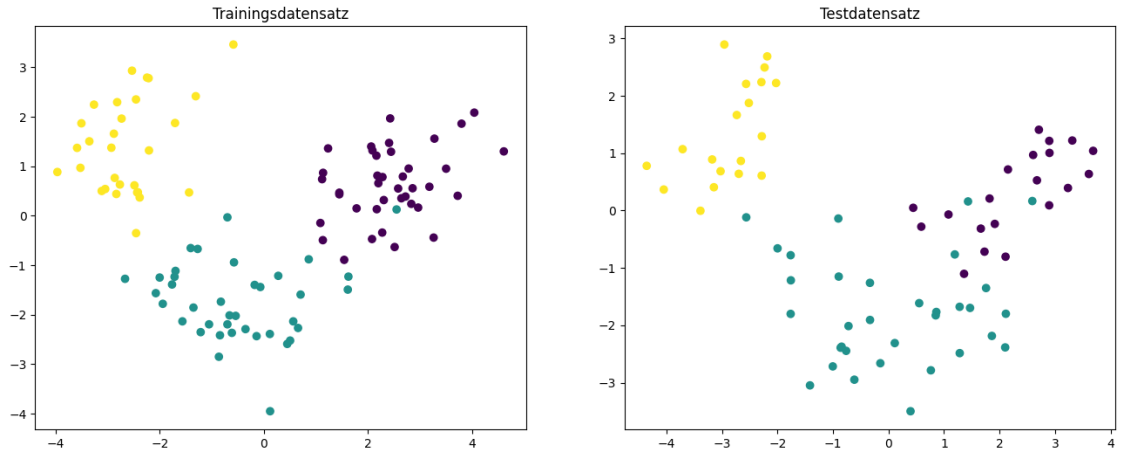
Um *Data Leakage* zu vermeiden, empfiehlt sich die Verwendung einer Pipeline in folgender Form (mögen es uns die Korrigierenden verzeihen xD):

[39]:
```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.pipeline import Pipeline

# preprocess data
X, y = df.iloc[:, 1:].values, df.iloc[:, 0].values
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.4,␣
 ↪random_state=10)

pipe = Pipeline([('scaler', StandardScaler()), ('pca', PCA(n_components=2))])

X_train_p = pipe.fit_transform(X_train)
X_test_p = pipe.transform(X_test)
```

(4) Visualisieren Sie in zwei Scatterplots den PCA-transformierten Trainingsdatensatz sowie den Testdatensatz. Färben Sie die Punkte in beiden Plots ein gemäß der Klassenzugehörigkeit, wie Sie in Ihrem Vektor `y_train` bzw. `y_test` kodiert ist. Die Einträge in `y_train` und `y_test` werden auch *Labels* genannt.

[40]:
```
fig, axs = plt.subplots(1, 2, figsize=(16, 6))
```

```
axs[0].set_title("Trainingsdatensatz")
axs[0].scatter(X_train_p[:, 0], X_train_p[:, 1], c=y_train)
axs[1].set_title("Testdatensatz")
axs[1].scatter(X_test_p[:, 0], X_test_p[:, 1], c=y_test)

plt.show()
```




(5) Wir werden jetzt ein NN-Modell (Nächste Nachbarn Modell) erstellen. Schreiben Sie dazu eine Funktion mit dem Namen `NN`, die die Trainingsdaten (`X_train_p` und `y_train_p`) sowie die Testdaten (`X_test_p`) entgegen nimmt und die vorhergesagten Klassen (Labels) für die Testdaten als Vektor (`y_pred`) zurückgibt. Schlagen Sie in den Vorlesungsfolien nach, wie ein NN Modell definiert ist und nutzen Sie für die Implementierung numpy Funktionen. Broadcasting kann Ihnen ebenfalls sehr hilfreich sein.

[41]:
```
def NN(X_train: np.ndarray, y_train: np.ndarray, X: np.ndarray) -> np.ndarray:
    y2 = np.sum(X_train**2, axis=1)
    x2 = np.sum(X**2, axis=1).reshape(-1, 1)
    distances = np.sqrt(x2 - 2*(X @ X_train.T) + y2)
    return y_train[np.argmin(distances, axis=1)]
```

(6) Sie haben in Schritt (5) ein einfaches Machine Learning Modell implementiert, einen Klassifikator. Sagen Sie mithilfe Ihrer Funktion die Labels (Klassen) der Weinproben des Testdatensatzes voraus und speichern Sie die Voraussage im Vektor `y_pred`.

[42]:
```
y_pred: np.ndarray = NN(X_train_p, y_train, X_test_p)
```

(7) Bestimmen Sie die *Accuracy* Ihrer Vorhersage, also den Anteil der korrekt vorhergesagten Klassen dividiert durch die Gesamtanzahl aller Vorhersagen. Beurteilen Sie anhand der *Accuracy*, ob Ihr Modell die Klassen des Testdatensatzes gut vorhersagen kann.

[43]:
```
(y_pred == y_test).sum() / y_pred.size
```

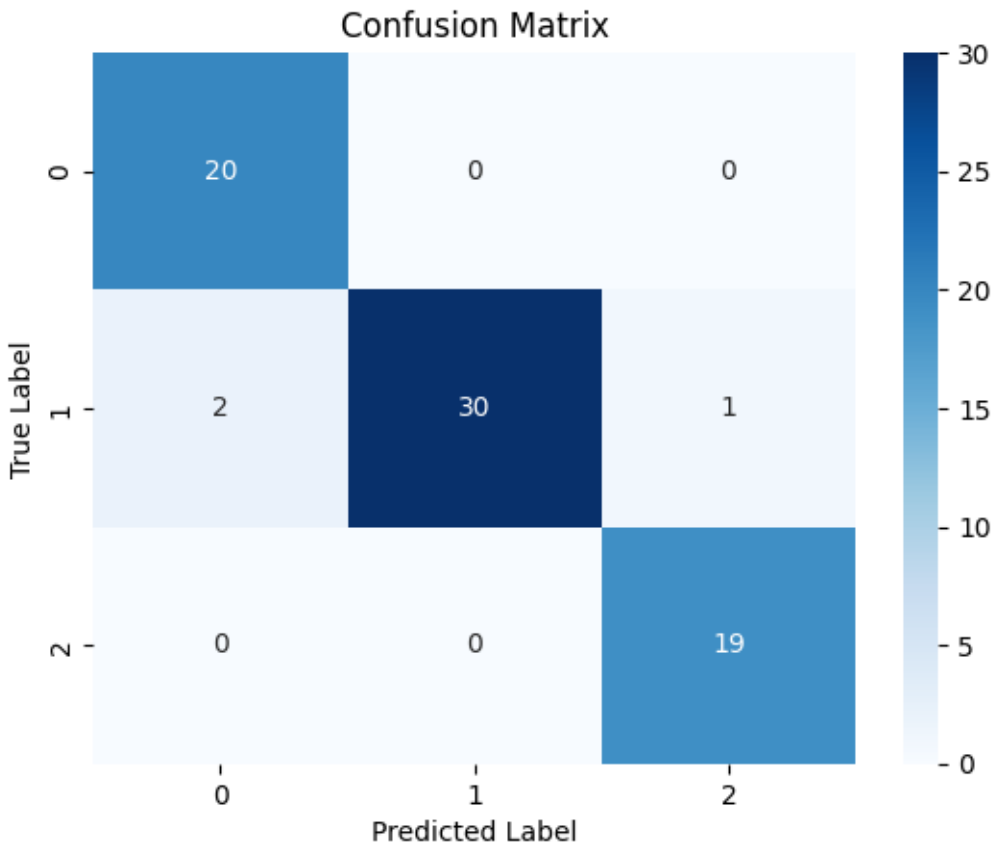
[43]:
```
np.float64(0.9583333333333334)
```

Es gelingt eine korrekte Vorhersage mit einer *Accuracy* von rund 95.83% (bei fehlerhafter Normierung der Testdaten 94.4%), sodass man sagen kann, dass unserem Nearest Neighbor Modell die Vorhersage gut gelingt.

(8) Bestimmen Sie eine *Confusion Matrix*, um Ihren Klassifikator besser einschätzen zu können:

1. Schlagen Sie in den Folien der Vorlesung nach, wie eine Confusion Matrix aufgebaut wird.
2. Bestimmen Sie die Confusion Matrix Ihres Klassifikators auf dem Testdatensatz.
3. Visualisieren Sie die Confusion Matrix mithilfe der Matplotlib.

[44]:
```
def confusion_matrix(y: np.ndarray, y_pred: np.ndarray):
    classes: np.ndarray  = np.unique(y)
    array = []
    for true_label in classes:
        row = []
        for predicted_label in classes:
            row.append(((y == true_label) & (y_pred == predicted_label)).sum())
        array.append(row)

    confusion_matrix: np.ndarray = np.array(array)
    sns.heatmap(confusion_matrix, annot=True, cmap='Blues')

    plt.title("Confusion Matrix")
    plt.ylabel("True Label")
    plt.xlabel("Predicted Label")
    plt.show()

confusion_matrix(y_test, y_pred)
```




(9) Interpretieren Sie die *Confusion Matrix*: Welche Klassen werden besser vorhergesagt, welche schlechter?

Bei den Klassen `0` und `2` gelingt die Vorhersage sehr zuverlässig, während bei der Klasse `1` drei Fehlzuordnungen passieren.