

Machine Learning & AI

Tuur Vanhoutte

25 februari 2021

Inhoudsopgave

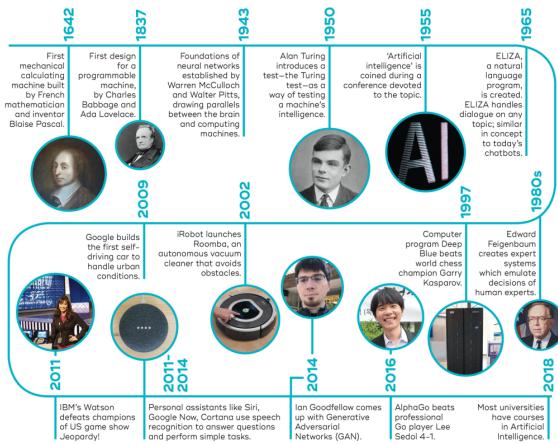
1 Inleiding	1
1.1 AI in context	1
1.1.1 Vormen van AI	1
1.1.2 Sectoren die de planeet verbeteren	2
1.1.3 Waarom nu?	2
2 Hoe leren uit data?	2
2.1 Leeralgoritmes	2
2.2 Supervised Learning	3
2.2.1 Regressie vs Classificatie	4
2.2.2 Voorbeeld	4
2.3 Unsupervised learning	5
2.4 Reinforcement learning	6
2.5 Overzicht leeralgoritmes	6
2.6 Werkwijze van een ML Project	7
2.6.1 Tijdverdeling	7
3 Enkelvoudige Lineaire regressie	8
3.1 Voorbeeld	8
3.1.1 Scatterplot	8
3.2 De hypothese	9
3.3 De kostenfunctie	9
3.4 Gradient Descent (GDS)	9
3.4.1 Learning rate	10
4 Meervoudige lineaire regressie	11
4.1 Statistische vooranalyse	12
4.1.1 Consistentie van de dataset	12
4.1.2 Uitschieters	12
4.1.3 Onderlinge correlatie	13
4.2 Features en targets	13
4.3 Trainen van het model	14
4.3.1 Initialiseren en trainen van het regressiemodel	14
4.4 Testen van het model	15
4.4.1 Voorspellingen maken	15
4.5 Performantie en scores van het model	15
4.5.1 Mean Absolute Error (MAE)	15
4.5.2 Mean Squared Error (MSE)	16
4.5.3 Determinatiecoëfficiënt	16
5 Feature engineering	16
5.1 Normalisatie / Scaling	17
5.1.1 Voordelen	17
5.1.2 MIN-MAX-scaling	17
5.1.3 Standard scaling (normalisatie)	18
5.1.4 Robust scaling	20
5.2 Feature expansion	20
5.2.1 Nieuwe features	20
5.2.2 Hogere-orde features	21
5.3 One-hot encoding	22

6 Underfitting & overfitting	23
6.1 Underfitting	23
6.2 Overfitting	23
6.2.1 Impact van de grootte van de dataset	24
6.3 Regularisatie (regularisation)	24
6.3.1 Voorbeeld regularisatie	24
6.3.2 Regularisatie met L2 norm	25
6.3.3 Regularisatie met L1 norm	25
6.3.4 Voorbeeld regularisatie op huizenprijzen	26
7 Classificatie	26
7.1 Wat is classificatie?	26
7.1.1 Voorbeelden	26
7.2 Types van classifiers	27
7.2.1 Binary (binomial) classifier	27
7.2.2 Multiclass classifier	27
7.2.3 Multilabel classifier	28
7.3 Waarom regressie geen goede optie is	29
8 Logistische regressie	30
8.1 Het model	30
8.1.1 Interpretatie via voorbeeld appels	30
8.1.2 Grafische interpretatie via voorbeeld appels	31
8.1.3 Wat als het model niet lineair is?	31
8.2 De kostenfunctie	32
8.3 Voorbeeld logistic regression met Sklearn (lineair model)	32
8.3.1 Preprocessing van de data	32
8.3.2 Trainen van het logistic regression model	33
8.3.3 Classificeren van een nieuwe sample	33
8.3.4 Visualiseer de decision boundary	34
8.4 Voorbeeld logistic regression met Sklearn - niet-lineair	35
8.4.1 Feature engineering: toevoegen van hogere orde features	35
8.4.2 Oplossing: regularisatie	35
8.5 Multi-class classification	36
8.5.1 One-vs-all	36
8.5.2 One-vs-One	37
9 Evaluatie van een classifier	37
9.1 Accuracy	38
9.2 True Positive Rate (TPR)	38
9.3 Positive Predictive Value (PPV)	38
9.4 F1 Score	38
9.5 Receiver Operating Characteristic (ROC)	38
9.5.1 ROC curve en AUC (Area Under ROC Curve)	39
10 Support Vector Machines (SVM)	41
10.1 Wat is een SVM?	41
10.1.1 Welke classifier zou je verkiezen?	41
10.2 Hoe een SVM classificeert	41
10.2.1 Wat als een perfecte lineaire scheiding niet mogelijk is?	42
10.2.2 Wat bij niet-lineair scheidbare gegevens	43
10.3 Kernels	43

10.3.1 Meest gebruikte kernels	43
10.3.2 Voorbeeld	43
10.3.3 Parameter gamma	44
10.3.4 Hyperparameters	45
10.4 Motivatie voor het gebruik van een SVM	45
10.5 Logistische regressie vs SVM	45
10.5.1 Wanneer welke classifier kiezen?	45
11 Cross-validatie	46
11.1 Verschillende types cross-validatie	46
11.1.1 Hold out cross-validation	46
11.1.2 K-fold cross-validation	46
11.1.3 Leave one out cross-validation	47
11.1.4 Bootstrap cross-validation	47
11.2 Hyperparameter tuning via cross-validatie	47
11.2.1 Grid search	47
11.2.2 Random search	48

1 Inleiding

1.1 AI in context



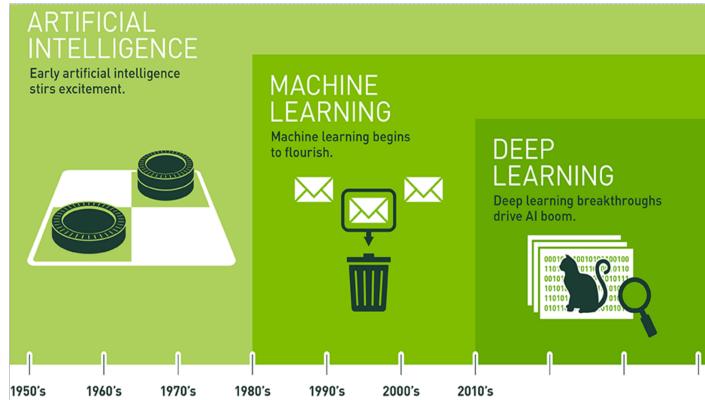
Figuur 1: Geschiedenis van AI

Belangrijkste gebeurtenissen:

- **1943:** McCulloch - Pitts: fundering van neurale netwerken
- **1950:** Alan Turing: de Turing test
- **1956:** Dartmouth workshop: bijeenkomst voor breinstorm AI
- **1997:** Garry Kasparov vs Deep Blue (IBM)
- **2011:** IBM Watson
- **2016:** AlphaGo
- **2021-:** toekomst

1.1.1 Vormen van AI

- Zwakke AI (weak AI / Artificial Narrow Intelligence)
 - Goed in een bepaalde taak maar alleen in die taak
 - **Voorbeelden:** spamfilters, schaakcomputers, gezichtsherkenning
- Sterke AI (strong AI / Artificial General Intelligence)
 - Intelligentie op menselijk niveau
 - In staat om zich aan te passen en problemen te leren oplossen in verschillende contexten
- Superintelligentie (Artificial Super Intelligence)
 - Als AI zelfbewust wordt en de mens op alle vlakken voorbij steekt



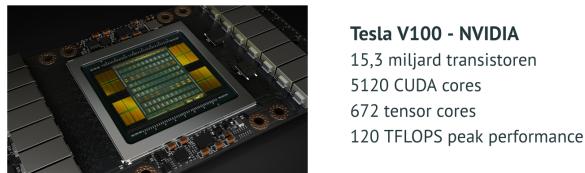
Figuur 2: AI vs ML vs DL

1.1.2 Sectoren die de planeet verbeteren

- Klimaatsverandering
- Biodiversiteit en conservatie
- Water
- Hernieuwbare energie
- Medische sector
- Weer- en rampenvoorspelling

1.1.3 Waarom nu?

- Snellere hardware
- Betere algoritmes
- Meer data
- (Open source) frameworks



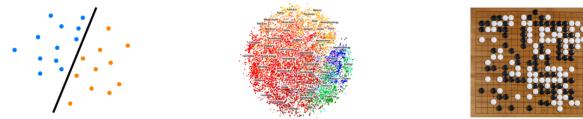
Figuur 3: Voorbeeld huidige hardware: de Tesla V100 van Nvidia

2 Hoe leren uit data?

2.1 Leeralgoritmes

- Supervised
 - Inputs met gewenste outputs zijn gegeven

- Task driven
- Unsupervised
 - De gewenste outputs zijn niet gegeven
 - Data driven (clustering)
- Reinforcement
 - Beslissingsproces op basis van beloningen
 - Algoritme leert te reageren op zijn omgeving



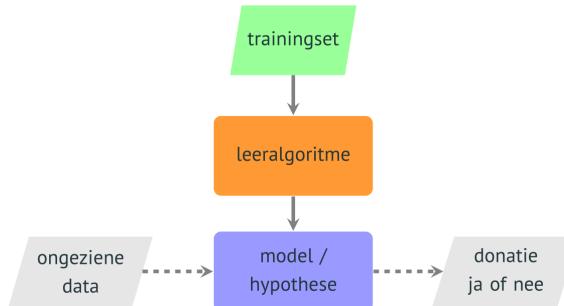
Figuur 4: Supervised / Unsupervised / Reinforcement learning

2.2 Supervised Learning

Leren uit een gelabelde dataset. Vind het verband tussen de features en de labels

		sentiment	text
0	1	1	I am going to start reading the Harry Potter series again because that is one awesome story.
1	1	1	the story of Harry Potter is a deep and profound one, and I love Harry Potter.
2	1	1	Mission Impossible 3 was excellent.
3	0	0	The Da Vinci Code sucked, but the night was great.
4	1	1	The Da Vinci Code was absolutely AWESOME!
5	0	0	Then snuck into Brokeback Mountain, which is the most depressing movie I have ever seen..
6	1	1	I love Harry Potter.
7	0	0	Ok brokeback mountain is such a horrible movie.
8	1	1	He's like,"YEAH I GOT ACNE AND I LOVE BROKEBACK MOUNTAIN".
9	0	0	Da Vinci Code sucks.

Figuur 5: Leren uit een dataset

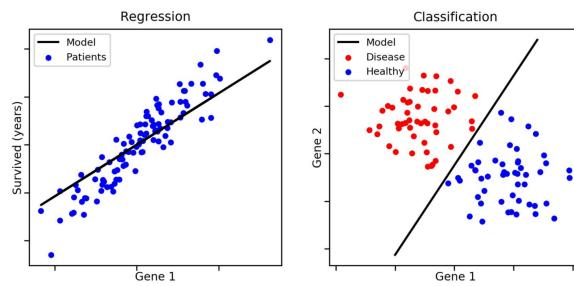


Figuur 6: Supervised learning kan uit ongeziene data een resultaat berekenen

2.2.1 Regressie vs Classificatie



Figuur 7: Regressie vs classificatie

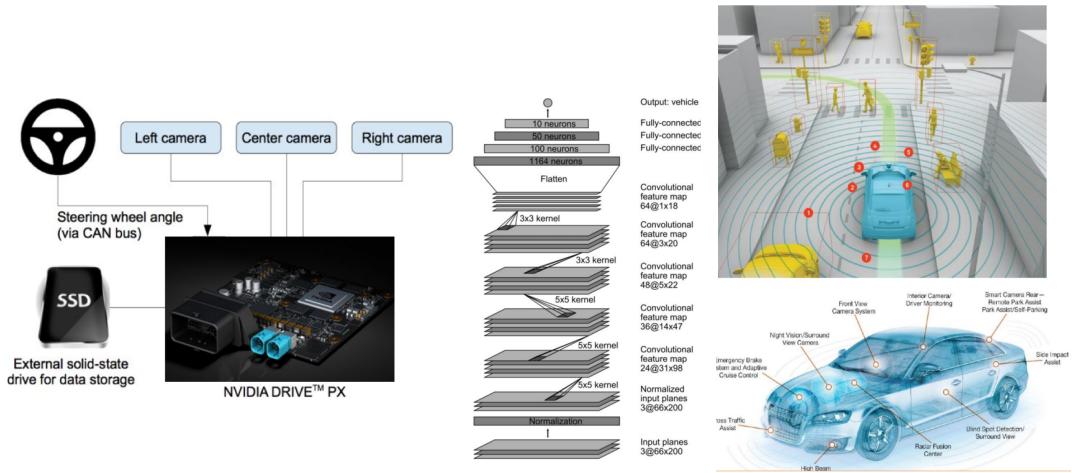


Figuur 8: Regressie vs classificatie

2.2.2 Voorbeeld

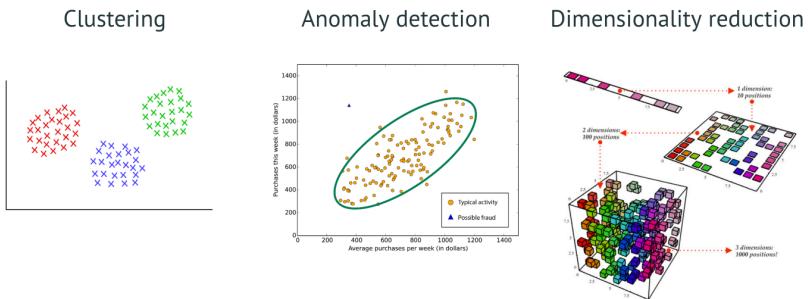
Hoe stuurhoek bepalen bij een self-driving car?

- (infrarood) camera's
- Stereo vision
- Radar
- LIDAR
- GPS
- Audio

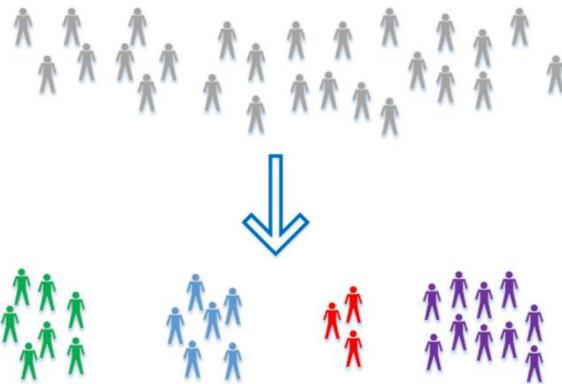


Figuur 9: Via sensoren weet de auto

2.3 Unsupervised learning

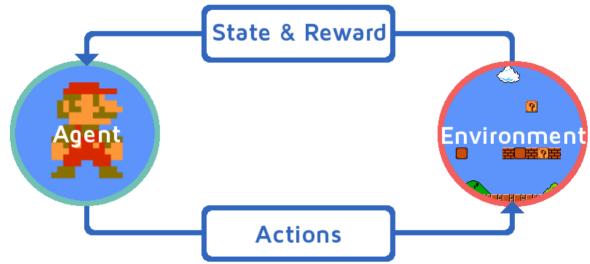


Figuur 10: Unsupervised Learning



Figuur 11: Voorbeeld Clustering: de data in groepen verdelen

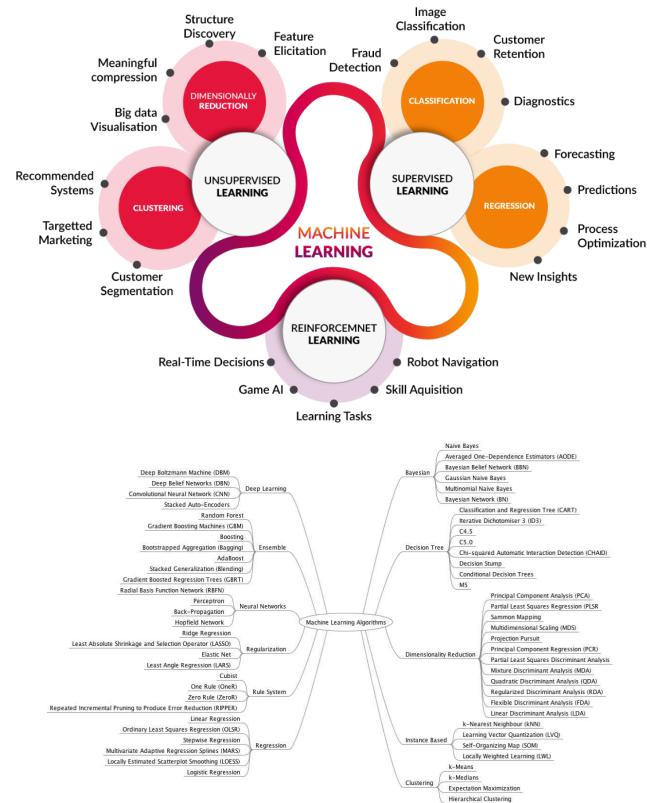
2.4 Reinforcement learning



Figuur 12: Reinforcement learning

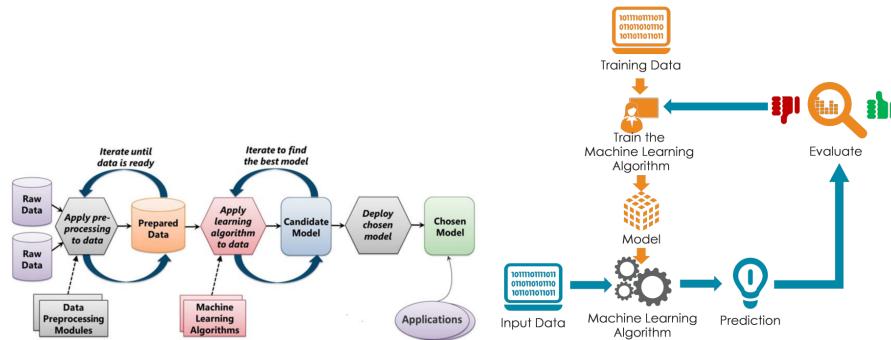
- Voor elke actie krijgt de AI feedback
- De AI leert uit de feedback
- In het begin zijn de acties heel willekeurig

2.5 Overzicht leeralgoritmes

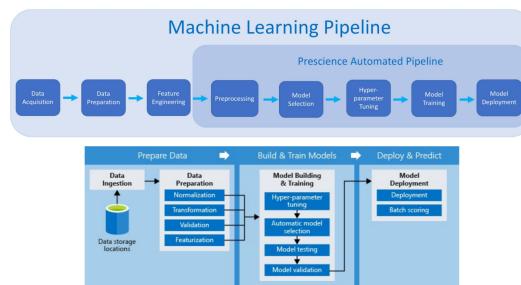


Figuur 13: Overzicht

2.6 Werkwijze van een ML Project



Figuur 14



Figuur 15

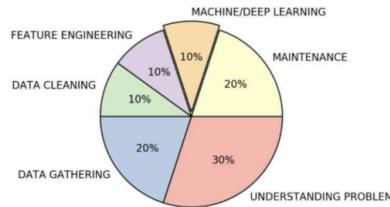
2.6.1 Tijdverdeling

DATA SCIENTIST JOB - EXPECTATION



Follow: Dr. Angshuman Ghosh

DATA SCIENTIST JOB - REALITY



Figuur 16: Tijdverdeling: verwachting vs realiteit

3 Enkelvoudige Lineaire regressie

3.1 Voorbeeld

	leeftijd	gewicht	bloeddruk
0	52	78	132
1	59	83	143
2	67	88	153
3	73	96	162
4	64	89	154
5	74	100	168
6	54	85	137
7	61	85	149
8	65	94	159
9	46	76	128
10	72	98	166

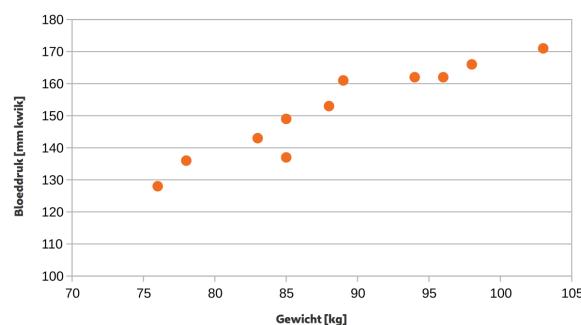
Figuur 17: Voorspel de bloeddruk op basis van leeftijd en gewicht

- **features:** leeftijd en gewicht
- **target:** bloeddruk (=wat je wil voorspellen = output = label)
- **trainingset:** 11 training examples (=samples)

Definitie 3.1 (Regressie-analyse) *Regressie-analyse is het modelleren van of het zoeken naar een verband op basis van één of meerdere variabelen.*

Bij regressie is de output/target een (continue) variabele

3.1.1 Scatterplot



Figuur 18: Scatterplot: de grafiek toont een positieve correlatie ⇒ een sterk verband

3.2 De hypothese

Definitie 3.2 (De hypothese) Het verband (model of hypothese) $h_\theta(x)$ is van de vorm:

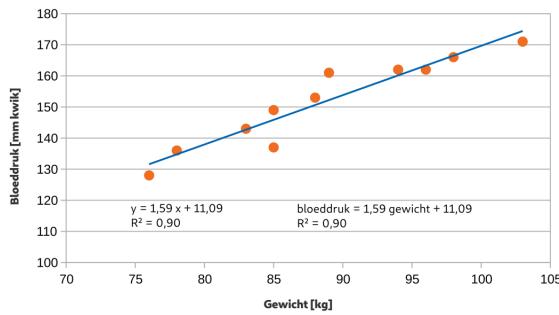
$$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x \quad (1)$$

Bepalen van de optimale waarden voor θ_0 en θ_1 :

- θ_0 = snijpunt van de y-as (= noemen we ook de **bias**)
- θ_1 = helling van de rechte (rico)

De parameters θ_i = **weights**

Het zoeken van het model / hypothese = **training** / **learning**



Figuur 19: Lineaire trnedlijn met model $h_\theta(x)$

R²-waarde: determinatiecoëfficiënt

3.3 De kostenfunctie

We moeten de kostenfunctie $J(\theta)$ via de **Least Mean Squared** methode (LMS).

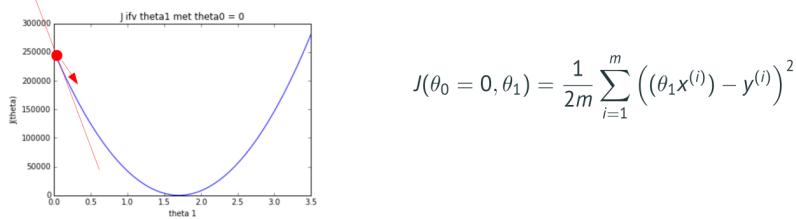
$$J(\theta) = \frac{1}{2 \cdot m} \cdot \sum_{i=1}^m (h_\theta(x_i) - y_i)^2 \quad (2)$$

- m = de bias = snijpunt met de y-as
- De kostenfunctie berekent de gemiddelde fout door alle fouten op te tellen
- Elke fout wordt gekwadrateerd om:
 - negatieve waardes positief te maken
 - de fout uit te groten

3.4 Gradient Descent (GDS)

$$J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{2 \cdot m} \cdot \sum_{i=1}^m ((\theta_1 \cdot x_i + \theta_0) - y_i)^2 \quad (3)$$

Stel de parameters θ_0 en θ_1 voortdurend bij in een iteratief proces tot je de waarden voor θ_0 en θ_1 hebt gevonden die de kleinst mogelijke waarde. Start met willekeurige waarden.



Figuur 20: De GDS als $\theta_0 = 0$

- Je krijgt een dalparabool als uitkomst
- Je kan aflezen wat de parameters moeten zijn om de kleinst mogelijke waarde te vinden
- In de realiteit heb je vaak veel meer dan 2 gewichten
 - Voorbeeld: de textgenererende AI GPT-3 heeft rond de 175 miljard gewichten
 - ⇒ veel rekenkracht nodig om beste uitkomst te vinden

3.4.1 Learning rate

$$J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m \left((\theta_1 x^{(i)} + \theta_0) - y^{(i)} \right)^2$$

Bepaal de gradient naar θ_0 en θ_1

$$\frac{dJ(\theta)}{d\theta_0} = \frac{2}{2m} \sum_{i=1}^m \left((\theta_1 x^{(i)} + \theta_0) - y^{(i)} \right)$$

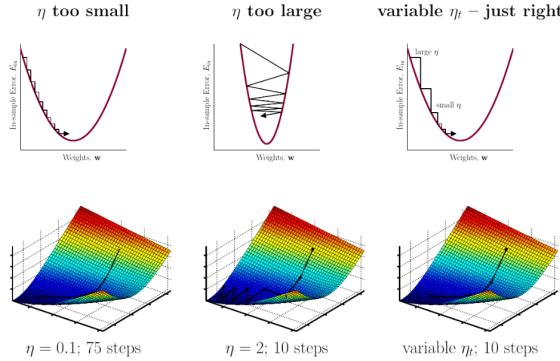
$$\frac{dJ(\theta)}{d\theta_1} = \frac{2}{2m} \sum_{i=1}^m \left((\theta_1 x^{(i)} + \theta_0) - y^{(i)} \right) x^{(i)}$$

Update de parameters θ_0 en θ_1 volgens:

$$\theta_0 := \theta_0 - \eta \frac{dJ(\theta)}{d\theta_0} \quad \text{en} \quad \theta_1 := \theta_1 - \eta \frac{dJ(\theta)}{d\theta_1}$$

Figuur 21: De parameters θ_0 en θ_1 stellen we constant bij (formules niet te kennen)

- We bepalen de afgeleide (= de gradient, de helling) van θ_0 en θ_1
- We gebruiken die afgeleiden om een betere θ_0 en θ_1 te vinden.
- We vermenigvuldigen de gradient met een variable η (=de learning rate)
- Onze nieuwe θ wordt berekend met behulp van de oude θ en de afgeleide maal de learning rate.



Figuur 22: Learning rate η : bij een te kleine/te grote η hebben we te veel stappen

De learning rate η stellen we constant bij om met zo weinig aantal stappen het optimum te bereiken.

4 Meervoudige lineaire regressie

Definitie 4.1 (Meervoudige lineaire regressie) Bij meervoudige lineaire regressie (*multiple regression*) wordt het model/hypothese bepaald aan de hand van een trainingset met **meerdere features**.

- Bloeddruk wordt bepaald a.d.h.v. gewicht en leeftijd
- De kwaliteit van wijn wordt voorspeld op basis van: zuurtegraad, suikergehalte, chloriden, dichtheid, sulfaten, hoeveelheid alcohol, ...
- Het warmeverlies van een huis wordt voorspeld op basis van: het type glas, muurisolatie, oriëntatie van het huis, ...

$$h_{\theta}(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \cdots + \theta_n x_n + \quad (4)$$

- CRIM - per capita crime rate by town.
- ZN - proportion of residential land zoned for lots over 25,000 sq.ft.
- INDUS - proportion of non-retail business acres per town.
- CHAS - Charles River dummy variable (1 if tract bounds river; 0 otherwise).
- NOX - nitric oxides concentration (parts per 10 million).
- RM - average number of rooms per dwelling.
- AGE - proportion of owner-occupied units built prior to 1940.
- DIS - weighted distances to five Boston employment centres.
- RAD - index of accessibility to radial highways.
- TAX - full-value property-tax rate per \$10000.
- PTRATIO - pupil-teacher ratio by town.
- B - 1000(B_k - 0.63)^2 where B_k is the proportion of blacks by town.
- LSTAT % lower status of the population.
- Price - Median value of owner-occupied homes in 1000's.

	CRIM	ZN	INDUS	CHAS	NOX	RM	AGE	DIS	RAD	TAX	PT	B	LSTAT	Price
0	0.00632	18.0	2.31	0	0.538	6.575	65.199997	4.0900	1	296	15.300000	396.899994	4.98	504.000000
1	0.02731	0.0	7.07	0	0.469	6.421	78.900002	4.9671	2	242	17.799999	396.899994	9.14	453.600008
2	0.02729	0.0	7.07	0	0.469	7.185	61.099998	4.9671	2	242	17.799999	392.829987	4.03	728.700016
3	0.03237	0.0	2.18	0	0.458	6.998	45.799999	6.0622	3	222	18.700001	394.630005	2.94	701.400032
4	0.06905	0.0	2.18	0	0.458	7.147	54.200001	6.0622	3	222	18.700001	396.899994	5.33	760.200016

Figuur 23: **Voorbeeld:** voorspel de huisprijs op basis van deze features

4.1 Statistische vooranalyse

4.1.1 Consistentie van de dataset

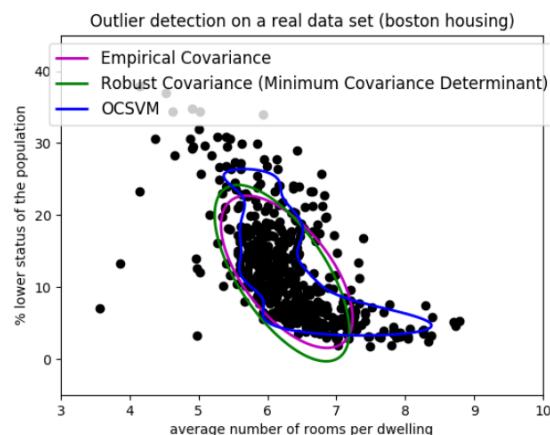
- Volledigheid van de dataset
- Inconsistenties
- Spreiding van de gegevens

We verwijderen de CHAS kolom:

```
1 dataset.drop('CHAS', axis=1, inplace=True)
```

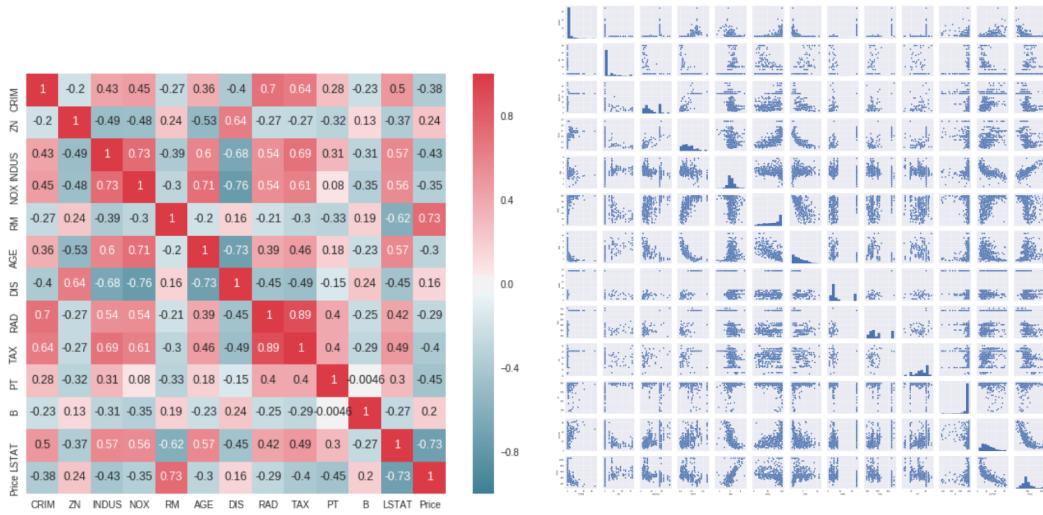
4.1.2 Uitschieters

- Vinden en verwijderen van extreme waarden/samples
- Geavanceerde technieken: zie later bij clustering



Figuur 24: Uitschieters

4.1.3 Onderlinge correlatie



Figuur 25: Heatmap en pairplot van de underline correlatie tussen de features

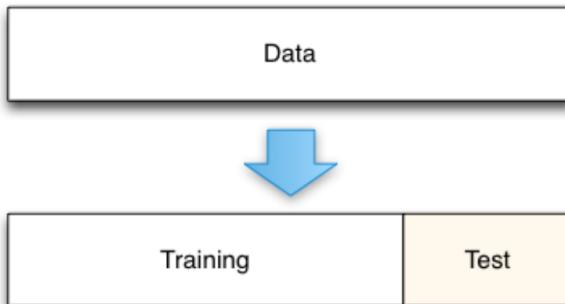
4.2 Features en targets

CRIM	ZN	INDUS	NOX	RM	AGE	DIS	RAD	TAX	PT	B	LSTAT	Price
0.00632	18.0	2.31	0.538	6.557	65.199997	4.0900	1	296	15.300000	396.899994	4.98	504.000000
0.02731	0.0	7.07	0.469	4.621	78.900002	4.9671	2	242	17.799999	396.899994	9.14	453.600000
0.02729	0.0	7.07	0.469	7.185	61.099998	4.9671	2	242	17.799999	392.829987	4.03	728.700016
0.03237	0.0	2.18	0.458	6.998	45.999999	6.0622	3	22	18.700001	394.630000	2.94	701.400032
0.06903	0.0	2.18	0.458	7.147	54.200001	6.0622	3	222	18.700001	396.899994	5.33	760.200016

Figuur 26: Dataset opsplitsen in features en targets

```
1 y = dataset['target_kolom'].values
2 X = dataset.drop('target_kolom',axis=1).values
3 # Alternatief
4 features=list(dataset.columns[:dataset.columns.size-1])
5 X = dataset[features].values
6 y = dataset['Price'].values
```

4.3 Trainen van het model



Figuur 27: Dataset opsplitsen in training set en test set

- Belangrijk om eerst de data te randomiseren: te data zou gesorteerd kunnen zijn, dat willen we vermijden
- Stel dat huizenprijzen van laag naar hoog gesorteerd is, en je traaint de data op de eerste 75%, en test de laatste 25%. Resultaat: Het model zal niet getraind zijn op dure huizen.
- Ander voorbeeld: stel dat je een self-driving AI alleen traaint op de autosnelweg, en dan test in een zone-30 straat bij een school...

```
1 X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.33,
2 random_state=0)
```

4.3.1 Initialiseren en trainen van het regressiemodel

```
1 lregmodel = linear_model.LinearRegression()
2 lregmodel.fit(X_train, y_train)
```

Model:

```
1 print('coeffs: ', lregmodel.coef_)
2 print('intercept', lregmodel.intercept_)
3
4 >> coeffs: [-3.56141289e+00, 4.05479295 e-01, 8.14080284 e-01,
5     8.96450415 e+01, -3.02997261e-01, -2.77339444e+01,
6     7.47151897 e+00, -2.92233040e-01, -1.61741146e+01,
7     -1.17962045e +01]
8
9 >> intercept: 650.652022517
```

Price = $-3.56 \times CRIM + 0.41 \times ZN + 0.81 \times INDUS - 270.51 \times NOX + 89.65 \times RM - 0.30 \times AGE - 27.74 \times DIS + 7.47 \times RAD - 0.29 \times TAX - 16.17 \times PT + 0.08 \times B - 11.80 \times LSTAT + 650.65$

4.4 Testen van het model

4.4.1 Voorspellingen maken

CRIM	ZN	INDUS	NOX	RM	AGE	DIS	RAD	TAX	PT	B	LSTAT
0.11	0	12.03	0.57	6.80	89.30	2.39	1	273	21.00	393.45	6.48

Figuur 28: Voorspel de prijs van een huis met deze features

```
1 house = np.array([0.11, 0, 12.03, 0.57, 6.80, 89.30, 2.39, 1,
2 273, 21.00, 393.45, 6.48])
3
4 house = house.reshape(1, -1)
5
6 # met reshape wordt house:
7 # house = np.array([[0.11, 0, 12.03, 0.57, 6.80, 89.30, 2.39, 1,
8 # 273, 21.00, 393.45, 6.48]])
9
10 price = lregmodel.predict(house)
11
12 print('De prijs van het huis bedraagt: ', price)
13
14 >> De prijs van het huis bedraagt: 563.68335073
```

- `reshape(1, -1)` maakt een rijvector
- Werkelijke prijs: 562.00

4.5 Performantie en scores van het model

4.5.1 Mean Absolute Error (MAE)

Definitie 4.2 (MAE) De Mean Absolute Error (MAE) is *het gemiddelde van de absolute waarden van het verschil tussen de werkelijke waarden y_i en de voorgespelde waarden \hat{y}_i .*

$$MAE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (5)$$

```
1 from sklearn.metrics import mean_absolute_error
2
3 y_predicted = lregmodel.predict(X_test)
4 MAE = mean_absolute_error(y_test, y_predicted)
5
6 print('MAE= ', MAE)
7
8 >> MAE = 64.0090867586
```

4.5.2 Mean Squared Error (MSE)

Definitie 4.3 (MSE) De Mean Squared Error (MSE) is **het gemiddelde van de gekwadrateerde waarden** van het verschil tussen de werkelijke waarden y_i en de voorspelde waarden \hat{y}_i .

$$MSE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (6)$$

```
1 from sklearn.metrics import mean_squared_error
2
3 y_predicted = lregmodel.predict(X_test)
4 MSE = mean_squared_error(y_test, y_predicted)
5
6 print('MSE = ', MSE)
7
8 >> MSE = 7803.89332739
```

4.5.3 Determinatiecoëfficiënt

Definitie 4.4 (De determinatiecoëfficiënt R^2) De determinatiecoëfficiënt (R^2) is de variabiliteit van het model

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (7)$$

Bij perfecte voorspellingen is $R^2 = 1$

Een negatieve waarde voor R^2 betekent dat het model slechter scoort dan een horizontale lijn (= slechter dan het gemiddelde te nemen) ($y_i = \bar{y}$, \bar{y} is het gemiddelde van y)

```
1 from sklearn.metrics import r2_score
2
3 y_predicted = lregmodel.predict(X_test)
4 r2 = r2_score(y_test, y_predicted)
5
6 print('r2_score = ', r2)
7
8 # alternatieve manier voor het bepalen van de r2 score:
9 r2 = lregmodel.score(X_test, y_test)
10
11 >> r2 score = 0.754254234917
```

5 Feature engineering

Om een beter model te verkrijgen (en zo een betere R^2 score), kunnen we verschillende dingen doen:

- Meer data toevoegen
- Ander model kiezen, hyperparameter tuning
- Feature engineering

5.1 Normalisatie / Scaling

Definitie 5.1 (Normalisatie / Scaling) *Normalisatie of Scaling zorgt ervoor dat de features op dezelfde schaalverdeling staan*

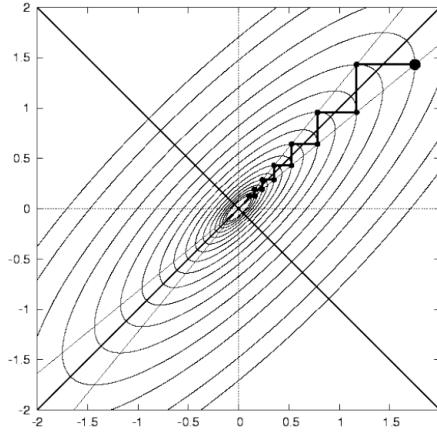
In ons voorbeeld van de huurprijs:

	CRIM	ZN	INDUS	NOX	RM	AGE	DIS	RAD	TAX	PT	B	LSTAT
count	441.000000	441.000000	441.000000	441.000000	441.000000	441.000000	441.000000	441.000000	441.000000	441.000000	441.000000	441.000000
mean	2.649013	9.988662	10.759479	0.547575	6.265785	67.632200	3.85189	8.478458	389.045351	18.387302	375.393853	12.165329
std	6.273766	19.941189	6.749778	0.112896	0.685393	27.997824	2.054524	8.000859	158.293650	2.164533	49.296266	6.032866
min	0.006320	0.000000	1.250000	0.385000	3.561000	2.900000	1.169100	1.000000	188.000000	12.600000	83.449997	1.730000
25%	0.081870	0.000000	5.190000	0.449000	5.877000	45.000000	2.122200	4.000000	277.000000	17.000000	377.730011	6.920000
50%	0.217190	0.000000	8.140000	0.524000	6.172000	74.500000	3.375100	5.000000	311.000000	18.700001	392.200012	10.740000
75%	1.656600	12.500000	18.100000	0.609000	6.590000	93.599998	5.231100	8.000000	432.000000	20.200001	396.899994	15.940000
max	67.920799	80.000000	27.740000	0.871000	8.780000	100.000000	10.710300	24.000000	711.000000	22.000000	396.899994	31.990000

NOX: 0.385 \mapsto 0.871 terwijl TAX: 188 \mapsto 711

Figuur 29: NOX: min = 0.385, max = 0.871; TAX: min = 188, max = 711

5.1.1 Voordelen

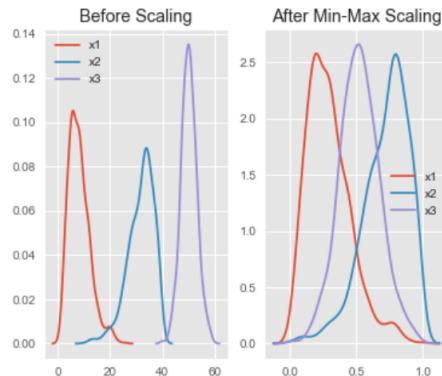


Figuur 30: Gradient Descent convergeert minder snel als features op een verschillende schaalgrootte staan. Normalisatie zorgt er dus voor dat het model sneller zal trainen.

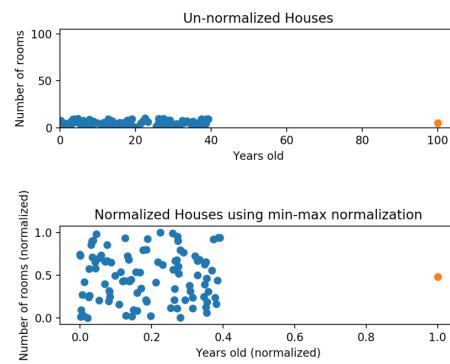
5.1.2 MIN-MAX-scaling

$$x_{s_i} = \frac{x_i - \text{Min}(x)}{\text{Max}(x) - \text{Min}(x)} \quad (8)$$

- Schaalt alle features tussen 0 en 1
- Werkt goed bij niet-Gaussiaanse distributies en bij kleine variantie
- De scheefheid (skew) blijft bewaard
- Gevoelig voor uitschieters



Figuur 31: Voor en na scaling



Figuur 32: Bij het voorbeeld van de huizenprijzen

```

1  from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler
2
3  scaler = MinMaxScaler().fit(X_train)
4  X_train = scaler.transform(X_train)
5  X_test = scaler.transform(X_test)
6
7  # alternatief
8  scaler = MinMaxScaler()
9  X_train = scaler.fit_transform(X_train)
10 X_test = scaler.transform(X_test)

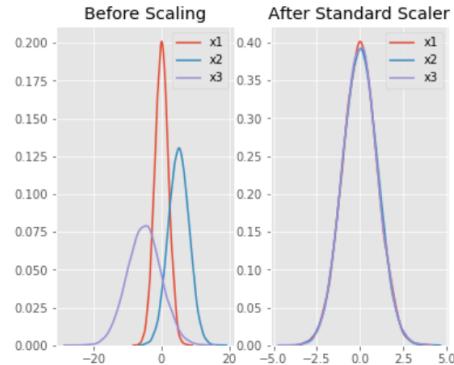
```

5.1.3 Standard scaling (normalisatie)

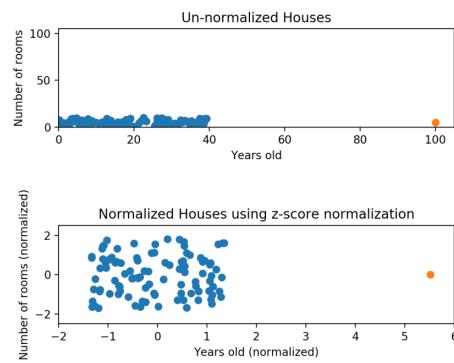
$$x_{s_i} = \frac{x_i - \text{mean}(x)}{\text{stddev}(x)} \quad (9)$$

- Geschaalde features;
 - Gemiddelde = 0
 - Standaardafwijking = 1

- Geschaalde features schommelen rond 0 (soms nodig bij deep learning)
- Vervormt geen relatieve afstanden tussen de feature waarden
- Kan beter overweg met uitschieters
- Garandeert geen genormaliseerde data op exact dezelfde schaal



Figuur 33: Voor en na standard scaling



Figuur 34: Bij het voorbeeld van de huizenprijzen

```

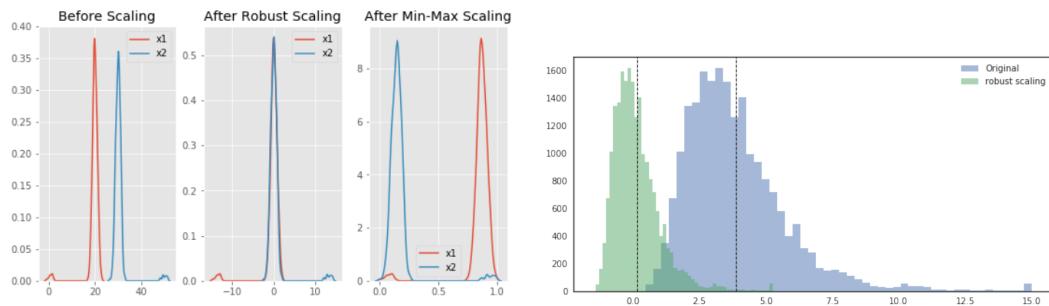
1  from sklearn.preprocessing import StandardScaler
2
3  scaler = StandardScaler().fit(X_train)
4  X_train = scaler.transform(X_train)
5  X_test = scaler.transform(X_test)
6
7  # alternatief
8  scaler = StandardScaler()
9  X_train = scaler.fit_transform(X_train)
10 X_test = scaler.transform(X_test)

```

5.1.4 Robust scaling

$$x_{s_i} = \frac{x_i - Q_2(x)}{Q_3(x) - Q_1(x)} \quad (10)$$

- Lijkt op MIN-MAX scaler maar gebruikt de interkwartielafstand ipv range
- Houdt geen rekening met uitschieters
- Gebruikt minder data bij het bepalen van de schaal
- Range van de genormaliseerde data is groter dan bij MIN-MAX scaling
- Garandeert geen genormaliseerde data op exact dezelfde schaal



Figuur 35: Voor en na robust scaling

```

1 from sklearn.preprocessing import RobustScaler
2
3 scaler = RobustScaler().fit(X_train)
4 X_train = scaler.transform(X_train)
5 X_test = scaler.transform(X_test)
6
7 # alternatief
8 scaler = RobustScaler()
9 X_train = scaler.fit_transform(X_train)
10 X_test = scaler.transform(X_test)

```

5.2 Feature expansion

5.2.1 Nieuwe features

Bedenken van nieuwe features

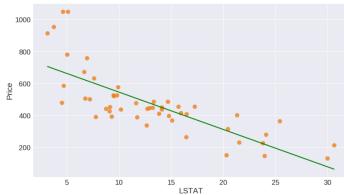
Voorbeelden:

- Uit de lengte en breedte van een huis de oppervlakte halen als nieuwe feature.
- Uit een start en eindpunt de afstand halen als nieuwe feature.
- Uit een datum afleiden welke dag van de week het is.
- Veranderingen in de features.
- Nieuwe opgemeten parameters.

5.2.2 Hogere-orde features

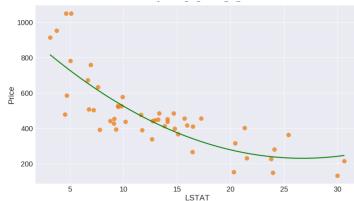
= Het verband tussen features en de target(s) is niet altijd lineair.

Voorbeeld: samenhang tussen LSTAT (x_1) en de huizenprijs (P)



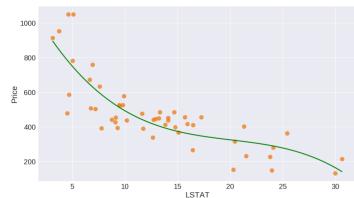
Figuur 36: $P = \theta_0 + \theta_1 x_1$

Toevoegen van een extra hogere-orde feature $x_2 = x_1^2$:

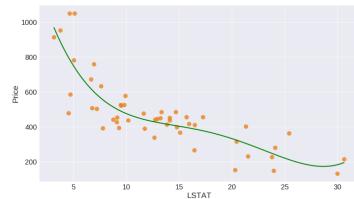


Figuur 37: $P = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2$

Toevoegen van een extra hogere-orde features $x_3 = x_1^3$ en $x_4 = x_1^4$:



Figuur 38: $P = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_3 x_3$



Figuur 39: $P = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_3 x_3 + \theta_4 x_4$

```

1 # toevoegen van een extra feature: LSTAT^2 LSTAT^3
2 dataset.insert(dataset.columns.size - 1, 'LSTAT^2', dataset.LSTAT**2)
3 dataset.insert(dataset.columns.size - 1, 'LSTAT^3', dataset.LSTAT**3)

```

	CRIM	ZN	INDUS	NOX	RM	AGE	DIS	RAD	TAX	PT	B	LSTAT	LSTAT^2	LSTAT^3	Price
0	0.00632	18.0	2.31	0.538	6.575	65.199997	4.0900	1	296	15.300000	396.899994	4.9	24.800400	123.505993	504.000000
1	0.02731	0.0	7.07	0.469	6.421	78.900000	4.9671	2	242	17.799999	396.899994	9.14	83.539606	763.562006	453.600008
2	0.02729	0.0	7.07	0.469	7.185	61.099998	4.9671	2	242	17.799999	392.829987	4.03	16.240902	65.460837	728.700016
3	0.03237	0.0	2.18	0.458	6.998	45.799999	6.0622	3	222	18.700001	394.630005	2.94	8.643600	25.412181	701.400032
4	0.06905	0.0	2.18	0.458	7.147	54.200001	6.0622	3	222	18.700001	396.899994	5.33	28.408899	151.419431	760.200016

Figuur 40: Resultaat toevoegen hogere-orde features

- Nu model met extra features trainen en nadien testen op de test set.
- Opgepast:** bij de test set moet je ook dezelfde features toevoegen.

5.3 One-hot encoding

- = Omzetten van categorische variabelen naar meerdere aparte features
- categorische variabelen = variabelen zonder echte waarden, de waarden stellen een categorie voor (niet altijd een nummer)
- ⇒ voor elke categorie een nieuwe kolom
- ‘Dummy Variable Trap’
 - = als een rij maar tot 1 categorie kan behoren (zie onderstaand voorbeeld, een appel is geen kip), dan zou je in principe 1 kolom kunnen schrappen en dan kan je toch dezelfde informatie krijgen.
 - $x_1 + x_2 + x_3 = 1 \Leftrightarrow x_1 = 1 - x_2 - x_3$
 - In de praktijk laat men dit gewoon staan.
 - (niet te kennen op examen)

Label Encoding			One Hot Encoding			
Food Name	Categorical #	Calories	Apple	Chicken	Broccoli	Calories
Apple	1	95	1	0	0	95
Chicken	2	231	0	1	0	231
Broccoli	3	50	0	0	1	50

Figuur 41: Voorbeeld One-hot encoding

```

1 # voeg de categorieën toe als kolommen
2 dataset = pd.concat(
3     [dataset, pd.get_dummies(dataset['food_name'], prefix='food')],
4     axis=1)
5 # verwijder de food_name kolom
6 dataset.drop(['food_name'], axis=1, inplace=True)
7 # toon de eerste 5 rijen:
8 dataset.head()

```

	food_name	Calories		Calories	food_Apple	food_Broccoli	food_Chicken	food_Chocolat
0	Apple	95	0	95	1	0	0	0
1	Chicken	231	1	231	0	0	1	0
2	Broccoli	50	2	50	0	1	0	0
3	Chocolat	549	3	549	0	0	0	1

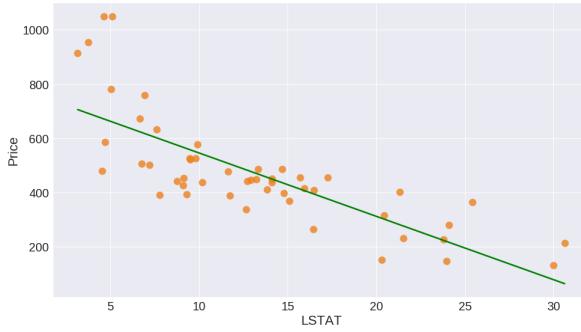
Figuur 42: Resultaat van dataset.head(), voor en na one-hot encoding

6 Underfitting & overfitting

6.1 Underfitting

Definitie 6.1 (Underfitting) *Underfitting treedt op wanneer een model de training data niet kan modeleren en ook niet kan generaliseren op nieuwe data.*

- *Het model is te 'simpel'*
- *Model met hoge bias*

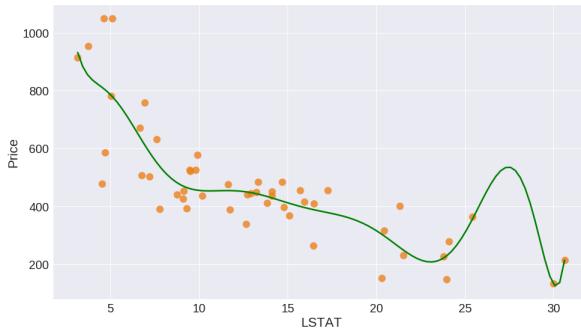


Figuur 43: Het model werkt voor sommige variabelen maar voor velen ook niet

6.2 Overfitting

Definitie 6.2 (Overfitting) *Overfitting treedt op wanneer een model de training data te goed modelleert en niet kan generaliseren op nieuwe data.*

- *Het model is te 'complex'*
- *De ruis van willekeurige fluctuaties in data worden opgepikt*
- *Model met een hoge variance*

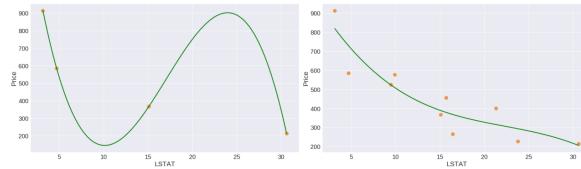


Figuur 44: Model met order ≈ 15

6.2.1 Impact van de grootte van de dataset

Afhankelijkheid van de grootte van de dataset (aantal observaties m):

- Bij weinig observaties: snel overfitting bij complexer model
- Bij veel observaties: minder snel overfitting bij complexer model



Figuur 45: Voorbeeld: 3de orde polynoom

6.3 Regularisatie (regularisation)

Definitie 6.3 (Regularisatie) Methode om de mate van bias van een hypothese te regelen en een goed evenwicht te vinden tussen underfitting en overfitting.

$$J(\theta) = \frac{1}{2 \cdot m} \sum_{i=1}^m (h_\theta(x_i) - y_i)^2 + R(\theta) \quad (11)$$

Definitie 6.4 ($R(\theta)$) $R(\theta)$ is de regularisatie-term.

Dit is een extra kostenterm die het gebruik van hogere orde features afstrafst tenzij ze de globale kostenfunctie doen dalen.

6.3.1 Voorbeeld regularisatie

$$J(\theta) = \frac{1}{2 \cdot m} \sum_{i=1}^m (h_\theta(x_i) - y_i)^2 + \lambda \theta \theta^\top$$

- $\theta = \{\theta_1, \dots, \theta_n\}$
 - intercept θ_0 wordt meestal niet geregulariseerd
- λ is een tuning parameter (hyper parameter), we moeten die zelf vinden
 - $\lambda = 0 \Rightarrow$ geen regularisatie

- $\lambda = \inf \Rightarrow \theta = 0$
- λ tussenin regelt de mate van regularisatie.

De tuningparameter λ regelt de complexiteit van de hypothese:

- Kleine waarde voor λ : lage bias, hoge variantie (overfitting)
- Grote waarde voor λ : hoge bias, lage variantie (underfitting)

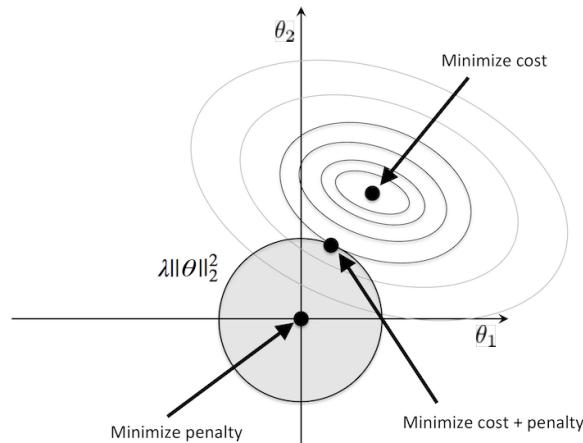
Afhankelijk van hoe R gedefinieerd wordt is er een andere benaming voor de regularisatie:

- Ridge regression (L2 regularisatie)
- Lasso regression (L1 regularisatie)

6.3.2 Regularisatie met L2 norm

$$J_{L2} = J + \lambda_2 \sum_{j=1}^m \theta_j^2$$

$$J_{L2} = \sum_{i=1}^n (\text{target}_i - \text{output}_i) + \lambda_2 \sum_{j=1}^m \theta_j^2$$

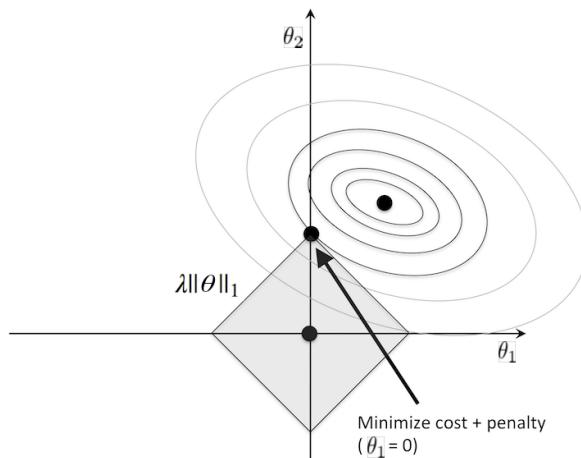


Figuur 46

6.3.3 Regularisatie met L1 norm

$$J_{L1} = J + \lambda_1 \sum_{j=1}^m |\theta_j|$$

$$J_{L1} = \sum_{i=1}^n (\text{target}_i - \text{output}_i) + \lambda_1 \sum_{j=1}^m |\theta_j|$$



Figuur 47

6.3.4 Voorbeeld regularisatie op huizenprijzen

Via Ridge of Lasso regressie met regularisatieparameter α

- Hoe groter α , hoe sterker de regularisatie en dus hoe simpler het model
- Hoe kleiner α , hoe zwakker de regularisatie en dus hoe complexer het model

```

1 regmodel = Ridge(alpha=0.14, tol=0.0001, fit_intercept=True)
2 regmodel.fit(X_train, y_train)
3 regmodel.score(X_test, y_test)
4 >> 0.79834480089914472
5
6 lregmodel = Lasso(alpha=0.5, tol=0.0001, fit_intercept=True)
7 lregmodel.fit(X_train, y_train)
8 lregmodel.score(X_test, y_test)
9 >> 0.8437113338085345

```

7 Classificatie

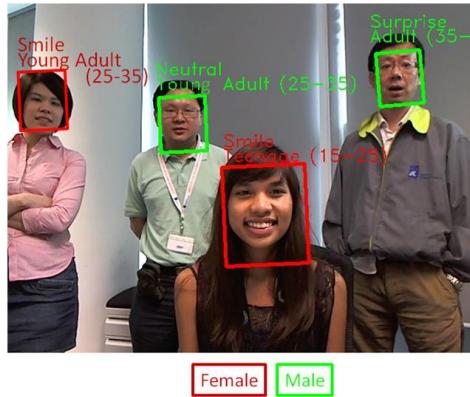
7.1 Wat is classificatie?

Definitie 7.1 (Classificatie) *Classificatie is een supervised learning techniek waarbij een getraind model niet geziene inputs toewijst aan één of meerdere gelabelde categorieën (classes)*

7.1.1 Voorbeelden

- Gezichtsherkenning
- Nummerplaatherkenning
- Spam detectie
- Medische diagnoses
- Voorspelling of een klant op een advertentie zal klikken

- Kwaliteitscontrole
- ...

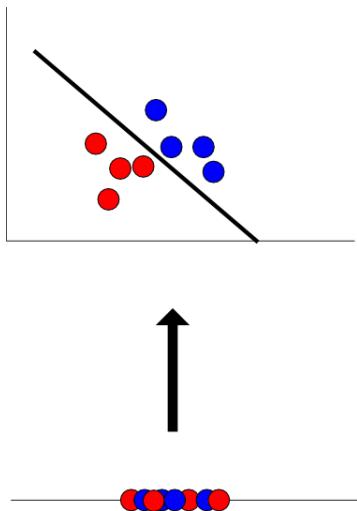


Figuur 48: Geslachtsherkenning + leeftijdsclassificatie

7.2 Types van classifiers

7.2.1 Binary (binomial) classifier

= verdeel de samples in **twee verschillende klassen**



Figuur 49: Voorbeeld: bepaal of een kanker goedaardig of kwaadaardig is

7.2.2 Multiclass classifier

Verdeel de samples in drie of meerdere verschillende klassen



Figuur 50: Voorbeelden: gezichtsherkenning, sentiment analyse

7.2.3 Multilabel classifier

Er kunnen meerdere labels aan een sample toegewezen worden. Een sample kan tot meerdere klassen behoren



Huis	Boom	Strand	Wolken	Bergen	Dieren
Ja	Ja	Nee	Ja	Nee	Nee

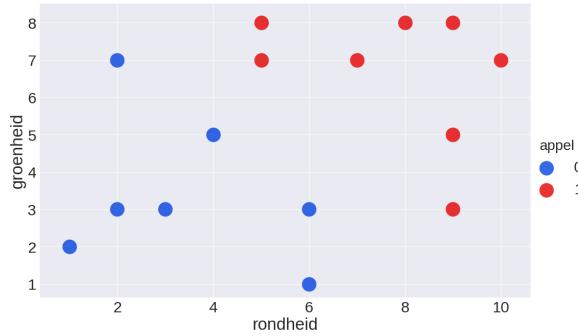
Figuur 51: Image content analysis, een film kan tot meerdere genres behoren

	rondheid	groenheid	appel
0	9	8	1
1	10	7	1
2	2	3	0
3	1	2	0
4	5	8	1
5	7	7	1
6	6	3	0
7	3	3	0
8	9	5	1
9	9	3	1
10	4	5	0
11	6	1	0
12	5	7	1
13	8	8	1
14	2	7	0

Figuur 52: Voorspel of een stuk fruit een appel is op basis van vorm en kleur

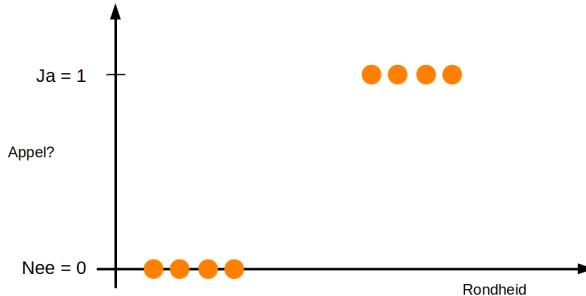
- features: rondheid en groenheid
- target: appel: ja/nee
- trainingset: 15 training samples

Bij classificatie is de output/target een (**discrete**) variabele/klasse

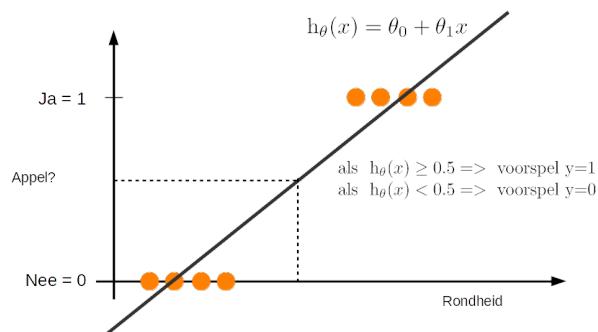


Figuur 53

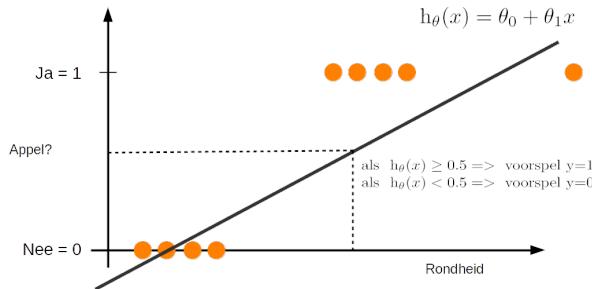
7.3 Waarom regressie geen goede optie is



Figuur 54: Voorbeeld: rondheid bepaalt of het een appel is of niet



Figuur 55



Figuur 56

TODO: meer uitleg

8 Logistische regressie

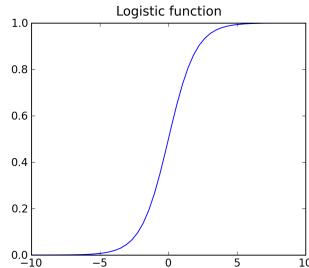
8.1 Het model

We willen dat het model $h_\theta(x)$ voldoet aan:

$$0 \leq h_\theta(x) \leq 1$$

- $h_\theta(x)$ = de geschatte kans dat $y = 1$ bij input x
- Voorbeeld: $h_\theta(x) = 0.80$
 - Het model is voor 80% zeker dat het om een appel gaat.

$$h_\theta(x) = \frac{1}{1 + e^{-\theta^\top x}} \quad (12)$$



Figuur 57

- $y = 1$ als $h_\theta(x) \geq 0.5 \Rightarrow \theta^\top x \geq 0$
- $y = 0$ als $h_\theta(x) < 0.5 \Rightarrow \theta^\top x < 0$

8.1.1 Interpretatie via voorbeeld appels

Het model is van de vorm:

$$h_\theta(x) = g(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2)$$

met $x_1 = \text{rondheid}$ en $x_2 = \text{groenheid}$

Veronderstel na training: $\theta_0 = -40, \theta_1 = 4, \theta_2 = 4$

- Voorspel $y = 1$ als $-40 + 4x_1 + 4x_2 \geq 0$
- Voorspel $y = 0$ als $-40 + 4x_1 + 4x_2 < 0$

Gegeven een rondheid van 8 en een groenheid van 6:

$$-40 + 4 \cdot 8 + 4 \cdot 6 = 16 \Rightarrow \text{Appel}$$

$$h_\theta(x) = \frac{1}{1+e^{-16}} = 0.999999887$$

Gegeven een rondheid van 5 en een groenheid van 4.5:

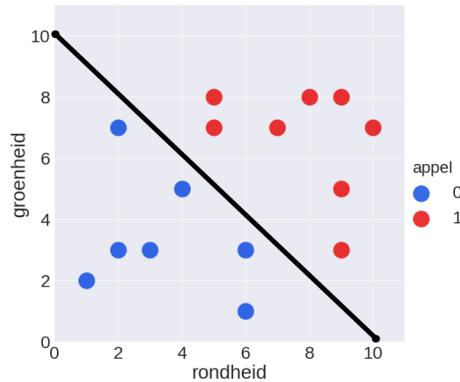
$$-40 + 4 \cdot 5 + 4 \cdot 4.5 = -2 \Rightarrow \text{Geen appel}$$

$$h_\theta(x) = \frac{1}{1+e^{-2}} = 0.12$$

- Het model is maar voor 12% zeker dat het om een appel gaat
- \Rightarrow Met 88% zekerheid gaat het volgens het model niet om een appel

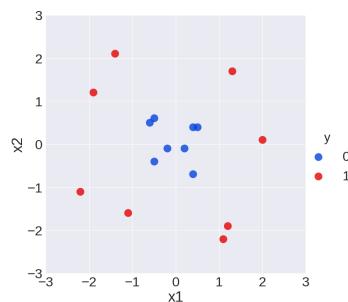
8.1.2 Grafische interpretatie via voorbeeld appels

- Op de scheidingslijn: $\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 = 0$
- In het voorbeeld: $-40 + 4x_1 + 4x_2 = 0$



Figuur 58

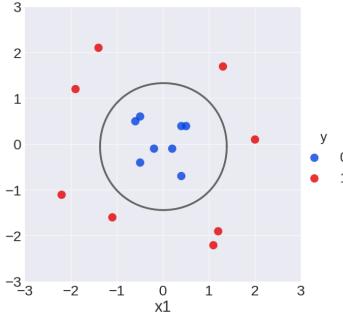
8.1.3 Wat als het model niet lineair is?



Figuur 59: Het model is niet lineair

Extra features: $h_\theta(x) = g(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_3 x_1^2 + \theta_4 x_2^2)$

- Veronderstel: $\theta_0 = -2, \theta_1 = 0, \theta_2 = 0, \theta_3 = 1, \theta_4 = 1$
- Voorspel $y = 1$ als $-2 + x_1^2 + x_2^2 \geq 0$



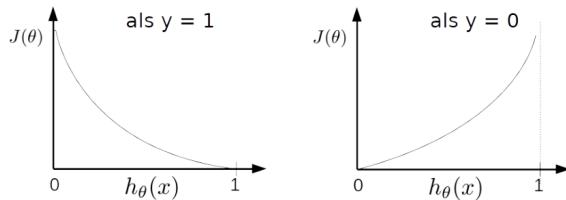
Figuur 60: $x_1^2 + x_2^2 \geq 2$ (vergelijking van een cirkel met straal $\sqrt{2}$)

8.2 De kostenfunctie

De kostenfunctie wordt:

$$J(\theta) = \begin{cases} -\ln(h_\theta(x)) & \text{als } y = 1 \\ -\ln(1 - h_\theta(x)) & \text{als } y = 0 \end{cases} \quad (13)$$

$$J(\theta) = -\frac{1}{m} \cdot \left[\sum_{i=1}^m y_i \ln(h_\theta(x_i)) + (1 - y_i) \cdot \ln(1 - h_\theta(x_i)) \right] \quad (14)$$



Figuur 61: Zoek de waarden voor θ die de kostenfunctie $J(\theta)$ minimaliseert via Gradient Descent (GDS)

8.3 Voorbeeld logistic regression met Sklearn (lineair model)

8.3.1 Preprocessing van de data

Analoog aan preprocessing bij lineaire regressie:

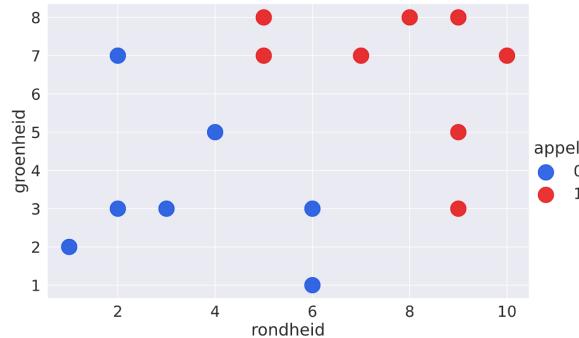
- Data inlezen
- Check op inconsistenties
- Check uitschieters
- Plot de data

- Splits op in features en targets
- Verdeel in een training en test set

```

1 # importeer de dataset
2 dataset = pd.read_csv('appels.csv')
3 # definieer de features
4 features = list(dataset.columns[:dataset.columns.size-1])
5 X = dataset[features].values
6 y = dataset['appel'].values
7 # lettergrootte voor de axis labels
8 sns.set(font_scale=2)
9 # definieer kleuren
10 colors = ['blue', 'red', 'greyish', 'faded_green', 'dusty_purple']
11 # plot
12 sns.lmplot(x='rondheid', y='groenheid', data=dataset,
13     fit_reg=False, hue='appel', palette=sns.xkcd_palette(colors),
14     scatter_kws={'s': 500}, size=7, aspect=1.5)

```



Figuur 62: Plot van de dataset

8.3.2 Trainen van het logistic regression model

```

1 # train een logistic regression classifier
2 logreg = linear_model.LogisticRegression(C=1e5)
3 # C = inverse of regularisation strength
4 # must be a positive float
5 # like in support vector machines: smaller values => stronger regularisation
6 logreg.fit(X, y)

7
8 print('coefficienten: ', logreg.coef_)
9 print('intercept: ', logreg.intercept_)

```

- Coefficiënten: $\theta_1 = 4.287$ en $\theta_2 = 4.062$
- Intercept: $\theta_0 = -43.941$

8.3.3 Classificeren van een nieuwe sample

```

1 # voorspel de klasse met rondheid = 8 en groenheid = 6
2 print(logreg.predict(np.array([8,6]).reshape(1, -1)))

```

```

3 kans = logreg.predict_proba(np.array([8,6]).reshape(1, -1))
4 print("Kans op appel/geen appel = ", kans)
5
6 # voorspel de klasse met rondheid = 4 en groenheid = 4
7 print(logreg.predict(np.array([4,4]).reshape(1, -1)))
8
9 kans = logreg.predict_proba(np.array([4,4]).reshape(1, -1))
10 print("Kans op appel/geen appel = ", kans)
11

```

Output:

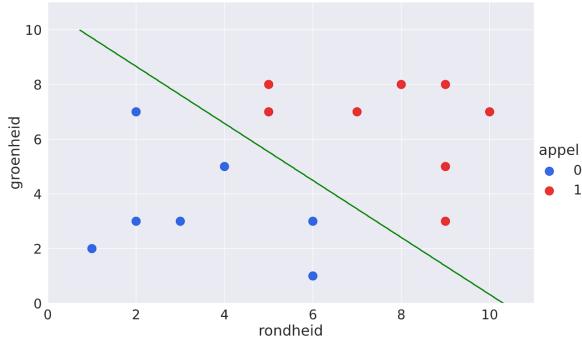
- kans op een appel/geen appel: 3.99395302e-07 | 9.99999601e-01
- kans op een appel/geen appel: 9.99973583e-01 | 2.64168196e-05

8.3.4 Visualiseer de decision boundary

```

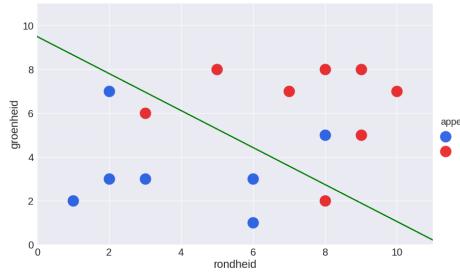
1 h = 0.01
2 rond_min = X[:,0].min()-2
3 rond_max = X[:,0].max()+2
4 groen_min = X[:,1].min()-2
5 groen_max = X[:,1].max()+2
6 xx, yy = np.meshgrid(np.arange(rond_min, rond_max, h),np.arange(groen_min, groen_max, h))
7 Z = logreg.predict(np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()])
8 Z = Z.reshape(xx.shape)
9 # font settings
10 sns.set(font_scale = 2)
11 # colors
12 colors = ["blue", "red", "greyish", "faded green", "dusty purple"]
13 sns.lmplot(x='rondheid',y='groenheid',data=dataset,
14     fit_reg=False,hue='appel',palette=sns.xkcd_palette(colors),
15     scatter_kws={'s':200}, height=8, aspect=1.5)
16 plt.ylim(0, 11)
17 plt.xlim(0, 11)
18 plt.contour(xx, yy, Z, colors='green')

```



Figuur 63: Visualisatie van de decision boundary

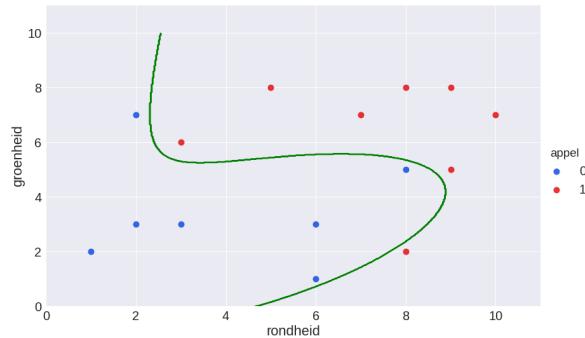
8.4 Voorbeeld logistic regression met Sklearn - niet-lineair



Figuur 64: Niet-lineair scheidbare dataset

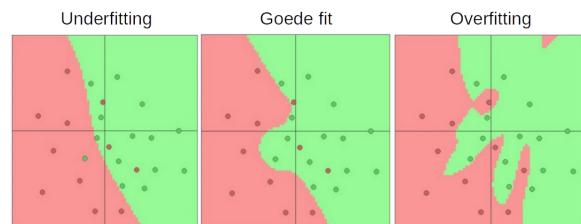
8.4.1 Feature engineering: toevoegen van hogere orde features

```
1 # Aanmaken van de hogere orde features
2 graad = 3
3
4 poly = PolynomialFeatures(graad)
5 Xp = poly.fit_transform(X)
6
7 # Train model op hogere orde features en visualiseer de decision boundary
8 logreg_poly = linear_model.LogisticRegression(C=1)
9 logreg_poly.fit(Xp, y)
```



Figuur 65: Resultaat: overfitting

8.4.2 Oplossing: regularisatie



Figuur 66: Regelen tussen underfitting en overfitting via regularisatie

- Via regularisatie een goed evenwicht zoeken tussen underfitting en overfitting
- In Scikit Learn `linear_model.LogisticRegression`:
 - C = inverse regularisatie sterkte
 - kleine waarden voor C \Rightarrow sterke regularisatie (overfitting)
 - grote waarden voor C \Rightarrow zwakke regularisatie (underfitting)

```

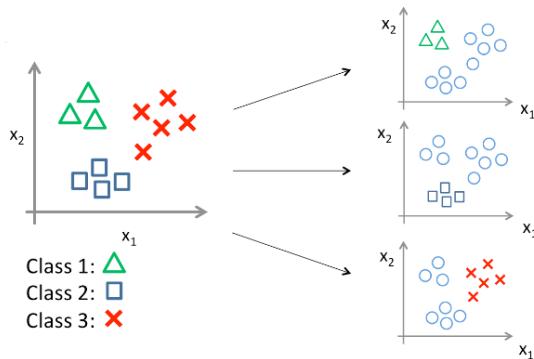
1 logreg = linear_model.LogisticRegression(C=100)
2 logreg.fit(Xf, y)

```

8.5 Multi-class classification

Data kan tot meerdere klassen behoren. We kunnen met zo'n data dus geen binaire classificatie doen.

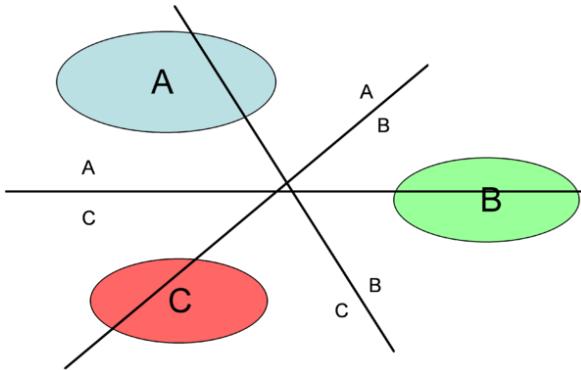
8.5.1 One-vs-all



Figuur 67: One-vs-All: 3 binaire classifiers

- "One-vs-Rest"
- Je classificeert 1 klasse tegen de rest
- Je hebt dus 1 classifier per klasse
- Totaal aantal classifiers: N
- Gevoeliger voor niet-gebalanceerde data (als er in een bepaalde klasse weinig datasamples zijn)

8.5.2 One-vs-One



Figuur 68: One-vs-One

- Je hebt $\frac{N \cdot (N-1)}{2}$ classifiers (met N aantal klassen) \Rightarrow rekenintensief
- Minder gevoelig voor niet-gebalanceerde data

9 Evaluatie van een classifier

	p' (Predicted)	n' (Predicted)
P (Actual)	True Positive	False Negative
n (Actual)	False Positive	True Negative

Figuur 69: Confusion matrix

Stel: we hebben een binaire classifier die klasse 0 of 1 als output heeft. We vergelijken de verwachte waarden uit de classifier met de werkelijke waarden uit de testset.

- True Positive = de verwachte waarde en werkelijke waarde zijn beide 1
- False Positive = de verwachte waarde is 1, terwijl de werkelijke waarde 0 is
- False Negative = de verwachte waarde is 0, terwijl de werkelijke waarde 1 is
- True Negative = de verwachte waarde en werkelijke waarde zijn beide 0

We tellen het aantal TP, FP, FN, TN om te gebruiken in de volgende formules. Deze formules kunnen we gebruiken om een classifier te evalueren.

9.1 Accuracy

$$\text{Accuracy} = \frac{TP + TN}{TP + FP + FN + TN} \quad (15)$$

- Probleem: stel dat $TN = 990$, $FN = 10$, $TP = 0$, $FP = 0$
- Dan heb je een accuracy van 99%, terwijl je eigenlijk geen enkele positieve predictie
- Accuracy is dus niet altijd veelzeggend \Rightarrow nood aan andere termen

9.2 True Positive Rate (TPR)

= Recall = Sensitivity = Hit rate

$$\text{Recall} = \frac{TP}{TP + FN} \quad (16)$$

- Wordt vaak in combinatie gebruikt met Precision (PPV)

TODO

9.3 Positive Predictive Value (PPV)

= Precision

$$\text{Precision} = \frac{TP}{TP + FP} \quad (17)$$

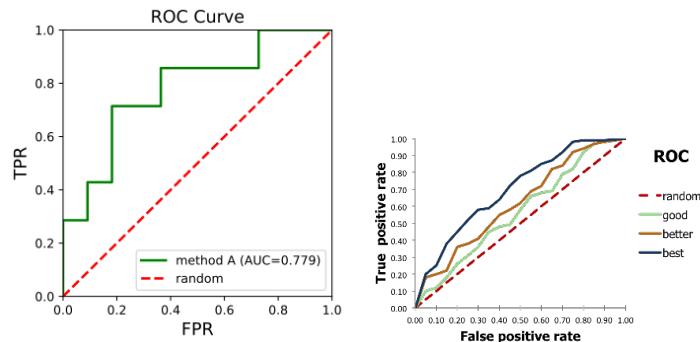
9.4 F1 Score

$$\text{F1 score} = \frac{2 \cdot (\text{Recall} \cdot \text{Precision})}{(\text{Recall} + \text{Precision})} \quad (18)$$

- Is een harmonisch gewogen gemiddelde van de recall en de precision

9.5 Receiver Operating Characteristic (ROC)

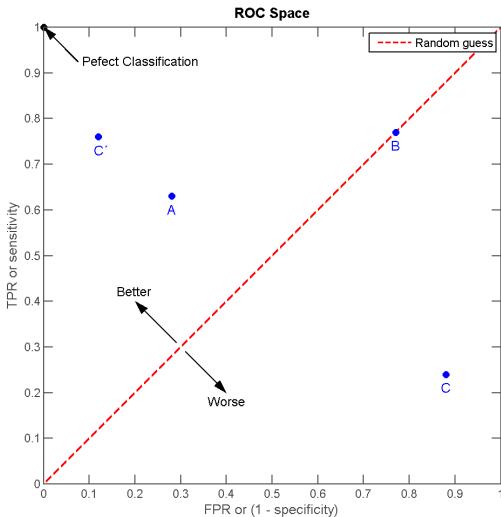
- Wordt gebruikt bij binaire classifiers (2 klassen)
- Wordt gebruikt om beter modellen te selecteren en minder goede te verwerpen



Figuur 70: ROC Curve (x-as = FPR, y-as = TPR)

We gebruiken voor de assen de TPR en FPR

- True Positive Rate = Sensitivity = Recall (zie hierboven)
- False Positive Rate = $1 - \text{Specificity} = \frac{FP}{FP+TN}$
- Specificity = $\frac{TN}{FP+TN}$



Figuur 71: Classifier C' is een betere classifier dan classifier A

- Bij classifier C' hebben we het omgekeerde van C genomen
- We noemen linksboven 'ROC heaven' en rechtsbeneden 'ROC Hell'.
- De rode stippelijn is een classifier die gewoon gokt.
- B is een classifier die even goed is als een gewone gok.

9.5.1 ROC curve en AUC (Area Under ROC Curve)

ROC bij verschillende threshold settings:

Example nr.	y_true	P(y=1 x)			
1	1	0.93			
2	0	0.55			
3	0	0.30			
4	0	0.53			
5	1	0.81			
6	1	0.69			
7	0	0.42			
8	1	0.28			
9	1	0.96			
10	0	0.51			
Actual (y=1)	Predicted (y=1)	Predicted (y=0)			
4	4	1			
3	3	2			

Figuur 72: $p(y = 1|x)$ – threshold = 0.5

- Testset met 10 samples
- $TPR = \frac{TP}{TP+FN} = \frac{4}{4+1} = 0.8$

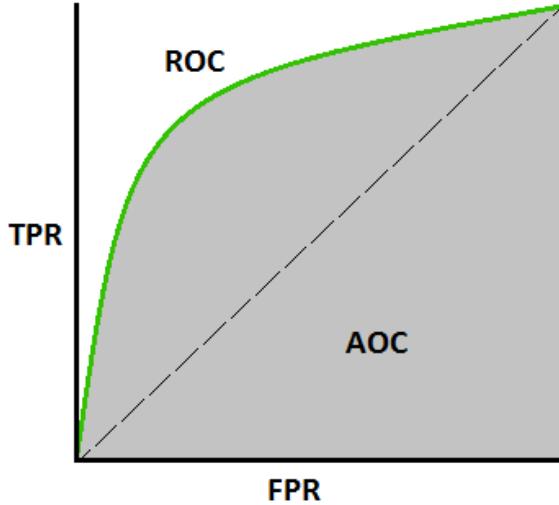
- $FPR = \frac{FP}{FP+TN} = \frac{3}{3+2} = 0.6$

Example nr.	y_true	P(y=1 x)
1	1	0.93
2	0	0.55
3	0	0.30
4	0	0.53
5	1	0.81
6	1	0.69
7	0	0.42
8	1	0.28
9	1	0.96
10	0	0.51

	Predicted (y=1)	Predicted (y=0)
Actual (y=1)	4	1
Actual (y=0)	0	5

Figuur 73: $p(y = 1|x)$ – threshold = 0.6

- Met $p(y = 1|x)$ – threshold = 0.6 krijgen we dezelfde TRP, maar een betere FPR
- $TPR = \frac{TP}{TP+FN} = \frac{4}{4+1} = 0.8$
- $FPR = \frac{FP}{FP+TN} = \frac{0}{0+5} = 0$



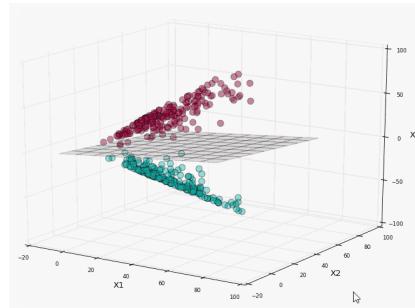
Figuur 74: AOC of AuROC = Area under ROC

- Stel dat de threshold 0 is:
 - Dan is TPR = 100%
 - Maar FPR is ook 100%
- Stel dat de threshold dichter bij 1 komt (bv: 0.95):
 - Dan is TPR dichter bij 0%
 - En FPR ook dichter bij 0%
- Je kiest de beste ROC \Rightarrow ROC met grootste AOC

10 Support Vector Machines (SVM)

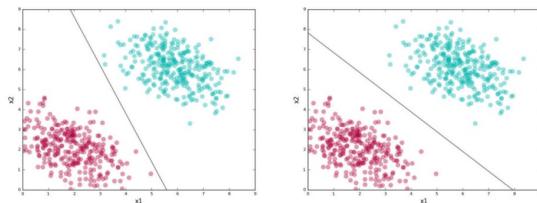
10.1 Wat is een SVM?

Definitie 10.1 (SVM) Een SVM is een supervised ML algoritme dat zowel voor classificatie als regressie gebruikt kan worden. Classificatie gebeurt door het vinden van een hyper-plane die een optimale scheiding maakt tussen twee verschillende klassen.



Figuur 75: Grafiek: hyper-plane die een optimale scheiding maakt

10.1.1 Welke classifier zou je verkiezen?

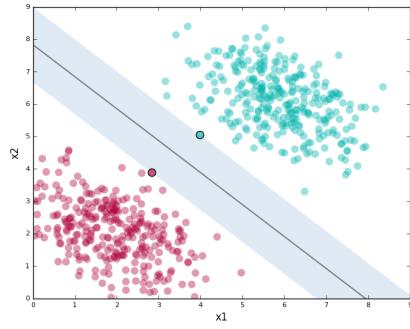


Figuur 76

- Beide scheiden de data perfect
- Het gaat er niet om welke er best presteert op de training data, maar wel op de test data
- De rechtse classifier is meer robuust: de meeste punten liggen verder van de lijn in vergelijking met de linkse

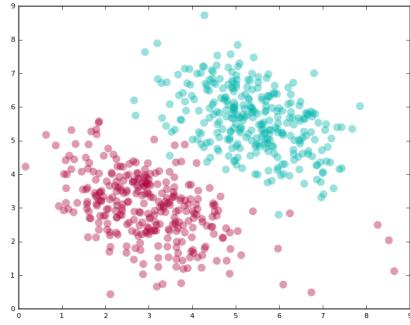
10.2 Hoe een SVM classificeert

- Zoek scheidingslijn die de trainingset zo goed mogelijk scheiden
- Kies de scheidingslijn die de grootste afstand (margin) heeft tot de punten die er het dichtst bij gelegen zijn
- De dichtsbij gelegen punten noemen we de **support vectors**
- SVM = Large margin classifier



Figuur 77: Scheidingslijn kiezen

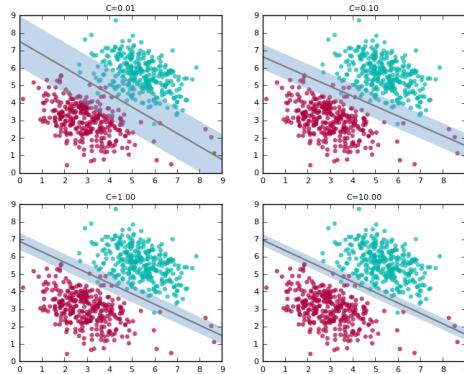
10.2.1 Wat als een perfecte lineaire scheiding niet mogelijk is?



Figuur 78

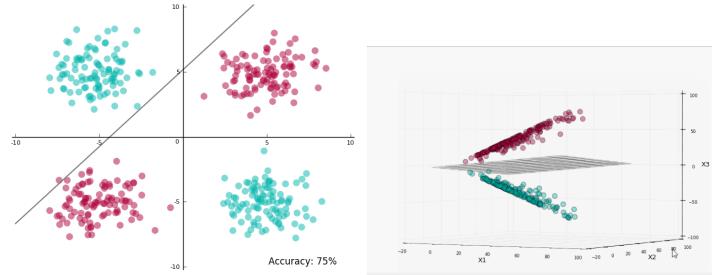
Antwoord: werken met een regularisatieparameter C

- Afweging tussen correcte classificatie op de training set en een grote marge tussen de klassen (large margin)
- Grote C -waarde: constraints zijn moeilijk te negeren \Rightarrow smalle marge
- Kleine C -waarde: constraints kunnen makkelijker genegeerd worden \Rightarrow brede marge



Figuur 79

10.2.2 Wat bij niet-lineair scheidbare gegevens

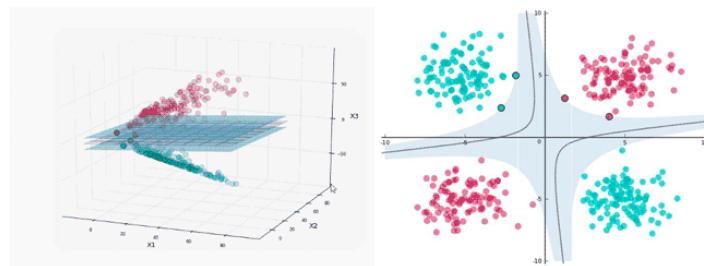


Figuur 80: Niet-lineair scheidbare gegevens

Oplossing: transformeer de data naar een hogere dimensie gevolgd door lineaire scheiding

Bv:

- $X_1 = x_1^2$
- $X_2 = x_2^2$
- $X_3 = \sqrt{2} \cdot x_1 \cdot x_2$



Figuur 81: Resultaat na transformatie naar hogere ordes

10.3 Kernels

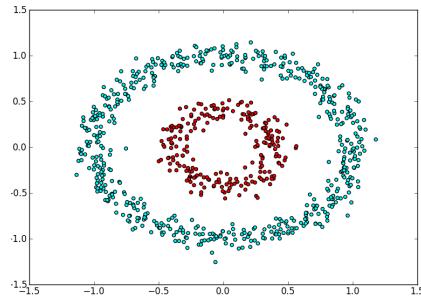
Projecteer de data in een hogere dimensie en probeer lineair te scheiden met behulp van een kernel:

10.3.1 Meest gebruikte kernels

- **RBF - Radial Basis Function (Gaussiaanse kernel)**
- Polynomial kernel
- Histogram kernel
- **Lineaire kernel = SVM zonder kernel**

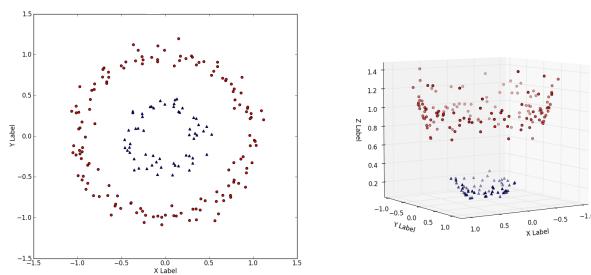
10.3.2 Voorbeeld

Hoe kan je onderstaande klassen scheiden?



Figuur 82: Voorbeeld

Oplossing: Gebruik een Gaussiaanse (RBF) kernel



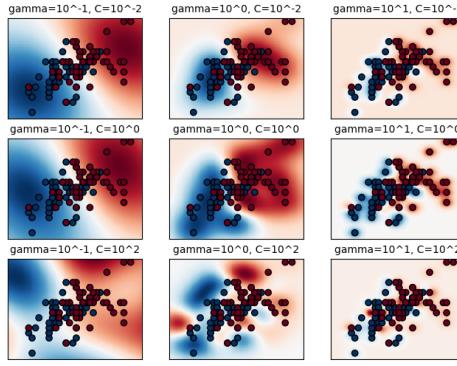
Figuur 83: Voorbeeld ("Donut problem")

- Visualisatie: <https://www.youtube.com/watch?v=3liCbRZPrZA>

10.3.3 Parameter gamma

De parameter gamma regelt de breedte van de RBF kernel

- Kleine gamma \Rightarrow brede RBF kernels
 - Te kleine gamma leidt ertoe dat het het model de complexiteit van het model niet kan capteren (**underfitting**)
- Grote gamma \Rightarrow smalle RBF kernels
 - Te grote gamma leidt tot **overfitting**
- Bij gebruik van een RBF kernel: **feature scaling** (=normalisatie) toepassen



Figuur 84: De parameter γ regelt de breedte van de RBF kernels

10.3.4 Hyperparameters

Implementeren van een SVM:

- Test lineaire kernel (=geen kernel) en RBF kernel
- Tune de parameter C
- Bij gebruik van RBF kernel: tune zowel de parameters C als γ

10.4 Motivatie voor het gebruik van een SVM

- Kan zowel gebruikt worden voor regressie als classificatie (en zelfs clustering).
- Werkt goed op kleine datasets (in tegenstelling tot neurale netwerken en deep learning).
- Is nog altijd effectief wanneer het aantal features groter is dan het aantal training samples.
- Het werkt goed bij een groot aantal features (high dimensional space).
- Gebruikt niet alle training examples tijdens training \Rightarrow geheugenefficiënt.
- Geen lokale minima/optima, maar globaal optimum.

10.5 Logistische regressie vs SVM

10.5.1 Wanneer welke classifier kiezen?

- Wanneer het aantal features groot is ten opzichte van het aantal training samples:
 - \Rightarrow Gebruik logistische regressie of SVM zonder kernel (=lineaire kernel)
- Wanneer het aantal features klein is en het aantal training samples behoorlijk
 - \Rightarrow Gebruik SVM met RBF kernel
- Bij een klein aantal features met een groot aantal training samples
 - \Rightarrow Creëer meer features
 - \Rightarrow Gebruik logistic regression of SVM zonder kernel (=lineaire kernel)

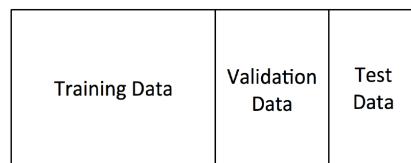
11 Cross-validatie

Cross-validatie gaat ons toelaten om automatisch goede parameters te vinden voor ons model

11.1 Verschillende types cross-validatie

- Hold Out cross-validation
- K-fold cross-validation
- Leave One Out cross-validation
- Bootstrap cross-validation

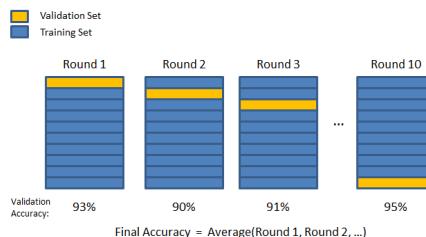
11.1.1 Hold out cross-validation



Figuur 85

- Training data: om model mee te trainen
- Validation data: tuning van hyper parameters en model selection
- Test data: uiteindelijke test van het best gevalideerde model op nog nooit geziene data

11.1.2 K-fold cross-validation

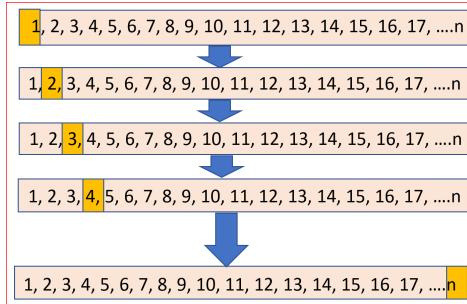


Figuur 86: Voorbeeld: 10-fold cross validation. De validation set is 1/10 van de trainingset

- We berekenen de validation accuracy K keer
- Met telkens een andere keuze trainingset en validation set
- De validation set is 1/K van de trainingset, de rest wordt gebruikt om te trainen
- We nemen van alle K validation accurancies het gemiddelde om zo een final accuracy te bekomen

11.1.3 Leave one out cross-validation

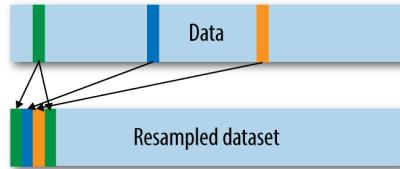
- $K = N$ (aantal examples in de training set)
- Evenveel rondes als aantal examples



Figuur 87: Leave one out cross-validation

11.1.4 Bootstrap cross-validation

- Sampling met teruglegging
- Validatie op niet-geselecteerde examples

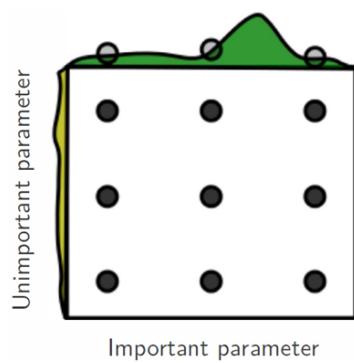


Figuur 88: Bootstrap cross-validation

11.2 Hyperparameter tuning via cross-validatie

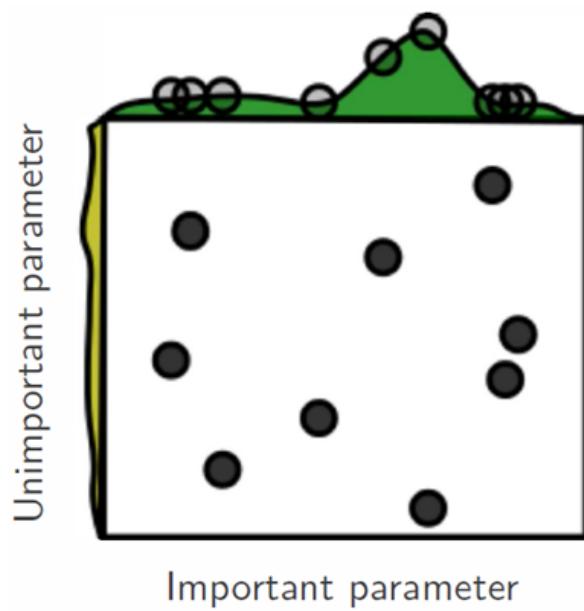
11.2.1 Grid search

- We zetten de parameters op een grid
- We testen ons model met elke combinatie van parameters in de grid, bv:
 - x-waarden = regularisatieparameter C
 - y-waarden = gamma



Figuur 89

11.2.2 Random search



Figuur 90: Hetzelfde als grid search, maar met random punten