5. Klassifikation

Inhalt dieses Kapitels

5.1 Einleitung

Das Klassifikationsproblem

- Gegeben: eine Menge O von Objekten des Formats $(o_1, \ldots, o_d)$
  mit *Attributen* A_i, $1 \le i \le d$, und Klassenzugehörigkeit $c_i, c_i \in C = \{c_1, \ldots, c_k\}$
- Gesucht:
  die Klassenzugehörigkeit für Objekte aus $D \setminus O$
  ein *Klassifikator* $K : D \rightarrow C$
- Abgrenzung zum Clustering
  Klassifikation: Klassen apriori bekannt, und es gibt Trainingsdaten
  Clustering: Klassen werden erst gesucht
- Verwandtes Problem: *Vorhersage* (Prediction)

gesucht ist der Wert für ein numerisches Attribut
Methode z.B. Regression

5.1 Einleitung

Beispiel

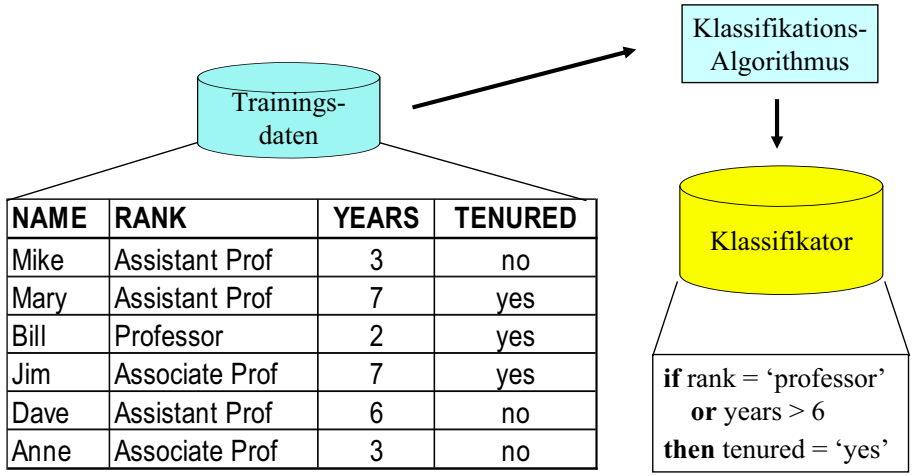
ID	Alter	Autotyp	Risiko
1	23	Familie	hoch
2	17	Sport	hoch
3	43	Sport	hoch
4	68	Familie	niedrig
5	32	LKW	niedrig

Einfacher Klassifikator

```
if Alter > 50 then Risikoklasse = Niedrig;
if Alter ≤ 50 and Autotyp=LKW then Risikoklasse=Niedrig;
if Alter ≤ 50 and Autotyp ≠ LKW
                then Risikoklasse = Hoch.
```


5.1 Der Prozess der Klassifikation

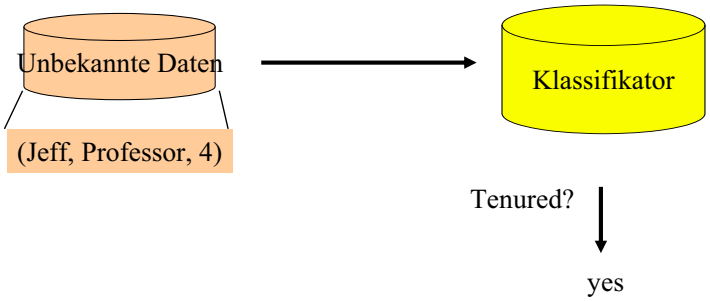
Konstruktion des Modells



NAME	RANK	YEARS	TENURED
Mike	Assistant Prof	3	no
Mary	Assistant Prof	7	yes
Bill	Professor	2	yes
Jim	Associate Prof	7	yes
Dave	Assistant Prof	6	no
Anne	Associate Prof	3	no

5.1 Der Prozess der Klassifikation

Anwendung des Modells



manchmal: keine Klassifikation unbekannter Daten
sondern „nur“ besseres Verständnis der Daten

5.1 Bewertung von Klassifikatoren

Grundbegriffe

- Klassifikator ist für die Trainingsdaten optimiert,
  liefert auf der Grundgesamtheit der Daten evtl. schlechtere Ergebnisse
  ➡ *Overfitting*

- *Train-and-Test*
  Aufteilung der Menge O in zwei Teilmengen:
  - *Trainingsmenge*
    zum Lernen des Klassifikators (Konstruktion des Modells)
  - *Testmenge*
    zum Bewerten des Klassifikators

5.1 Bewertung von Klassifikatoren

Grundbegriffe

- Train-and-Test nicht anwendbar, wenn nur wenige Objekte mit bekannter Klassenzugehörigkeit
- Stattdessen: m-fache *Überkreuz-Validierung* (*Cross-Validation*)
- Idee
  - teile die Menge O in m gleich große Teilmengen
  - verwende jeweils $m-1$ Teilmengen zum Training und die verbleibende Teilmenge zur Bewertung
  - kombiniere die erhaltenen m Klassifikationsfehler (und die m gefundenen Modelle!)

5.1 Bewertung von Klassifikatoren

Gütemaße für Klassifikatoren

- Klassifikationsgenauigkeit
- Kompaktheit des Modells
  z.B. Größe eines Entscheidungsbaums
- Interpretierbarkeit des Modells
  wieviel Einsichten vermittelt das Modell dem Benutzer?
- Effizienz
  der Konstruktion des Modells
  der Anwendung des Modells
- Skalierbarkeit für große Datenmengen
  für sekundärspeicherresidente Daten
- Robustheit
  gegenüber Rauschen und fehlenden Werten

5.1 Bewertung von Klassifikatoren

Gütemaße für Klassifikatoren

- Sei K ein Klassifikator, $TR \subseteq O$ die Trainingsmenge, $TE \subseteq O$ die Testmenge. Bezeichne $C(o)$ die tatsächliche Klasse eines Objekts o.
- *Klassifikationsgenauigkeit* (classification accuracy) von K auf TE:

$$G_{TE}(K) = \frac{|\{o \in TE \,|\, K(o) = C(o)\}|}{|TE|}$$

- *Tatsächlicher Klassifikationsfehler* (true classification error)

$$F_{TE}(K) = \frac{|\{o \in TE \,|\, K(o) \neq C(o)\}|}{|TE|}$$

- *Beobachteter Klassifikationsfehler* (apparent classification error)

$$F_{TR}(K) = \frac{|\{o \in TR \,|\, K(o) \neq C(o)\}|}{|TR|}$$

5.2 Bayes-Klassifikatoren

Motivation

- gegeben ein Objekt o und zwei Klassen *positiv* und *negativ*
- drei unabhängige Hypothesen h_1, h_2, h_3
- die A-posteriori-Wahrscheinlichkeiten der Hypothesen für gegebenes o

  $P(h_1|o) = 0{,}4$,
  $P(h_2|o) = 0{,}3$,
  $P(h_3|o) = 0{,}3$
- die A-posteriori-Wahrscheinlichkeiten der Klassen für gegebene Hypothese

  $P(negativ|h_1) = 0$, $P(positiv|h_1) = 1$
  $P(negativ|h_2) = 1$, $P(positiv|h_2) = 0$
  $P(negativ|h_3) = 1$, $P(positiv|h_3) = 0$

➡ o ist mit Wahrscheinlichkeit 0,4 *positiv*, mit Wahrscheinlichkeit 0,6 *negativ*

5.2 Optimaler Bayes-Klassifikator

Grundbegriffe

- Sei H = $\{h_1, \ldots, h_l\}$ eine Menge *unabhängiger* Hypothesen.
- Sei o ein zu klassifizierendes Objekt.
- Der *optimale Bayes-Klassifikator* ordnet o der folgenden Klasse zu:

$$\underset{c_j \in C}{argmax} \sum_{h_i \in H} P(c_j|h_i) \cdot P(h_i|o)$$

- im obigen Beispiel: o als *negativ* klassifiziert
- Kein anderer Klassifikator mit demselben A-priori-Wissen erreicht im Durchschnitt eine bessere Klassifikationsgüte.

➡ *optimaler* Bayes-Klassifikator

5.2 Optimaler Bayes-Klassifikator

Grundbegriffe

- Vereinfachung: immer genau eine der Hypothesen h_i gültig
- vereinfachte Entscheidungsregel $\underset{c_j \in C}{argmax}\, P(c_j|o)$

die $P(c_j|o)$ sind meist unbekannt

- Umformung mit Hilfe des Satzes von Bayes

$$\underset{c_j \in C}{argmax}\; P(c_j|o) = \underset{c_j \in C}{argmax}\; \frac{P(o|c_j) \cdot P(c_j)}{P(o)} = \underset{c_j \in C}{argmax}\; P(o|c_j) \cdot P(c_j)$$

- endgültige Entscheidungsregel des optimalen Bayes-Klassifikators

$$\underset{c_j \in C}{argmax}\; P(o|c_j) \cdot P(c_j)$$

➡ *Maximum-Likelihood-Klassifikator*

5.2 Naiver Bayes-Klassifikator

Grundbegriffe

- Schätzung der $P(c_j)$ als beobachtete Häufigkeit der einzelnen Klassen
- Schätzung der $P(o|\ c_j)$?
- Annahmen des naiven Bayes-Klassifikators
  - $o = (o_1, \ldots, o_d)$
  - die Attributwerte o_i sind für eine gegebene Klasse *bedingt unabhängig*
- Entscheidungsregel des *naiven Bayes-Klassifikators*

$$\underset{c_j \in C}{argmax}\ P(c_j) \cdot \prod_{i=1}^{d} P(o_i|c_j)$$

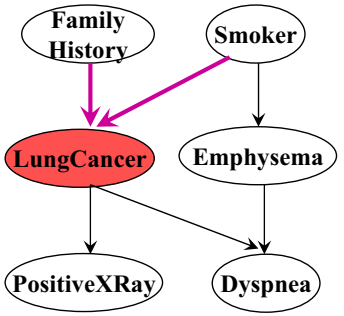
5.2 Bayes-Netzwerke

Grundbegriffe

- Graph mit Knoten = *Zufallsvariable* und Kante = *bedingte Abhängigkeit*
- Jede Zufallsvariable ist bei gegebenen Werten für die Vorgänger-Variablen bedingt unabhängig von allen Zufallsvariablen, die keine Nachfolger sind.
- Für jeden Knoten (Zufallsvariable): Tabelle der bedingten Wahrscheinlichkeiten
- Trainieren eines Bayes-Netzwerkes
  - bei gegebener Netzwerk-Struktur und allen bekannten Zufallsvariablen
  - bei gegebener Netzwerk-Struktur und teilweise unbekannten Zufallsvariablen
  - bei apriori unbekannter Netzwerk-Struktur

5.2 Bayes-Netzwerke

Beispiel



	(FH,S)	(FH,~S)	(~FH,S)	(~FH,~S)
LC	0.8	0.5	0.7	0.1
~LC	0.2	0.5	0.3	0.9

bedingte Wahrscheinlichkeiten für LungCancer

bei gegebenen Werten für FamilyHistory und Smoker liefert der Wert für Emhysema keine zusätzliche Information über LungCancer

5.2 Klassifikation von Texten

Grundlagen

- Anwendungen (z.B. [Craven et al. 1999], [Chakrabarti, Dom & Indyk 1998])

  Filterung von Emails

  Klassifikation von Webseiten
- Vokabular $T = \{t_1, \ldots, t_d\}$ von relevanten Termen
- Repräsentation eines Textdokuments $o = (o_1, \ldots, o_d)$
- o_i: Häufigkeit des Auftretens von t_i in o
- Methode
  - Auswahl der relevanten Terme
  - Berechnung der Termhäufigkeiten
  - Klassifikation neuer Dokumente

Auswahl der Terme

- Reduktion der auftretenden Worte auf Grundformen

  Stemming

  Abhängigkeit von der Sprache der Texte
- Einwort- oder Mehrwort-Terme?
- Elimination von Stoppwörtern
- weitere Reduktion der Anzahl der Terme

bis zu 100 000 Terme

Reduktion der Anzahl der Terme

- optimaler Ansatz

  $O(2^{\text{AnzahlTerme}})$ Teilmengen

  optimale Teilmenge läßt sich nicht effizient bestimmen

- Greedy-Ansatz

  bewerte die „Separationsfähigkeit“ jedes Terms einzeln

  sortiere die Terme nach dieser Maßzahl absteigend

  wähle die ersten d Terme als Attribute aus

Klassifikation neuer Dokumente

- Anwendung des naiven Bayes-Klassifikators

aber: Häufigkeiten der verschiedenen Terme typischerweise korreliert

- wichtigste Aufgabe:

  Schätzung der $P(o_j | c)$ aus den Trainingsdokumenten
- Generierung eines Dokuments o der Klasse c mit n Termen

  Bernoulli-Experiment:

  n mal eine Münze werfen,

  die für jeden Term t_i eine Seite besitzt

Klassifikation neuer Dokumente

- Wahrscheinlichkeit, daß t_i nach oben kommt

  $f(t_i, c)$: relative Häufigkeit des Terms t_i in der Klasse c
- Problem
  - Term t_i tritt in keinem Trainingsdokument der Klasse c_j auf
  - t_i tritt in einem zu klassifizierenden Dokument o auf
  - in o treten ebenfalls „wichtige“ Terme der Klasse c_j auf

vermeide $P(o_j | c) = 0$

Glättung der absoluten Häufigkeiten

5.2 Klassifikation von Texten

Experimentelle Untersuchung [Craven et al. 1999]

- Trainingsmenge: 4127 Webseiten von Informatik-Instituten
- Klassen: department, faculty, staff, student, research project, course, other
- 4-fache Überkreuz-Validierung

  drei der Universitäten zum Training, vierte Universität zum Test
- Zusammenfassung der Ergebnisse
  - Klassifikationsgenauigkeit 70% bis 80 % für die meisten Klassen
  - Klassifikationsgenauigkeit 9% für Klasse *staff*

    aber 80% korrekt in Oberklasse *person*
  - schlechte Klassifikationsgenauigkeit für Klasse *other*

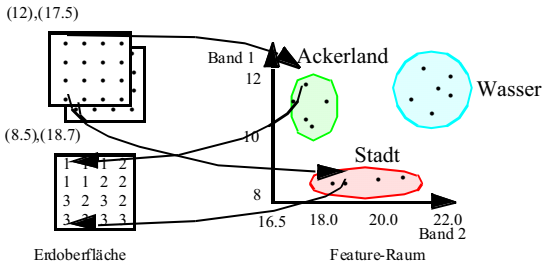
    große Varianz der Dokumente dieser Klasse

5.2 Interpretation von Rasterbildern

Motivation

- *automatische* Interpretation von d Rasterbildern eines bestimmten Gebiets

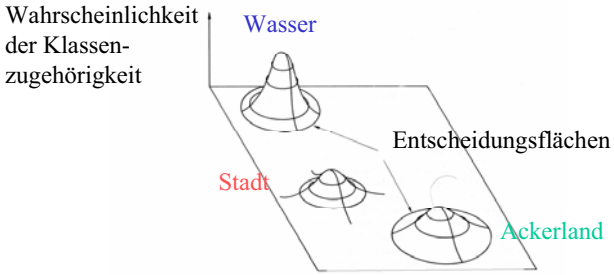
  für jedes Pixel ein d-dimensionaler Grauwertvektor $(o_1, \ldots, o_d)$
- verschiedene Oberflächenbeschaffenheiten der Erde besitzen jeweils ein charakteristisches Reflexions- und Emissionsverhalten



5.2 Interpretation von Rasterbildern

Grundlagen

- Anwendung des optimalen Bayes-Klassifikators
- Schätzung der $P(o \mid c)$ ohne Annahme der bedingten Unabhängigkeit
- Annahme einer d-dimensionalen Normalverteilung für die Grauwertvektoren einer Klasse



5.2 Interpretation von Rasterbildern

Methode

- Zu schätzen aus den Trainingsdaten

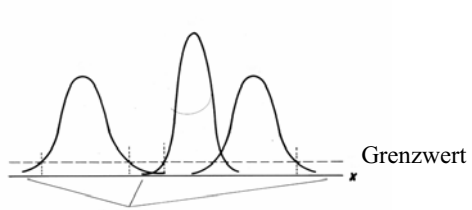
  μ_i: d-dimensionaler Mittelwertvektor aller Feature-Vektoren der Klasse c_i

  Σ_i: $d \cdot d$ Kovarianzmatrix der Klasse c_i

- Probleme der Entscheidungsregel
  - Likelihood für die gewählte

    Klasse sehr klein
  - Likelihood für mehrere

    Klassen ähnlich



Diskussion

+ Optimalitätseigenschaft
  Standard zum Vergleich für andere Klassifikatoren
+ hohe Klassifikationsgenauigkeit in vielen Anwendungen
+ Inkrementalität
  Klassifikator kann einfach an neue Trainingsobjekte adaptiert werden
+ Einbezug von Anwendungswissen

- Anwendbarkeit
  die erforderlichen bedingten Wahrscheinlichkeiten sind oft unbekannt
- Ineffizienz
  bei sehr vielen Attributen
  insbesondere Bayes-Netzwerke

Motivation

• Bayes-Klassifikator zur Interpretation von Rasterbildern

Annahme der Normalverteilung der Grauwertvektoren einer Klasse

erfordert Schätzung von μ_i und Σ_i

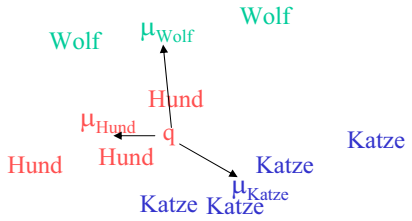
Schätzung von μ_i benötigt wesentlich weniger Trainingsdaten

• Ziel

Klassifikator, der lediglich die Mittelwertvektoren für jede Klasse benötigt

⇨ Nächste-Nachbarn-Klassifikatoren

Beispiel



Klassifikator:
q ist ein Hund!

Instance-Based Learning
verwandt dem Case-Based Reasoning

Grundlagen

Basisverfahren

• Trainingsobjekte o als Attributvektoren $o = (o_1, \ldots, o_d)$
• Bestimmung des Mittelwertvektors μ_i für jede Klasse c_i
• Zuordnung eines zu klassifizierenden Objektes zur Klasse c_i mit dem nächstgelegenen Mittelwertvektor μ_i

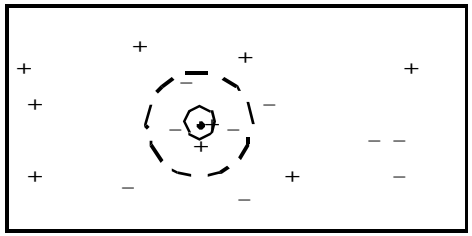
Verallgemeinerungen

• benutze mehr als ein Trainingsobjekt pro Klasse
• betrachte $k > 1$ Nachbarn
• gewichte die Klassen der k nächsten Nachbarn

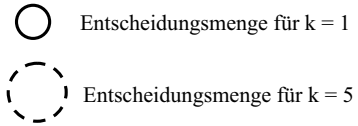
Grundbegriffe

- Distanzfunktion
  definiert die Ähnlichkeit (Unähnlichkeit) für Paare von Objekten
- Anzahl k der betrachteten Nachbarn
- *Entscheidungsmenge*
  die Menge der zur Klassifikation betrachteten k-nächsten Nachbarn
- *Entscheidungsregel*
  wie bestimmt man aus den Klassen der Entscheidungsmenge die Klasse des zu klassifizierenden Objekts?

Beispiel



Klassen „+“ und „-“



Gleichgewichtung der Entscheidungsmenge

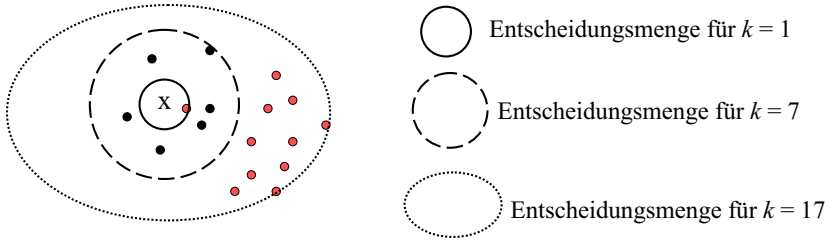
$k = 1$: Klassifikation als „+“, $k = 5$ Klassifikation als „–“

Gewichtung der Entscheidungsmenge nach inversem Quadrat der Distanz

$k = 1$ und $k = 5$: Klassifikation als „+“

Wahl des Parameters k

- „zu kleines“ k: hohe Sensitivität gegenüber Ausreißern
- „zu großes“ k: viele Objekte aus anderen Clustern (Klassen) in der Entscheidungsmenge.
- mittleres k: höchste Klassifikationsgüte, oft $1 << k < 10$



x: zu klassifizieren

Entscheidungsregel

Standardregel

wähle die Mehrheitsklasse der Entscheidungsmenge

Gewichtete Entscheidungsregel

gewichte die Klassen der Entscheidungsmenge

- nach Distanz
- nach Verteilung der Klassen (oft sehr ungleich!)

  Klasse A: 95 %, Klasse B 5 %

  Entscheidungsmenge = {A, A, A, A, B, B, B}

  Standardregel $\Rightarrow$ A, gewichtete Regel $\Rightarrow$ B

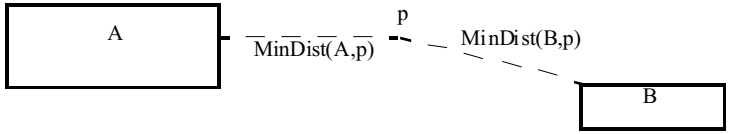
5.3 Nächste-Nachbarn-Klassifikatoren

Indexunterstützung für k-nächste-Nachbarn Anfragen

- balancierte Indexstruktur (z.B. X-Baum oder M-Baum)
- Anfragepunkt p
- PartitionList

  MURs, deren referenzierte Teilbäume noch bearbeitet werden müssen, nach MinDist zu p aufsteigend sortiert
- NN

  der nächste Nachbar von p in den bisher gelesenen Datenseiten



5.3 Nächste-Nachbarn-Klassifikatoren

Indexunterstützung für k-nächste-Nachbarn Anfragen

- alle MURs aus der PartitionList entfernen, die eine größere Distanz zum Anfragepunkt p besitzen als der bisher gefundene nächste Nachbar NN von p
- PartitionList wird aufsteigend nach MinDist zu p sortiert
- es wird jeweils das erste Element dieser Liste zur Bearbeitung ausgewählt

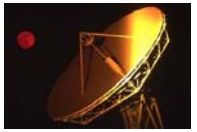
  es werden keine überflüssigen Seiten gelesen!
- Anfragebearbeitung auf wenige Pfade der Indexstruktur beschränkt

Durschnittliche Laufzeit O(log *n*) bei „nicht zu vielen“ Attributen

bei sehr vielen Attributen O(*n*)

5.3 Klassifikation von Sternen

Analyse astronomischer Daten



Entfernen von Rauschen

Bildsegmentierung

Feature-Extraktion

Automatische *Klassifikation* des Sterntyps

Manuelle Analyse der interessanten Sterntypen

Klassifikation des Sterntyps mit Nächste-Nachbarn-Klassifikator basierend auf dem Hipparcos-Katalog

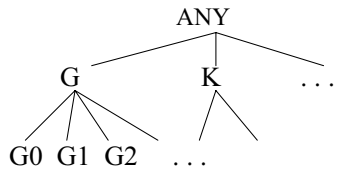
5.3 Klassifikation von Sternen

Hipparcos-Katalog [ESA 1998]

- enthält ca. 118 000 Sterne
- mit 78 Attributen (Helligkeit, Entfernung, Farbe,. . .)
- Klassenattribut: Spektraltyp (Attribut H76)

z.B.

H76: G0
H76: G7.2
H76: KIII/IV



- Werte des Spektraltyps sind vage
- Hierarchie von Klassen

  benutze die erste Ebene der Klassenhierarchie

5.3 Klassifikation von Sternen

Verteilung der Klassen

Klasse	#Instanzen	Anteil Instanzen	
K	32 036	27.0	häufige Klassen
F	25 607	21.7	
G	22 701	19.3	
A	18 704	15.8	
B	10 421	8.8	
M	4 862	4.1	
O	265	0.22	seltene Klassen
C	165	0.14	
R	89	0.07	
W	75	0.06	
N	63	0.05	
S	25	0.02	
D	27	0.02	

5.3 Klassifikation von Sternen

Experimentelle Untersuchung [Poschenrieder 1998]

Distanzfunktion

- mit 6 Attributen (Farbe, Helligkeit und Entfernung)
- mit 5 Attributen (ohne Entfernung)

⇒ beste Klassifikationsgenauigkeit mit 6 Attributen

Anzahl *k* der Nachbarn

⇒ beste Klassifikationsgenauigkeit für $k = 15$

Entscheidungsregel

- Gewichtung nach Distanz
- Gewichtung nach Klassenverteilung

⇒ beste Klassifikationsgenauigkeit bei Gewichtung nach Distanz
aber nicht nach Klassenverteilung

5.3 Klassifikation von Sternen

Klasse	Falsch klassifiziert	Korrekt klassifiziert	Klassifikations-genauigkeit
K	408	2338	85.1%
F	350	2110	85.8%
G	784	1405	64.2%
A	312	975	75.8%
B	308	241	43.9%
M	88	349	79.9%
C	4	5	55.6%
R	5	0	0%
W	4	0	0%
O	9	0	0%
N	4	1	20%
D	3	0	0%
S	1	0	0%
Total	2461	7529	75.3%

hohe Klassifikationsgenauigkeit für die häufigen Klassen, schlechte Genauigkeit für die seltenen Klassen

die meisten seltenen Klassen besitzen weniger als $k / 2 = 8$ Instanzen!

5.3 Nächste-Nachbarn-Klassifikatoren

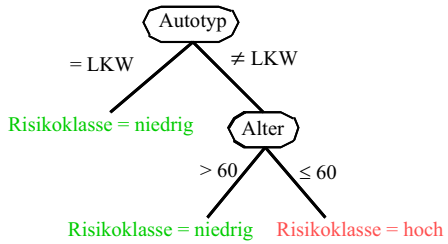
Diskussion

+ Anwendbarkeit
  erfordert als Eingabe nur die Trainingsdaten
+ hohe Klassifikationsgenauigkeit
  in vielen Anwendungen
+ Inkrementalität
  Klassifikator kann sehr einfach an neue Trainingsobjekte adaptiert werden
+ auch zur Vorhersage einsetzbar

- Ineffizienz
  erfordert *k*-nächste-Nachbarn Anfrage an die Datenbank
- liefert kein explizites Wissen über die Klassen

Motivation

ID	Alter	Autotyp	Risiko
1	23	Familie	hoch
2	17	Sport	hoch
3	43	Sport	hoch
4	68	Familie	niedrig
5	32	LKW	niedrig



finden explizites Wissen

Entscheidungsbäume sind für die meisten Benutzer verständlich

Grundbegriffe

- Ein *Entscheidungsbaum* ist ein Baum mit folgenden Eigenschaften:
  - ein innerer Knoten repräsentiert ein Attribut,
  - eine Kante repräsentiert einen Test auf dem Attribut des Vaterknotens,
  - ein Blatt repräsentiert eine der Klassen.
- Konstruktion eines Entscheidungsbaums

  anhand der Trainingsmenge

  Top-Down
- Anwendung eines Entscheidungsbaums

  Durchlauf des Entscheidungsbaum von der Wurzel zu einem der Blätter

  ➡ eindeutiger Pfad

  Zuordnung des Objekts zur Klasse des erreichten Blatts

Konstruktion eines Entscheidungsbaums

Basis-Algorithmus

- Anfangs gehören alle Trainingsdatensätze zur Wurzel.
- Das nächste Attribut wird ausgewählt (Splitstrategie).
- Die Trainingsdatensätze werden unter Nutzung des Splitattributs partitioniert.
- Das Verfahren wird rekursiv für die Partitionen fortgesetzt.

➡ lokal optimierender Algorithmus

Abbruchbedingungen

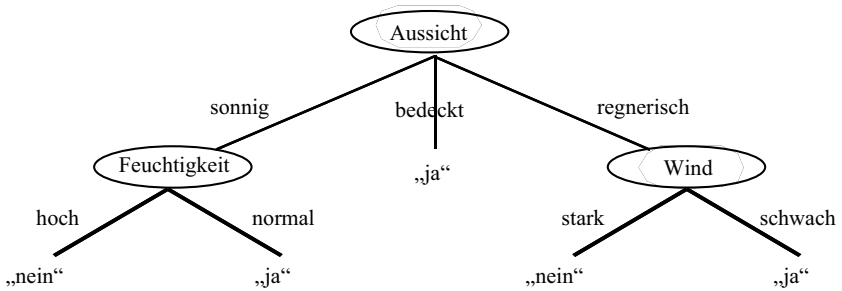
- keine weiteren Splitattribute
- alle Trainingsdatensätze eines Knotens gehören zur selben Klasse

Beispiel

Tag	Aussicht	Temperatur	Feuchtigkeit	Wind	Tennispielen
1	sonnig	heiß	hoch	schwach	nein
2	sonnig	heiß	hoch	stark	nein
3	bedeckt	heiß	hoch	schwach	ja
4	regnerisch	mild	hoch	schwach	ja
5	regnerisch	kühl	normal	schwach	ja
6	regnerisch	kühl	normal	stark	nein
7	. . .	. . .	. . .	. . .	. . .

Ist heute ein Tag zum Tennisspielen?

Beispiel



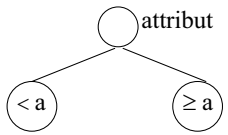
Typen von Splits

Kategorische Attribute

- Splitbedingungen der Form „*attribut = a*“ or „*attribut ∈ set*“
- viele mögliche Teilmengen

Numerische Attribute

- Splitbedingungen der Form „*attribut < a*“
- viele mögliche Splitpunkte



Qualitätsmaße für Splits

Gegeben

- eine Menge T von Trainingsobjekten
- eine disjunkte, vollständige Partitionierung $T_1, T_2, \ldots, T_m$ von T
- p_i die relative Häufigkeit der Klasse c_i in T

Gesucht

- ein Maß der *Unreinheit* einer Menge S von Traininsgobjekten in Bezug auf die Klassenzugehörigkeit
- ein Split von T in $T_1, T_2, \ldots, T_m$, der dieses Maß der Unreinheit *minimiert*

⇒ Informationsgewinn, Gini-Index

Informationsgewinn

- Entropie: minimale Anzahl von Bits zum Codieren der Nachricht, mit der man die Klasse eines zufälligen Trainingsobjekts mitteilen möchte
- Die *Entropie* für eine Menge T von Trainingsobjekten ist definiert als

$$entropie(T) = \sum_{i=1}^{k} p_i \cdot \log p_i$$

$entropie(T) = 0$, falls $p_i = 1$ für ein i
$entropie(T) = 1$ für $k = 2$ Klassen mit $p_i = 1/2$

- Das Attribut A habe die Partitionierung $T_1, T_2, \ldots, T_m$ erzeugt.
- Der *Informationsgewinn* des Attributs A in Bezug auf T ist definiert als

$$informationsgewinn(T, A) = entropie(T) - \sum_{i=1}^{m} \frac{|T_i|}{|T|} \cdot entropie(T_i)$$

Gini-Index

• *Gini-Index* für eine Menge T von Trainingsobjekten

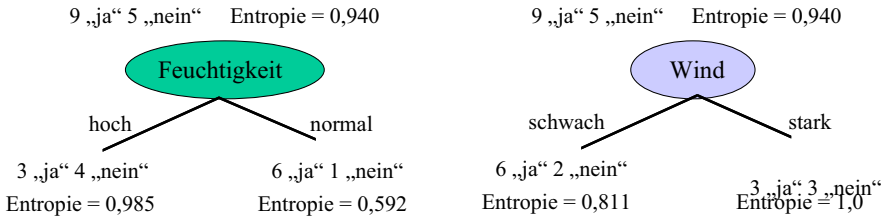
$$gini(T) = 1 - \sum_{j=1}^{k} p_j^2$$

kleiner Gini-Index ⇔ geringe Unreinheit,
großer Gini-Index ⇔ hohe Unreinheit

• Das Attribut A habe die Partitionierung $T_1, T_2, \ldots, T_m$ erzeugt.
• *Gini-Index* des Attributs A in Bezug auf T ist definiert als

$$gini_A(T) = \sum_{i=1}^{m} \frac{|T_i|}{|T|} \cdot gini(T_i)$$

Beispiel



$$informationsgewinn(T, Feuchtigkeit) = 0{,}94 - \frac{7}{14} \cdot 0{,}985 - \frac{7}{14} \cdot 0{,}592 = 0{,}151$$

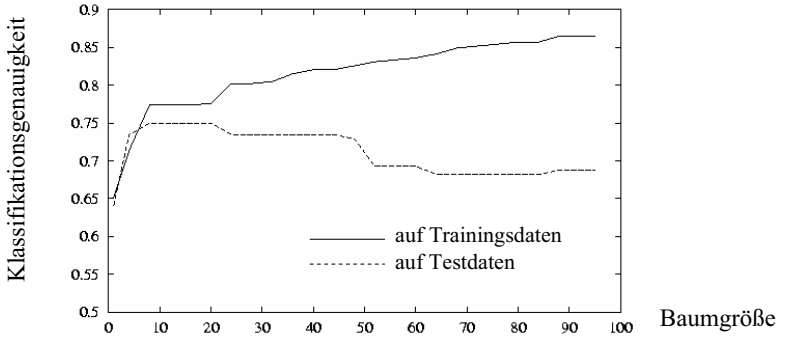
$$informationsgewinn(T, Feuchtigkeit) = 0{,}94 - \frac{8}{14} \cdot 0{,}811 - \frac{6}{14} \cdot 1{,}0 = 0{,}048$$

⇒ Feuchtigkeit liefert den höheren Informatiuonsgewinn

Einführung

Overfitting bei der Konstruktion eines Entscheidungsbaums, wenn es zwei Entscheidungsbäume E und E' gibt mit

• E hat auf der Trainingsmenge eine kleinere Fehlerrate als E',
• E' hat auf der Grundgesamtheit der Daten eine kleinere Fehlerrate als E.



Ansätze zum Vermeiden von Overfitting

• Entfernen von fehlerhaften Trainingsdaten

insbesondere widersprüchliche Trainingsdaten

• Wahl einer geeigneten Größe der Trainingsmenge

nicht zu klein, nicht zu groß

• Wahl einer geeigneten Größe des minimum support

minimum support:

Anzahl der Datensätze, die mindestens zu einem Blattknoten des Baums gehören müssen

minimum support >> 1

5.4 Overfitting

Ansätze zum Vermeiden von Overfitting

- Wahl einer geeigneten Größe der minimum confidence

  minimum confidence: Anteil, den die Mehrheitsklasse eines Blattknotens mindestens besitzen muß

  minimum confidence << 100%

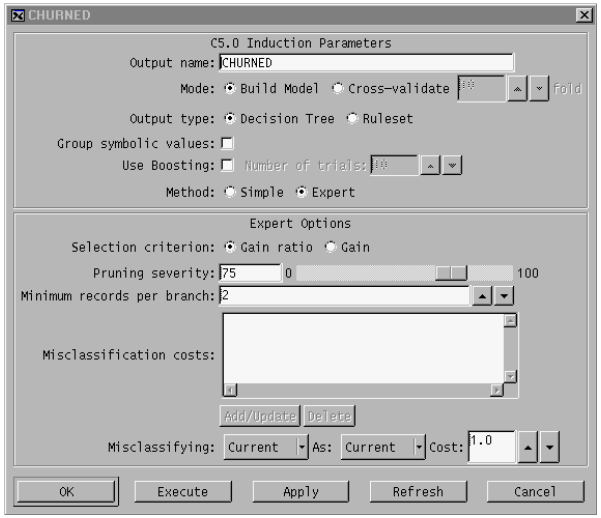
  Blätter können auch fehlerhafte Datensätze oder Rauschen „absorbieren“

- nachträgliches Pruning des Entscheidungsbaums

  Abschneiden der überspezialisierten Äste

  ➡ nächster Abschnitt

5.4 Overfitting



Typische Parameter der Konstruktion eines Entscheidungsbaums (Clementine)

5.4 Pruning von Entscheidungsbäumen

Fehlerreduktions-Pruning [Mitchell 1997]

- Aufteilung der klassifizierten Daten in Trainingsmenge und Testmenge
- Konstruktion eines Entscheidungsbaums *E* für die Trainingsmenge
- Pruning von *E* mit Hilfe der Testmenge *T*
  - bestimme denjenigen Teilbaum von *E*, dessen Abschneiden den Klassifikationsfehler auf *T* am stärksten reduziert
  - entfernte diesen Teilbaum
  - fertig, falls kein solcher Teilbaum mehr existiert

nur anwendbar, wenn genügend viele klassifizierte Daten

5.4 Pruning von Entscheidungsbäumen

Minimales Kostenkomplexitäts-Pruning

[Breiman, Friedman, Olshen & Stone 1984]

- benötigt keine separate Testmenge

  auch anwendbar für kleine Trainingsmengen
- Pruning des Entscheidungsbaums mit Hilfe der Trainingsmenge

  Klassifikationsfehler ungeeignet als Qualitätskriterium
- Neues Qualitätskriterium für Entscheidungsbäume

  Trade-off von Klassifikationsfehler und Baumgröße

  gewichtete Summe aus Klassifikationsfehler und Baumgröße

kleinere Entscheidungsbäume generalisieren typischerweise besser

Grundbegriffe

- *Größe* $|E|$ des Entscheidungsbaums E: Anzahl seiner Blätter
- *Kostenkomplexität* von E in Bezug auf die Trainingsmenge T und den Komplexitätsparameter $\alpha \geq 0$:

$$KK_T(E,\alpha) = F_T(E) + \alpha \cdot |E|$$

- Der *kleinste minimierende Teilbaum* $E(\alpha)$ von E in Bezug auf α erfüllt:

  (1) es gibt keinen Teilbaum von E mit kleinerer Kostenkomplexität

  (2) falls $E(\alpha)$ und B die Bedingung (1) erfüllen, ist $E(\alpha)$ Teilbaum von B

- $\alpha = 0$: $E(\alpha) = E$
- $\alpha = \infty$: $E(\alpha)$ = Wurzel von E
- $0 < \alpha < \infty$: $E(\alpha)$ = ein echter Teilbaum von E, mehr als die Wurzel

Grundbegriffe

- E_e: Teilbaum mit der Wurzel e,

  $\{e\}$: Baum,der nur aus dem Knoten e besteht.

- Für kleine Werte von α gilt: $KK_T(E_e, \alpha) < KK_T(\{e\}, \alpha)$,

  für große Werte von α gilt: $KK_T(E_e, \alpha) > KK_T(\{e\}, \alpha)$.

- *kritischer Wert* von α für e

  α_{crit}: $KK_T(E_e, \alpha_{crit}) = KK_T(\{e\}, \alpha_{crit})$

  ➡ für $\alpha \geq \alpha_{crit}$ lohnt sich das Prunen beim Knoten e

- *schwächster Link*: Knoten mit dem minimalen Wert für α_{crit}

Methode

- Beginne mit dem vollständigen Baum E.
- Entferne iterativ immer den schwächsten Link aus dem aktuellen Baum.
- Falls mehrere schwächste Links existieren: alle miteinander im gleichen Schritt entfernen.

  ➡ Folge geprunter Bäume $E(\alpha_1) > E(\alpha_2) > \ldots > E(\alpha_m)$ mit $\alpha_1 < \alpha_2 < \ldots < \alpha_m$

- Auswahl des besten $E(\alpha_i)$

  Schätzung des Klassifikationsfehlers auf der Grundgesamtheit durch l-fache Überkreuz-Validierung auf der Trainingsmenge

Beispiel

i	|Ei|	beobachteter Fehler	geschätzter Fehler	tatsächlicher Fehler
1	71	0,0	0,46	0,42
2	63	0,0	0,45	0,40
3	58	0,04	0,43	0,39
4	40	0,10	0,38	0,32
5	34	0,12	0,38	0,32
6	19	0,2	0,32	0,31
7	10	0,29	0,31	0,30
8	9	0,32	0,39	0,34
9	7	0,41	0,47	0,47
10	. . .	. . .	. . .	. . .
. . .	. . .	. . .	. . .	. . .

E_7 besitzt den geringsten geschätzten Fehler und den niedrigsten tatsächlichen Fehler

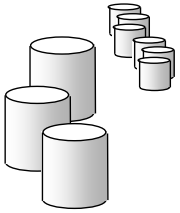
Motivation

Konstruktion von Entscheidungsbäumen

eine der wichtigsten Methoden der Klassifikation

Bisher

- kleine Datenmengen
- hauptspeicherresident



Jetzt

- immer größere kommerzielle Datenbanken
- Algorithmen für sekundärspeicherresidente Daten

➡ skalieren für Datenbanken beliebiger Größe

Ansätze zur Skalierung

Sampling

- Stichprobe der Daten als Trainingsmenge
  paßt in den Hauptspeicher
- Stichprobe aller potentiellen Splits evaluieren (bei numerischen Attributen)

🔍 Verminderung der Qualität der entstehenden Entscheidungsbäume

Unterstützung durch spezielle Daten- und Indexstrukturen

- alle Daten als Trainingsmenge
- Verwaltung auf dem Sekundärspeicher durch ein Datenbanksystem
- Einsatz spezieller Daten- und Indexstrukturen zur effizienten Unterstützung

🔍 kein Verlust an Qualität der Entscheidungsbäume

Unterstützung durch spezielle Daten- und Indexstrukturen

Teure Operationen

- Evaluation der potentiellen Splits und Selektion des besten Splits
  bei numerischen Attributen:
    Sortierung der Attributwerte
    Evaluation jedes Attributwerts als potentieller Splitpunkt
  bei kategorischen Attributen:
    $O(2^m)$ mögliche binäre Splits für m verschiedene Attributwerte
- Partitionierung der Trainingsdaten
    entsprechend dem gewählten Split
    Lesen und Schreiben aller Trainingsdaten

➡ Growth Phase hat dominanten Anteil am Gesamtaufwand

Einführung [Mehta, Agrawal & Rissanen 1996]

- skalierbarer Entscheidungsbaum-Klassifikator
- binäre Splits
- Evaluierung der Splits mit Hilfe des Gini-Index
- spezielle Datenstrukturen

🔍 vermeiden das Sortieren der Trainingsdaten

für jeden Knoten des Entscheidungsbaums

und für jedes numerische Attribut

Datenstrukturen

- *Attributlisten*
  Werte eines Attributs in aufsteigender Sortierreihenfolge
  zusammen mit Referenz auf den zugehörigen Eintrag in der Klassenliste
  ⇒ sequentiell zugegriffen
  sekundärspeicherresident
- *Klassenliste*
  für jeden Trainingsdatensatz die Klasse
  sowie einen Verweis auf das zugehörige Blatt des Entscheidungsbaums
  ⇒ wahlfrei zugegriffen
  hauptspeicherresident
- *Histogramme*
  für jedes Blatt des Entscheidungsbaums
  Häufigkeiten der einzelnen Klassen in der Partition

Beispiel

Trainingsdaten

Id	Alter	Gehalt	Klasse
1	30	65	G
2	23	15	B
3	40	75	G
4	55	40	B
5	55	100	G
6	45	60	G

N1

Klassenliste

Id	Klasse	Blatt
1	G	N1
2	B	N1
3	G	N1
4	B	N1
5	G	N1
6	G	N1

Attributlisten

Alter	Id
23	2
30	1
40	3
45	6
55	5
55	4

Gehalt	Id
15	2
40	4
60	6
65	1
75	3
100	5

Algorithmus

- Breadth-First-Strategie
  für alle Blätter des Entscheidungsbaums auf derselben Ebene
  werden alle potentiellen Splits für alle Attribute evaluiert

  klassische Entscheidungsbaumklassifikatoren: Depth-First-Strategie
- Split numerischer Attribute
  für jeden Wert *W* der Attributsliste von *A* (sequentieller Durchlauf)
  – bestimme den zugehörigen Eintrag *E* der Klassenliste;
  – sei *K* der Wert des Attributs "Blatt" von *E*;
  – aktualisiere das Histogramm von *K*
  basierend auf dem Wert des Attributs "Klasse" von *E*;

Einführung [Shafer, Agrawal & Mehta 1996]

SLIQ

- Größe der Klassenliste wächst linear mit der Größe der Datenbank.
- SLIQ skaliert nur gut, wenn genügend Hauptspeicher für die ganze Klassenliste verfügbar ist.

Ziele von SPRINT

- Skalierung für *beliebig große* Datenbanken
- einfache *Parallelisierbarkeit* des Verfahrens

Datenstrukturen

- Klassenliste

  keine Klassenliste mehr

  zusätzliches Attribut „Klasse“ für die Attributlisten (sekundärspeicherresident)

  ⇒ keine Hauptspeicher-Datenstrukturen mehr

  skalierbar für beliebig große DB

- Attributlisten

  getrennte Attributlisten pro Knoten des Entscheidungsbaums

  nicht eine Attributliste für die ganze Trainingsmenge

  ⇒ keine zentralen Datenstrukturen mehr

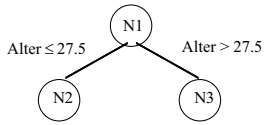
  einfache Parallelisierung von SPRINT

Beispiel

Alter	Klasse	Id
17	Hoch	1
20	Hoch	5
23	Hoch	0
32	Niedrig	4
43	Hoch	2
68	Niedrig	3

Attributlisten für Knoten N1

Autotyp	Klasse	Id
Familie	Hoch	0
Sport	Hoch	1
Sport	Hoch	2
Familie	Niedrig	3
LKW	Niedrig	4
Familie	Hoch	5



Alter	Klasse	Id
17	Hoch	1
20	Hoch	5
23	Hoch	0

Attribut-listen für Knoten N2

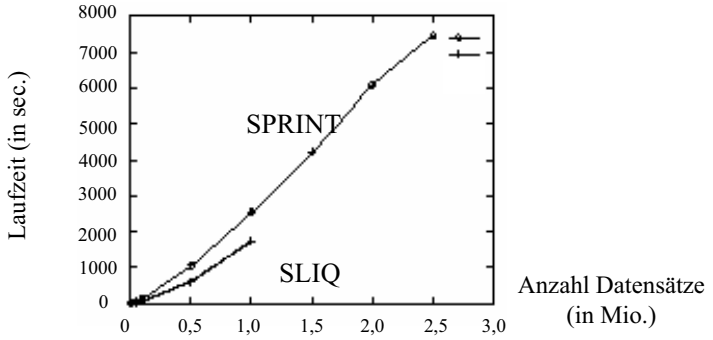
Autotyp	Klasse	Id
Familie	Hoch	0
Sport	Hoch	1
Familie	Hoch	5

Alter	Klasse	Id
32	Niedrig	4
43	Hoch	2
68	Niedrig	3

Attribut-listen für Knoten N3

Autotyp	Klasse	Id
Sport	Hoch	2
Familie	Niedrig	3
LKW	Niedrig	4

Experimentelle Untersuchung



SLIQ ist effizienter, solange die Klassenliste in den Hauptspeicher paßt

für mehr als 1.000.000 Datensätze ist SLIQ nicht mehr anwendbar (Thrashing)

Einführung [Gehrke, Ramakrishnan & Ganti 1998]

SPRINT

- nutzt den vorhandenen Hauptspeicherplatz nicht aus
- ist anwendbar nur für Entscheidungsbaum-Konstruktion mit Breitensuche

RainForest

- nutzt den verfügbaren Hauptspeicher zur Effizienzverbesserung
- für praktisch alle bekannten Algorithmen anwendbar

Trennung der Aspekte der Skalierung

von den Aspekten der Qualität eines Entscheidungsbaum-Klassifikators

Datenstrukturen

- *AVC-Menge* für das Attribut *A* und den Knoten *K*

  enthält für jeden Wert von *A* ein Klassenhistogramm

  für die Teilmenge aller Trainingsdaten, die zur Partition von *K* gehören

  Einträge der Form $(a_i, c_j, zaehler)$

- *AVC-Gruppe* für das Attribut *A* und den Knoten *K*

  Menge der AVC-Mengen von *K* für alle Attribute

- bei kategorischen Attributen: AVC-Menge wesentlich kleiner als Attributliste

  ⇒ mindestens eine AVC-Menge paßt in den Hauptspeicher

  evtl. sogar die gesamte AVC-Gruppe

Beispiel

Trainingsdaten

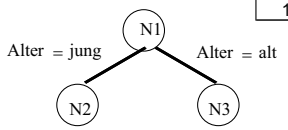
Id	Alter	Gehalt	Klasse
1	jung	65	G
2	jung	15	B
3	jung	75	G
4	alt	40	B
5	alt	100	G
6	alt	60	G

AVC-Menge Alter für N1

Wert	Klasse	Zähler
jung	B	1
jung	G	2
alt	B	1
alt	G	2

AVC-Menge Gehalt für N1

Wert	Klasse	Zähler
15	B	1
40	B	1
60	G	1
65	G	1
75	G	1
100	G	1



AVC-Menge Gehalt für N2

Wert	Klasse	Zähler
15	B	1
65	G	1
75	G	1

AVC-Menge Alter für N2

Wert	Klasse	Zähler
jung	B	1
jung	G	2

Algorithmen

Annahme

- die gesamte AVC-Gruppe des Wurzelknotens paßt in den Hauptspeicher
- dann passen die AVC-Gruppen jedes Knotens in den Hauptspeicher

Algorithmus *RF_Write*

- Aufbau der AVC-Gruppe des Knotens *K* im Hauptspeicher
  sequentieller Scan über die Trainingsmenge
- Bestimmung des optimalen Splits des Knotens *K*
  mit Hilfe seiner AVC-Gruppe
- Lesen der Trainingsmenge und Verteilen (Schreiben) auf die Partitionen

  ⇒ Trainingsmenge wird zweimal gelesen und einmal geschrieben

Algorithmen

Algorithmus *RF_Read*

- vermeidet das explizite Schreiben der Partitionen auf den Sekundärspeicher
- Lesen der gewünschten Partition aus der gesamten Trainingsdatenbank
- gleichzeitiger Aufbau der AVC-Gruppen für möglichst viele Partitionen

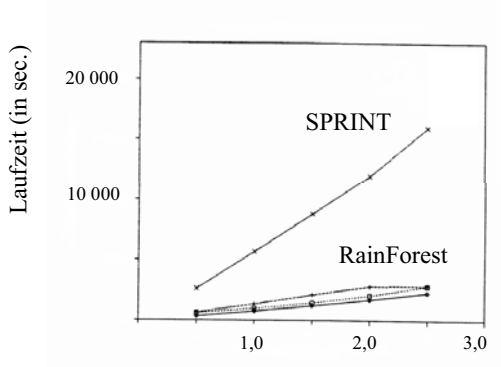
⇒ Trainingsdatenbank wird für jede Ebene des Baums mehrfach gelesen

Algorithmus *RF_Hybrid*

- Nutzung von RF_Read, solange die AVC-Gruppen aller Knoten der aktuellen Ebene des Entscheidungsbaums in den Hauptspeicher passen
- Dann Materialisierung der Partitionen mit RF_Write

5.5 RainForest

Experimentelle Untersuchung



Anzahl der Trainingsdatensätze (in Mio.)

für alle RainForest-Algorithmen wächst die Laufzeit linear mit *n*
RainForest ist wesentlich effizienter als SPRINT

5.6 Support Vector Maschines (SVM)

übernommen von
Stefan Rüping, Katharina Morik
Universität Dortmund
Vorlesung Maschinelles Lernen und Data Mining
WS 2002/03

Erinnerung: Funktionslernen

Gegeben:

Beispiele X in LE

- die anhand einer Wahrscheinlichkeitsverteilung P auf X erzeugt wurden und
- mit einem Funktionswert Y = t(X) versehen sind (alternativ: Eine Wahrscheinlichkeitsverteilung P(Y|X) der möglichen Funktionswerte - verrauschte Daten).

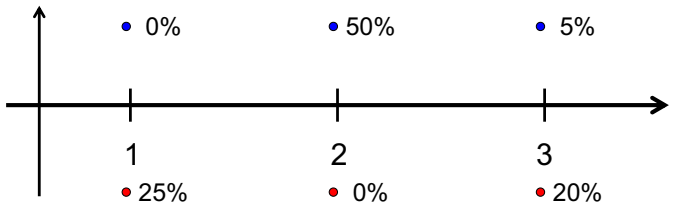
H die Menge von Funktionen in LH.

Ziel: Eine Hypothese h(X) $\in$ H, die das erwartete Fehlerrisiko R(h) minimiert.

Risiko:

$$R(h) = \sum_x Q(x,h)P(x)$$

Beispiel: Funktionenlernen



H = { f_a | $f_a(x) = 1$, für $x \geq a$, $f_a(x) = -1$ sonst, $a \in \Re$}

$R(f_0)$	= 0,25 + 0 + 0,20	= 0,45
$R(f_{1,5})$	= 0 + 0 + 0,20	= 0,20
$R(f_{3,5})$	= 0 + 0,5 + 0,05	= 0,55

Reale Beispiele

Klassifikation: Q(x,h) = 0, falls t(x) = h(x), 1 sonst

- Textklassifikation (x = Worthäufigkeiten)
- Handschriftenerkennung (x = Pixel in Bild)
- Vibrationsanalyse in Triebwerken (x = Frequenzen)
- Intensivmedizinische Alarmfunktion (x = Vitalzeichen)

Regression: $Q(x,h) = (t(x)-h(x)))^2$

- Zeitreihenprognose (x = Zeitreihe, t(x) = nächster Wert)

Erinnerung: Minimierung des beobachteten Fehlers

Funktionslernaufgabe nicht direkt lösbar. Problem:

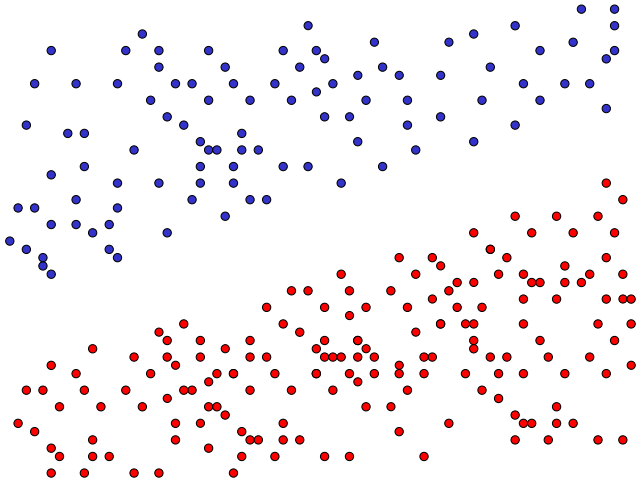
- Die tatsächliche Funktion t(X) ist unbekannt.
- Die zugrunde liegende Wahrscheinlichkeit ist unbekannt.

Ansatz:

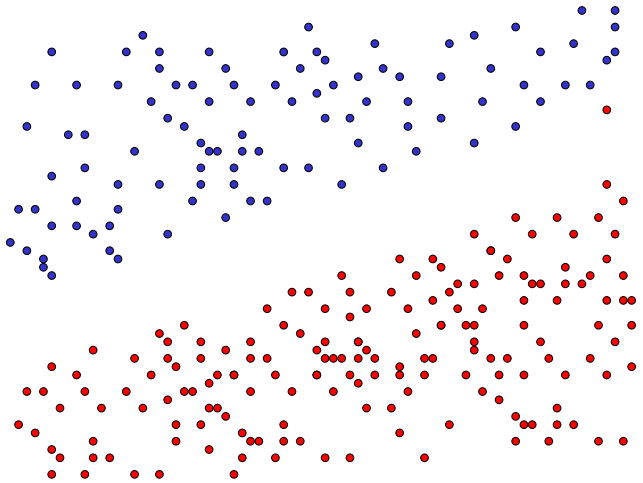
- eine hinreichend große Lernmenge nehmen und für diese den Fehler minimieren.

$\Rightarrow$ Empirical Risk Minimization

Beispiel



Beispiel II

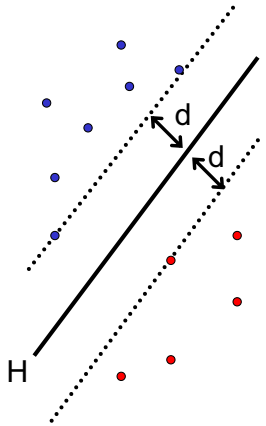


Probleme der ERM

- Aufgabe ist nicht eindeutig beschrieben: Mehrere Funktionen mit minimalem Fehler existieren. Welche wählen?
- Overfitting: Verrauschte Daten und zu wenig Beispiele führen zu falschen Ergebnissen.

Die optimale Hyperebene

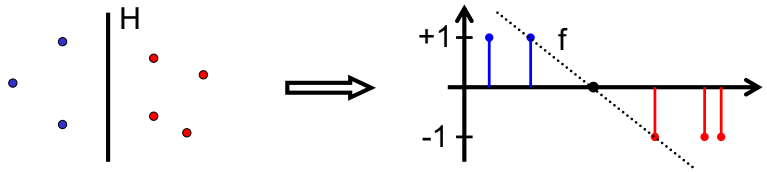
- Beispiele heißen linear trennbar, wenn es eine Hyperebene H gibt, die die positiven und negativen Beispiele voneinander trennt.
- H heißt optimale Hyperebene, wenn ihr Abstand d zum nächsten positiven und zum nächsten negativen Beispiel maximal ist.
- Satz: Es existiert eine eindeutig bestimmte optimale Hyperebene.



Berechnung der opt. Hyperebene

- Hyperebene
  $H = \{x \mid w*x+b = 0\}$
- H trennt (x_i,y_i), $y_i \in \{\pm 1\}$
- H ist optimale Hyperebene

- Entscheidungsfunktion $f(x) = w*x+b$
- $f(x_i) > 0 \Leftrightarrow y_i > 0$
- $||w||$ minimal und
  $f(x_i) \geq 1$, wenn $y_i = 1$
  $f(x_i) \leq -1$, wenn $y_i = -1$

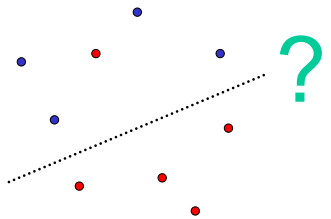


Optimierungsaufgabe der SVM

- Minimiere $||w||^2$
- so dass für alle i gilt:
  $f(x_i) = w*x_i+b \geq 1$ für $y_i = 1$ und
  $f(x_i) = w*x_i+b \leq -1$ für $y_i = -1$
- Äquivalente Nebenbedingung: $y_i*f(x_i) \geq 1$
- Konvexes, quadratisches Optimierungs-problem $\Rightarrow$ eindeutig in $O(n^3)$ lösbar.
- Satz: $||w|| = 1/d$, d = Abstand der optimalen Hyperebene zu den Beispielen.

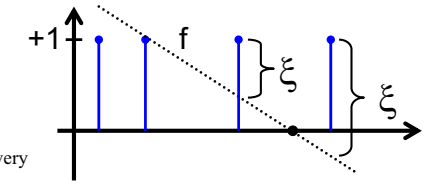
Nicht linear trennbare Daten

- In der Praxis sind linear trennbare Daten selten.
- 1. Ansatz: Entferne eine minimale Menge von Datenpunkten, so dass die Daten linear trennbar werden (minimale Fehlklassifikation).
- Problem: Algorithmus wird exponentiell.



Weich trennende Hyperebene

- Wähle $C \in \Re_{>0}$ und minimiere $\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{n} \xi_i$
- so dass für alle i gilt:
  $f(x_i) = w*x_i+b \geq 1-\xi_i$ für $y_i = 1$ und
  $f(x_i) = w*x_i+b \leq -1+\xi_i$ für $y_i = -1$
- Äquivalent: $y_i*f(x_i) \geq 1- \xi_i$



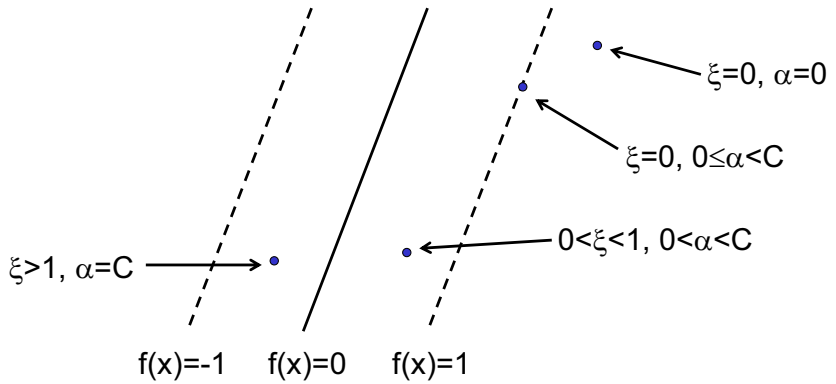
Duales Optimierungsproblem

- Umformung mit Lagrange-Multiplikatoren liefert einfacheres Optimierungsproblem:
- Maximiere

$$W(\alpha) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \tfrac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} y_i y_j \alpha_i \alpha_j (x_i * x_j)$$

- unter $0 \leq \alpha_i \leq C$ für alle i und $\sum \alpha_i y_i = 0$
- Es gilt $w = \sum \alpha_i y_i x_i$, also $f(x) = \sum \alpha_i y_i (x_i * x) + b$

Bedeutung von ξ und α



Beispiele x_i mit $\alpha_i>0$ heißen Stützvektoren $\Rightarrow$ SVM

Optimierungsalgorithmus

```
s = Gradient von W(α)                 // s_i = ∑α_j(x_j*x_i)
while(nicht konvergiert(s))           // auf  ε genau
    WS = working_set(s)               // suche k „gute“ Variablen
    α‘ = optimiere(WS)                // k neue α-Werte
    s = update(s, α‘)                 // s = Gradient von W(α‘)
```

- Gradientensuchverfahren
- Trick: Stützvektoren allein definieren Lösung
- Weitere Tricks: Shrinking, Caching von $x_i * x_j$

Was wissen wir jetzt über SVM‘s?

- Funktionslernen als allgemeine Lernaufgabe
- Minimierung des empirischen Risikos als Lösungsstrategie
- Optimale Hyperebene präzisiert die ERM
- Praxis: weich trennende Hyperebene
- Berechnung mittels SVM und dualem Problem
- **Offene Fragen:** Generelles Prinzip hinter der optimalen Hyperebene? Nicht lineare Daten?