

5. Klassifikation

Inhalt dieses Kapitels

5.1 Einleitung

Das Klassifikationsproblem, Bewertung von Klassifikatoren

5.2 Bayes-Klassifikatoren

Optimaler Bayes-Klassifikator, Naiver Bayes-Klassifikator, Anwendungen

5.3 Nächste-Nachbarn-Klassifikatoren

Grundbegriffe, Parameterwahl, Anwendungen

5.4 Entscheidungsbaum-Klassifikatoren

Grundbegriffe, Splitstrategien, Overfitting, Pruning von Entscheidungsbäumen

5.5 Skalierung für große Datenbanken

SLIQ, SPRINT, RainForest

5.1 Einleitung

Das Klassifikationsproblem

- Gegeben: eine Menge O von Objekten des Formats (o_1, \dots, o_d)
mit *Attributen* A_i , $1 \leq i \leq d$, und Klassenzugehörigkeit c_i , $c_i \in C = \{c_1, \dots, c_k\}$
- 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

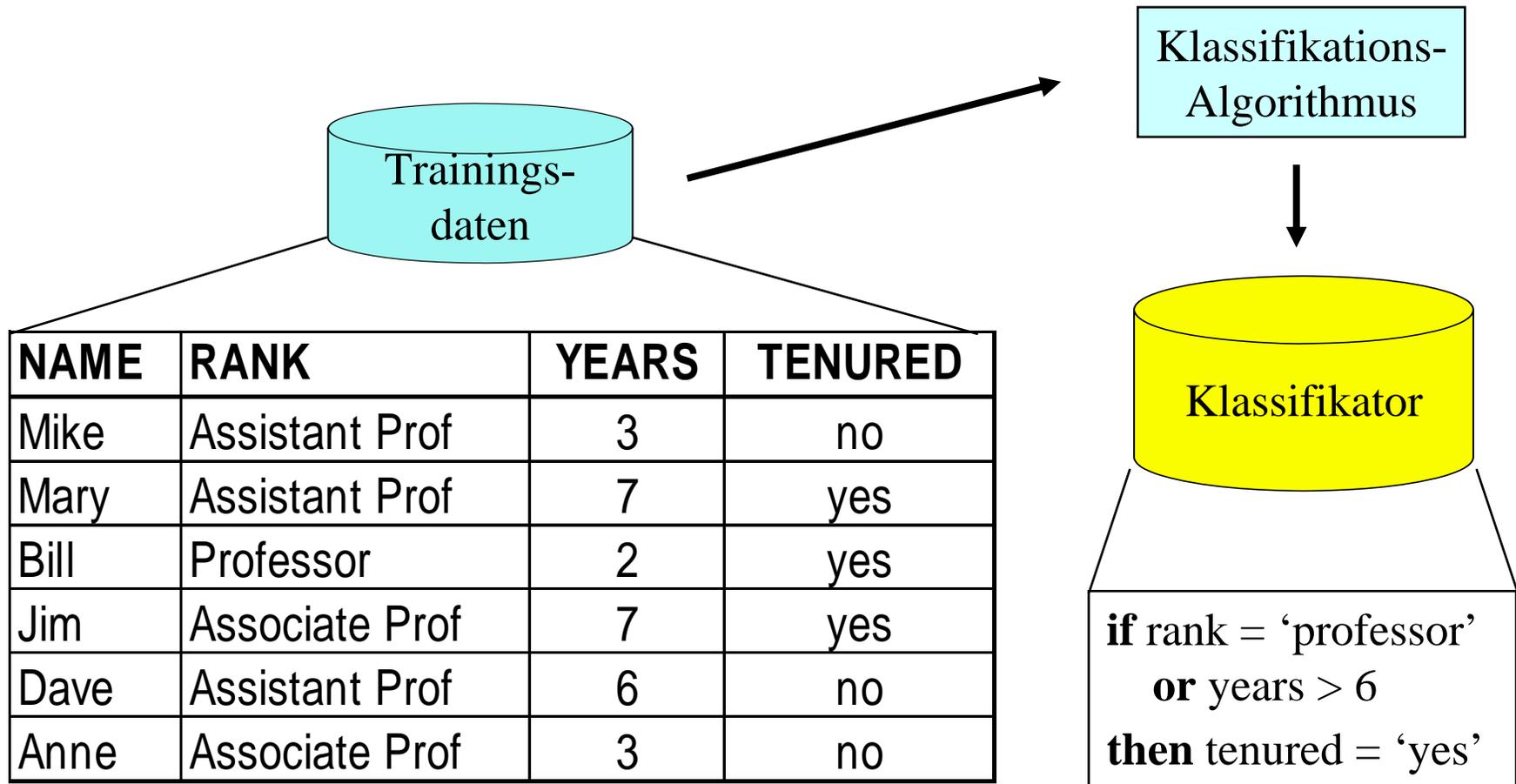
ID	Alter	Autotyp	Risiko
1	23	Familie	hoch
2	17	Sport	hoch
3	43	Sport	hoch
4	68	Familie	niedrig
5	32	LKW	niedrig

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.
```

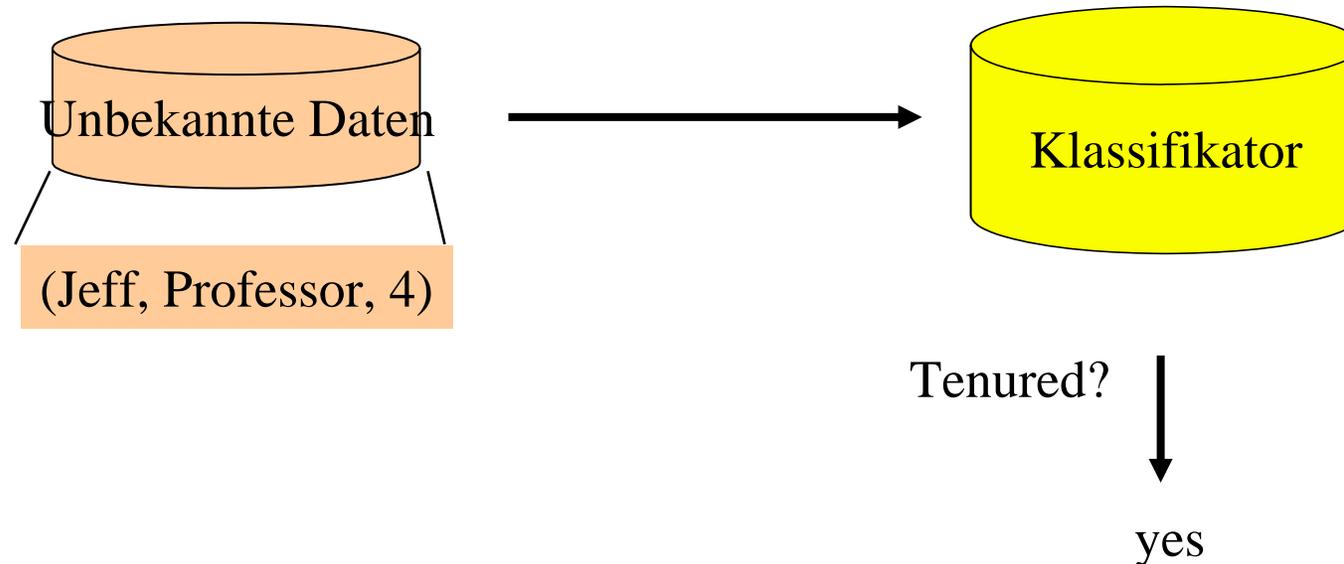
5.1 Der Prozess der Klassifikation

Konstruktion des Modells



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 :

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

- *Tatsächlicher Klassifikationsfehler* (true classification error)

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

- *Beobachteter Klassifikationsfehler* (apparent classification error)

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

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

$$P(\text{negativ}|h_1) = 0, P(\text{positiv}|h_1) = 1$$

$$P(\text{negativ}|h_2) = 1, P(\text{positiv}|h_2) = 0$$

$$P(\text{negativ}|h_3) = 1, P(\text{positiv}|h_3) = 0$$

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

5.2 Optimaler Bayes-Klassifikator

Grundbegriffe

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

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

- 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 $\operatorname{argmax}_{c_j \in C} P(c_j|o)$



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

- Umformung mit Hilfe des Satzes von Bayes

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

- endgültige Entscheidungsregel des optimalen Bayes-Klassifikators

$$\operatorname{argmax}_{c_j \in C} P(o|c_j) \cdot P(c_j)$$

 *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
 - $o = (o_1, \dots, o_d)$
 - die Attributwerte o_i sind für eine gegebene Klasse *bedingt unabhängig*
- Entscheidungsregel des *naiven Bayes-Klassifikators*

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

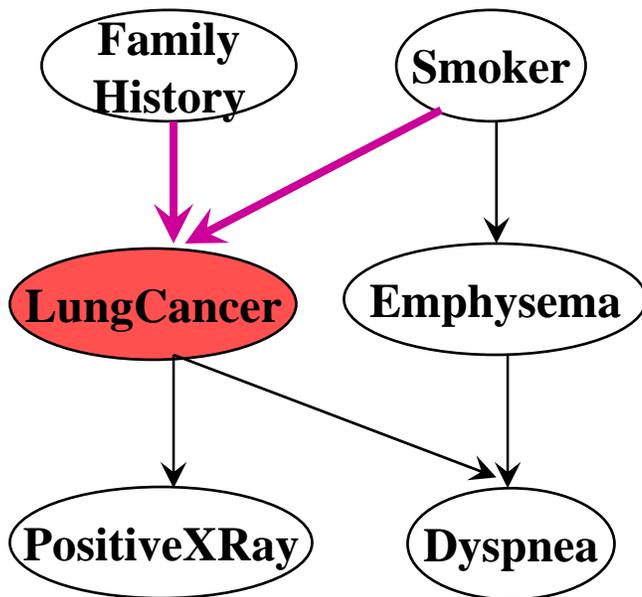
5.2 Bayes-Netzwerke

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

5.2 Klassifikation von Texten

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

5.2 Klassifikation von Texten

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

5.2 Klassifikation von Texten

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

5.2 Klassifikation von Texten

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

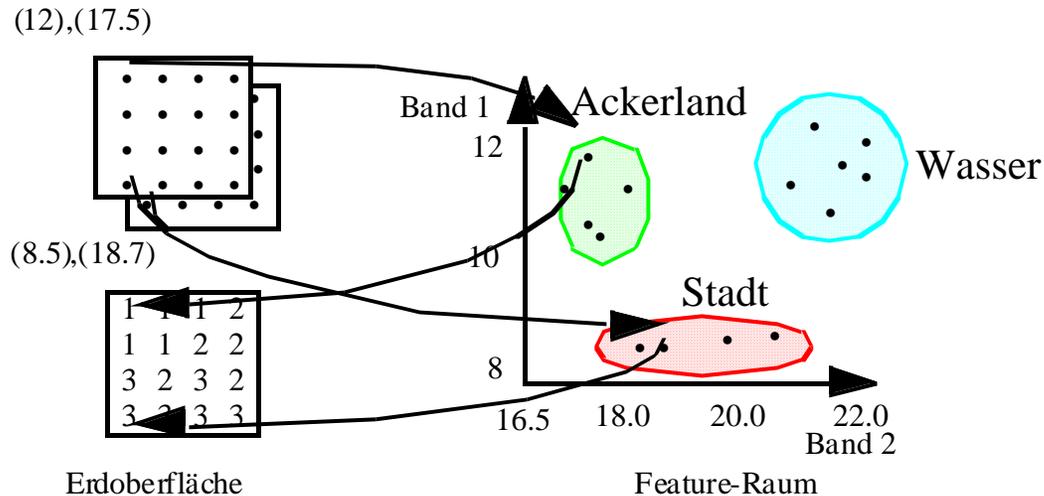
Experimentelle Untersuchung [Craven et al. 1999]

- 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

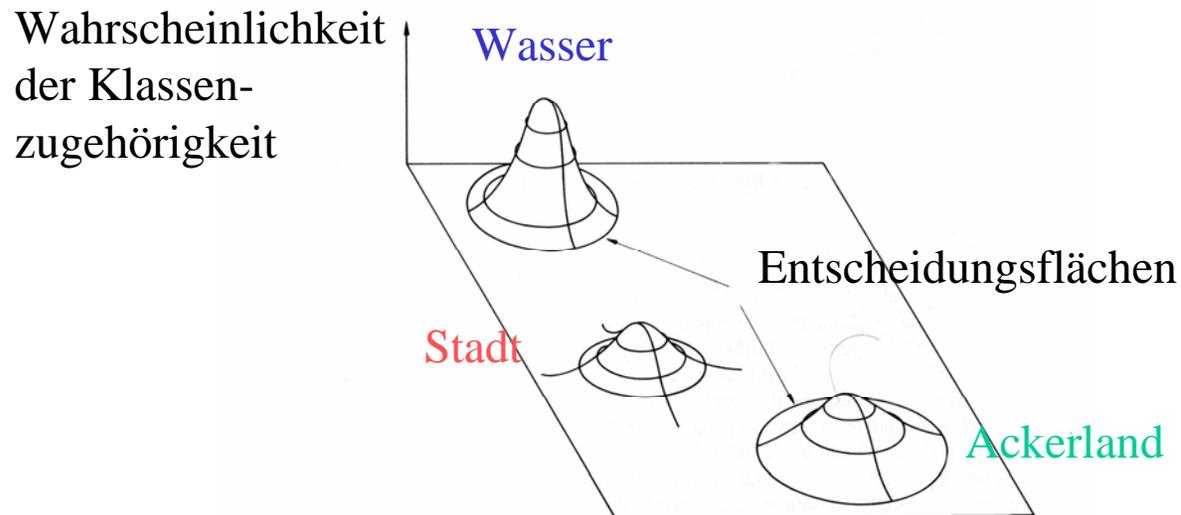
- *automatische* Interpretation von d Rasterbildern eines bestimmten Gebiets für jedes Pixel ein d -dimensionaler Grauwertvektor (o_1, \dots, o_d)
- verschiedene Oberflächenbeschaffenheiten der Erde besitzen jeweils ein charakteristisches Reflexions- und Emissionsverhalten



5.2 Interpretation von Rasterbildern

Grundlagen

- Anwendung des optimalen Bayes-Klassifikators
- Schätzung der $P(o | c)$ 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

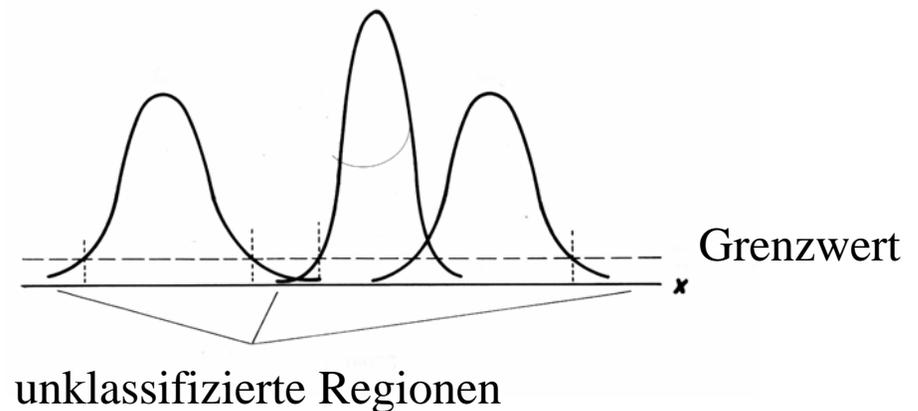
- Probleme der Entscheidungsregel

- Likelihood für die gewählte

Klasse sehr klein

- Likelihood für mehrere

Klassen ähnlich



5.2 Bayes-Klassifikatoren

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

5.3 Nächste-Nachbarn-Klassifikatoren

Motivation

- Bayes-Klassifikator zur Interpretation von Rasterbildern

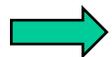
Annahme der Normalverteilung der Grauwertvektoren einer Klasse

erfordert Schätzung von μ_i und Σ_i

Schätzung von μ_i benötigt wesentlich weniger Trainingsdaten

- Ziel

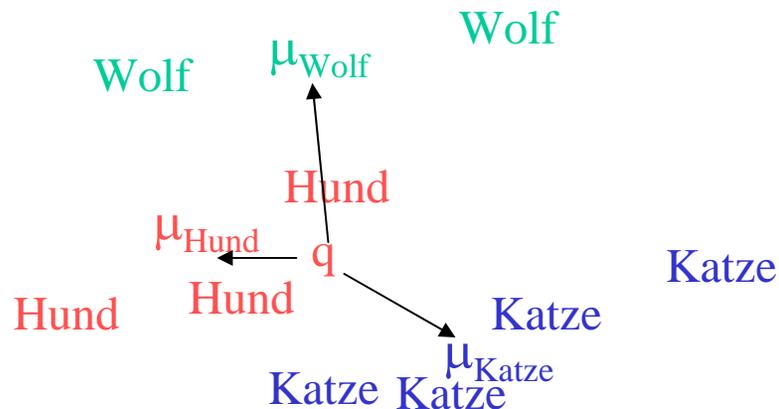
Klassifikator, der lediglich die Mittelwertvektoren für jede Klasse benötigt



Nächste-Nachbarn-Klassifikatoren

5.3 Nächste-Nachbarn-Klassifikatoren

Beispiel



Klassifikator:
q ist ein Hund!



Instance-Based Learning
verwandt dem Case-Based Reasoning

5.3 Nächste-Nachbarn-Klassifikatoren

Grundlagen

Basisverfahren

- Trainingsobjekte o als Attributvektoren $o = (o_1, \dots, o_d)$
- 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

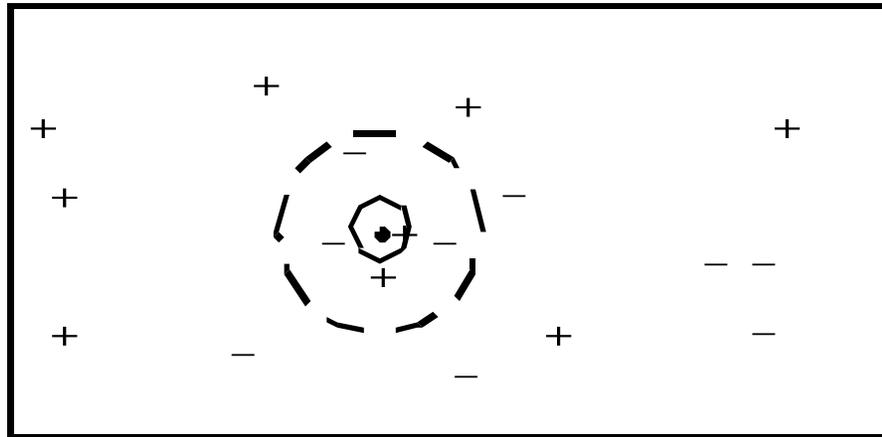
5.3 Nächste-Nachbarn-Klassifikatoren

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?

5.3 Nächste-Nachbarn-Klassifikatoren

Beispiel



Klassen „+“ und „-“



Entscheidungsmenge für $k = 1$



Entscheidungsmenge für $k = 5$

Gleichgewichtung der Entscheidungsmenge

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

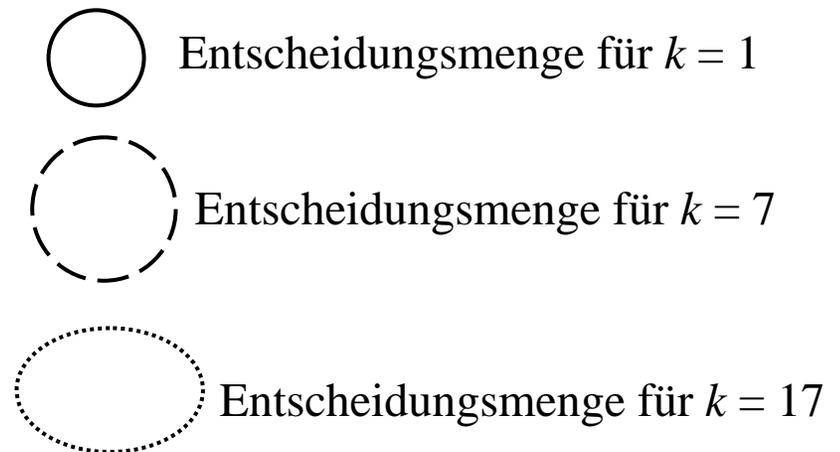
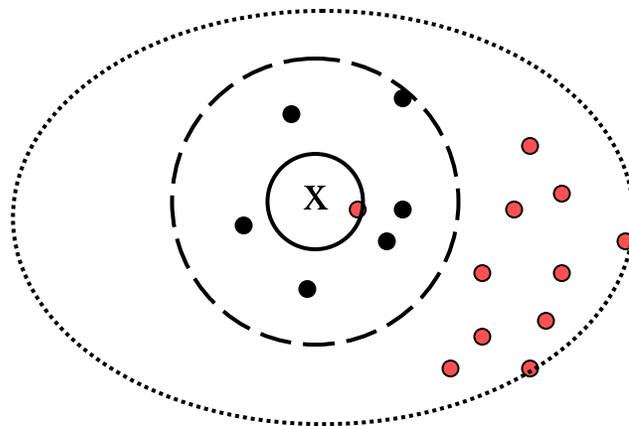
Gewichtung der Entscheidungsmenge nach inversem Quadrat der Distanz

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

5.3 Nächste-Nachbarn-Klassifikatoren

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 $1 \ll k < 10$



x: zu klassifizieren

5.3 Nächste-Nachbarn-Klassifikatoren

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

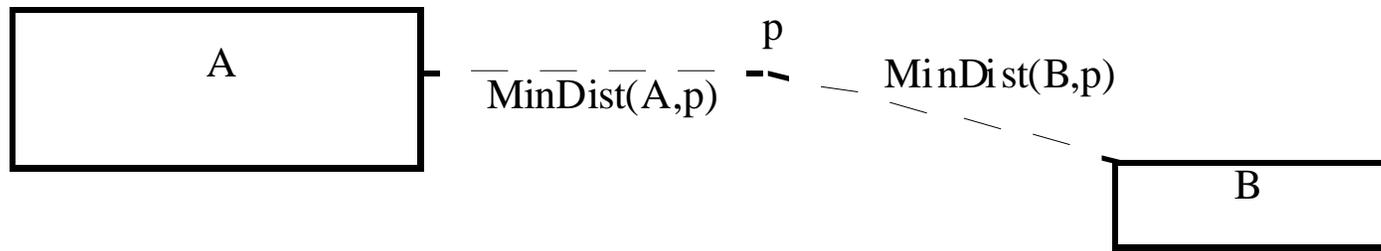
5.3 Nächste-Nachbarn-Klassifikatoren

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

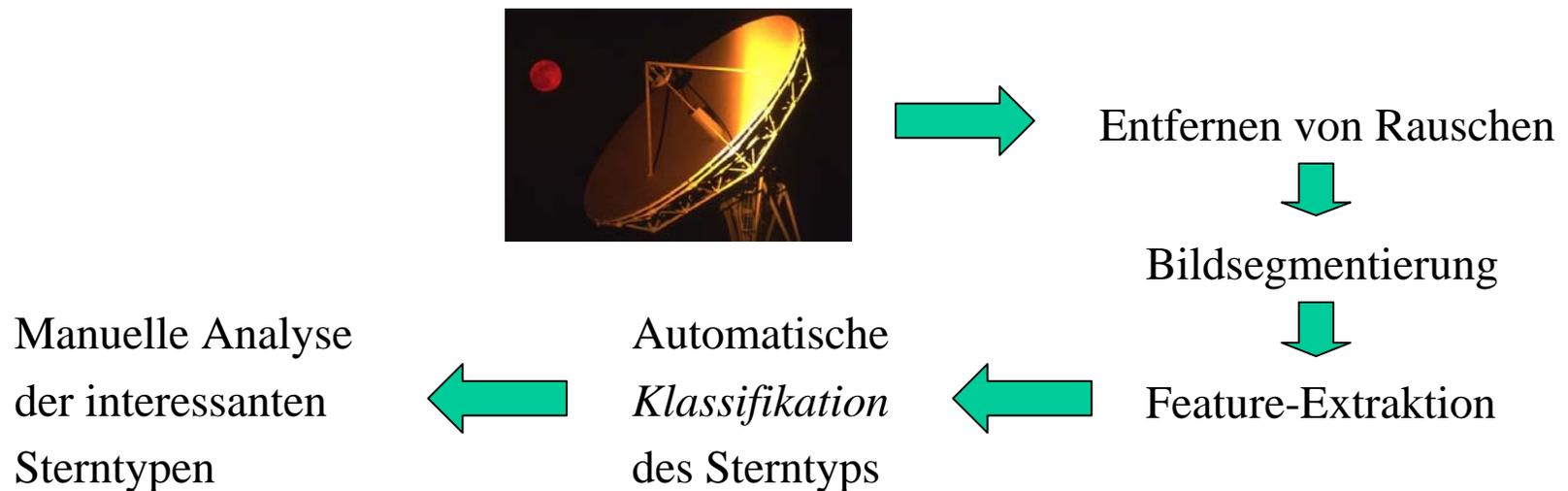
- alle MURs aus der PartitionList entfernen, die eine größere Distanz zum Anfragepunkt p besitzen als der bisher gefundene nächste Nachbar NN von p
- PartitionList wird aufsteigend nach MinDist zu p sortiert
- es wird jeweils das erste Element dieser Liste zur Bearbeitung ausgewählt
es werden keine überflüssigen Seiten gelesen!
- Anfragebearbeitung auf wenige Pfade der Indexstruktur beschränkt



Durchschnittliche Laufzeit $O(\log n)$ bei „nicht zu vielen“ Attributen
bei sehr vielen Attributen $O(n)$

5.3 Klassifikation von Sternen

Analyse astronomischer Daten



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

5.3 Klassifikation von Sternen

Hipparcos-Katalog [ESA 1998]

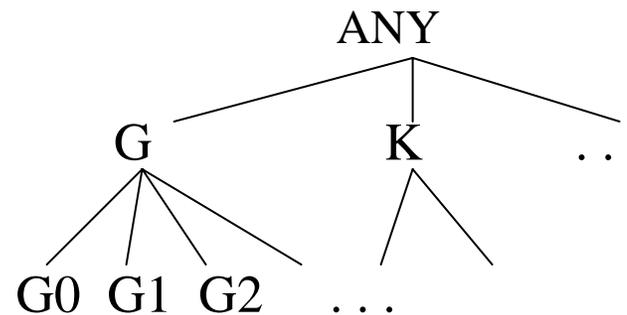
- enthält ca. 118 000 Sterne
- mit 78 Attributen (Helligkeit, Entfernung, Farbe, . . .)
- Klassenattribut: Spektraltyp (Attribut H76)

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	}
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	
C	165	0.14	
R	89	0.07	
W	75	0.06	
N	63	0.05	
S	25	0.02	
D	27	0.02	

häufige Klassen

seltene Klassen

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	Klassifikationsgenauigkeit
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

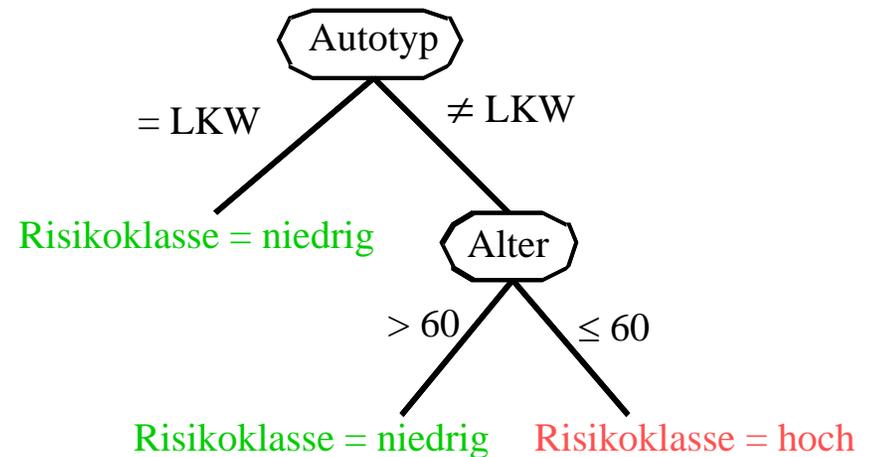
- + Anwendbarkeit
 - erfordert als Eingabe nur die Trainingsdaten
- + hohe Klassifikationsgenauigkeit
 - in vielen Anwendungen
- + Inkrementalität
 - Klassifikator kann sehr einfach an neue Trainingsobjekte adaptiert werden
- + auch zur Vorhersage einsetzbar

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

5.4 Entscheidungsbaum-Klassifikatoren

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

5.4 Entscheidungsbaum-Klassifikatoren

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

5.4 Entscheidungsbaum-Klassifikatoren

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

5.4 Entscheidungsbaum-Klassifikatoren

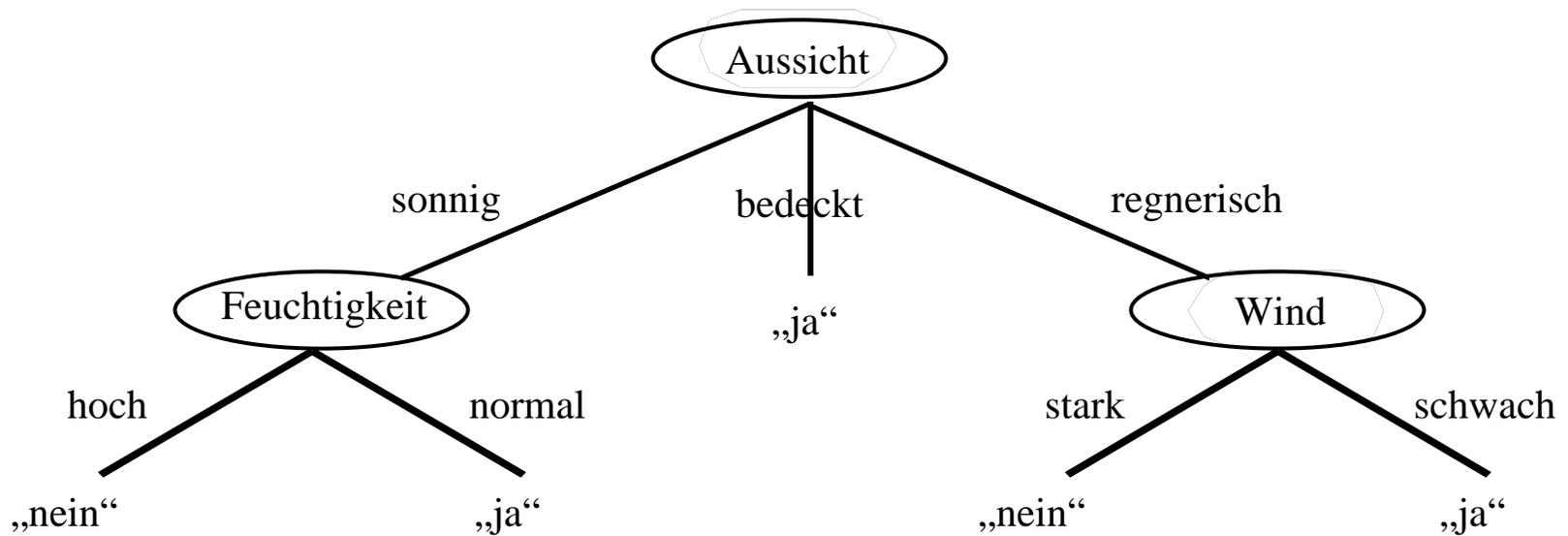
Beispiel

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 Tennispielen?

5.4 Entscheidungsbaum-Klassifikatoren

Beispiel

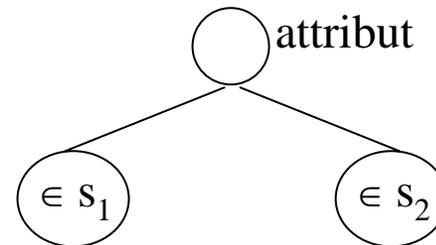
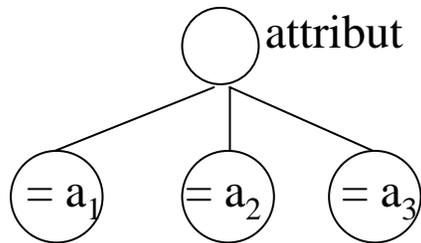


5.4 Splitstrategien

Typen von Splits

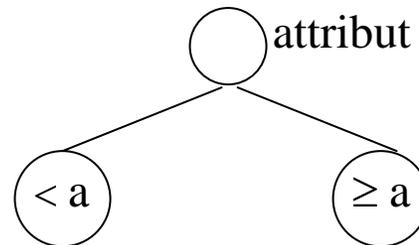
Kategorische Attribute

- Splitbedingungen der Form „ $attribut = a$ “ or „ $attribut \in set$ “
- viele mögliche Teilmengen



Numerische Attribute

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



5.4 Splitstrategien

Qualitätsmaße für Splits

Gegeben

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

Gesucht

- ein Maß der *Unreinheit* einer Menge S von Trainingsobjekten in Bezug auf die Klassenzugehörigkeit
- ein Split von T in T_1, T_2, \dots, T_m , der dieses Maß der Unreinheit *minimiert*
 - ➡ Informationsgewinn, Gini-Index

5.4 Splitstrategien

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

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

$\text{entropie}(T) = 0$, falls $p_i = 1$ für ein i

$\text{entropie}(T) = 1$ für $k = 2$ Klassen mit $p_i = 1/2$

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

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

5.4 Splitstrategien

Gini-Index

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

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

kleiner Gini-Index \Leftrightarrow geringe Unreinheit,

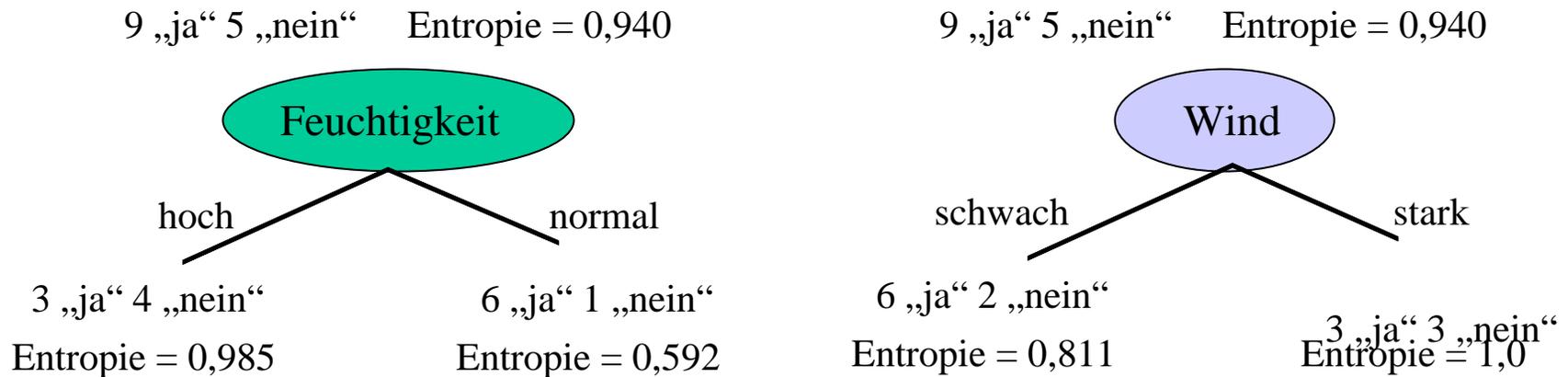
großer Gini-Index \Leftrightarrow hohe Unreinheit

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

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

5.4 Splitstrategien

Beispiel



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

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

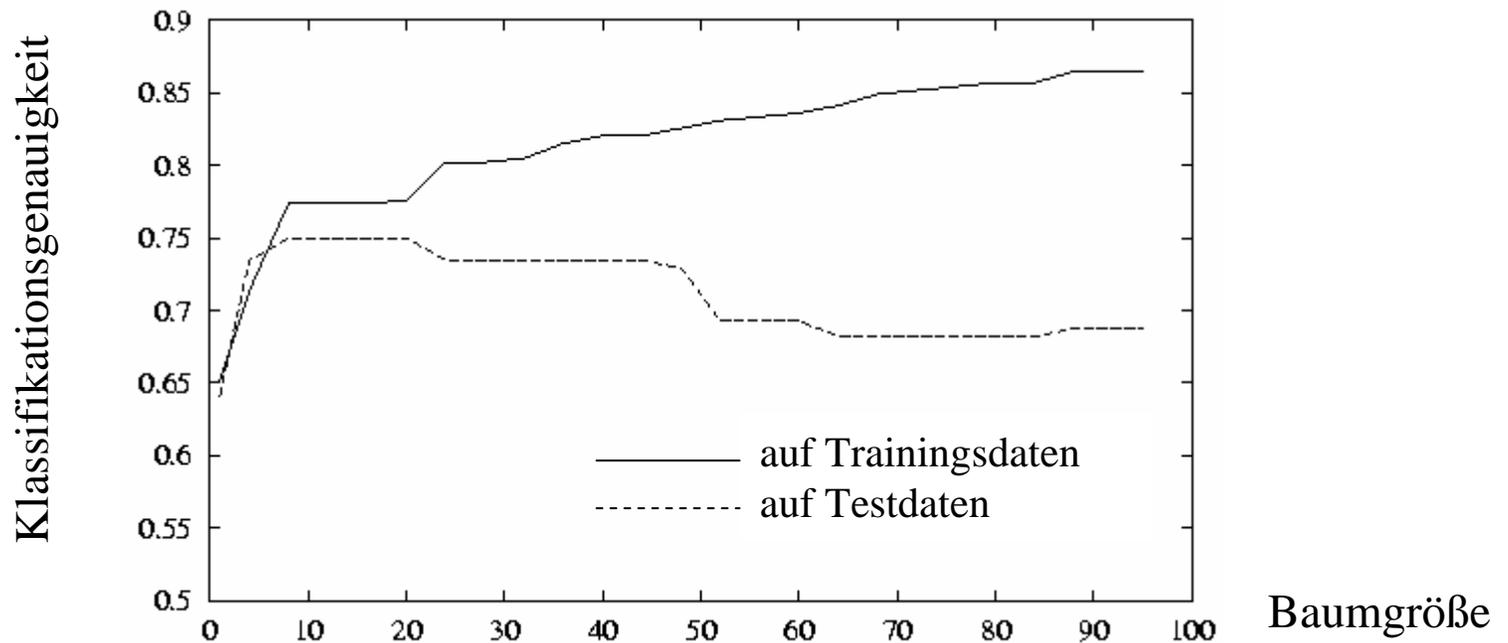
➔ Feuchtigkeit liefert den höheren Informationsgewinn

5.4 Overfitting

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 .



5.4 Overfitting

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 \ll 100%

Blätter können auch fehlerhafte Datensätze oder Rauschen „absorbieren“

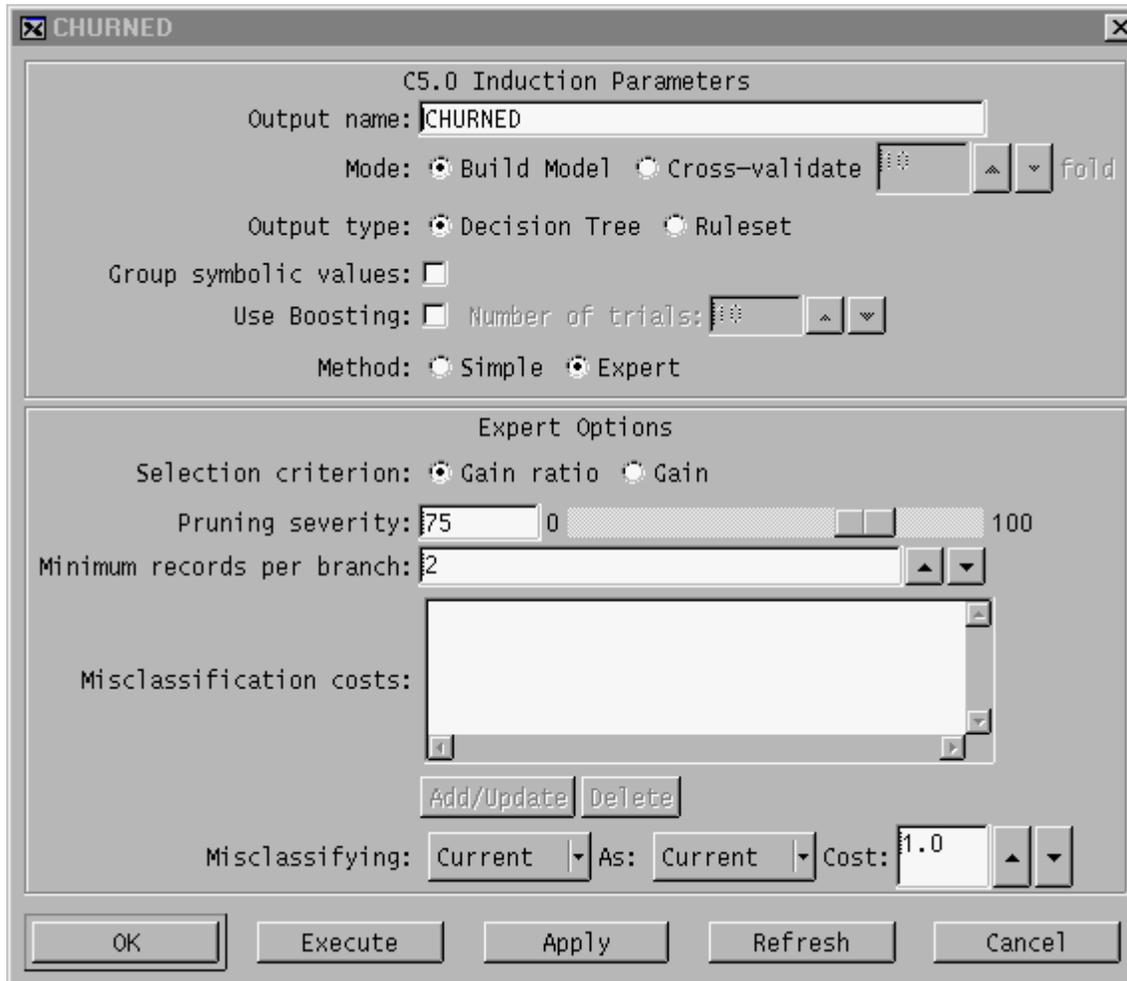
- nachträgliches Pruning des Entscheidungsbaums

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

5.4 Pruning von Entscheidungsbäumen

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

5.4 Pruning von Entscheidungsbäumen

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

 für $\alpha \geq \alpha_{crit}$ lohnt sich das Prunen beim Knoten e
- *schwächster Link*: Knoten mit dem minimalen Wert für α_{crit}

5.4 Pruning von Entscheidungsbäumen

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 $E(\alpha_1) > E(\alpha_2) > \dots > E(\alpha_m)$
mit $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_m$
- Auswahl des besten $E(\alpha_i)$
Schätzung des Klassifikationsfehlers auf der Grundgesamtheit
durch l -fache Überkreuz-Validierung auf der Trainingsmenge

5.4 Pruning von Entscheidungsbäumen

Beispiel

i	E _i	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

5.5 Skalierung für große Datenbanken

Motivation

Konstruktion von Entscheidungsbäumen

eine der wichtigsten Methoden der Klassifikation

Bisher

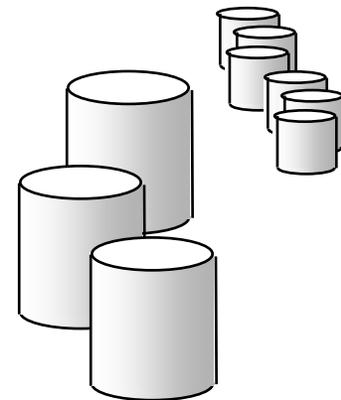
- kleine Datenmengen
- hauptspeicherresident

Jetzt

- immer größere kommerzielle Datenbanken
- Algorithmen für sekundärspeicherresidente Daten



skalieren für Datenbanken beliebiger Größe



5.5 Skalierung für große Datenbanken

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

5.5 Skalierung für große Datenbanken

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

5.5 SLIQ

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

5.5 SLIQ

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

5.5 SLIQ

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

5.5 SLIQ

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 Attributliste 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 ;

5.5 SPRINT

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

5.5 SPRINT

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

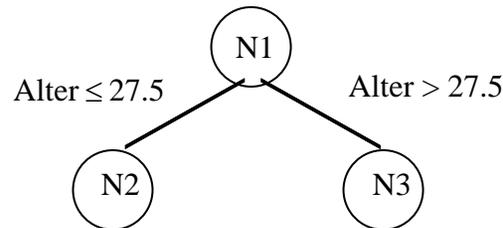
5.5 SPRINT

Beispiel

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

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

Attributlisten
für Knoten N1



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

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

Attribut-
listen für
Knoten N2

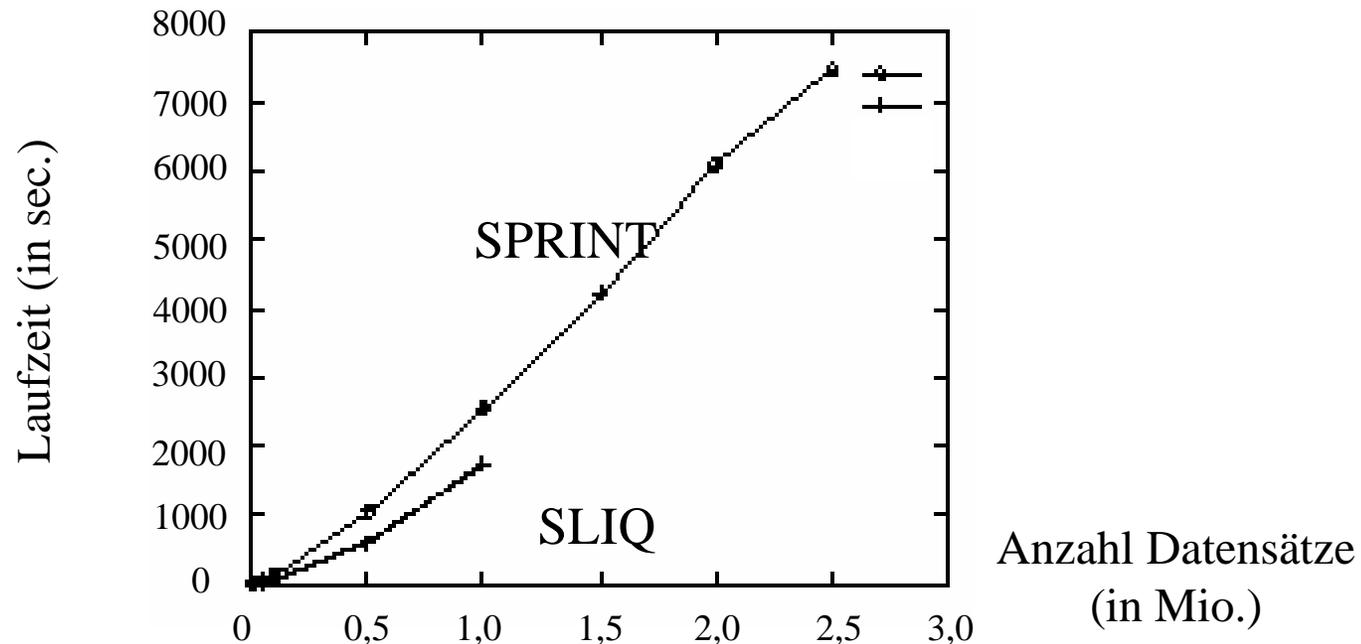
Attribut-
listen für
Knoten N3

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

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

5.5 SPRINT

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)

5.5 RainForest

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

5.5 RainForest

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 $(a_i, c_j, \text{zaehler})$
- *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

5.5 RainForest

Beispiel

Trainingsdaten

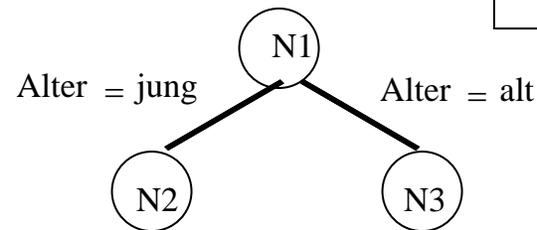
Id	Alter	Gehalt	Klasse
1	jung	65	G
2	jung	15	B
3	jung	75	G
4	alt	40	B
5	alt	100	G
6	alt	60	G

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

5.5 RainForest

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

5.5 RainForest

Algorithmen

Algorithmus *RF_Read*

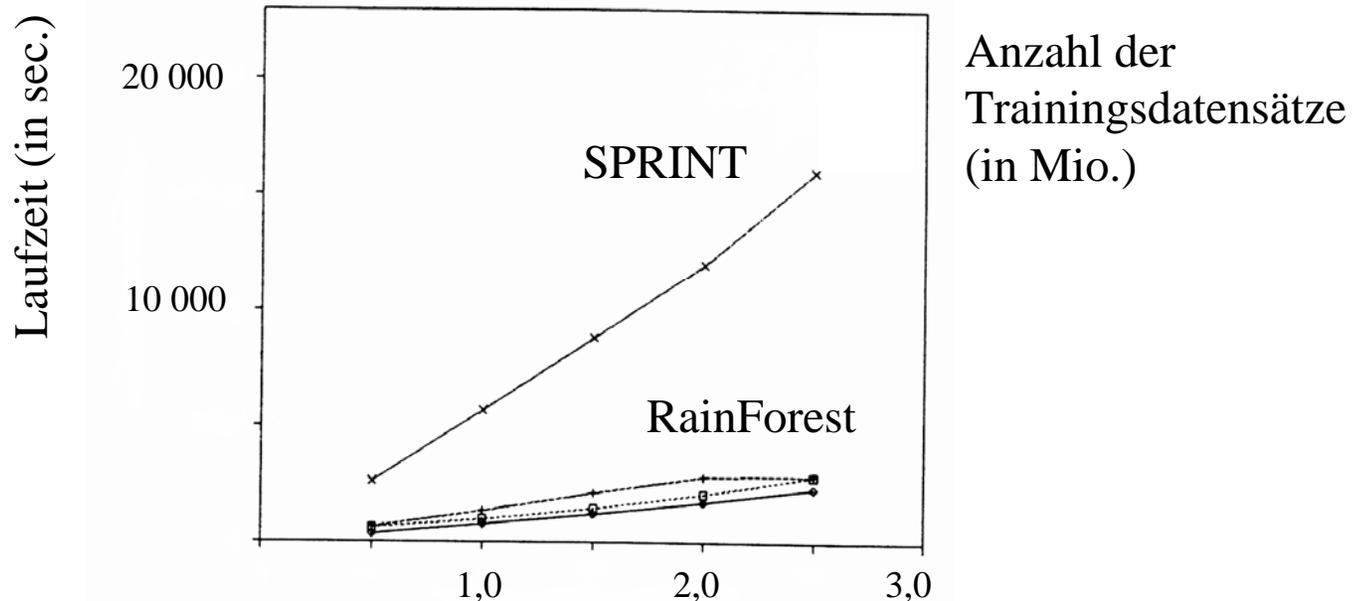
- vermeidet das explizite Schreiben der Partitionen auf den Sekundärspeicher
 - Lesen der gewünschten Partition aus der gesamten Trainingsdatenbank
 - gleichzeitiger Aufbau der AVC-Gruppen für möglichst viele Partitionen
- ➡ Trainingsdatenbank wird für jede Ebene des Baums mehrfach gelesen

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



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

5.6 Support Vector Machines (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).

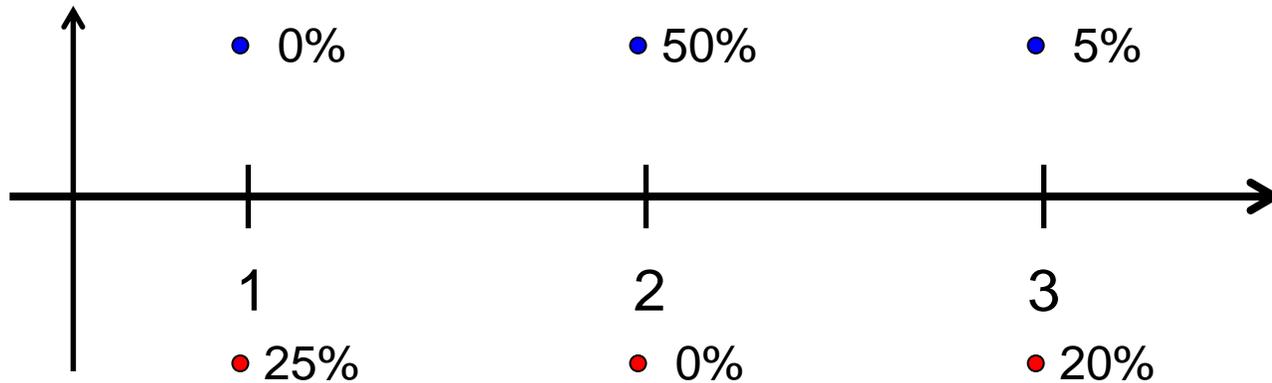
H die Menge von Funktionen in LH .

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



$$H = \{ f_a \mid f_a(x) = 1, \text{ für } x \geq a, f_a(x) = -1 \text{ sonst, } a \in \mathcal{R} \}$$

$$R(f_0) = 0,25 + 0 + 0,20 = 0,45$$

$$R(f_{1,5}) = 0 + 0 + 0,20 = 0,20$$

$$R(f_{3,5}) = 0 + 0,5 + 0,05 = 0,55$$

Reale Beispiele

Klassifikation: $Q(\mathbf{x},\mathbf{h}) = 0$, falls $t(\mathbf{x}) = \mathbf{h}(\mathbf{x})$, **1** sonst

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

Regression: $Q(\mathbf{x},\mathbf{h}) = (t(\mathbf{x})-\mathbf{h}(\mathbf{x}))^2$

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

Erinnerung: Minimierung des beobachteten Fehlers

Funktionslernaufgabe nicht direkt lösbar. Problem:

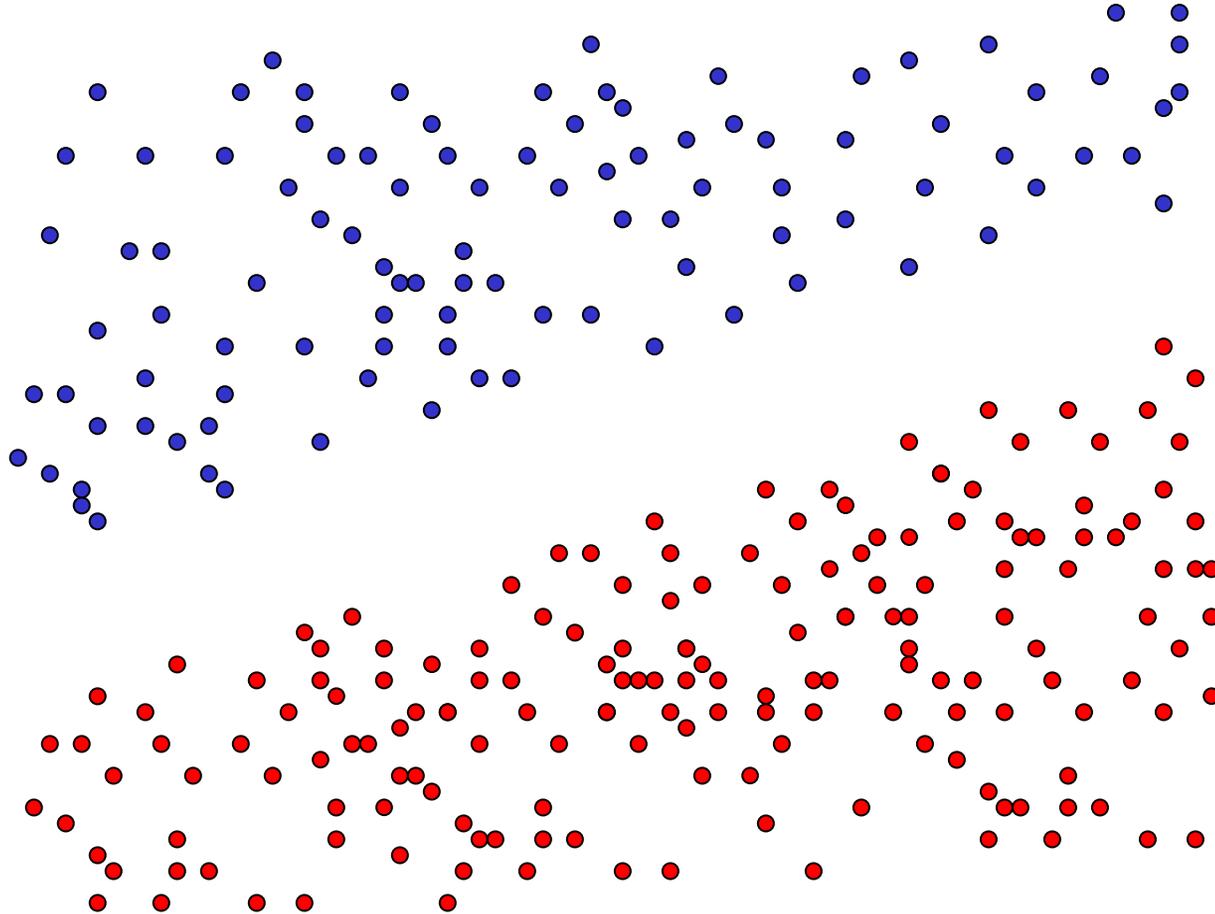
- Die tatsächliche Funktion $t(X)$ ist unbekannt.
- Die zugrunde liegende Wahrscheinlichkeit ist unbekannt.

Ansatz:

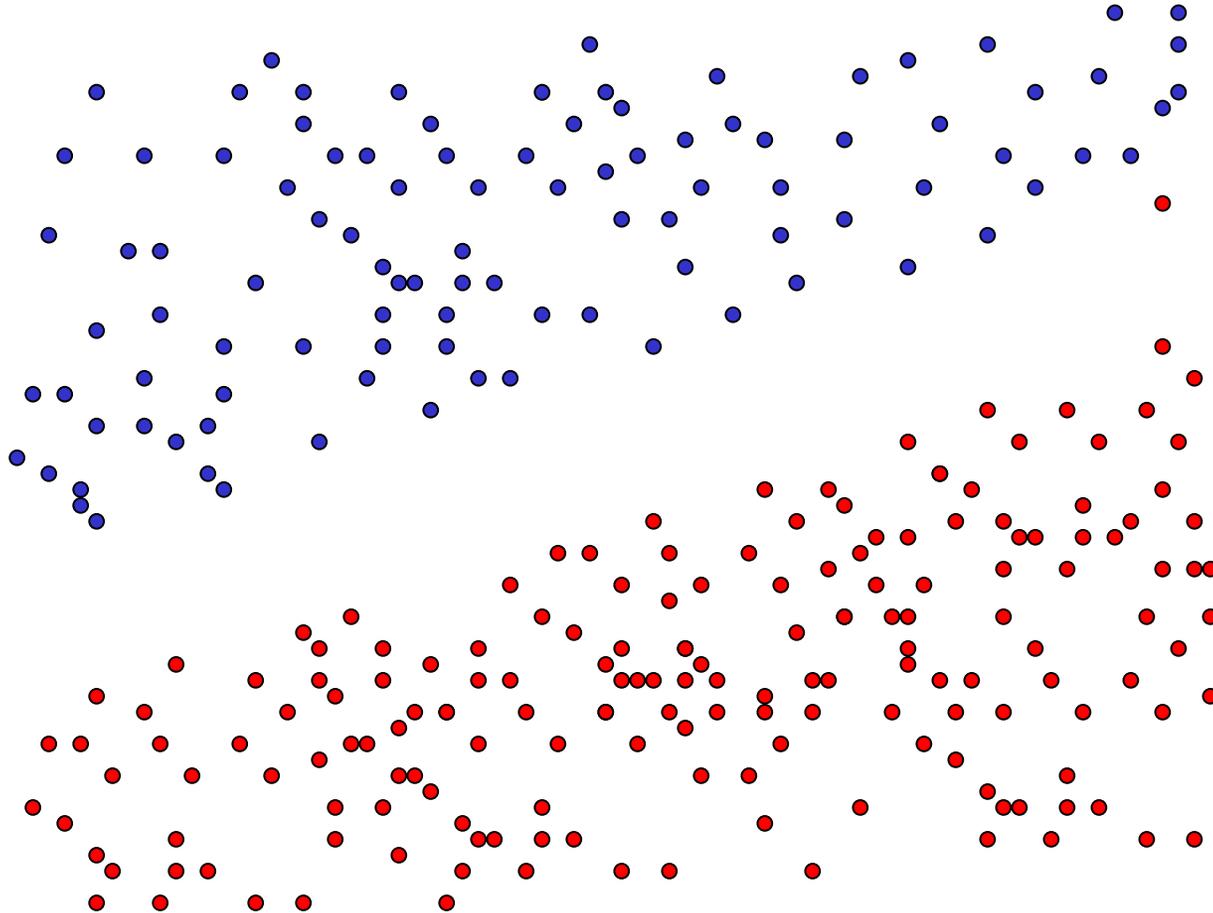
- eine hinreichend große Lernmenge nehmen und für diese den Fehler minimieren.

⇒ Empirical Risk Minimization

Beispiel



Beispiel II

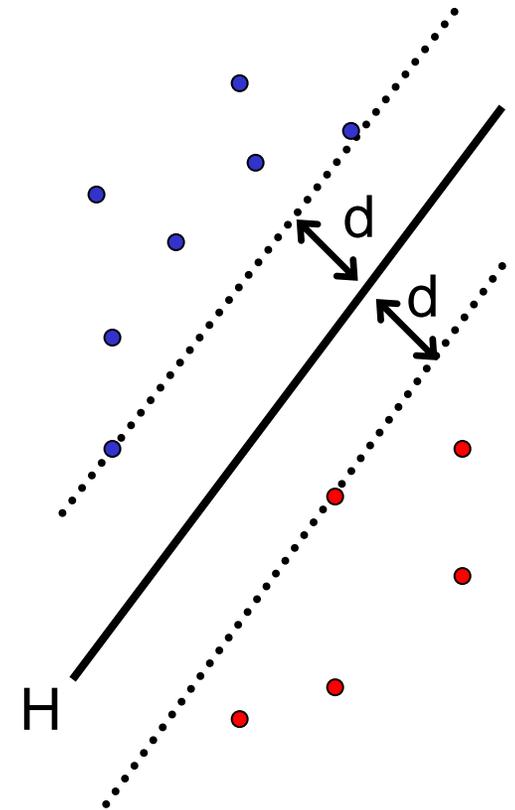


Probleme der ERM

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

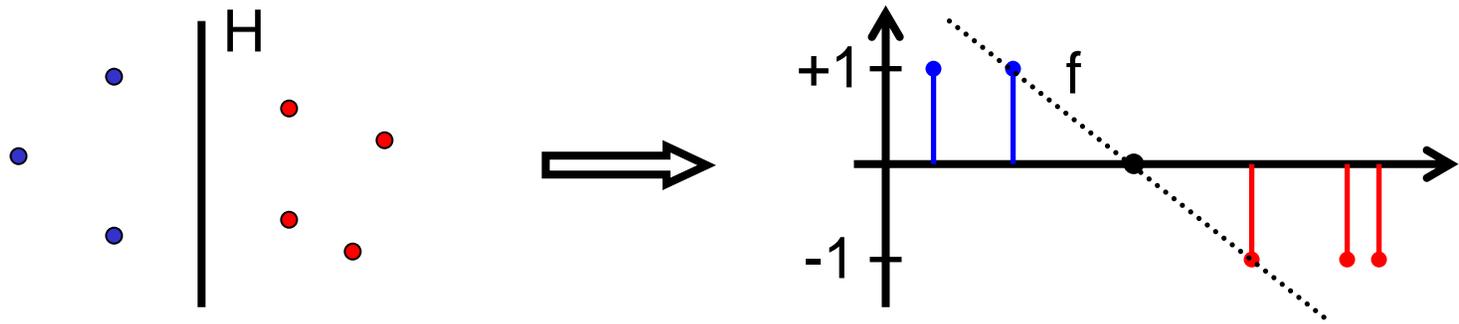
Die optimale Hyperebene

- 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 $y_i = -1$

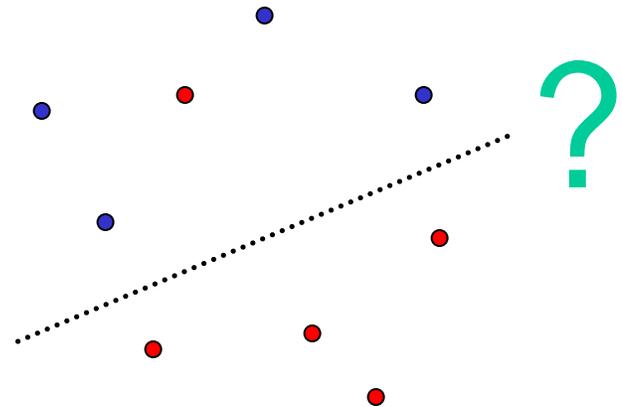


Optimierungsaufgabe der SVM

- 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.

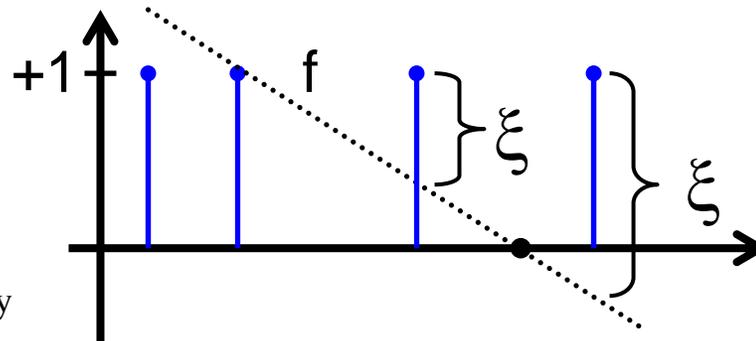
Nicht linear trennbare Daten

- 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 $C \in \mathcal{R}_{>0}$ 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: $y_i * f(x_i) \geq 1 - \xi_i$



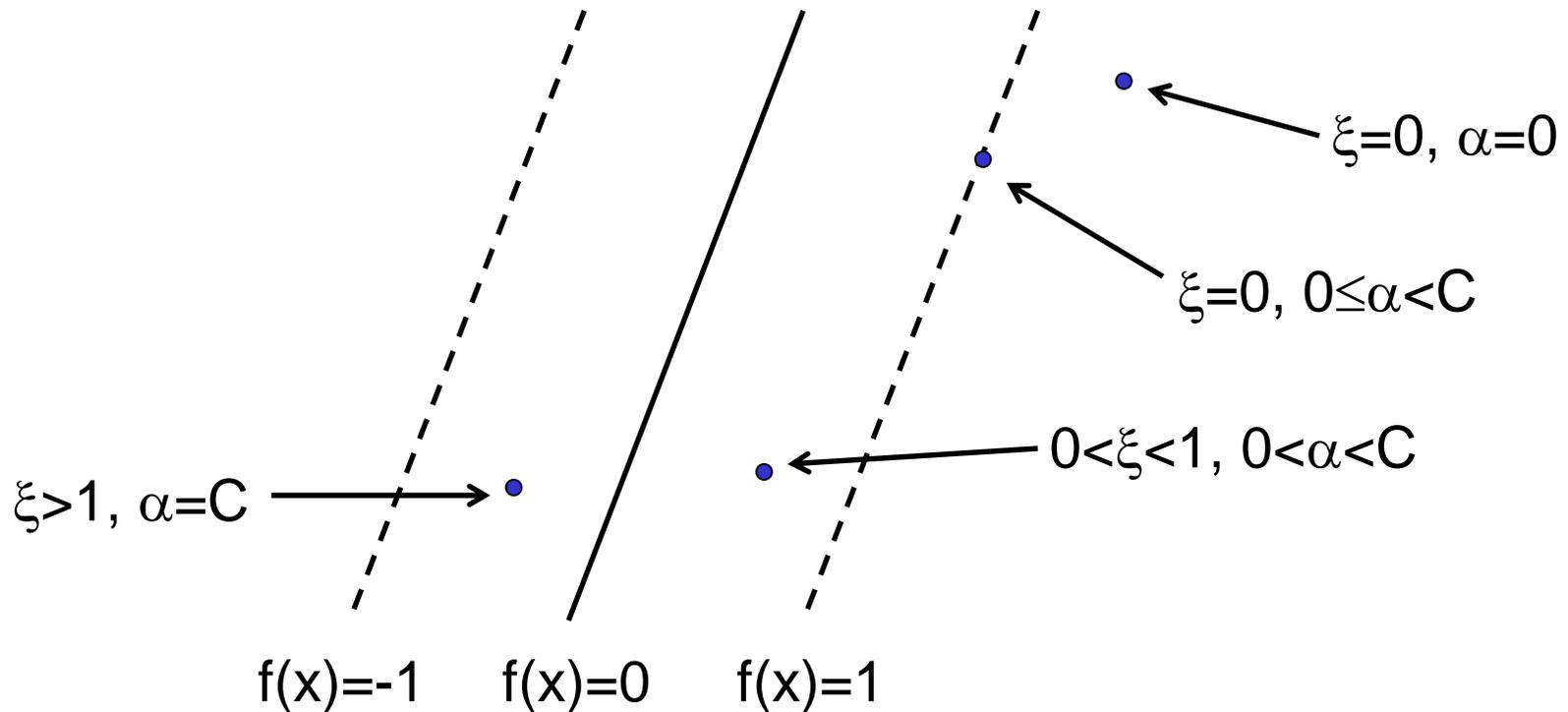
Duales Optimierungsproblem

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

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

- 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( $\alpha$ )           //  $s_i = \sum \alpha_j (x_j * x_i)$ 
while(nicht konvergiert(s))         // auf  $\epsilon$  genau
    WS = working_set(s)             // suche k „gute“ Variablen
     $\alpha'$  = optimiere(WS)          // k neue  $\alpha$ -Werte
    s = update(s,  $\alpha'$ )          // s = Gradient von W( $\alpha'$ )
```

- 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?