

## 0.1 Vorgehensweise bei der Analyse

Bevor die Ergebnisse erläutert werden, wird kurz auf die Vorgehensweise bei der Analyse eingegangen. In die Analyse werden fünf Modelle einbezogen: SVM mit linearem, polynomialem und radialem Kern, sowie regularisierte logistische Regression und k-nearest neighbours.

Vor dem erstellen der Modelle wird ein Tuning der Hyperparameter je Modell durchgeführt. Dafür wird die Bayesian Optimization Methode genutzt, welche ein iterativer Algorithmus ist. Hierbei werden die nächsten Evaluierungspunkte basierend auf zuvor beobachteten Ergebnissen bestimmt (Yang & Shami, 2020). Der Algorithmus basiert auf zwei Hauptkomponenten: einem Surrogatmodell und einer Akquisitionsfunktion. Das Surrogatmodell, wofür hier ein Gaussian Process genutzt wird, passt die bisher beobachteten Punkte an die Zielfunktion an. Die Akquisitionsfunktion wählt dann die nächsten Punkte aus, wobei ein Gleichgewicht zwischen der Erkundung neuer Bereiche und der Nutzung vielversprechender Regionen angestrebt wird. Dafür wird hier der Ansatz des Upper-Confidence-Bound genutzt, welcher obere Konfidenzgrenzen nutzt um den Verlust gegenüber der besten möglichen Entscheidung, während der Optimierung zu minimieren (Snoek et al., 2012).

$$a_{UCB}(\mathbf{x}; \{\mathbf{x}_n, y_n\}, \theta) = \mu(\mathbf{x}; \{\mathbf{x}_n, y_n\}, \theta) - k\sigma(\mathbf{x}; \{\mathbf{x}_n, y_n\}, \theta) \quad (1)$$

Die Bayesian Optimization wird genutzt, da sie eine schnelle Konvergenz für stetige Hyperparameter aufweist (Yang & Shami, 2020). Als Evaluierungskriterium wird die Genauigkeit der Modelle, welche durch den Anteil der korrekt klassifizierten Beobachtungen wiedergegeben wird, verwendet.

Basierend auf den Ergebnissen des Tuning werden die oben genannten Modelle erstellt. Daraufhin werden die Genauigkeit, die Receiver Operating Characteristic Kurve (ROC-Kurve) bzw. der Area Under The Curve Wert (AUC-Wert) und der F1-Score für jedes Modell bestimmt.

Die ROC-Kurve ist eine grafische Darstellung der Leistungsfähigkeit eines Klassifikationsmodells, wobei die Sensitivität auf der y-Achse von 0 bis 1 gegen die Spezifität auf der x-Achse von 1 bis 0 abgetragen wird (Fawcett, 2006). Sensitivität und Spezifität ergeben sich aus:

$$Sensitivität = \frac{\textit{korrekt Positiv}}{\textit{korrekt Positiv} + \textit{falsch Negativ}} \quad (2)$$

$$Spezifität = \frac{\textit{korrekt Negativ}}{\textit{falsch Positiv} + \textit{korrekt Negativ}} \quad (3)$$

Positiv ist in diesem Fall gleichbedeutend mit Klasse 1 und Negativ mit Klasse 2. Die ROC-Kurve zeigt dann den Zusammenhang zwischen dem Nutzen (korrekt Positive) und den Kosten (falsch Positive) auf. Eine ideale Kurve läuft nah am linken, oberen Rand der Grafik, da hier bereits bei sehr hoher Spezifität (hohe Anzahl korrekt Negative) eine hohe Sensitivität (hohe Anzahl korrekt Positive) erreicht wird. Der AUC-Wert bezieht sich auf die Fläche unterhalb der Kurve und liegt somit im Intervall  $[0,1]$ , wobei ein Wert von 1 für eine perfekte Klassifikation spricht, während ein Wert von 0.5 gleichbedeutend mit einer rein zufälligen Zuordnung der Klassen spricht.

Für den F1-Score ist außerdem die Präzision von Bedeutung, die sich wie folgt berechnet (Fawcett, 2006):

$$Präzision = \frac{\textit{korrekt Positiv}}{\textit{korrekt Positiv} + \textit{falsch Positiv}} \quad (4)$$

Der F1-Score beschreibt das harmonische Mittel zwischen Präzision und Sensitivität und drückt folglich die Fähigkeit des Modells, gleichzeitig falsch Positive und falsch Negative zu minimieren, aus.

$$F1\text{-Score} = \frac{2}{1/Präzision + 1/Sensitivität} \quad (5)$$

Zuletzt wird innerhalb jeder Datensituation, für jeden Algorithmus ein Rang vergeben, der sich aus der Summe der drei Auswertungskriterien Genauigkeit, AUC-Wert sowie F1-Score ergibt. Dabei steht Rang 1 für den am besten abschneidenden Algorithmus in der jeweiligen Datensituation.

	linear					polynomial					radial				
		ACC	AUC	F1	Rang		ACC	AUC	F1	Rang		ACC	AUC	F1	Rang
$p \ll n$	SVM-L	0.956	0.991	0.956	4	SVM-L	0.665	0.728	0.659	5	SVM-L	0.525	0.532	0.620	4
	SVM-P	0.956	0.991	0.956	3	SVM-P	0.674	0.729	0.671	4	SVM-P	1.000	1.000	1.000	1
	SVM-R	0.961	0.991	0.961	1	SVM-R	0.704	0.759	0.690	1	SVM-R	0.913	0.994	0.905	3
	LogR	0.957	0.992	0.957	2	LogR	0.687	0.740	0.687	2	LogR	0.506	0.530	0.532	5
	K-NN	0.582	0.599	0.582	5	K-NN	0.691	0.731	0.657	3	K-NN	0.978	0.978	0.978	2
$p \approx n$	SVM-L	0.82	0.869	0.816	3	SVM-L	0.50	0.504	0.545	4	SVM-L	0.68	0.605	0.724	4
	SVM-P	0.82	0.869	0.816	3	SVM-P	0.58	0.525	0.571	3	SVM-P	0.84	0.912	0.852	1
	SVM-R	0.86	0.875	0.844	2	SVM-R	0.56	0.530	0.389	5	SVM-R	0.84	0.886	0.818	2
	LogR	0.88	0.918	0.864	1	LogR	0.64	0.563	0.667	1	LogR	0.64	0.526	0.690	5
	K-NN	0.66	0.622	0.667	5	K-NN	0.56	0.552	0.577	2	K-NN	0.80	0.800	0.833	3
$p \gg n$	SVM-L	0.72	0.786	0.708	3	SVM-L	0.62	0.574	0.612	1	SVM-L	0.56	0.504	0.633	5
	SVM-P	0.74	0.792	0.735	2	SVM-P	0.62	0.574	0.612	1	SVM-P	0.72	0.882	0.774	2
	SVM-R	0.54	0.500	0.439	5	SVM-R	0.50	0.500	NaN	5	SVM-R	0.72	0.744	0.611	3
	LogR	0.80	0.814	0.808	1	LogR	0.60	0.562	0.600	3	LogR	0.58	0.530	0.656	4
	K-NN	0.62	0.584	0.513	4	K-NN	0.50	0.612	0.490	4	K-NN	0.88	0.880	0.893	1

Tabelle 1: Vergleich der Modelle

## 0.2 Darstellung der Ergebnisse

Tabelle 1 zeigt die Leistungsfähigkeit der fünf Klassifikationsalgorithmen über die neun verschiedenen Datensituationen anhand drei verschiedener Evaluationskriterien, sowie den Rang in der jeweiligen Datensituation. In den Datensituationen mit linearer Form der Entscheidungsgrenze performt insbesondere *logR* gut, da sie in allen drei Szenarien über alle Kriterien hinweg einen Wert von mindestens 0.8 aufweist und jeweils mindestens Rang 2 belegt. Im Falle von  $p \ll n$  und  $p \approx n$  zeigen auch *SVM – L*, *SVM – P* und *SVM – R* eine gute Leistung mit Werten um 0.9. In dem hochdimensionalen Setting  $p \gg n$  ist die Performance jedoch differenzierter zu betrachten. Hier schneiden *SVM – L* und *SVM – P* nach wie vor ordentlich ab. *SVM – R* zeigt hier jedoch deutliche Defizite über alle Kriterien hinweg mit Werten um 0.5. *K – NN* schneidet im linearen Kontext über alle Szenarien hinweg schlecht ab, wobei die Genauigkeit maximal bei 0.66 im Falle von  $p \approx n$  liegt.

Die ROC-Kurven werden nur in den Datensituationen mit  $p \ll n$  genutzt, da die grafische Darstellung in Szenarien mit kleinem  $n$  nicht sinnvoll erscheint. Abbildung 1 zeigt die ROC-Kurven für die Datensituation S1. Diese zeigt grafisch noch einmal den deutlichen Unterschied zwischen *K – NN*, welcher nur etwas besser als eine reine Zufallsauswahl ist und den anderen vier Algorithmen, welche nahezu perfekt klassifizieren.

In den Datensituationen mit polynomialer Form der Entscheidungsgrenze ist die Leistungsfähigkeit aller Algorithmen grundsätzlich deutlich schlechter als in den zuvor beschriebenen Szenarien. Im Fall von  $p \ll n$  sind die Ergebnisse mittelmäßig mit Werten um 0.7, wobei sich kein Algorithmus von den anderen absetzen kann. Bei  $p \approx n$  ist *LogR* den anderen Klassifikationsmethoden leicht überlegen, insbesondere bei der Fähigkeit gleichzeitig falsch Positive und falsch Negative zu minimieren (F1-Score = 0.667). Die anderen Algorithmen befinden sich durchweg über alle Werte hinweg nahe 0.5. Ähnlich ist es der Fall für  $p \gg n$  bei dem nun *SVM – L*, *SVM – P* und *LogR* mit einer Genauigkeit von 0.6, *SVM – R* und *K – NN* mit einer Genauigkeit von 0.5 leicht überlegen sind. Dennoch ist für die letzten beiden Szenarien deutlich, dass kein Algorithmus gute Leistung zeigt.

Abbildung 2 zeigt die ROC-Kurven für Szenario 2. Hieraus wird erneut deutlich, dass sich kein Algorithmus von den anderen abheben kann, wobei alle eine mittelmäßige Leistung zeigen.

In den Datensituationen mit radialer Form der Entscheidungsgrenze ist für den Fall  $p \ll n$  eine eindeutige Unterscheidung zu treffen. Während *SVM – P*, *SVM – R* und *K – NN* (nahezu) perfekt klassifizieren, haben dabei *SVM – L* und *LogR* große Probleme und zeigen lediglich Werte nahe 0.5. Weniger drastisch aber dennoch mit dem gleichen Resultat ist dies für  $p \approx n$  der Fall. Während *SVM – P*, *SVM – R* und *K – NN* etwas schlechter abschneiden (beispielsweise mit F1-Scores zwischen 0.8 und 0.9), performen *SVM – L* und *LogR* leicht besser (beispielsweise mit F1-Scores nahe 0.7). Innerhalb dieser beiden Gruppen gibt es keine nennenswerten Unterschiede. Für  $p \gg n$  sind ebenfalls die beiden Gruppen zu differenzieren. Für *SVM – L* und *LogR* sind wie in Szenario 3 wieder Werte nahe 0.5 bzw. nahe 0.6 für die F1-Scores erkennbar. *SVM – P* und *SVM – R* performen in diesem Szenario am schlechtesten, wobei die AUC-Werte von 0.882 bzw. 0.744 weiterhin akzeptable Leistungen zeigen. Heraus sticht *K – NN*, insbesondere bei dem F1-Score von 0.893, was verdeutlicht das dieser Algorithmus hier die beste Leistung zeigt.

Abbildung 3 zeigt die ROC-Kurven für Szenario 3. Hieraus wird die Aufteilung in die zwei Gruppen sofort deutlich. *SVM – P*, *SVM – R* und *K – NN* bewegen sich nahe an der oberen linken Kante, was für eine (nahezu) perfekte Klassifikation spricht. *SVM – L* und *LogR* orientieren sich nahe der diagonalen Linie, die eine ROC-Kurve einer reinen Zufallsauswahl beschreibt. Dies zeigt auf, dass sie kaum Fähigkeit aufweisen zwischen den Klassen zu unterscheiden.

Zuletzt wird ein Vergleich der einzelnen Dimensionen über die drei Formen der Entscheidungsgrenze gezogen. So ist für  $p \ll n$  ersichtlich, dass insbesondere *SVM – P* und *SVM – R* über alle drei Szenarien gute Leistung (insbesondere für S1 und S3 mit mindestens 0.9 über alle Werte) zeigen. Das gleiche gilt, mit Ausnahme der polynomialen Form der Entscheidungsgrenze, auch für  $p \approx n$ , wobei die Werte etwas niedriger bei 0.8 bis 0.9 liegen. In den hochdimensionalen Szenarien  $p \gg n$  ist einzig *SVM – P* überzeugend, erneut ausgenommen der polynomialen Form der Entscheidungsgrenze.

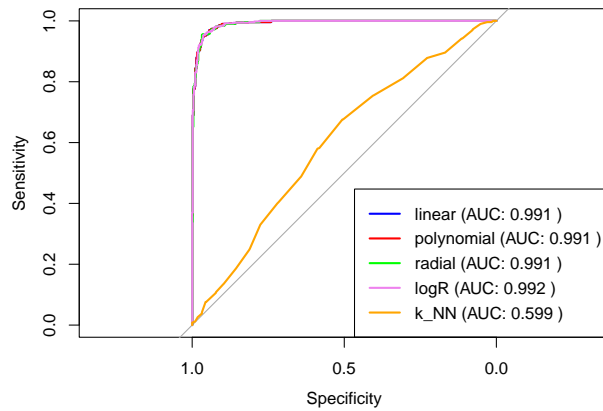


Abbildung 1: ROC-Kurven Szenario 1

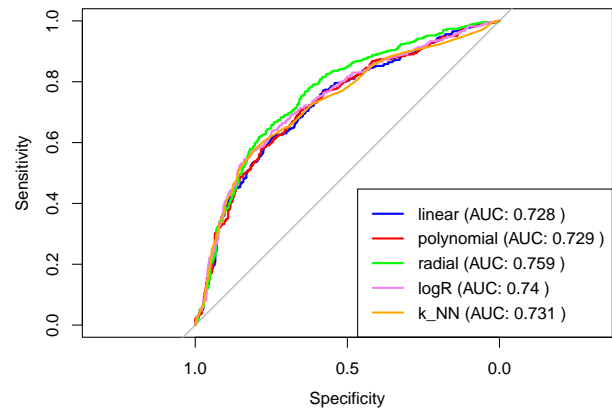


Abbildung 2: ROC-Kurven Szenario 2

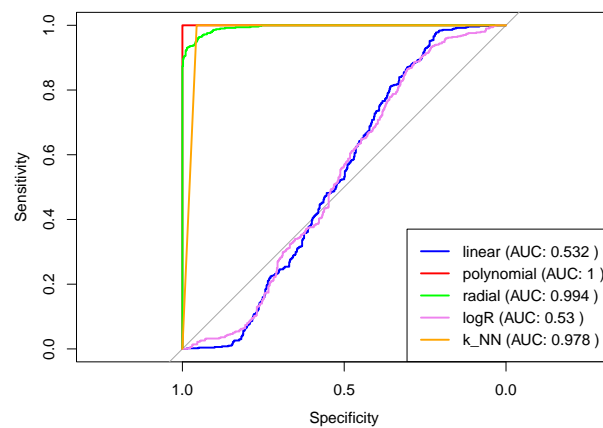


Abbildung 3: ROC-Kurven Szenario 3

## Literatur

- Fawcett, T. (2006). An Introduction to ROC Analysis. *Pattern Recognition Letters*, 27(8), 861–874. <https://doi.org/10.1016/j.patrec.2005.10.010>
- Snoek, J., Larochelle, H., & Adams, R. P. (2012, August). Practical Bayesian Optimization of Machine Learning Algorithms.
- Yang, L., & Shami, A. (2020). On Hyperparameter Optimization of Machine Learning Algorithms: Theory and Practice. *Neurocomputing*, 415, 295–316. <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2020.07.061>