Machine Learning Applications Baumbasierte Verfahren



Entscheidungsbäume sind auf den ersten Blick ein grundlegend anderer Ansatz zur Konstruktion von Klassifikationsregeln. Ihre Regeln sind meist sehr verständlich fur den Anwender, können sich aber nicht sehr flexibel an die Daten anpassen. In R kann z.B. rpart () aus dem Paket rpart benutzt werden.

Basierend auf Folien von Katharina Morik, Uwe Ligges, Christoph Sawade, Niels Landwehr, Paul Prasse, Silvia Makowski, Tobias Scheffer und Johannes Fürnkranz. Danke fürs Offenlegen der Folien.



Unsere Ziele



Was wollen wir hier kennenlernen?

- Was sind Entscheidungsbäume?
- Was ist der Informationsgewinn von Tests?
- Wie lernen wir Entscheidungsbäume?
- Wie vermeiden wir "Wildwuchs" bei Entscheidungsbäumen?
- Gütekosten



Aufteilen der Beispiele und Modellierung jeder Region



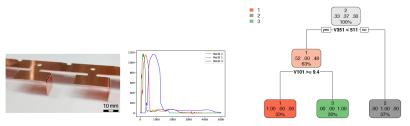
- ▶ Lineare Modelle passen die Parameter für den gesamten Raum der Beispiele an, der evtl. durch eine implizite Transformation (Kernfunktionen, dazu später mehr) oder explizite Transformationen (Vorverarbeitung) in einen Merkmalsraum überführt werden.
- Baumlerner teilen den Merkmalsraum in Rechtecke auf und passen in jedem ein Modell an. Dabei wird die Wahl des Merkmals in der rekursiven Aufteilung automatisch bestimmt.
- k-nächste Nachbarn (kNN) Verfahren, die wir noch kennen lernen werden, teilen den Raum der Beispiele bei einer Anfrage x in die Nachbarschaft von x und den Rest auf.



Entscheidungsbäume



Ein Beispiel aus der Produktion



Stanzen von Löchern in Abhängigkeit des Vorhersage des Materials Typs und der Dicke des Materials. (Links) Produktionsteil. (Rechts) Sensorwerte.

Danke an das Institut für Produktionstechnik und Umformmaschinen der TU Darmstadt für die Daten!



Entscheidungsbäume



Ein weiteres Beispiel aus der Kreditwirtschaft





Warum Entscheidungsbäume?





- Bäume sind (recht) einfach zu interpretieren
- Sie liefern direkt Vorhersagen und Begründungen: "Abgelehnt, weil weniger als 3 Monate beschäftigt und Kredit-Sicherheiten <2x verfügbares Einkommen".
- Bäume können aus Beispielen gelernt werden: Einfache Lernalgorithmen, die effizient und skalierbar ist.
- Es gibt Bäume sowohl für Klassifikation und Regression.
- ▶ Und sie lassen sich mit Modellen wie z.B. linearen Modellen kombinieren.



Was sind denn nun Entscheidungsbäume?





Entscheidungsbaum

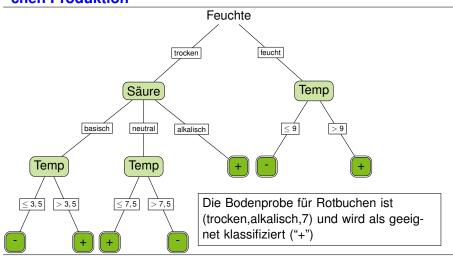
(n-äre) Entscheidungsbäume bestehen aus einer Abfolge von *n* Entscheidungen (Test), die als Baum darstellbar sind.

- Bei binären Bäumen findet In jedem Innerenknoten eine "Ja-Nein" (binäre) Entscheidung statt. Bei "Ja" folgt die Entscheidung im nächsten Knoten auf der linken Seite, bei "Nein" auf der rechten Seite.
- Die Entscheidungen werden so getroffen, dass die Knoten möglichst eine "reine" Klasse darstellen.
- ► In jedem Terminalknoten (Blatt) wird eine Zuordnung zu der Klasse getroffen, die dort am häufigsten vorkommt.



Klassifizieren mit Entscheidungsbäumen Ein weiteres Beispiel aus der landwirtschaftlichen Produktion





Lernen aus Beispielen



+				-			
ID	Feuchte	Säure	Temp	ID	Feuchte	Säure	Temp
1	trocken	basisch	7	2	feucht	neutral	8
3	trocken	neutral	7	4	feucht	alkal.	5
6	trocken	neutral	6	5	trocken	neutral	8
9	trocken	alkal.	9	7	trocken	neutral	11
10	trocken	alkal.	8	8	trocken	neutral	9
12	feucht	neutral	10	11	feucht	basisch	7
13	trocken	basisch	6	14	feucht	alkal.	7
16	trocken	basisch	4	15	trocken	basisch	3

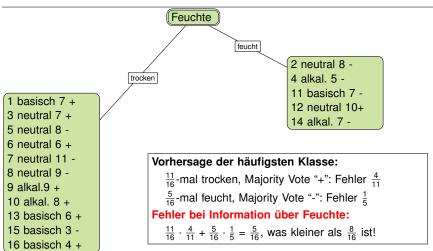
Ohne einen Test zu benutzten, können wir als Vorhersage immer "-" sagen (Majority Vote). Der Fehler ist dann 8/16.



Aufteilen nach Bodenfeuchte









Wir haben bedingte Wahrscheinlichkeiten benutzt



Bedingte Wahrscheinlichkeit

Wahrscheinlichkeit, dass ein Beispiel zu einer Klasse gehört, gegeben der Merkmalswert

$$P(Y|X_j) = P(Y \cap X_j)/P(X_j)$$

Wir kennen die echte Verteilung nicht, daher Annäherung der Wahrscheinlichkeit über die Häufigkeit in den Lernbeispielen sowie Gewichtung bezüglich der Oberklasse. Beispiel:

$$Y = \{+, -\}, X_j = \{feucht, trocken\}$$

 $P(+|feucht) = 1/5, P(-|feucht) = 4/5$ gewichtet mit 5/16
 $P(+|trocken) = 7/11, P(-|trocken) = 4/11$ gewichtet mit 11/16

Wahl des Merkmals mit dem höchsten Wert (kleinsten Fehler)



Eine erste Idee: Betrachte den Informationsgewinn eines Merkmals



Information

Sei p_+ die Wahrscheinlichkeit, dass ein Beispiel der Klasse "+" entstammt. Damit können wir die **Entropy** berechnen:

$$I(p_+, p_-) = (-p_+ \log p_+) + (-p_- \log p_-)$$

Ein Merkmal X_j mit k Werten teilt eine Menge von Beispielen X in k Untermengen $X_1, ..., X_k$ auf. Für jede dieser Mengen berechnen wir die Entropie.

Information(
$$X_j, \mathbf{X}$$
) := $-\sum_{i=1}^k \frac{|\mathbf{X}_i|}{|\mathbf{X}|} I(p_+, p_-)$

Informationsgewinn

Differenz zwischen den Informationen der Beispiele mit und ohne die Aufteilung durch X_i .



Informationsgewinn des Merkmals Feuchte



Güte des Attributs Feuchte mit den 2 Werten trocken und feucht:

$$-\left[\underbrace{\frac{11}{16} \cdot I(+,-)}_{trocken} + \underbrace{\frac{5}{16} \cdot I(+,-)}_{feucht}\right]$$

$$= -\left[\underbrace{\frac{11}{16} \cdot \left(-\frac{7}{11} \cdot \log\left(\frac{7}{11}\right) - \frac{4}{11} \cdot \log\left(\frac{4}{11}\right)\right)}_{trocken} + \underbrace{\frac{5}{16} \left(-\frac{1}{5} \cdot \log\left(\frac{1}{5}\right) - \frac{4}{5} \cdot \log\left(\frac{4}{5}\right)\right)}_{feucht}\right] = -0, 27$$

$$+\underbrace{\frac{5}{16}\left(-\frac{1}{5}\cdot\log\left(\frac{1}{5}\right) - \frac{4}{5}\cdot\log\left(\frac{4}{5}\right)\right)}_{=-0,2}$$

Informationsgewinn des Merkmals Säure



Güte des Attributs Säure mit den 3 Werten basisch, neutral und alkalisch:

$$-\left(\underbrace{\frac{5}{16}\cdot \textit{I}(+,-)}_{\text{basisch}} + \underbrace{\frac{7}{16}\cdot \textit{I}(+,-)}_{\text{neutral}} + \underbrace{\frac{4}{16}\cdot \textit{I}(+,-))}_{\text{alkalisch}}\right)$$

$$= -0.3$$

basisch
$$-\frac{3}{5} \cdot \log \left(\frac{3}{5}\right) + -\frac{2}{5} \cdot \log \left(\frac{2}{5}\right)$$

neutral $-\frac{3}{7} \cdot \log \left(\frac{3}{7}\right) + -\frac{4}{7} \cdot \log \left(\frac{4}{7}\right)$
alkalisch $-\frac{2}{4} \cdot \log \left(\frac{2}{4}\right) + -\frac{2}{4} \cdot \log \left(\frac{2}{4}\right)$



Informationsgewinn des Merkmals Temperatur



- ▶ Die Temperatur ist ein numerischer Wert! Es gibt also unendlich viele Temperaturwerte
- ► Einfachste Lösung: Numerische Merkmalswerte werden nach Schwellwerten eingeteilt.
 - 9 verschiedene Werte in der Beispielmenge, also 8 Möglichkeiten zu trennen.
 - Wert mit der kleinsten Fehlerrate bei Vorhersage der Mehrheitsklasse liegt bei 7.
 - ▶ 5 Beispiele mit Temp ≤ 7, davon 3 in +, 11 Beispiele Temp > 7, davon 6 in -.
- ▶ Die Güte (also hier der Informationsgewinn) der Temperatur als Merkmal ist -0, 29.



Mit dem Informationsgehalt können wir Merkmale als Tests auswählen

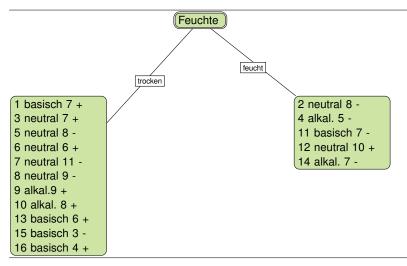


- Wir wählen das Merkmal X_j , dessen Werte am besten in (Unter-)mengen X_i aufteilen, die geordnet sind.
- Das Gütekriterium Informationsgewinn (mittels Entropie) bestimmt die Ordnung der Mengen.
- Im Beispiel hat Feuchte den höchsten Gütewert.



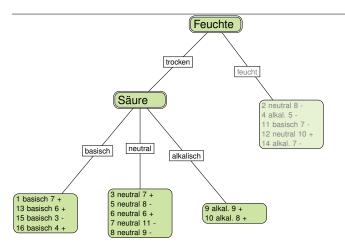
Alg.: Top Down Induction of Decision Trees (TDIDT, hier: ID3) am Beispiel





Algorithmus TDIDT (ID3) am Beispiel

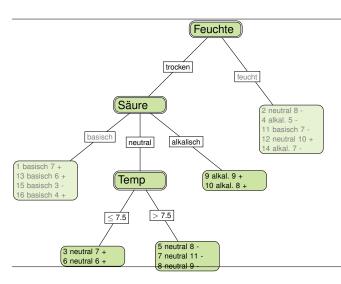






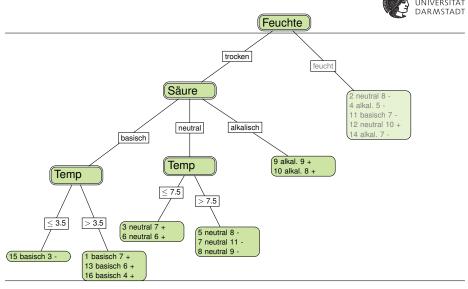
Algorithmus TDIDT (ID3) am Beispiel





Algorithmus TDIDT (ID3) am Beispiel





Algorithmus ID3 (TDIDT)



Rekursive Aufteilung der Beispielmenge nach Merkmalsauswahl:

- **1.** $TDIDT(\mathbf{X}, \{X_1, ... X_p\})$
- 2. X enthält nur Beispiele einer Klasse → fertig
- 3. X enthält Beispiele verschiedener Klassen:
 - ► *Güte*(*X*₁, .., *X*_p, **X**)
 - ▶ Wahl des besten Merkmals X₁ mit k Werten
 - Aufteilung von X in X₁, X₂, ..., X_k
 - für i = 1, ..., k: $TDIDT(\mathbf{X}_i, \{X_1, ..., X_p\} \setminus X_i)$
 - ▶ Resultat ist aktueller Knoten mit den Teilbäumen T₁, ..., T_k



Komplexität TDIDT ohne Pruning (Stutzen des Baumes)



Das Lernen von Enscheidungsbäumen ist effizient und skaliert gut.

Rekursive Aufteilung der Beispielmenge nach Merkmalsauswahl:

- Bei p (nicht-numerischen) Merkmalen und N Beispielen ist die Komplexität $\mathcal{O}(pN \log N)$
 - ▶ Die Tiefe des Baums sei in O(log N).
 - $\mathcal{O}(N \log N)$ alle Beispiele müssen "in die Tiefe verteilt" werden, also: $\mathcal{O}(N \log N)$ für ein Merkmal.
 - p mal bei p Merkmalen!



Stutzen (pruning) des Baumes



Aber Achtung! Es können große Bäume entstehen¹. Grosse Bäume können zwei Probleme haben:

- Obgleich sie sehr genau sind, erzeugen sie grosse Fehlerraten auf neuen Datensätzen, und
- das Verstehen und Interpretieren von Bäumen mit vielen Terminalknoten ist kompliziert. Grosse Bäume sind also komplexe Bäume.

Zwei Extreme: Nur ein Terminalknoten vs. grösster Baum, der möglich ist.

Die "richtigen Grösse" sollte zwischen den Extremen liegen.

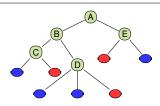


¹Die Komplexität eines Baumes wird gemessen durch die Anzahl seiner Terminalknoten.

Stutzen (pruning) des Baumes



- Die Ziele des Stutzens:
 - Überanpassung (Overfitting) des Baums an die Trainingsdaten verringern!
 - Verständlichkeit erhöhen!
- Operationen des Stutzens (Pruning):
 - a) Knoten an Stelle eines Teilbaums setzen
 - b) Einen Teilbaum eine Ebene h\u00f6her ziehen
- Schätzen, wie sich der wahre Fehler beim Stutzen entwickelt.



Knoten an Stelle eines Teilbaums setzen



Einen Teilbaum eine Ebene höher ziehen





Stutzen durch Fehlerschätzen



Die Suche nach dem Baum der "richtigen Grösse" beginnt mit dem Stutzen (pruning) der Äste des grössten Baumes von den Endknoten her ("bottom up").

- Wenn der Fehler eines Knotens kleiner ist als die Summe der Fehler seiner Unterknoten, k\u00f6nnen die Unterknoten weggestutzt werden. Dazu m\u00fcssen wir (bottom-up) die Fehler an allen Knoten sch\u00e4tzen.
- Obendrein sollten wir berücksichtigen, wie genau unsere Schätzung ist. Dazu bestimmen wir ein Konfidenzintervall: Wenn die obere Schranke der Konfidenz in den Fehler beim oberen Knoten kleiner ist als bei allen Unterknoten zusammen, werden die Unterknoten gestutzt.



Was ist ein Konfidenzintervall?



Konfidenzintervall

Vorgegeben eine tolerierte Irrtumswahrscheinlichkeit α , gibt das Konfidenzintervall

$$P(u \le X \le o) = 1 - \alpha$$

an, dass X mit der Wahrscheinlichkeit 1 $-\alpha$ im Intervall [u, o] liegt und mit der Wahrscheinlichkeit α nicht in [u, o] liegt.

Meist wird das Konfidenzintervall für den Erwartungswert gebildet. Beispiel α = 0, 1: Mit 90% iger Wahrscheinlichkeit liegt der Mittelwert \bar{X} im Intervall [u, o], nur 10% der Beobachtungen liefern einen Wert außerhalb des Intervalls.



z-Transformation in eine standardnormalverteilte Zufallsvariable



Die Zufallsvariable X wird bezüglich ihres Mittelwerts \bar{X} standardisiert unter der Annahme einer Normalverteilung:

$$Z = \frac{\bar{X} - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{N}}} \sim \mathcal{N}(0; 1)$$

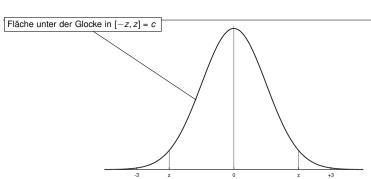
Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass der Mittelwert im Intervall liegt, ist nun:

$$P\left(-z\left(1-\frac{\alpha}{2}\right) \le \frac{\bar{X}-\mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{N}}} \le z\left(1-\frac{\alpha}{2}\right)\right) = 1-\alpha$$



Verteilung mit z-Werten





- ▶ $P(-z \le X \le z) = 1 \alpha$ Konfidenzniveau Wahrscheinlichkeit, dass X mit Mittelwert 0 im Intervall der Breite 2z liegt ist 1α .
- ▶ z kann nachgeschlagen werden (z.B. Bronstein), wobei wegen Symmetrie nur angegeben ist: $P(X \ge z)$



Rechnung für reellwertige Beobachtungen und Mittelwert



Wir wollen ein bestimmtes Konfidenzniveau erreichen, z.B. 0,8.

- P(X > -z) P(X < z) ist dann (1 0, 8)/2 = 0, 1.
- ▶ Der z-Wert, für den die Fläche der Glockenkurve zwischen -z und z genau $1-\alpha=0,8$ beträgt, ist das $(1-\frac{\alpha}{2})$ -Quantil der Standardnormalverteilung, hier: 1, 28 (nachschlagen).
- Das standardisierte Stichprobenmittel liegt mit der Wahrscheinlichkeit 0,8 zwischen -1,28 und +1,28.

0,8 =
$$P(-1,28 \le \frac{\bar{X} - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{N}}} \le 1,28)$$

= $P(-1,28 \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \le \bar{X} - \mu \le 1,28 \frac{\sigma}{\sqrt{N}})$
= $P(\bar{X} - 1,28 \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \le \mu \le \bar{X} - 1,28 \frac{\sigma}{\sqrt{N}})$

Das Intervall ist $[\bar{X} - 1, 28 \frac{\sigma}{\sqrt{N}}; \bar{X} + 1, 28 \frac{\sigma}{\sqrt{N}}].$



Fehler bzw. Erfolg schätzen



- ▶ Bei den Entscheidungsbäumen beobachten wir nur zwei Werte $Y \in \{+, -\}$.
- Wir haben eine Binomialverteilung mit wahrer Wahrscheinlichkeit p_+ für y = + (Erfolg).
- Beobachtung der Häufigkeit f₊ bei N Versuchen.

Varianz:

$$\sigma^2 = \frac{f_+(1-f_+)}{N}$$

Erwartungswert:

$$E(p_+) = f_+/N$$

In das allgemeine Konfidenzintervall $[\bar{X} - z(1 - \alpha/2)\frac{\sigma}{\sqrt{N}}; \bar{X} + 1, 28\frac{\sigma}{\sqrt{N}}]$ setzen wir diese Varianz ein und erhalten:

$$\left[f_{+}-z(1-\alpha/2)\frac{\sqrt{f_{+}(1-f_{+})}}{N};f_{+}z(1-\alpha/2)\frac{\sqrt{f_{+}(1-f_{+})}}{N}\right]$$



Konfidenz bei Binomialverteilung



Allgemein berechnet man die obere und untere Schranke der Konfidenz bei einer Binomialverteilung für ein Bernoulli-Experiment:

$$p_{+} = \frac{f_{+} + \frac{z^{2}}{2N} \pm z \sqrt{\frac{f_{+}}{N} - \frac{f^{2}}{N} + \frac{z^{2}}{4N^{2}}}}{1 + \frac{z^{2}}{N}}$$

Hierzu muss lediglich die Häufigkeit f_+ gezählt werden, N, z bekannt sein. Diese Abschätzung für den Erfolg können wir symmetrisch für den Fehler (p_-) durchführen.

Anwendung zum Stutzen



Für jeden Knoten nehmen wir die obere Schranke (pessimistisch):

$$p_{-} = \frac{f_{-} + \frac{z^{2}}{2N} + Z\sqrt{\frac{f_{-}}{N} - \frac{f_{-}^{2}}{N} + \frac{z^{2}}{4N^{2}}}}{1 + \frac{z^{2}}{N}}$$

Wenn der Schätzfehler eines Knotens kleiner ist als die Kombination der Schätzfehler seiner Unterknoten, werden die Unterknoten weggestutzt. Die Kombination wird gewichtet mit der Anzahl der subsumierten Beispiele.



Andere Gütemaße: Gini-Index



Wir wollen messen, wie "rein" die Klasse ist, die ein Knoten darstellt. Neben dem Informationsgewinn gibt es viele andere Maße.

Gini-Index

Das Gini-Index eines Knoten t ist definiert als

$$I(t) := 1 - S \text{ mit } S = \sum_{j=1}^{k} \rho^2(j|t)$$

wobei S die Reinheitsfunktion ist.

- ► CART, ein anderer Baumlerner, nimmt im Wesentlichen den Gini-Index.
- ▶ Der Gini-Index nimmt sein Maximum an, wenn jede Klasse in dem Knoten mit gleicher Wahrscheinlichkeit angenommen wird.



Andere Gütemaße: Gini-Index



Dazu passen wir dann unser Gütemaß an:

Allgemeines Gütemaß

Sein s eine Teilung im Knoten t. Das Gütemaß dieser Teiling mißt die Verringerung der "Unreinheit":

$$\Delta I(s, t) = I(t) - p_+ \cdot I(t_+) - p_- \cdot I(t_-)$$

wobei $I(t_+)$ das Gütemaß des linken und $I(t_-)$ das des rechten Teilbaums ist.

- CART, ein anderer Baumlerner, nimmt im Wesentlichen den Gini-Index.
- ▶ Der Gini-Index nimmt sein Maximum an, wenn jede Klasse in dem Knoten mit gleicher Wahrscheinlichkeit angenommen wird.



Andere Gütemaße: Regression



Unser Ziel sind jetzt niedrige Fehlerquadrate (SSE). Sei *t* ein Knoten.

$$SSE(t) = \sum_{(\mathbf{x}, y) \in t} (y - \bar{y})^2 \text{ mit } \bar{y} = \frac{1}{|t|} \sum_{(\mathbf{x}, y) \in t} y$$

SSE-Reduktion für [x < z] Tests

Seien t_+ und _ die Auteilung durch [$x \le z$]. Analog zum allgemeinen Gütemaß, berechnen wir

$$\Delta SSE(s, t) = SSE(t) - SSE(t_{+}) - SSE(t_{-})$$

► Führe keinen neuen Split ein, wenn SSE nicht um Mindestbetrag reduziert wird. Erzeuge dann Terminalknoten mit Mittelwert aus den aktuellen Beispielen in dem Knoten.



Evaluierung von Baumlernern



Doch zurück zur Klassifiaktion. Die Konfusionsmatrix lautet:

tatsächlich	Vorhergesagt	Vorhergesagt	
	+	_	
+	True positives	False negatives	Recall:
	TP	FN	TP/(TP + FN)
_	False positives	True negatives	
	FP	TN	
	Precision:		
	TP/(TP + FP)		

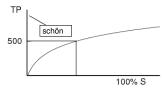
Accuracy: $P(\hat{f}(x) = y)$ geschätzt als (TP + TN)/total



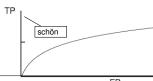
Balance von FP und FN



- ► F-measure: $\frac{\beta \cdot recall \cdot precision}{recall + precision} = \frac{\beta TP}{\beta TP + FP + FN}$
- Verlaufsformen:
 - Lift: TP für verschiedene Stichprobengrößen S



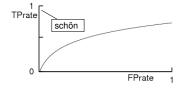
 Receiver Operating Characteristic (ROC): für verschiedene TP jeweils die FP anzeigen



ROC genauer



- Statt der absoluten Anzahl TP nimm die <u>Raten</u> von true oder false positives ergibt eine glatte Kurve.
 - Für jeden Prozentsatz von falschen Positiven nimm eine Hypothese h, deren Extension diese Anzahl von FP hat und zähle die TP.
 - ▶ $TP_{rate} := TP/P \sim recall$ bezogen auf eine Untermenge
 - ► FP_{rate} := FP/N ~ FP/FP + TN bezogen auf Untermenge





Kosten von Fehlern



- Nicht immer sind FP so schlimm wie FN
 - ▶ medizinische Anwendungen: lieber ein Alarm zu viel als einen zu wenig!
- Gewichtung der Beispiele:
 - Wenn FN 3x so schlimm ist wie FP, dann gewichte negative Beispiele 3x h\u00f6her als positive.
 - Wenn FP 10x so schlimm ist wie FN, dann gewichte positive Beispiele 10x h\u00f6her als negative.
- Lerne den Klassifikator mit den gewichteten Beispielen wie üblich. So kann jeder Lerner Kosten berücksichtigen!





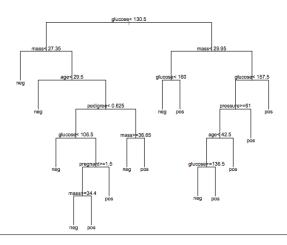
Zum Lernen: Funktion rpart() aus Paket rpart.

```
> library("rpart")
```

- > set.seed(20060911)
- > pid_rpart <- rpart(diabetes ~., data = pid_learn)</pre>
- > plot(pid_rpart, uniform = TRUE)
- > text(pid_rpart)



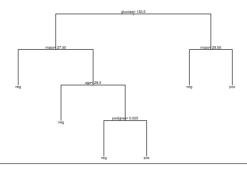








- > pid_rpart <- prune(pid_rpart, cp = 0.018)</pre>
- > plot(pid_rpart, uniform = TRUE)
- > text(pid_rpart)





Zum Prunen:

> pid_rpart\$cptable



Zum Vorhersagen:

Was haben sie kennengelernt?



- Sie kennen ID3 und CART als Beispiel für TDIDT.
- ► Für das Lernen verwendet ID3 das Gütemaß des Informationsgewinns auf Basis der Entropie. CART verwendet den Gini-Index
- Man kann etwas über die Performanz aussagen:
 - Man kann abschätzen, wie nah das Lernergebnis der unbekannten Wahrheit kommt → Konfidenz
 - Man kann abschätzen, wie groß der Fehler sein wird und dies zum Stutzen des gelernten Baums nutzen.
- Lernergebnisse werden also evaluiert:
 - Einzelwerte: accuracy, precision, recall, F-measure
 - Verläufe: ROC

Diese Evaluationsmethoden gelten nicht nur für Entscheidungsbäume!

Sie kennen das R package rpart

