



Bachelor Thesis

Density-Based Uncertainty Estimation for Calibrated Systems

Author:

Aaron Agyeman Duah Frey

Matrikelnr: 2572471

August 20, 2024

Supervisor:

Prof. Dr. Dominik Heider

Institut für Informatik
Machine Learning for Medical Data



Declaration of Independence

I, Aaron Agyeman Duah Frey, hereby declare that this thesis is my own work and that it has not been submitted previously for any academic award. All sources are acknowledged as references.

Abstract

In modern machine learning (ML) applications, accurately quantifying uncertainty in predictions is crucial for informed decision-making and reliable model deployment. This thesis focuses on the development and evaluation of a method for density-based uncertainty estimation in ML models. The approach leverages density maps around data points to assess prediction confidence, influenced by the distribution of training data. Initially, relevant datasets from the UCI ML Repository and Kaggle were selected, and various ML algorithms, including logistic regression and random forest, were employed to build predictive models. The developed method integrates density estimation techniques, such as Gaussian mixture models or kernel density estimation, implemented in Python, to derive uncertainty metrics. Evaluation metrics were used to compare the performance of the proposed method against traditional uncertainty measures. Results demonstrate the method's ability to provide calibrated predictions and improve decision-making under uncertainty. This study contributes to advancing methodologies for enhancing model reliability and supporting robust ML deployments in practical applications.

Zusammenfassung

In modernen Anwendungen des maschinellen Lernens (ML) ist die genaue Quantifizierung der Unsicherheit in Vorhersagen entscheidend für fundierte Entscheidungen und eine zuverlässige Modellbereitstellung. Diese Arbeit konzentriert sich auf die Entwicklung und Bewertung einer Methode zur dichte-basierten Unsicherheitsschätzung in ML-Modellen. Der Ansatz nutzt Dichtekarten um Datenpunkte herum, um das Vertrauen in Vorhersagen zu bewerten, beeinflusst durch die Verteilung der Trainingsdaten. Zunächst wurden relevante Datensätze aus dem UCI ML Repository und von Kaggle ausgewählt, und verschiedene ML-Algorithmen, darunter logistische Regression und Random Forest, wurden eingesetzt, um prädiktive Modelle zu erstellen. Die entwickelte Methode integriert Dichteschätzungstechniken wie Gaussian Mixture Models oder Kernel Density Estimation, die in Python implementiert wurden, um Unsicherheitsmetriken abzuleiten. Bewertungsmetriken wurden verwendet, um die Leistung der vorgeschlagenen Methode mit traditionellen Unsicherheitsmaßen zu vergleichen. Die Ergebnisse zeigen, dass die Methode kalibrierte Vorhersagen liefert und die Entscheidungsfindung unter Unsicherheit verbessern kann. Diese Studie trägt zur Weiterentwicklung von Methoden zur Verbesserung der Modellzuverlässigkeit und zur Unterstützung robuster ML-Bereitstellungen in praktischen Anwendungen bei.

Contents

Declaration of Independence	1
Zusammenfassung	1
1 Introduction	7
2 Background	8
3 Material and Methods	9
3.1 Material	9
3.2 Methods	9
4 Results	10
5 Discussion	11
6 Future Perspectives	12
7 Conclusion	13
8 Appendix	14

List of Figures

List of Tables

Listings

Chapter 1

Introduction

Chapter 2

Background

Chapter 3

Material and Methods

3.1 Material

3.2 Methods

Chapter 4

Results

Chapter 5

Discussion

Chapter 6

Future Perspectives

Chapter 7

Conclusion

Chapter 8

Appendix

Bibliography