Klassifikation III

Praktikum
Data Warehousing und
Data Mining

Künstliche Neuronale Netze - Veranschaulichung

Weitere Klassifikationstechniken

Regelbasierte Klassifikatoren

- Klassifikation durch Regelsatz
  - Beispiel:
    1. petalwidth <= 0.6: Iris-setosa
    2. petalwidth <= 1.7 AND petallength <= 4.9: Iris-versicolor
    3. Sonst: Iris-virginica
- Übliches Vorgehen:
  - Entscheidungsbaum lernen
  - Deduktion der wichtigsten Regeln aus Baum
  - Nicht alle Tupel klassifiziert:
    - Default-Regel klassifiziert einige Tupel
    - Im Beispiel: Default-Regel: Iris-virginica
- Regelsätze oft einfacher als Entscheidungsbäume
  $\Rightarrow$ Generalisierung

Assoziationsregeln zur Klassifikation - Beispiel

- Gegeben:
  Folgende Assoziationsregeln
  - Saft -> Cola; conf: 80%
  - Cola -> Saft; conf: 100%
  - Cola -> Bier; conf: 75%
  - Bier -> Cola; conf: 100%

- Vorhersageattribut:
  - Kauft Kunde Cola?

- Beispieltupel:
  - Kunde kauft Bier
    $\Rightarrow$ Kunde kauft Cola (4. Regel)

Assoziationsregeln zur Klassifikation -Vorgehen

- Eine Regel passt:
  $\Rightarrow$ Klassifikation eindeutig (mit Konfidenz der Regel)
- Keine Regel passt:
  $\Rightarrow$ Mehrheits-Klasse bzw. unklassifiziert
- Mehrere Regeln passen:
  - Berücksichtigung der Regel mit höchster Konfidenz
    - Regel entscheidet
  - Berücksichtigung der *k* Regeln mit höchster Konfidenz (oder auch aller Regeln)
    - Häufigste auftretende Klasse
    - Klasse mit höchster durchschnittlicher Konfidenz der Regeln
  - …
- Hinweis:
  Verfahren eignet sich auch für sequentielle Regeln.

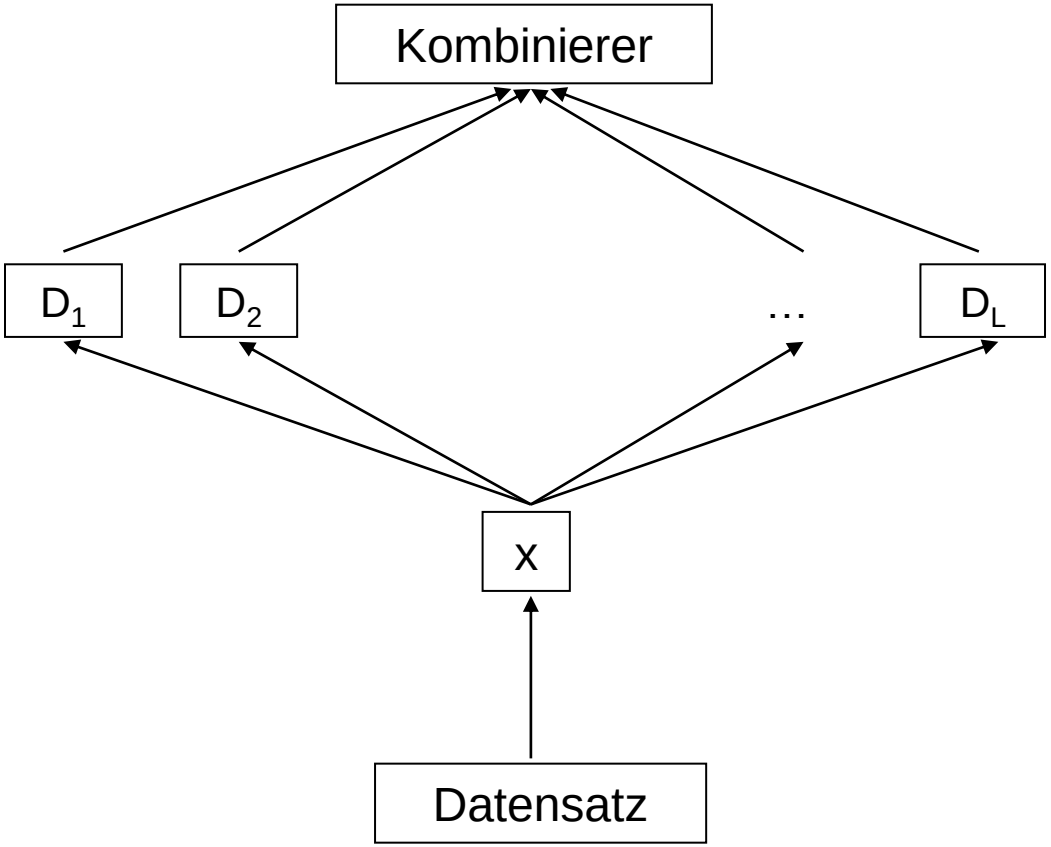
Kombinierte Klassifikatoren

Combined Classifiers / Multiple Classifier System / Classifier Fusion / Ensemble Techniques / Committee of Machines

Kombinierte Klassifikatoren - Motivation

- Im „banalen Leben“
  - Bei wichtiger Entscheidung
    - Konsultation mehrer Experten
    - Beispiel: Ärzte vor kritischer OP, Freunde vor Pferdewette
  - Entscheidungsfindung
    - Mehrheit der Experten oder
    - Vertrauenswürdigste Experten
- Im Data Mining
  - Bei wichtiger Entscheidung
    - Mehrere Klassifikatoren
  - Entscheidungsfindung
    - Kombination der Klassifikatoren oder
    - Classifier Selection
- Ziel: Erhöhung der Accuracy / anderer Maße

Kombinierte Klassifikatoren - Ansatzpunkte



Kombinations-Ebene:
Einsatz verschiedener Kombinationstechniken

Klassifikator-Ebene:
Einsatz verschiedener Klassifikatoren

Feature-Ebene:
Einsatz verschiedener Feature-Mengen

Daten-Ebene:
Einsatz verschiedener Teilmengen

Daten-Ebene: Bagging & Boosting

- Ursprünglicher Datensatz *D*, $d = |D|$

- Bagging
  - Zufällige Auswahl von *k* Lerndatensätzen
    - Vorgehen: Ziehen mit Zurücklegen von *d* Tupeln
  - Lernen je eines Klassifikators pro Lerndatensatz
  - Resultierende *k* Klassifikatoren oft erstaunlich unterschiedlich

- Boosting
  - Ähnlich Bagging
  - Ausnahme (*i*+*1*)ter Klassifikator:
    Fokus auf falsch klassifizierte Tupel in (*i*)tem Klassifikator

- Optionaler Schritt
  - Evaluation aller *k* Klassifikatoren
  - Ergebnisse gewichtet (z.B. mit Accuracy)

Feature-Ebene: Feature Selection

- Bekannt zur Dimensionsredukltion
- Bei Kombinierten Klassifikatoren:
  - Verschiedene Klassifikatoren durch verschiedene Attribut-Mengen von verschiedenen Feature-Selection-Strategien
- Es ist nicht nur erfolgsversprechend, nur besonders „gute“ Attribute auszuwählen.
  - Verschiedene zufällige Teilmengen
  - Getrennt nach kategorischen/numerischen Attributen

Klassifikator-Ebene

- Alternativen:
  - Einsatz eines Klassifikators mit verschiedenen Parametern, z.B. maximale Baumhöhe, …
  - Verwendung verschiedener Klassifikatoren, z.B. Entscheidungsbaum, Neuronales Netzwerk, Naive Bayes, …
  - Ein Klassifikator für jede Klasse
    (bei mehr als 2 Klassen)

- Ziel:
  - Klassifikatoren mit möglichst unterschiedlichen Ergebnissen

Kombinations-Ebene: Strategien

- Problem:
  - Unterschiedliche Vorgehensweisen zur Wahl der Vorhersageklasse

- Alternativen
  - Majority Vote
    - Vorhersageklasse: Ergebnis der meisten Klassifikatoren
  - Weighted Majority Vote
    - Gewichtung mit Konfidenzwerten
      (z.B. von Entscheidungsbäumen, Nearest Neighbour)
  - Stacking
    - Ein weiterer Klassifikator zur Vorhersage der endgültigen Klasse
  - Scoring
    - Bei binären Entscheidungsproblemen, wenn Konfidenzen bekannt
    - score = confidence if class=pos
      score = 1-confidence if class=neg
      Gesamt-Score: Mittel der Scores aller Klassifikatoren
    - Setzen eines Schwellwertes zur Klassifikation
  - Weitere Strategien in der Literatur…

Statistische Techniken zur Regression (Klassifikation durch Schwellwertsetzung)

Regressionsprobleme

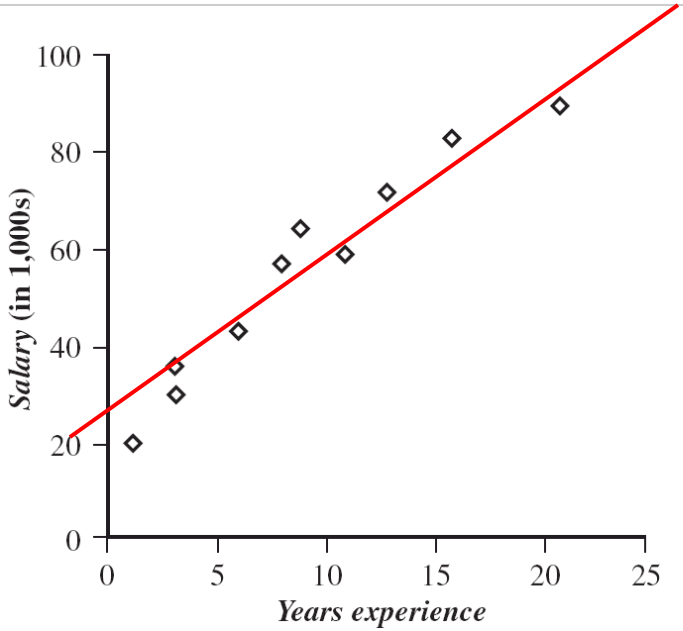
- Idee
  - Bestimmung eines unbekannten *numerischen* Attributwertes
    (oridinale und *kategorische* (zumindest *binäre*) Vorhersagen durch Schwellwertsetzung)
  - Unter Benutzung beliebiger bekannter Attributwerte
- Beispiele:
  - Vorhersage von Kundenverhalten wie ‚Zeit bis Kündigung'
  - Vorhersage von Kosten/Aufwand/Bedarf/Verkaufszahlen/…
  - Berechnung von diversen Scores/Wahrscheinlichkeiten
  - …
- Klassifikation: Durch Schwellwertsetzung

Einfache Lineare Regression

- Vorhersage der Zielvariable y durch eine Prediktorvariable x
- Gegeben: Lerndatensatz $D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_n, y_n)\}$, $n = |D|$
- Vermutung eines linearen Zusammenhangs
- Gesucht: Gerade

  $y = w_0 + w_1 x$

  - Bestimmung von w_0, w_1 (Regressionskoeffizienten)



$w_0 = 23{,}6$
$w_1 = 3{,}5$

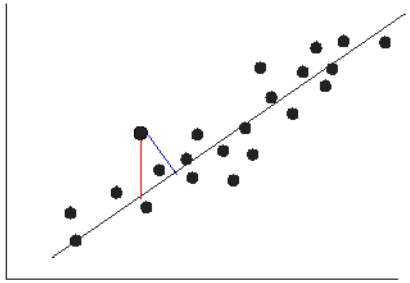
$y = 23{,}6 + 3{,}5\, x$

Lerndatensatz *D*:

x years experience	*y* salary (in $1000s)
3	30
8	57
9	64
13	72
3	36
6	43
11	59
21	90
1	20
16	83

Berechnung der Regressionskoeffizienten

- Zunächst:
  - Bestimmung des Fehlers als Summe der quadratischen Abweichungen
  - $E = \Sigma_i (y_i - (w_0 + w_1 x_i))^2$



y-Abstand euklidischer Abstand

- Aus der notwendigen Bedingung für ein Minimum der Fehlfunktion lassen sich unter Verwendung von partiellen Ableitungen w_0 und w_1 berechnen:

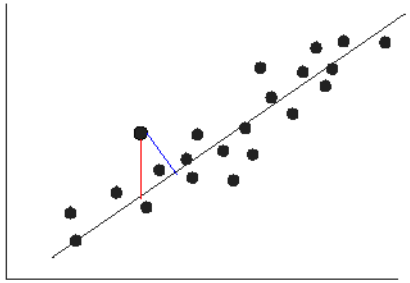
$$w_1 = \frac{\sum_{i=1}^{|D|}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{|D|}(x_i - \bar{x})^2} \qquad w_0 = \bar{y} - w_1 \bar{x}$$

$\bar{x}, \bar{y}$: Durchschnitt aller $x_1, x_2, \ldots, x_n$ bzw. aller $y_1, y_2, \ldots, y_n$

(Rechenbeispiel: S. Data-Mining-Buch von J. Han, M. Kamber)

Lineare Regression – Fehlermaße

- Üblich ist:
  - Mittlerer quadratischer Abstand in *y*-Richtung
- Andere sinnvolle Fehlermaße:
  - Mittlerer absoluter Abstand in *y*-Richtung
  - Mittlerer euklidischer Abstand
  - Maximaler absoluter/quadratischer Abstand in *y*-Richtung
  - Maximaler euklidischer Abstand
- Diese Maße können jedoch nicht verwendet werden:
  - Betragsfunktion (absoluter Abstand) und Maximum sind nicht überall differenzierbar.
  - Die Ableitung beim euklidischen Abstand führt zu einem nichtlinearen Gleichungssystem; ist nicht analytisch lösbar.



Multivariate Lineare Regression

- Typischerweise steht nicht nur eine Prediktorvariable x zur Verfügung, sondern mehrere (p) :

  Vektor $\boldsymbol{X}_i := x_{i,1}, x_{i,2}, \ldots, x_{i,p}$

- Lerndatensatz: $D = \{(\boldsymbol{X}_1, y_1), (\boldsymbol{X}_2, y_2), \ldots, (\boldsymbol{X}_n, y_n)\}$
- Hyper-Ebene: $y = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_p x_p$

- Die Methode zur Minimierung der Fehler-Quadrate kann übertragen werden:

  Es entsteht ein lineares Gleichungssystem.
  - Lösbar mit linearer Algebra (Matrizen).
  - Lösung mit numerischen Methoden oft effizienter.

Lineare Regression – Bewertung

- Eigenschaften
  - Aufwand zum Lösen der Gleichungen: $O(p^3)$
  - Koeffizienten sind eventuell interpretierbar.
- Vorteile
  - Relativ simples Modell:
    p-dimensionale Hyperebene bei p Prediktorvariablen
  - Dient als Baseline zum Vergleich von Regressionstechniken.
- Nachteile
  - Gleichungen sind eventuell nicht lösbar, wenn Prediktor-variablen (nahezu) linear abhängig voneinander sind.
  - Alle Prediktorvariablen werden betrachtet, auch irrelevante.
  - Anfällig für Outlier. (Ignorieren von Datenpunkten gefährlich!)
  - Nicht alle Probleme sind linear…

Nichtlineare Regression

- Einige nichtlineare Probleme können als polynomielle Funktion modelliert werden. -> KNIME
- Polynomielle (u.a.) Funktionen können in lineare Regressionsmodelle transformiert werden, z.B.:

$$y = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3$$

wird gemappt auf:

$$y = w_0 + w_1 x + w_2 x_2 + w_3 x_3$$

- Die Methode zur Minimierung der Fehler-Quadrate mit Ableitungstechniken kann prinzipiell auf beliebige Funktionen übertragen werden.
  - Eventuell sehr hoher Rechenaufwand, aber oft nicht lösbar.
  - Hintergrundwissen kann helfen, einen Term zu finden.

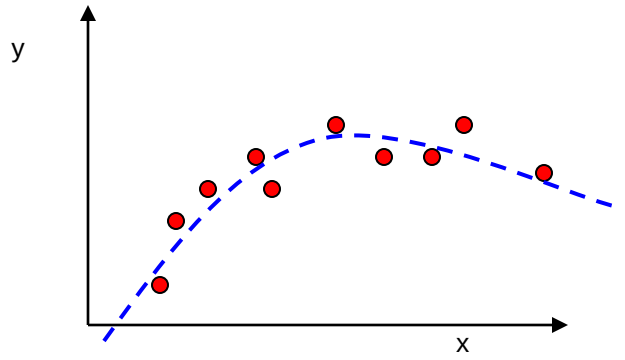
Lokale Lineare Regression

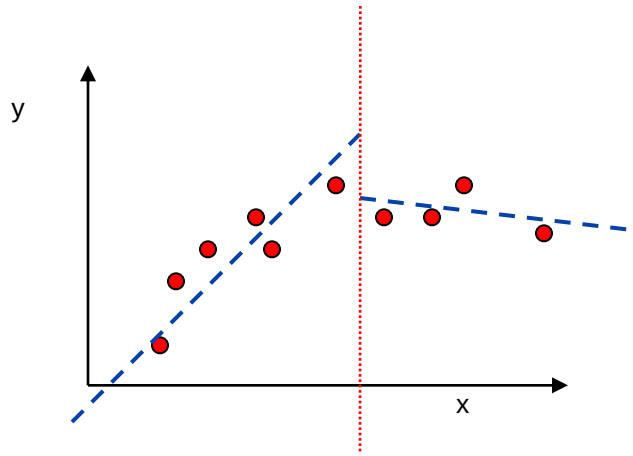
- Idee:

  Mehrere einfache Regressionsfunktionen (hier Geraden) für verschiedene Wertebereiche von *x*
- Problem:

  Brüche an Wertebereichsgrenzen
- Eine Lösung:

  Splines „glätten“ die Übergänge
- Gut geeignet bei wenigen Prädiktorvariablen.
- Bestimmte Regressionsbäuzme greiften die Idee „lokale Regression“ auf…

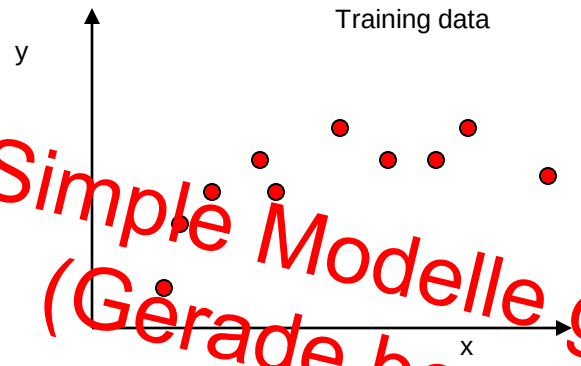


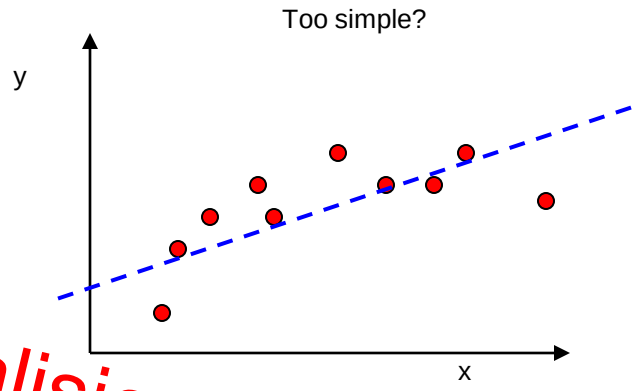


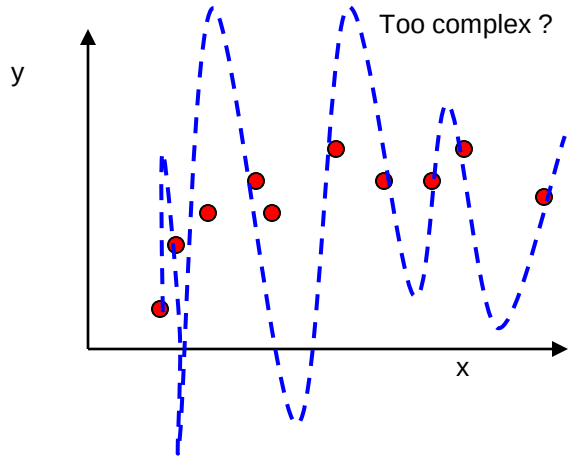
Weitere nichtlineare Verfahren

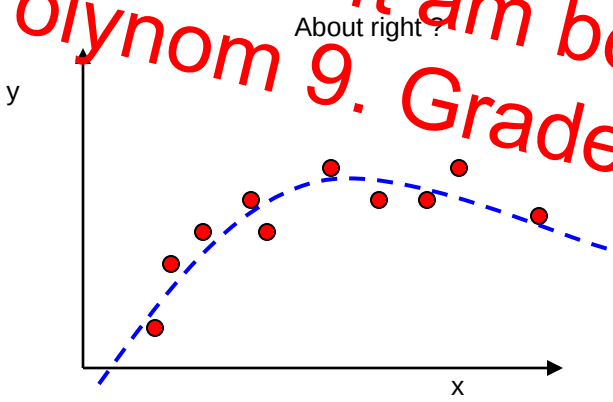
- Oft ist eine numerische Parameter-Bestimmung aus partiellen Ableitungen nicht möglich:
  - Parameter gehen nichtlinear in die Regressionsfunktion ein.
  - Ein alternatives Fehlermaß wird verwendet.
- Lösungsansatz: „Systematisches Trial and Error“
  1. Aufstellen einer (beliebigen) Regressionsfunktion.
  2. Suche nach geeigneten Parametern:
     - Random Search
     - Hillclimbing
     - Varianten um lokale Minima zu verhindern
     - Genetische Algorithmen
     - …

Generalisierung vs. Overfitting









Simple Modelle generalisieren oft am besten!
(Gerade besser als Polynom 9. Grades.)

Quellen

- J. Han und M. Kamber: „Data Mining: Concepts and Techniques“, Morgan Kaufmann, 2006.
- I.H. Witten und E. Frank: "Data Mining - Practical Machine Learning Tools and Techniques", Morgan Kaufmann, 2005.
- Hand, H. Mannila und P. Smyth: "Principles of Data Mining", MIT Press, 2001.
- T. M. Mitchell: „Machine Learning“, Mc Graw Hill, 1997.
- L. I. Kuncheva: „Combining Pattern Classifiers“, Wiley-Interscience, 2004.
- F. Klawonn: Folien zur Vorlesung „Data Mining“, 2006.
- C. Borgelt: Folien zur Vorlesung „Intelligent Data Analysis“, 2004. Vorlesungsskript verfügbar (120 Seiten): http://fuzzy.cs.uni-magdeburg.de/studium/ida/txt/idascript.pdf
- Pierre Geurts: Folien zur Vorlesung „Stochastic methods“.
- SPSS: Clementine 12.0 Algorithms Guide. 2007.