Data Mining und Maschinelles Lernen

Baumbasierte Verfahren

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

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

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

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

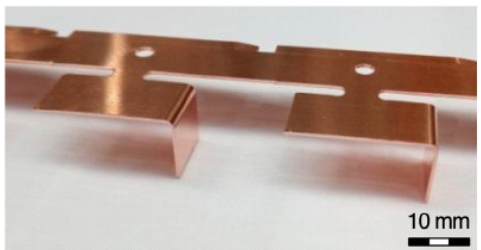
TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

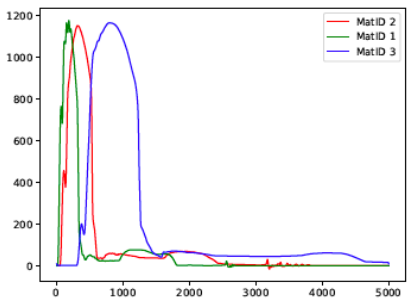
- Globale Modelle: Lineare Modelle passen die Parameter eines Modells für den gesamten Merkmalsraum der Beispiele an, der evtl. durch eine implizite Transformation (Kernfunktionen, dazu später mehr) oder explizite Transformationen (Vorverarbeitung) in einen Merkmalsraum überführt werden.
- Lokale Modelle: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

Entscheidungsbäume

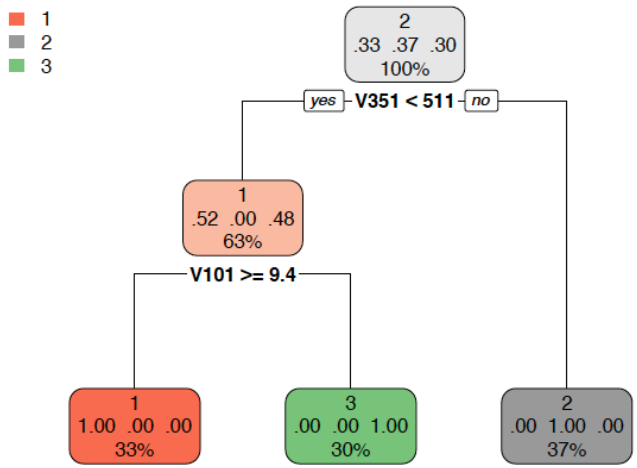
TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Ein Beispiel aus der Produktion





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



Vorhersage des Materials

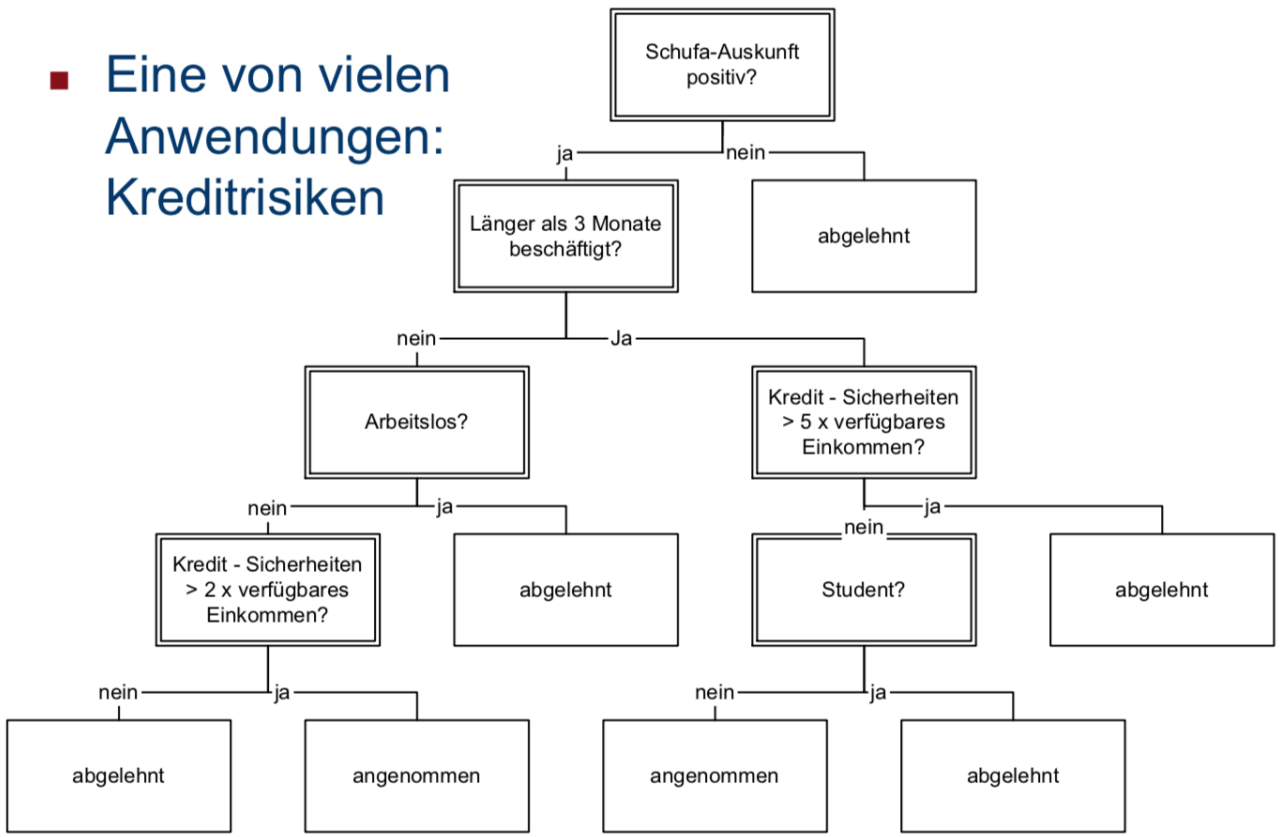
Danke an das Institut für Produktionstechnik und Umformmaschinen der TU Darmstadt für die Daten!

Entscheidungsbäume

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Ein weiteres Beispiel aus der Kreditwirtschaft

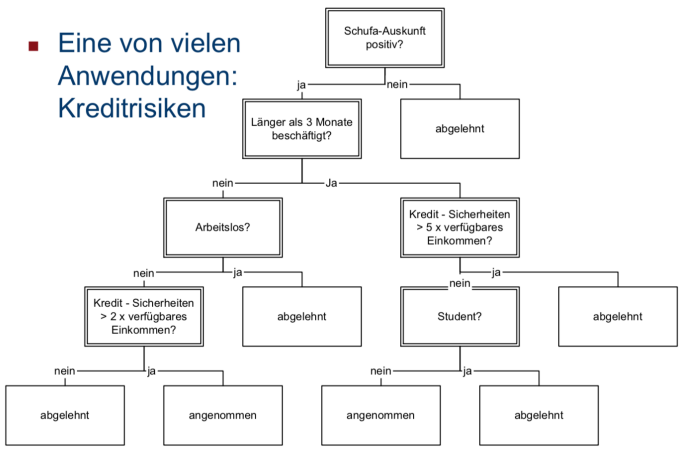
- Eine von vielen Anwendungen: Kreditrisiken



Warum Entscheidungsbäume?

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Eine von vielen Anwendungen: Kreditrisiken



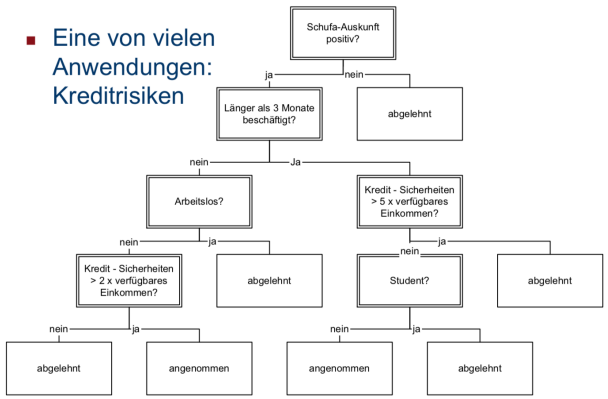
- Bäume sind (recht) einfach zu interpretieren
- Sie liefern direkt Vorhersagen und Begründungen: “Abgelehnt, weil weniger als 3 Monate beschäftigt und Kredit-Sicherheiten <2x verfügbares Einkommen”.

- 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?

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Eine von vielen Anwendungen: Kreditrisiken



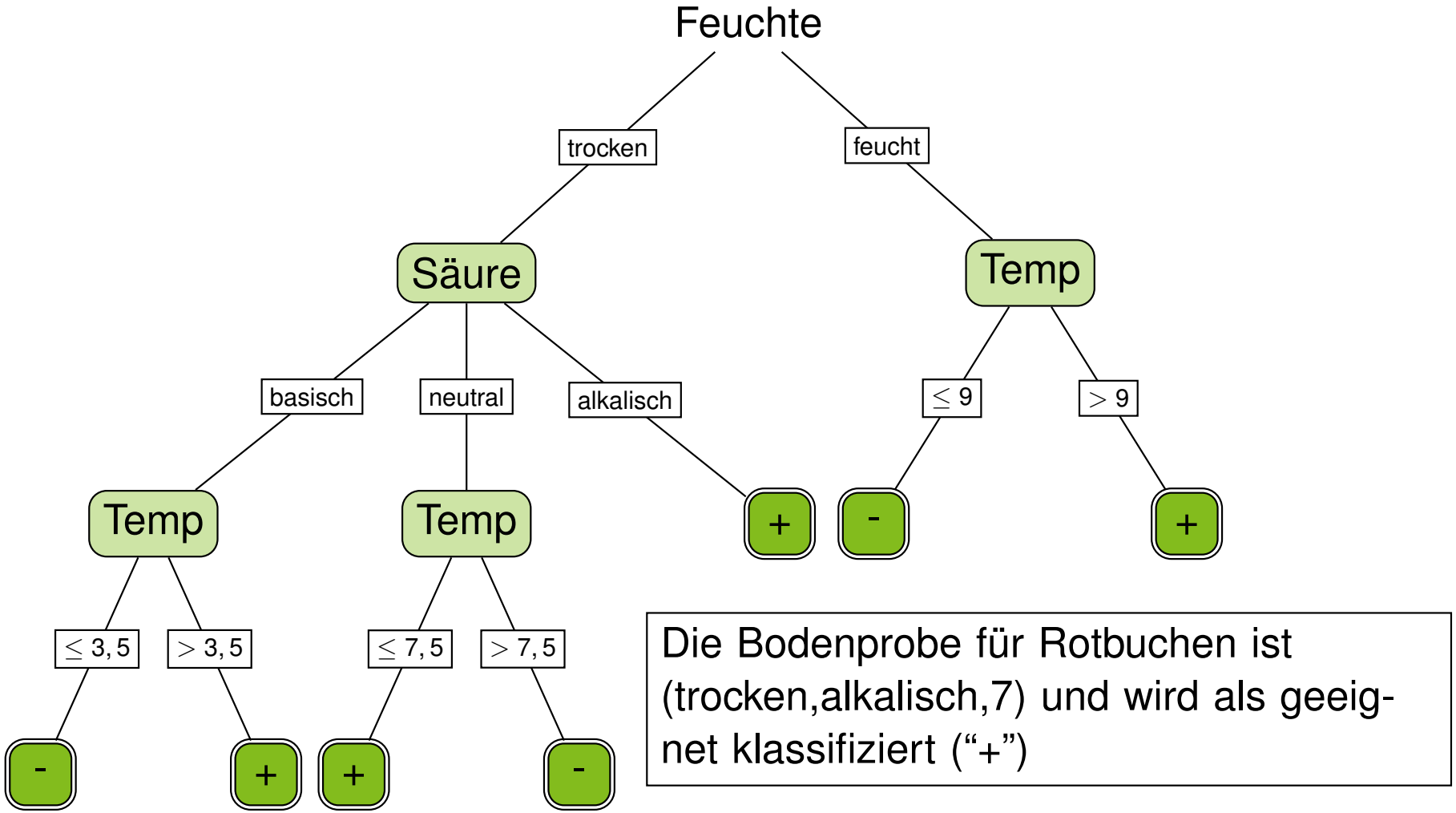
Entscheidungsbaum

(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



Die Bodenprobe für Rotbuchen ist (trocken,alkalisch,7) und wird als geeignet klassifiziert (“+”)

Lernen aus Beispielen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

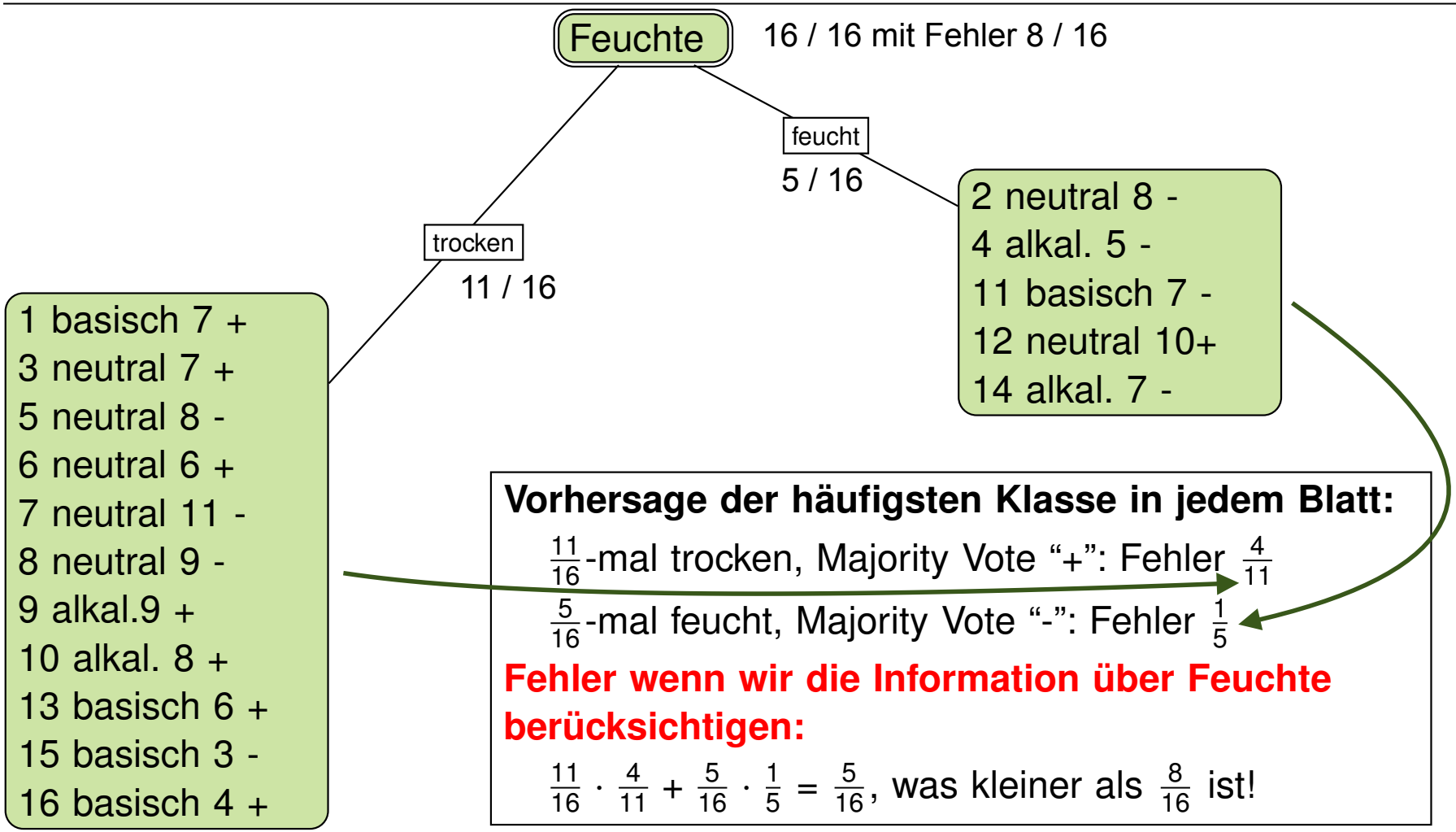
+				-			
ID	Feuchte	Säure	Temp	ID	Feuchte	Säure	Temp
1	trocken	basisch	7	2	feucht	neutral	8
3	trocken	neutral	7	4	feucht	alkal.	5
6	trocken	neutral	6	5	trocken	neutral	8
9	trocken	alkal.	9	7	trocken	neutral	11
10	trocken	alkal.	8	8	trocken	neutral	9
12	feucht	neutral	10	11	feucht	basisch	7
13	trocken	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, hier mit Tie-Break für “-”). Der Fehler ist dann 8/16.

Aufteilen nach Bodenfeuchte

Ein einzelner Test verbessert die Vorhersage!

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT



Vorhersage der häufigsten Klasse in jedem Blatt:

$\frac{11}{16}$-mal trocken, Majority Vote "+": Fehler $\frac{4}{11}$

$\frac{5}{16}$-mal feucht, Majority Vote "-": Fehler $\frac{1}{5}$

Fehler wenn wir die Information über Feuchte berücksichtigen:

$\frac{11}{16} \cdot \frac{4}{11} + \frac{5}{16} \cdot \frac{1}{5} = \frac{5}{16}$, was kleiner als $\frac{8}{16}$ ist!

Wir haben bedingte Wahrscheinlichkeiten benutzt

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

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 mit Gewichtung bezüglich der Oberklasse. Beispiel: $Y = \{+, -\}$, $X_j = \{feucht, trocken\}$

$$P(+|feucht) = 1/5,\ P(-|feucht) = 4/5 \text{ gewichtet mit } 5/16$$

$$P(+|trocken) = 7/11,\ P(-|trocken) = 4/11 \text{ gewichtet mit } 11/16$$

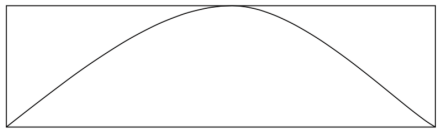
- Wahl des Merkmals mit dem höchsten Wert (kleinsten Fehler)

Eine erste Idee: Betrachte den Informationsgewinn eines Merkmals

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

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 $\mathbf{X}$ in k Untermengen $\mathbf{X}_1, ..., \mathbf{X}_k$ auf. Für jede dieser Mengen berechnen wir die Entropie.

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

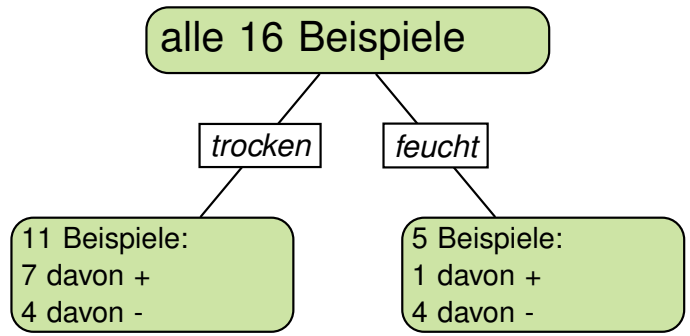
Informationsgewinn

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

Informationsgewinn des Merkmals Feuchte

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

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



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

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

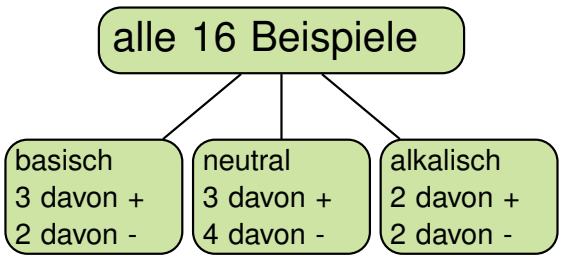
Informationsgewinn
= 1 Bit − 0.876 Bit
= 0.124 Bit

= 11/16 * 0.945 + 5/16 * 0.722
= 0.650 + 0.226 = 0.876

Informationsgewinn des Merkmals Säure

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

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



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

$$= 0.303 + 0.432 + 0.25 = 0.984$$

$$\text{basisch} \quad -\frac{3}{5} \cdot \log\left(\frac{3}{5}\right) + -\frac{2}{5} \cdot \log\left(\frac{2}{5}\right) = 0.971$$

$$\text{neutral} \quad -\frac{3}{7} \cdot \log\left(\frac{3}{7}\right) + -\frac{4}{7} \cdot \log\left(\frac{4}{7}\right) = 0.985$$

$$\text{alkalisch} \quad -\frac{2}{4} \cdot \log\left(\frac{2}{4}\right) + -\frac{2}{4} \cdot \log\left(\frac{2}{4}\right) = 1$$

Informationsgewinn
= 1 Bit − 0.984 Bit
= 0.016 Bit

Informationsgewinn des Merkmals Temperatur

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- 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 $\leq$ 7, davon 3 in +,
    11 Beispiele Temp $>$ 7, davon 6 in -.
- **Informationsgewinn von Temperatur**
  = 1 Bit - (5/16 * 0.971+ 11/16 * 0.994) Bit = 1 Bit- (0.303 + 0.683) Bit
  = 1 Bit - 0.986 Bit = 0,014 Bit

Mit dem Informationsgehalt können wir Merkmale als Tests auswählen

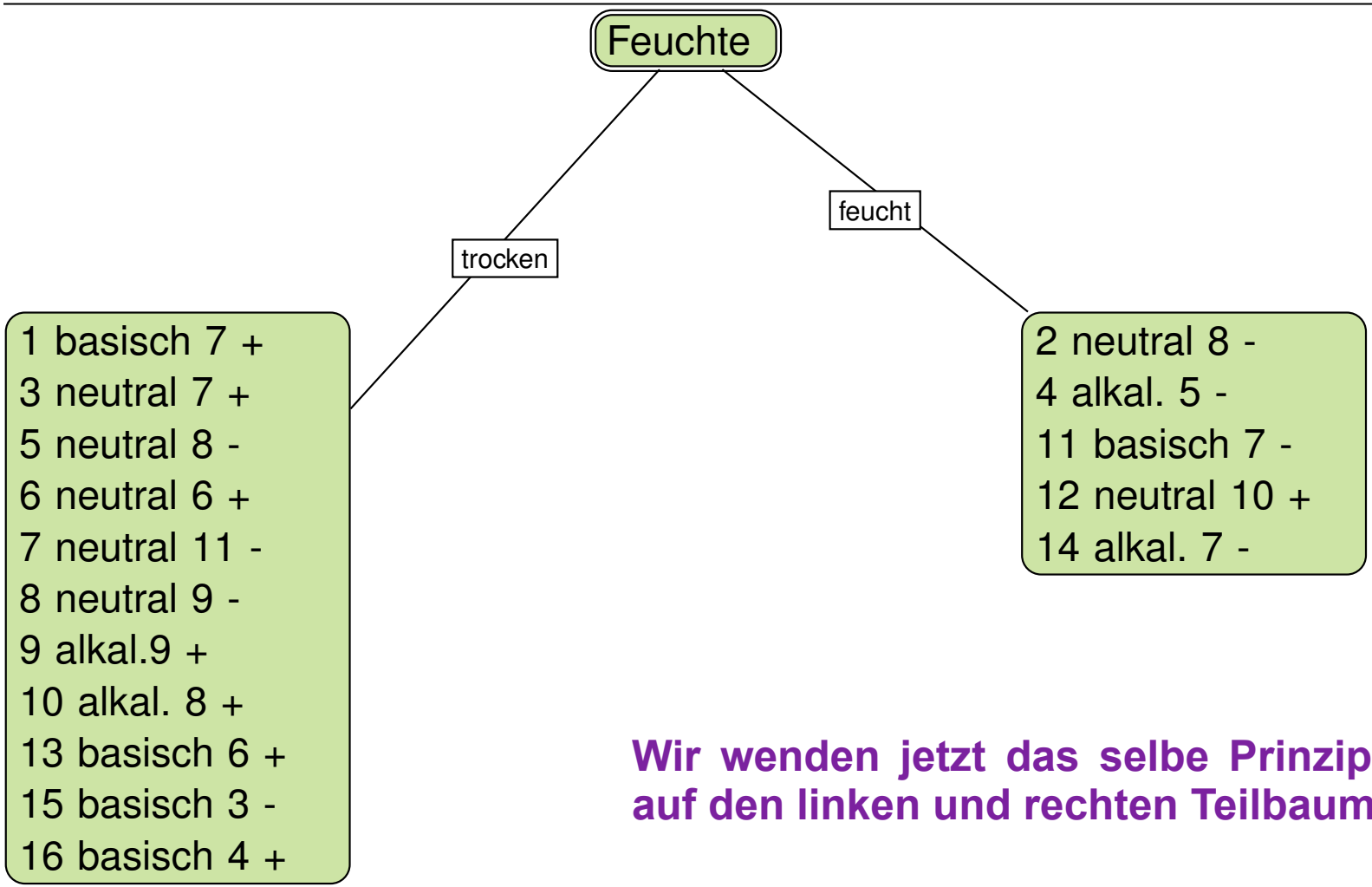
TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Wir wählen das Merkmal X_j, dessen Werte am besten in (Unter-)mengen $\mathbf{X}_i$ aufteilen, die geordnet sind.
- Das Gütekriterium Informationsgewinn (mittels Entropie) bestimmt die Ordnung der Mengen.
- In unserem Beispiel hat *Feuchte* den höchsten Gütewert.

Feuchte (0.125 Bit), Säure (0.016 Bit), Temperatur (0.014 Bit)

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

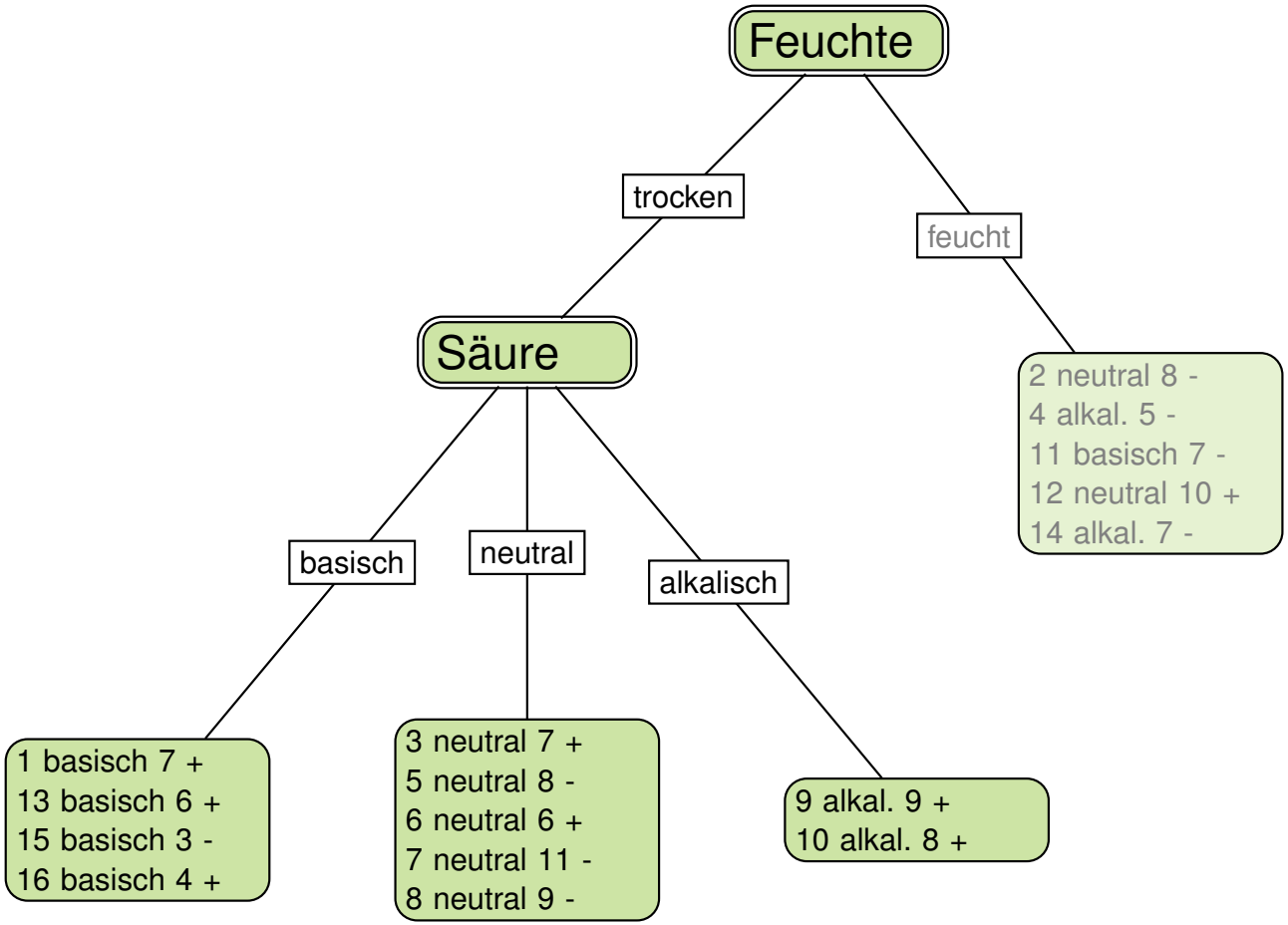
TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT



Wir wenden jetzt das selbe Prinzip rekursive auf den linken und rechten Teilbaum an

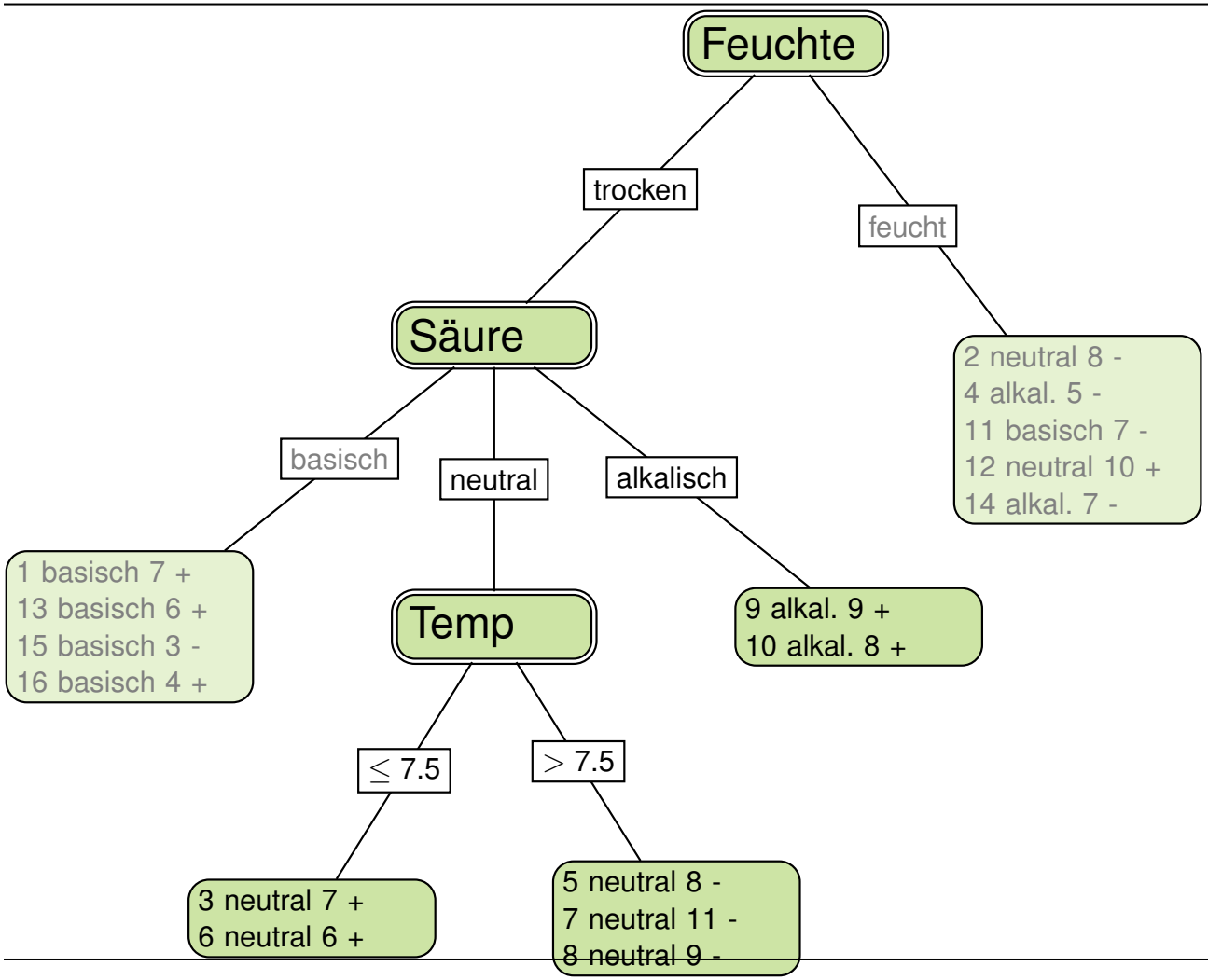
Algorithmus TDIDT (ID3) am Beispiel

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT



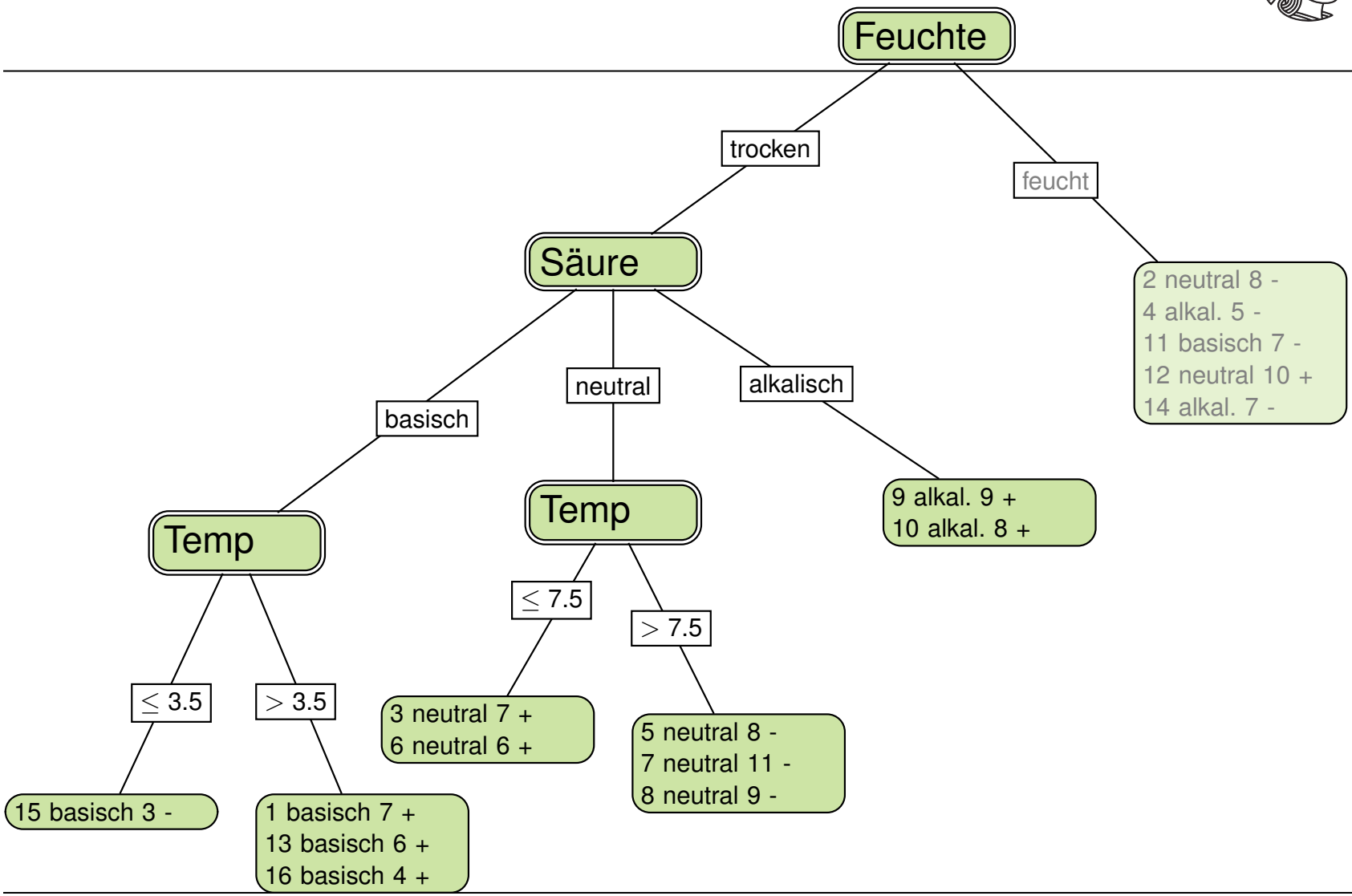
Algorithmus TDIDT (ID3) am Beispiel

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT



Algorithmus TDIDT (ID3) am Beispiel

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT



Algorithmus ID3 (TDIDT)

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Rekursive Aufteilung der Beispielmenge nach Merkmalsauswahl:

1. $TDIDT(\mathbf{X}, \{X_1, ...X_p\})$
2. $\mathbf{X}$ enthält nur Beispiele einer Klasse $\rightarrow$ fertig
3. $\mathbf{X}$ enthält Beispiele verschiedener Klassen:
   - $Güte(X_1, .., X_p, \mathbf{X})$
   - Wahl des besten Merkmals X_j mit k Werten
     - Aufteilung von $\mathbf{X}$ in $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, ..., \mathbf{X}_k$
     - für $i = 1, ..., k$:
       $TDIDT(\mathbf{X}_i, \{X_1, ..., X_p\} \backslash X_j)$
   - Resultat ist aktueller Knoten mit den Teilbäumen $T_1, ..., T_k$

Komplexität TDIDT ohne Pruning (Stutzen des Baumes)

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

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 $\mathcal{O}(\log N)$.
  - $\mathcal{O}(N \log N)$ 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

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Aber Achtung! Es können große Bäume entstehen[1]. 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.

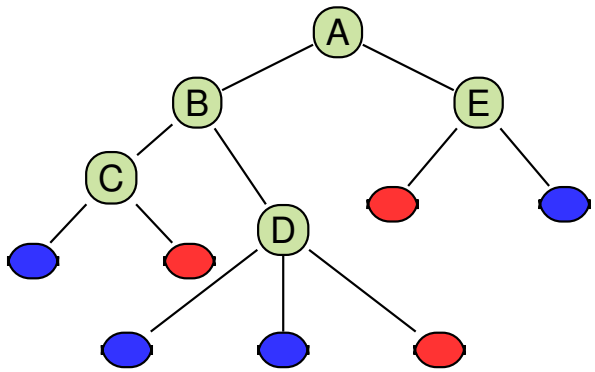
Die “richtigen Grösse” sollte zwischen den Extremen liegen.

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

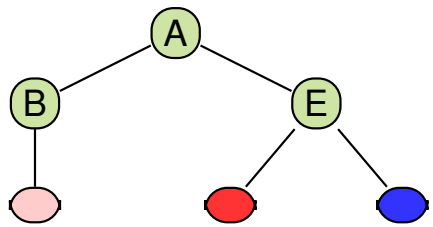
Stutzen (pruning) des Baumes

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

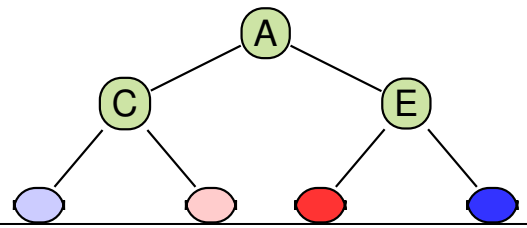
- Die Ziele des Stutzens:
  - Überanpassung (Overfitting) des Baums an die Trainingsdaten verringern!
  - Verständlichkeit erhöhen!
- Operationen des Stutzens (Pruning):
  a) Knoten an Stelle eines Teilbaums setzen
  b) Einen Teilbaum eine Ebene höher ziehen
- Schätzen, wie sich der wahre Fehler beim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



a) Knoten an Stelle eines Teilbaums setzen



b) Einen Teilbaum eine Ebene höher ziehen



Stutzen durch Fehlerschätzen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

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, können die Unterknoten weggestutzt werden. Dazu müssen wir (bottom-up) die Fehler an allen Knoten schätzen.
- 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?

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Konfidenzintervall

Vorgegeben eine tolerierte Irrtumswahrscheinlichkeit α, gibt das Konfidenzintervall

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

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 $\alpha = 0,1$: 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 standard-normalverteilte Zufallsvariable

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

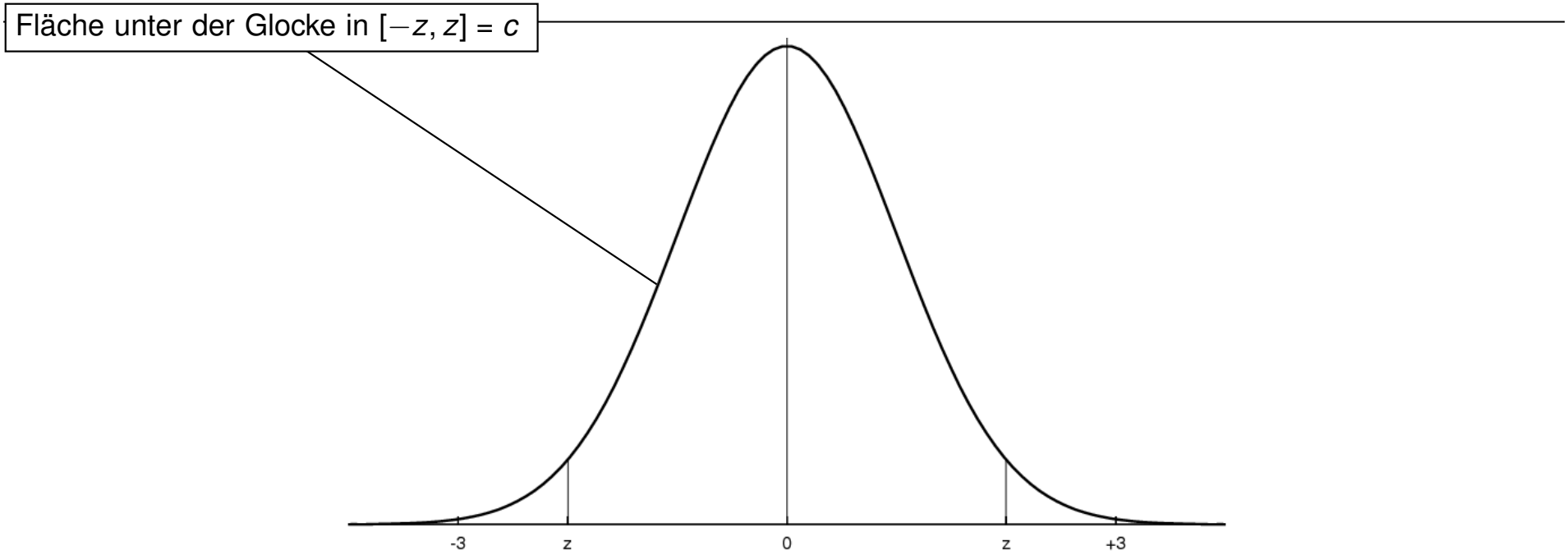
Die Zufallsvariable X wird bezüglich ihres Mittelwerts $\bar{X}$ standardisiert unter der Annahme einer Normalverteilung:

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

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

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

Verteilung mit z-Werten



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

Rechnung für reellwertige Beobachtungen und Mittelwert

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

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

- $P(X \geq -z)$ bzw. $P(X \leq z)$ 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.

$$
\begin{aligned}
0,8 &= P(-1,28 \leq \frac{\bar{X} - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{N}}} \leq 1,28) \\
&= P(-1,28\frac{\sigma}{\sqrt{N}} \leq \bar{X} - \mu \leq 1,28\frac{\sigma}{\sqrt{N}}) \\
&= P(\bar{X} - 1,28\frac{\sigma}{\sqrt{N}} \leq \mu \leq \bar{X} - 1,28\frac{\sigma}{\sqrt{N}})
\end{aligned}
$$

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

Fehler bzw. Erfolg schätzen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- 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

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

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

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- 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

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

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

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

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

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

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

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

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

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

SSE-Reduktion für $[x \leq z]$ Tests

Seien t_+ und $_-$ die Auteilung durch $[x \leq z]$. 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

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Doch zurück zur Klassifiaktion. Die Konfusionsmatrix lautet:

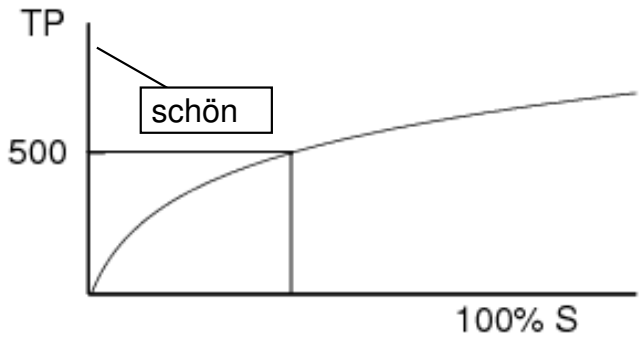
tatsächlich	Vorhergesagt +	Vorhergesagt −	
+	True positives TP	False negatives FN	Recall: $TP/(TP + FN)$
−	False positives FP	True negatives TN	
	Precision: $TP/(TP + FP)$		

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

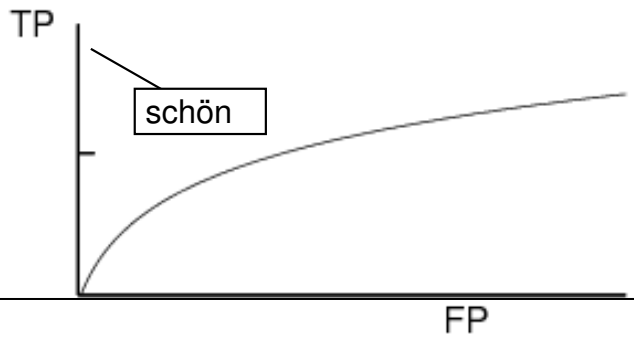
Balance von FP und FN

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

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



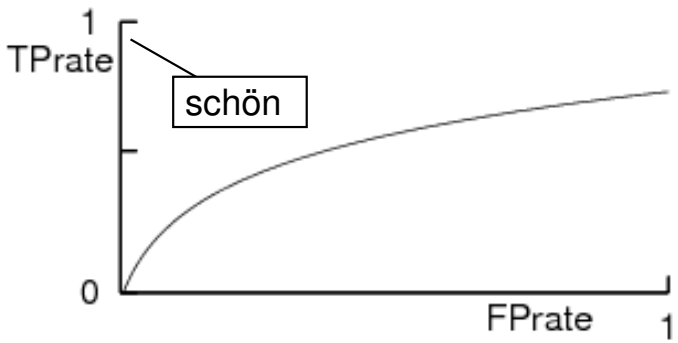
  - Receiver Operating Characteristic (ROC): für verschiedene *TP* jeweils die *FP* anzeigen



ROC genauer

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Statt der absoluten Anzahl *TP* nimm die Raten 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
  - $FP_{rate} := FP/N \sim FP/FP + TN$ bezogen auf Untermenge



Kosten von Fehlern

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- 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 höher als positive.
  - Wenn FP 10x so schlimm ist wie FN, dann gewichte positive Beispiele 10x höher als negative.
- Lerne den Klassifikator mit den gewichteten Beispielen wie üblich. So kann jeder Lerner Kosten berücksichtigen!

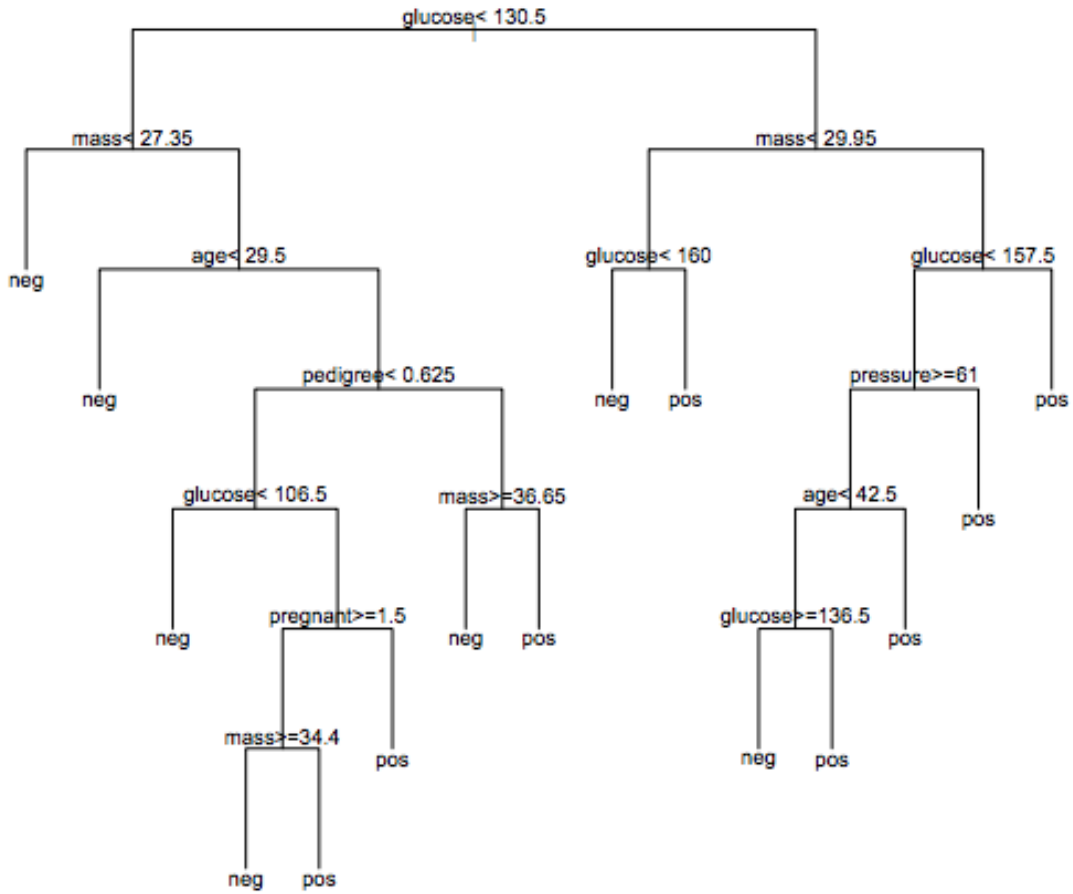
Bäume in R — rpart

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Zum Lernen: Funktion `rpart()` aus Paket `rpart`.

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

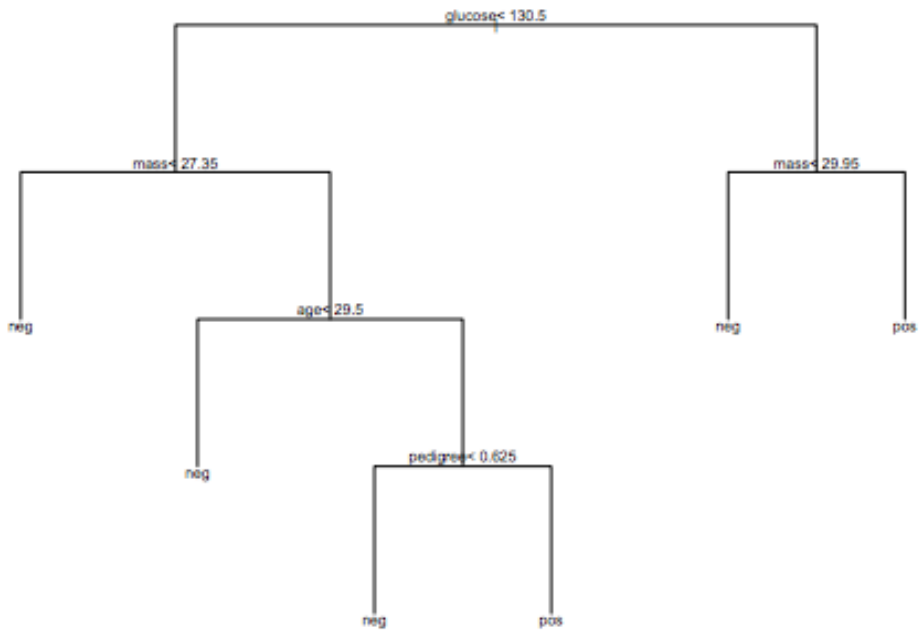
Bäume in R — rpart



Bäume in R — rpart

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

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



Bäume in R — rpart

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Zum Prunen:

```
> pid_rpart$cptable

          CP nsplit rel error    xerror       xstd
1 0.24117647      0 1.0000000 1.0000000 0.06230853
2 0.09411765      1 0.7588235 0.9117647 0.06083331
3 0.02745098      2 0.6647059 0.7705882 0.05783822
4 0.01764706      5 0.5823529 0.7647059 0.05769506
5 0.01372549     10 0.4941176 0.8000000 0.05853104
6 0.01000000     14 0.4294118 0.8411765 0.05943855
```

Bäume in R — rpart

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Zum Vorhersagen:

```
> pred_rpart <- predict(pid_rpart, newdata = pid_test,
+                       type = "class")
> mc(pred_rpart)

$table
     pred
true  neg pos
  neg 133  25
  pos  36  58

$rate
[1] 0.2420635
```

Was haben sie kennengelernt?

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- 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 $\rightarrow$ 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`