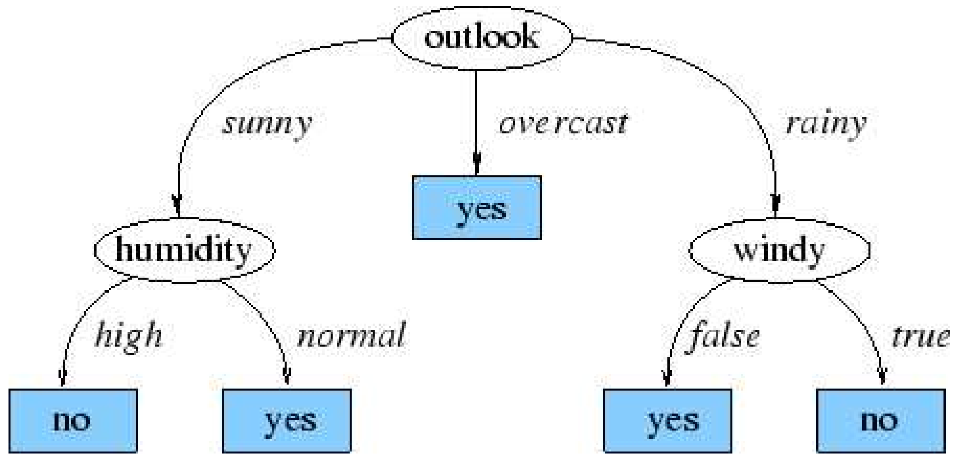
Entscheidungsbaum-Lernen: Übersicht

- Entscheidungsbäume
  - Repräsentationsformalismus
  - Tests
  - Semantik: Klassifikation
  - Ausdrucksfähigkeit
- Lernen von Entscheidungsbäumen
  - Szenario
  - vollst. Suche vs. TDIDT
  - Maße: Information Gain Ratio, Gini Index
  - weitere Aspekte: Kosten, fehlende Attribute
  - Overfitting: Pruning

Repräsentationsformalismus

Ein Entscheidungsbaum ist ein Baum mit:

- Jeder interne Knoten enthält einen Test
  - für jeden Ausgang des Testes gibt es eine Kante.
- Jedes Blatt enthält einen Klassifikationwert



Realer Beispielbaum für medizinische Diagnose

(C-Section: Kaiserschnitt)

Gelernt aus medizinischen Befunden von 1000 Frauen

```
[833+,167-] .83+ .17-
Fetal_Presentation = 1: [822+,116-] .88+ .12-
| Previous_Csection = 0: [767+,81-] .90+ .10-
| | Primiparous = 0: [399+,13-] .97+ .03-
| | Primiparous = 1: [368+,68-] .84+ .16-
| | | Fetal_Distress = 0: [334+,47-] .88+ .12-
| | | | Birth_Weight < 3349: [201+,10.6-] .95+ .05-
| | | | Birth_Weight >= 3349: [133+,36.4-] .78+ .22-
| | | Fetal_Distress = 1: [34+,21-] .62+ .38-
| Previous_Csection = 1: [55+,35-] .61+ .39-
Fetal_Presentation = 2: [3+,29-] .11+ .89-
Fetal_Presentation = 3: [8+,22-] .27+ .73-
```

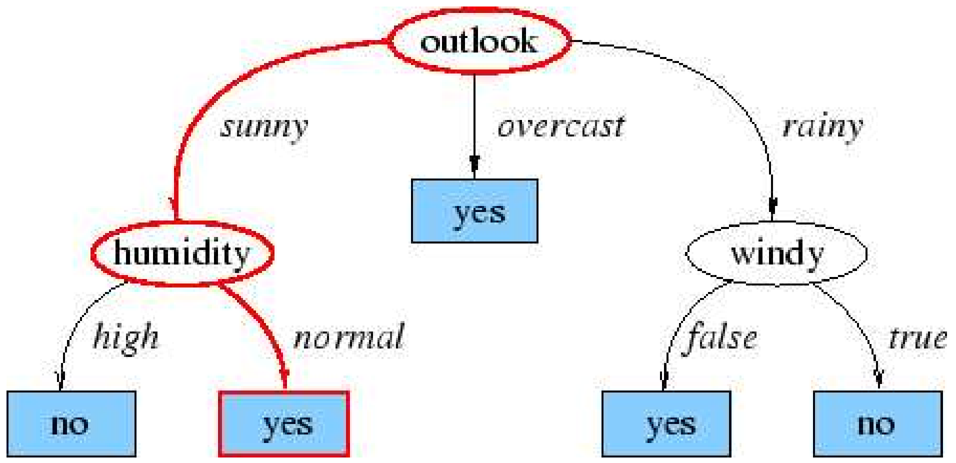
Klassifikation

Beginnend mit der Wurzel:

- Wenn in innerem Knoten:
  - Führe Test aus
  - Verzweige entsprechend Testausgang und gehe zum Anfang
- Wenn in Blatt:
  - Gib den Klassifikationswert als Ergebnis zurück

---

outlook	sunny
temperature	hot
humidity	normal
windy	false
play	?



Tests

Wir benutzen beim Lernen von Entscheidungsbäumen ausschließlich die folgenden Tests:

nominale Attribute

- Testausgang ist jeder der möglichen Attributwerte
  - *Bsp: outloook, Ausgänge: sunny, overcast, rainy*

numerische Attribute:

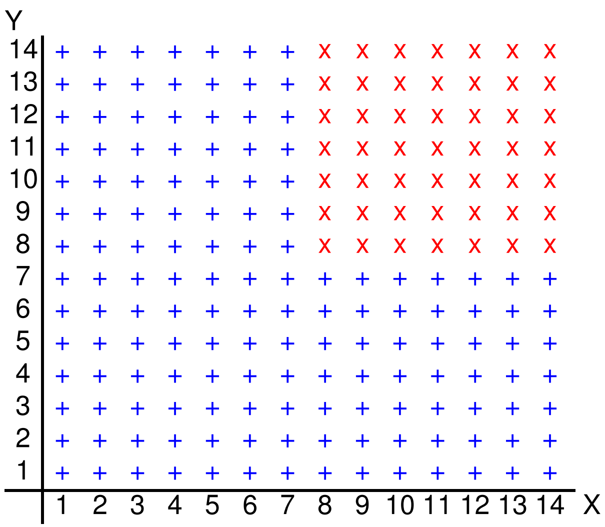
- Vergleich mit Konstante
  - *Bsp: kontostand* $<=$ *1000, Ausgänge: yes, no*

Repräsentationsfähigkeit

Warum keine anderen Tests?

- Vergleich zweier Attribute
  - *Bsp: meinKontostand $>$ KontostandDagobert*
- Logische Verküpfungen
  - *Bsp: outlook = sunny $\wedge$ humidity = high*
- Arithmetische Verküpfungen
  - *Bsp: meinKontostand * meinAlter $>$ log(KontostandDagobert)*

Beispiel:



Baum mit einfachen Tests:

$X \leq 7$: +
$X > 7$:
| $Y \leq 7$: +
| $Y > 7$: x

Baum mit komplexen Tests:

$(X > 7 \wedge Y > 7)$: x
$\neg(X > 7 \wedge Y > 7)$: +

Repräsentationsfähigkeit (cont.)

- Wie viele einfache Tests gibt es für das Beispiel?
- Wie viele komplexe Tests gibt es für das Beispiel?

Wie kann man folgende Formeln ausdrücken?

- $\wedge$, $\vee$, XOR
- $(A \wedge B) \vee (C \wedge \neg D \wedge E)$
- M von N

Repräsentationsfähigkeit (cont.)

- Jeder einfache Test legte eine achsenparallele Hyperebene in den Attributraum
- Logische Verküpfungen können durch Baumstruktur ausgedrückt werden
- $\longrightarrow$ Ein Entscheidungsbaum zerteilt den Attributraum in achsenparallele Hyperrechtecke
- Je weiter oben ein Test im Baum steht, desto größeren Einfluß hat er

Lernen von Entscheidungsbäumen

gegeben: Menge von Daten (Attribut-Wertpaare) zusammen mit der Zielklasse (binär)

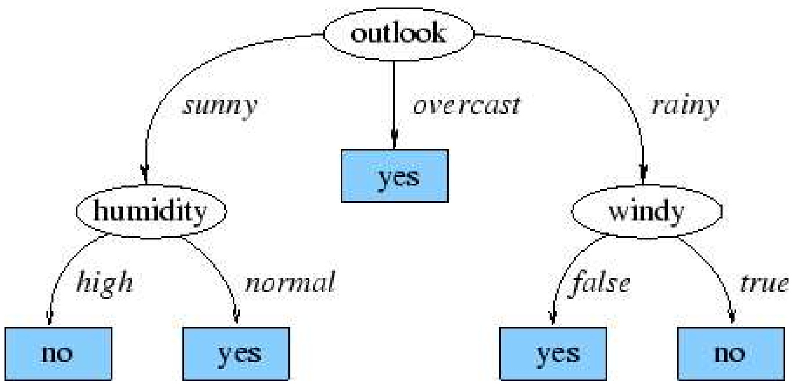
Naiver Ansatz:

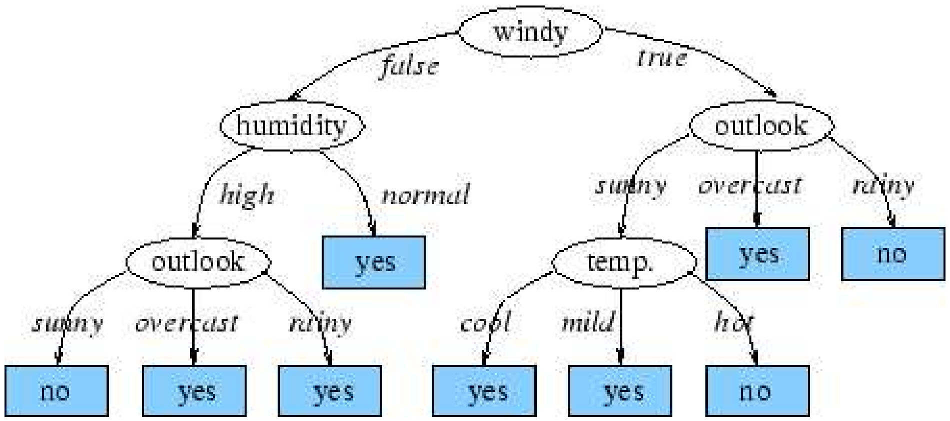
- Erzeuge alle möglichen Entscheidungsbäume und wähle den besten.

? Wie viele Entscheidungsbäume sind zu durchsuchen?

? Was heißt hier ‘bester‘?

Welcher Baum ist besser? Warum?





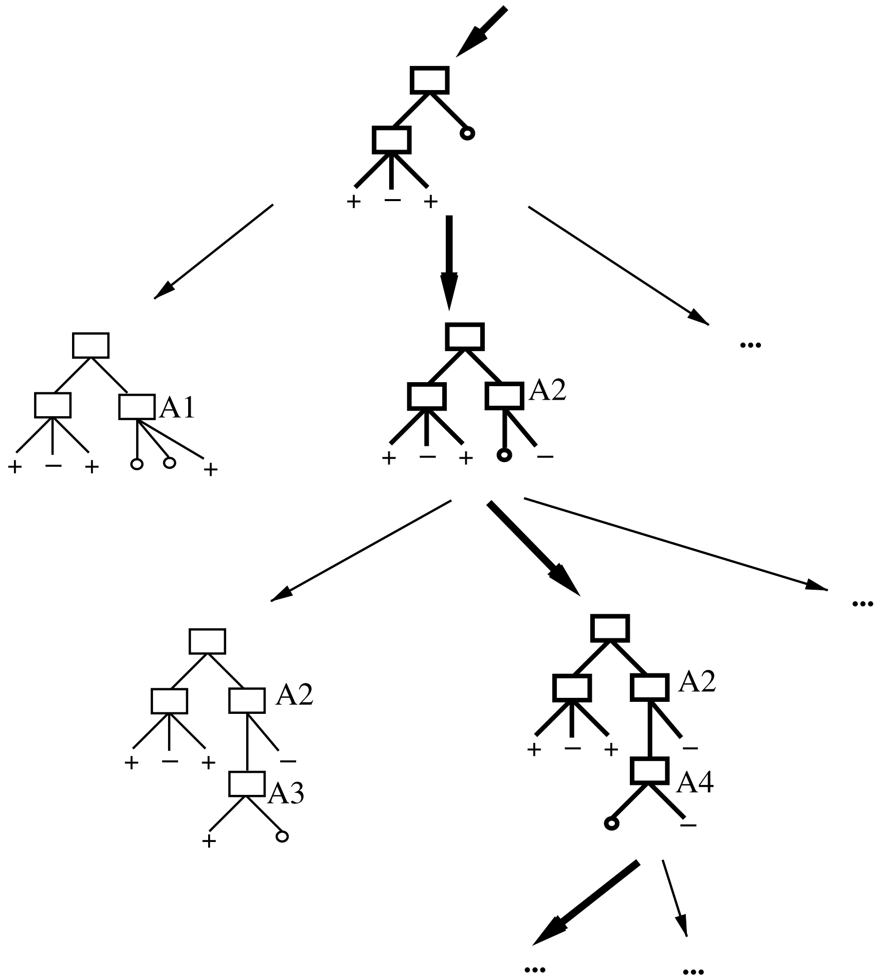
Top-Down Induktion of Decision Trees (TDIDT)

- Erzeuge Wurzelknoten n
- Berechne TDIDT(n,Beispielmenge)

TDIDT(n,Beispielmenge):

1. Wenn alle Beispiele in Beispielmenge ein und dieselbe Klassifikation besitzen, dann weise n diese Klasse zu
2. sonst:
   (a) Bestimme "besten" Test (Attribut) A für die Beispielmenge
   (b) Weise dem Knoten n den Test A zu
   (c) Bestimme Menge TA aller Testausgänge (Werte) von A
   (d) Für jeden Testausgang $t \in TA$:
      - erzeuge einen neuen Knoten n_t
      - erzeuge eine Kante von n nach n_t und beschrifte sie mit t
      - initialisiere $Bsp_t = \emptyset$
   (e) Für jedes Beispiel b aus der Beispielmenge:
      - Wende den Test A auf b an und bestimme den Testausgang t
      - Füge b zur Menge Bsp_t hinzu
   (f) Für jeden Nachfolgeknoten n_t von n: Berechne TDIDT(n_t, Bsp_t)

Greedy: Navigation im Hypothesenraum



Ziele

- entstehender Baum sollte möglichst klein sein
- Beispiele sollten möglichst gleichmäßig über den Baum verteilt sein

Maß zur Auswahl des besten Attributes: Information-Gain-Ratio

S: Menge von Trainingsbeispielen, A: ein Test

$$GainRatio(S, A) \equiv \frac{Gain(S, A)}{SplitInformation(S, A)}$$

$$Gain(S, A) \equiv Entropie(S) - \sum_{v \in Werte(A)} \frac{|S_v|}{|S|} Entropie(S_v)$$

$$Entropie(S) \equiv -\frac{|S_\oplus|}{|S|} \log_2 \frac{|S_\oplus|}{|S|} - \frac{|S_\ominus|}{|S|} \log_2 \frac{|S_\ominus|}{|S|}$$

$$SplitInformation(S, A) \equiv - \sum_{v \in Werte(A)} \frac{|S_v|}{|S|} \log_2 \frac{|S_v|}{|S|}$$

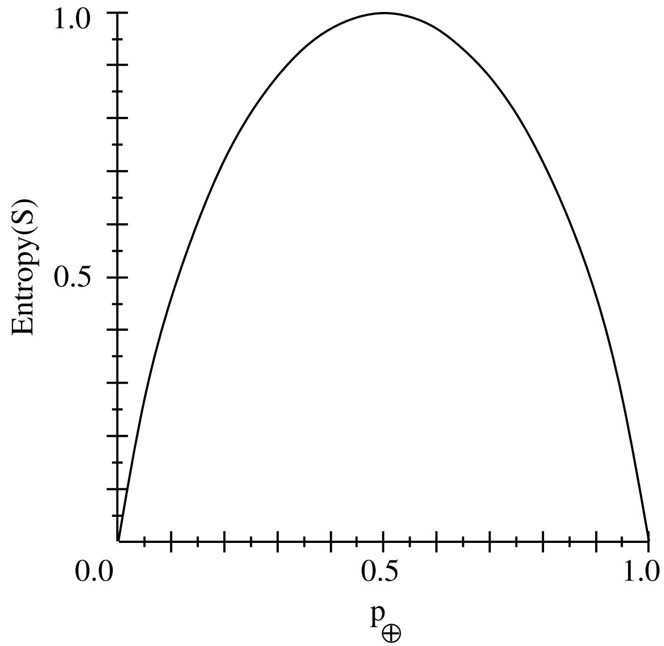
$S_\oplus$ ist die Menge aller positiven Beispiele in S, $S_\ominus$ die der negativen

S_v ist die Teilmenge von S, für die der Test A den Ausgang (Wert) v hat

Entropie

$$Entropie(S) \equiv -p_{\oplus} \log_2 p_{\oplus} - p_{\ominus} \log_2 p_{\ominus}$$

$$(p_{\oplus} = \frac{|S_{\oplus}|}{|S|}, p_{\ominus} = \frac{|S_{\ominus}|}{|S|})$$



- Entropie mißt die ‘Unreinheit’ von S

Entropie

$Entropie(S)$ = erwartete Anzahl von Bits die benötigt werden, um die Klassifikation ($\oplus$ oder $\ominus$) eines zufällig gezogenen Beispiels aus S zu kodieren (unter optimaler, kürzester Kodierung)

Warum?

Informationstheorie: optimale Kodierung benötigt $-\log_2 p$ Bits um eine Nachricht mit der Wahrscheinlichkeit p zu kodieren

$\longrightarrow$ erwartete Anzahl von Bits, um $\oplus$ oder $\ominus$ eines beliebig gezogenen Beispiels aus S zu kodieren:

$$p_{\oplus}(-\log_2 p_{\oplus}) + p_{\ominus}(-\log_2 p_{\ominus})$$

$$Entropie(S) \equiv -p_{\oplus} \log_2 p_{\oplus} - p_{\ominus} \log_2 p_{\ominus}$$

Information Gain

$Gain(S, A)$ = erwartete Verringerung der Entropie nach Partitionierung bzgl. A

$$Gain(S, A) \equiv Entropie(S) - \sum_{v \in Werte(A)} \frac{|S_v|}{|S|} Entropie(S_v)$$

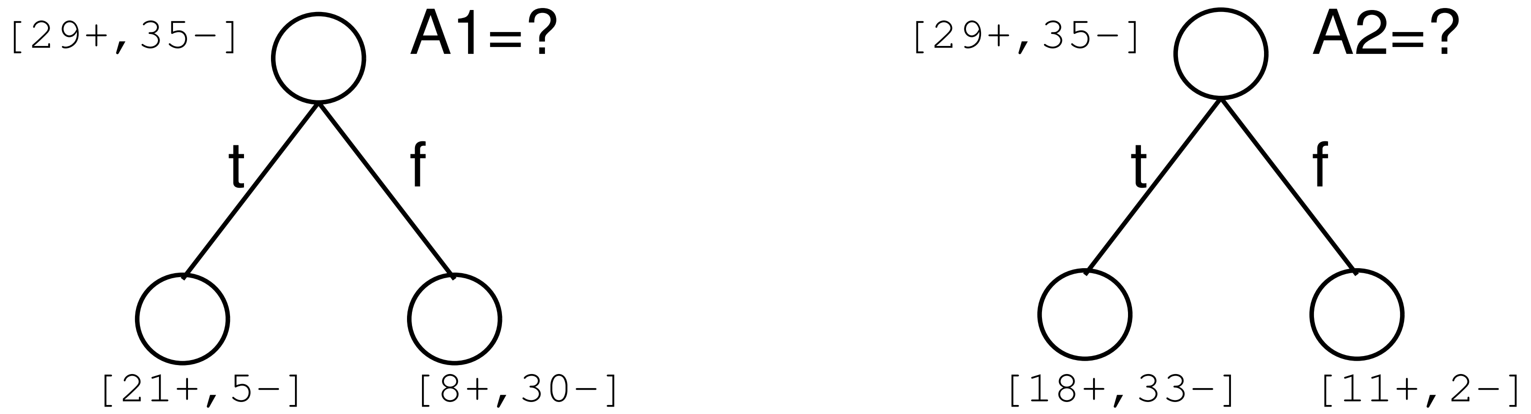
wobei S_v Teilmenge von S ist, für die A den Wert v hat

Gain selbst kann man auch als Maß zur Testauswahl benutzen.

- erster Algorithmus zum Lernen von Entscheidungsbäumen:
  ID3 = TDIDT mit Maß Gain

Aufgabe

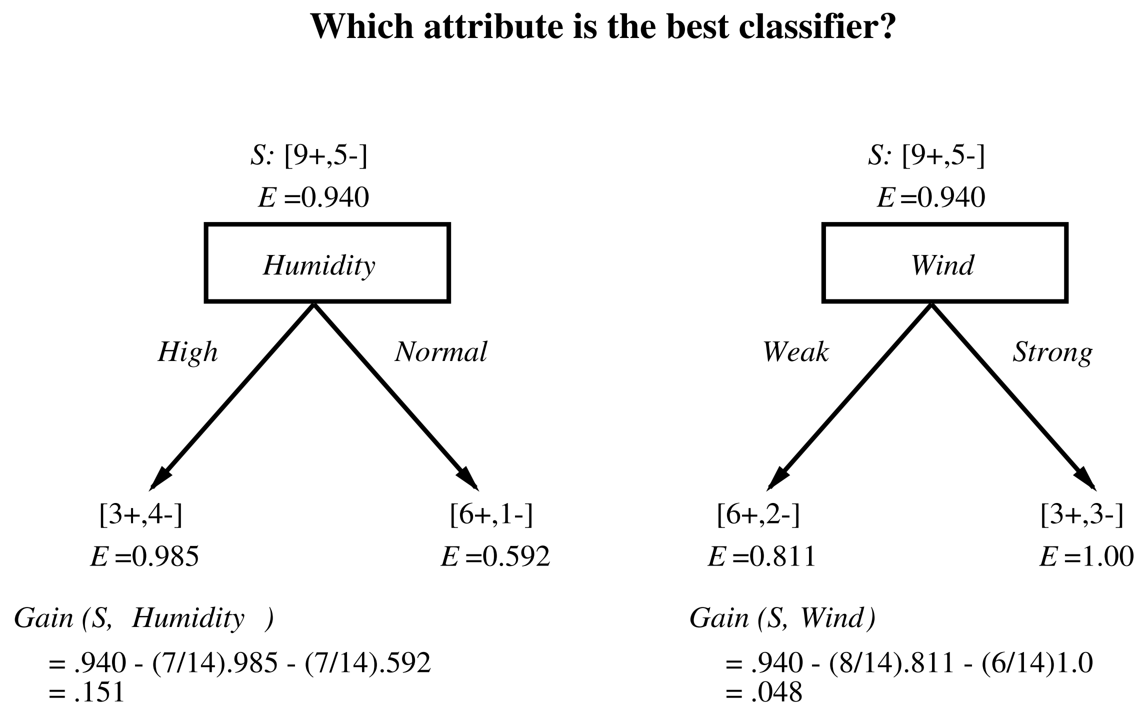
Berechnen Sie $Gain(\cdot, A1)$ und $Gain(\cdot, A2)$ in folgenden Situationen:



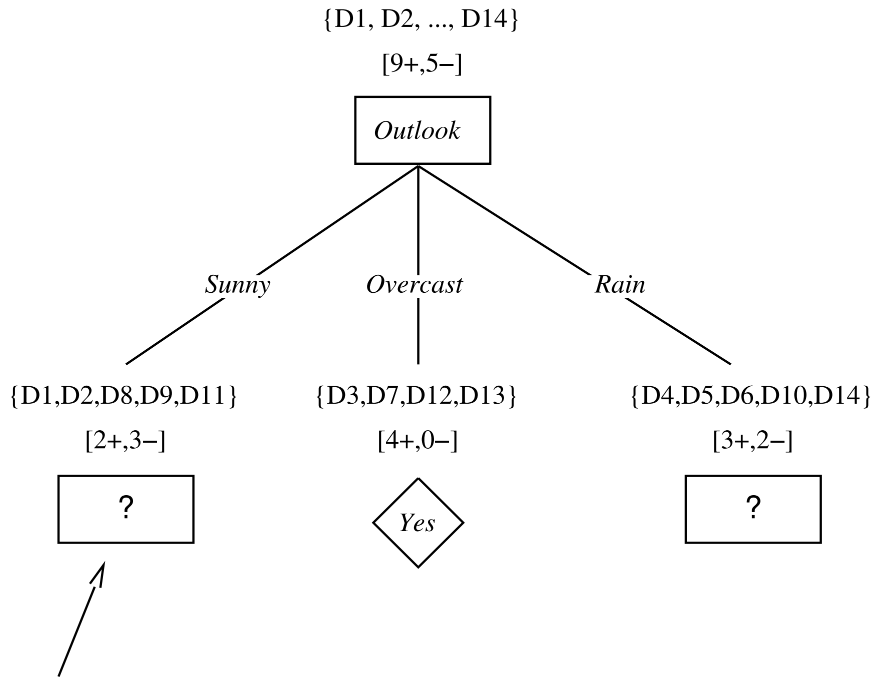
Trainingsbeispiele

Day	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	PlayTennis
D1	Sunny	Hot	High	Weak	No
D2	Sunny	Hot	High	Strong	No
D3	Overcast	Hot	High	Weak	Yes
D4	Rain	Mild	High	Weak	Yes
D5	Rain	Cool	Normal	Weak	Yes
D6	Rain	Cool	Normal	Strong	No
D7	Overcast	Cool	Normal	Strong	Yes
D8	Sunny	Mild	High	Weak	No
D9	Sunny	Cool	Normal	Weak	Yes
D10	Rain	Mild	Normal	Weak	Yes
D11	Sunny	Mild	Normal	Strong	Yes
D12	Overcast	Mild	High	Strong	Yes
D13	Overcast	Hot	Normal	Weak	Yes
D14	Rain	Mild	High	Strong	No

Auswahl des nächsten Attributs



Partiell erlernter Baum



Which attribute should be tested here?

S_{sunny} = {D1,D2,D8,D9,D11}

$Gain\ (S_{sunny}, Humidity) = .970 - (3/5)\ 0.0 - (2/5)\ 0.0 = .970$

$Gain\ (S_{sunny}, Temperature) = .970 - (2/5)\ 0.0 - (2/5)\ 1.0 - (1/5)\ 0.0 = .570$

$Gain\ (S_{sunny}, Wind) = .970 - (2/5)\ 1.0 - (3/5)\ .918 = .019$

ID3's Suche im Hypothesenraum

- Hypothesenraum ist vollständig!
  - Zielfunktion enthalten...
- Gibt eine einzige Hypothese aus
  - welche?...
- Kein Backtracking
  - Lokale Minima...
- Statistikbasierte Suchentscheidungen
  - Robust gegenüber verrauschten Daten...
- Induktiver Bias: "bevorzuge kleine Bäume"
  - Occam's Razor: Wähle kleinste Hypothese, die die Daten widerspiegelt
    - Warum? Was ist so besonders an kleinen Hypothesen?

Problem mit Gain: Attribute mit vielen Werten

Problem:

- Wenn der Wertebereich eines Attributs sehr groß ist, wird $Gain$ dieses auswählen
- Extrembeispiele: Kundennummer, Geburtsdatum, Name

Möglicher Ansatz: $GainRatio$

$$GainRatio(S, A) \equiv \frac{Gain(S, A)}{SplitInformation(S, A)}$$

$$SplitInformation(S, A) \equiv - \sum_{v \in Werte(A)} \frac{|S_v|}{|S|} \log_2 \frac{|S_v|}{|S|}$$

Maß zur Auswahl des besten Attributes: Gini-Index

Wähle das Attribut mit minimalem

$$gini(S, A) \equiv \sum_{v \in Werte(A)} \frac{|S_v|}{|S|} g(S_v)$$

$$g_i(S) = 1 - \left(\frac{|S_\oplus|}{|S|}\right)^2 - \left(\frac{|S_\ominus|}{|S|}\right)^2$$

$S_\oplus$ ist die Menge aller positiven Beispiele in S, $S_\ominus$ die der negativen

S_v ist die Teilmenge von S, für die der Test A den Ausgang (Wert) v hat

Details: Kontinuierliche Attribute

Kontinuierliche Attribute werden mit Konstante verglichen

- Mit welcher? (Es gibt überabzählbar unendlich viele)

Temperature:	40	48	60	72	80	90
PlayTennis:	No	No	Yes	Yes	Yes	No

- Es genügt, für jeden in den Daten vorkommenden Wert einen Test zu generieren
  - Warum?
  - Welchen?

Details: Unbekannte Attributwerte

Was wenn Wert von Attribut A fehlt?

Benutze Trainingsbeispiele s trotzdem: Wenn der Knoten n das Attribut A testet, dann

- Nimm an, s hätte für A denjenigen Wert, der unter allen anderen Beispielen für Knoten n am haufigsten für A vorkommt
- Weise A den Wert zu, den die meisten Beispiele mit der gleichen Klassifikation wie s haben
- Weise Wahrscheinlichkeit p_i für jeden möglichen Wert v_i von A zu
  - Propagiere 'Anteile' p_i der Beispiele in die Teilbäume
    - Beispiel: Attribut boolean, Anteil '+'=6"0%, '-'=40%
      Propagiere Beispiel mit Gewicht 0,6 in Zweig für '+', mit Gewicht 0,4 in Zweig für '-'

Klassifikation erfolgt in gleicher Weise.

Details: Attribute mit Kosten

Beispiele

- Medizinische Diagnose, *BloodTest* kostet $150
- Robotik, *Width_from_1ft* kostet 23 Sekunden.

Wie kann man einen konsistenten Baum mit geringsten Kosten lernen?

Ansatz: ersetze *Gain* bspw. durch

- Tan and Schlimmer (1990)

$$\frac{Gain^2(S,A)}{Cost(A)}.$$

- Nunez (1988)

$$\frac{2^{Gain(S,A)} - 1}{(Cost(A)+1)^w}$$

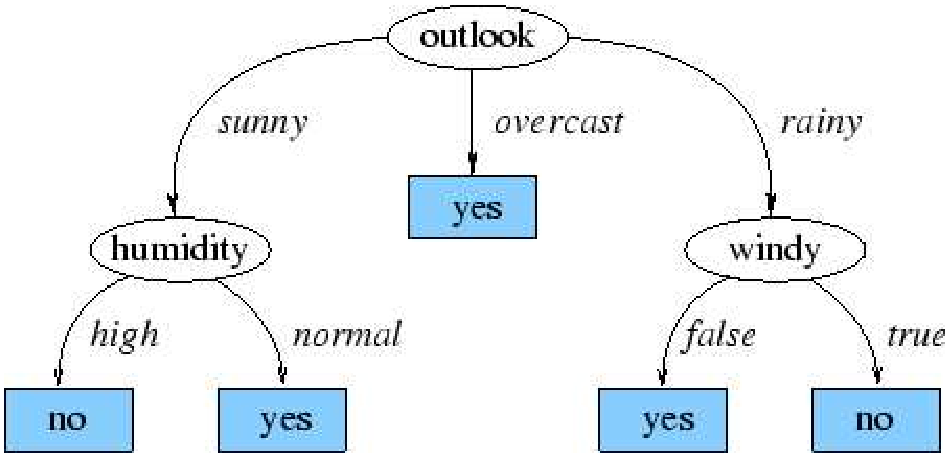
wobei $w \in [0,1]$ den Einfluß der Kosten beschreibt

Overfitting bei Entscheidungsbäumen

Betrachte folgendes verrauschte Beispiel #15:

$$Sunny,\ Hot,\ Normal,\ Strong,\ PlayTennis = No$$

Was passiert mit dem vorhin erzeugten Baum?



Overfitting

Betrachte Fehler von Hypothesen h über

- Trainingsdaten: $error_{train}(h)$
- gesamter Verteilung $\mathcal{D}$ der Daten: $error_{\mathcal{D}}(h)$

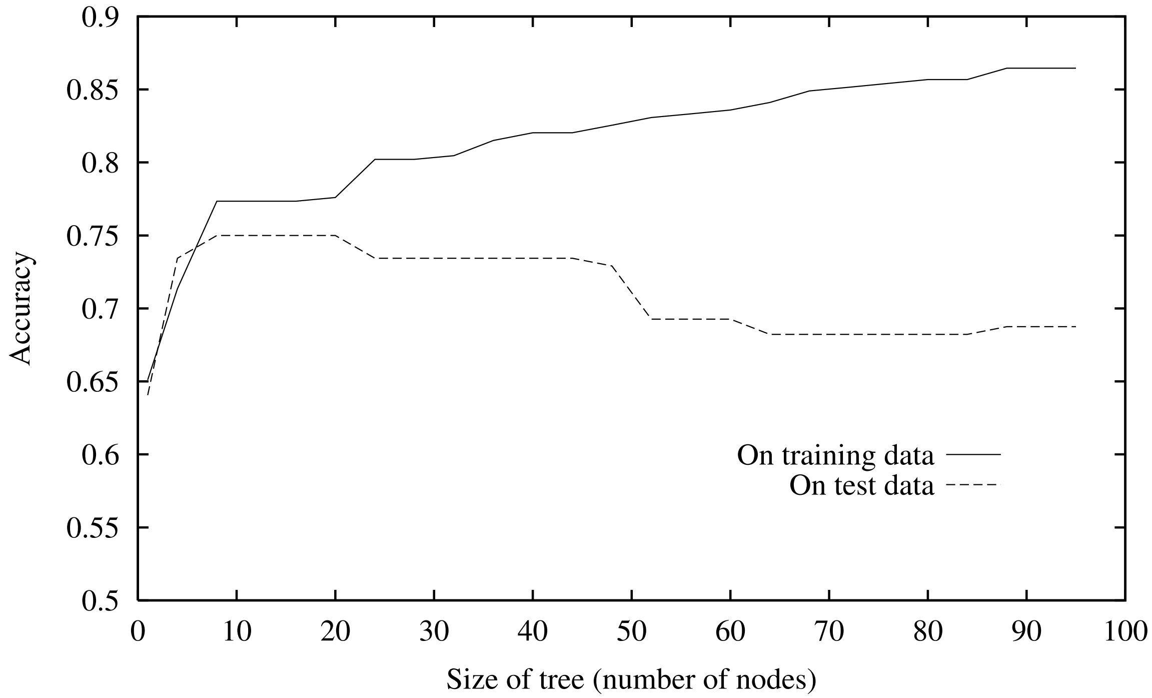
Hypothese $h \in H$ **overfits** eine Trainingsmenge, wenn es eine alternative Hypothese $h' \in H$ gibt mit

$$error_{train}(h) < error_{train}(h')$$

und

$$error_{\mathcal{D}}(h) > error_{\mathcal{D}}(h')$$

Overfitting beim Entscheidungsbaumlernen



Overfitting: Ein Beispiel

```
@relation vorlesungsbsp-dt-overfitting
%
@attribute x numeric
@attribute class? {+,-}
%
@data
%
% Zielfkt: x<7 <=> class = -
%
%
0,-
1,-
1.5,+   %FEHLER IN DATEN!!!
1.51,+  %FEHLER IN DATEN!!!
2,-
3,-
4,-
5,-
6,-
7,+
8,+
9,+
```

‘Gehorsamer’ Entscheidungsbaum

```
x <= 6
|   x <= 1.51
|   |   x <= 1: - (2.0)
|   |   x > 1: + (2.0)
|   x > 1.51: - (5.0)
x > 6: + (3.0)
```

Wie kann man Overfitting verhindern?

1. Aufhören, wenn Verfeinerung keine statistisch signifikante Verbesserung mehr bringt
2. Erzeuge vollständigen Baum, danach verkleinere ihn wieder

Auswahl des “besten” Baums:

- Miß Verhalten auf Trainingsdaten
- Miß Verhalten auf separaten Validationsdaten
  $\longrightarrow$ Teile ursprüngliche Daten auf!!!
- MDL: minimiere *size(tree) + size(misclassifications(tree))*

MDL: Minimum Description Length Principle

Reduced-Error Pruning

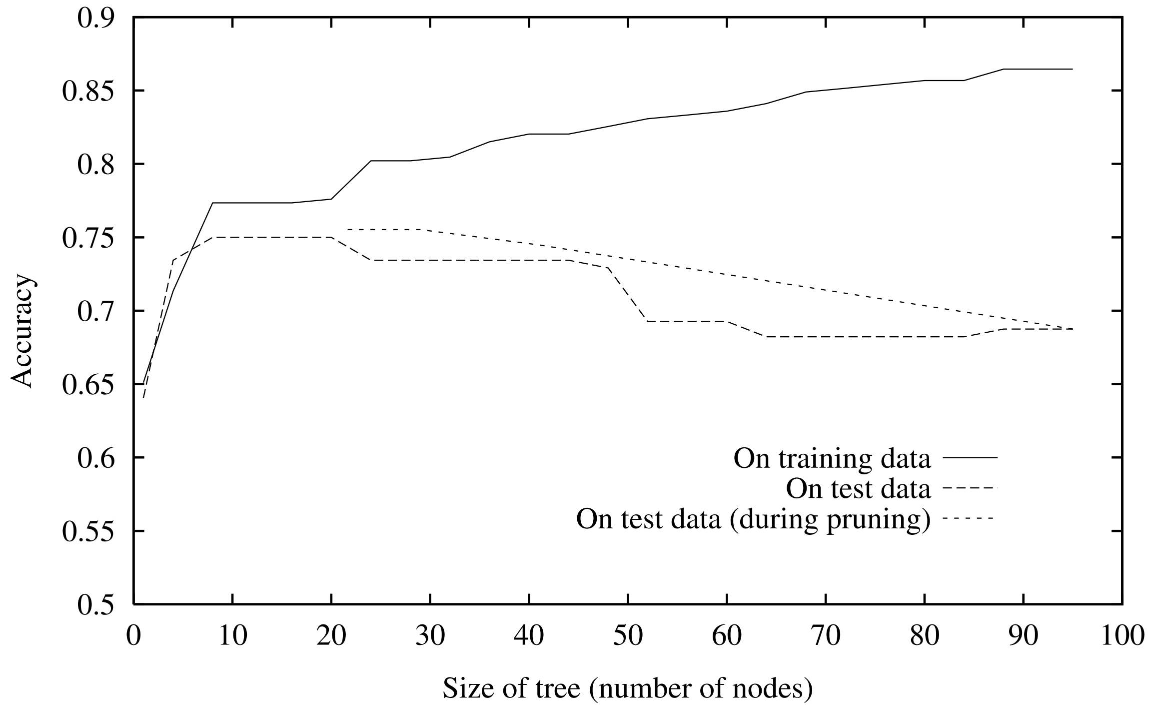
Teile Daten auf in *Trainings-* und *Validierungsmenge*

Solange bis Pruning keine Verbesserung mehr bringt:

1. Für jeden Knoten n des Baumes
   - entferne n (und alle darunter liegendenden Knoten) und bestimme Güte dieses Baumes bzgl. der Validierungsmenge
2. Entferne denjenigen Knoten, der die meiste Verbesserung auf der Validierungsmenge bewirkt

- erzeugt kleinste Version des genauesten Baumes
- Was, wenn die Datenmenge beschränkt ist?

Effekt des Reduced-Error Prunings



Reduced Error Pruning auf unserem Beispiel (WEKA, J48)

```
Options: -R

J48 pruned tree
------------------

x <= 6: - (6.0/1.0)
x > 6: + (2.0)

Number of Leaves  :      2

Size of the tree :       3


Time taken to build model: 0.1 seconds
Time taken to test model on training data: 0 seconds

=== Error on training data ===

Correctly Classified Instances          10                83.3333 %
Incorrectly Classified Instances         2                16.6667 %
Kappa statistic                          0.6364
Mean absolute error                      0.2361
Root mean squared error                  0.3632
Relative absolute error                 48.374  %
Root relative squared error             73.6574 %
Total Number of Instances               12


=== Confusion Matrix ===

 a b   <-- classified as
 3 2 | a = +
 0 7 | b = -


=== Stratified cross-validation ===

Correctly Classified Instances           5                41.6667 %
Incorrectly Classified Instances         7                58.3333 %
Kappa statistic                         -0.3125
Mean absolute error                      0.6076
```

```
Root mean squared error                  0.654
Relative absolute error                118.4896 %
Root relative squared error            126.0855 %
Total Number of Instances               12

=== Confusion Matrix ===

 a b   <-- classified as
 0 5 | a = +
 2 5 | b = -
```

C4.5 / J48

C4.5 = TDIDT mit Maß Information-Gain-Ratio und Reduced-Error-Pruning

---

Aufgabe

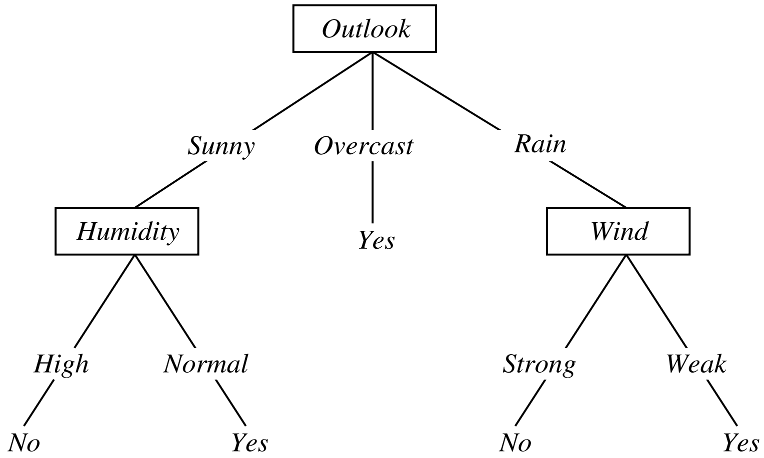
- Suchen Sie im Internet bzw. in der Literatur nach anderen Algorithmen zum Entscheidungsbaum-Lernen.
- Nennen sie mind. 500 davon:-)))

Regel Post-Pruning

1. Konvertiere Baum in äquivalente Menge von Regeln
2. Prune jede Regel unabhängig von den anderen
3. Sortiere Endregeln in gewünschte Reihenfolge für Benutzung

Häufig genutzte Methode (z.B. C4.5)

Konvertiere Baum in Regelmenge



IF $(Outlook = Sunny) \wedge (Humidity = High)$
THEN $PlayTennis = No$

IF $(Outlook = Sunny) \wedge (Humidity = Normal)$
THEN $PlayTennis = Yes$

...

Changelog

Folie 6: Beide DTs korrigiert (7 durch 6 ersetzt)

Folie 13: Formel für Entropie korrigiert

Folie 14: Formel für Entropie korrigiert

Folie 15: Formel für Entropie korrigiert