# INTELLIGENTE DATENANALYSE IN MATLAB

## Überwachtes Lernen: Entscheidungsbäume

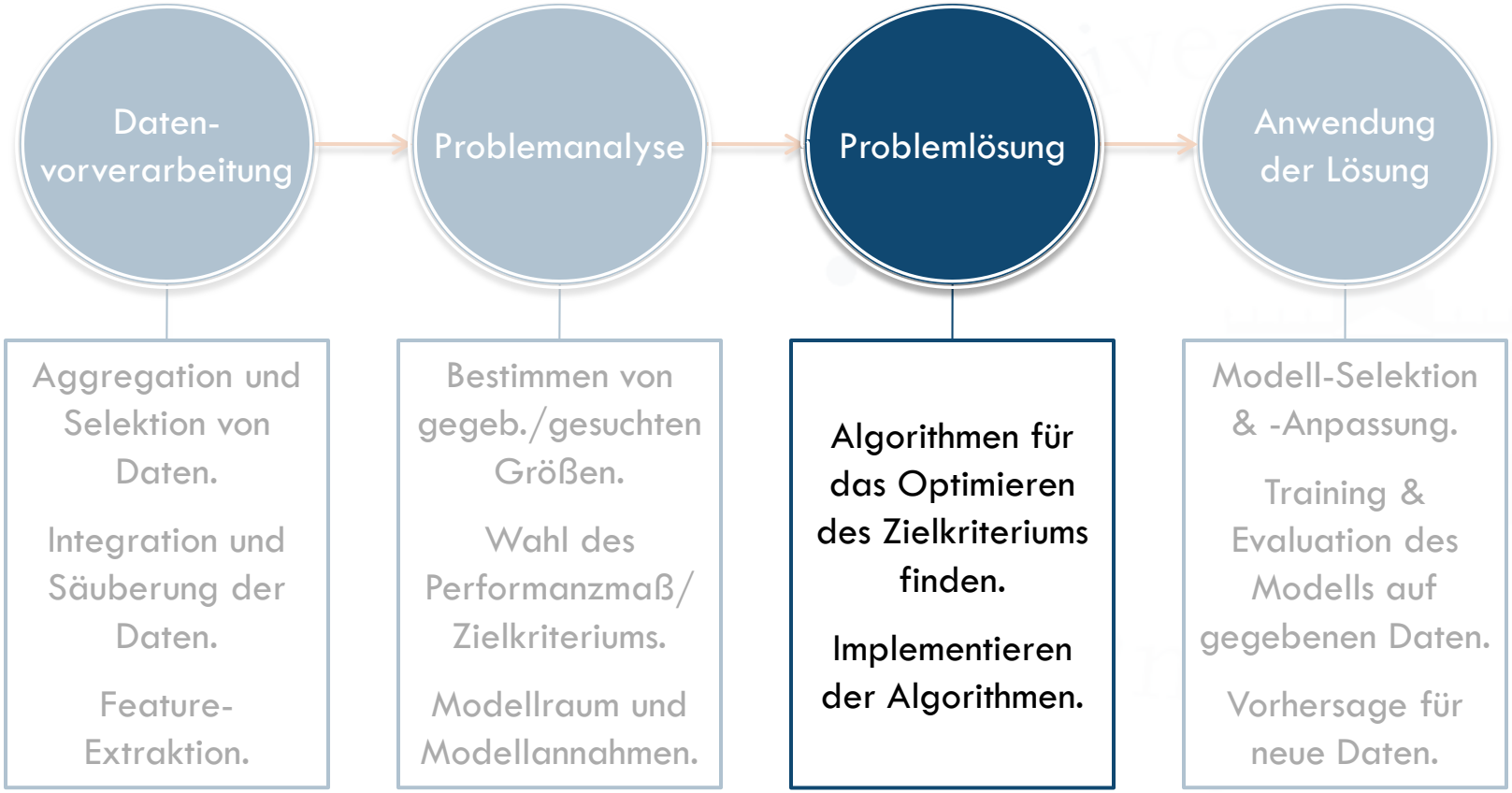
Michael Brückner/Tobias Scheffer

# Literatur

- Stuart Russell und Peter Norvig: Artificial Intelligence.
- Andrew W. Moore: http://www.autonlab.org/tutorials.

# Überblick

- Schritte der Datenanalyse:



# Überwachtes Lernen

## Problemstellung

- Gegeben: Trainingsdaten mit bekannten Zielattributen (gelabelte Daten).
- Eingabe: Instanz (Objekt, Beispiel, Datenpunkt, Merkmalsvektor) = Vektor mit Attribut-Belegungen.
- Ausgabe: Belegung des/der Zielattribut(e).
  - Klassifikation: Nominaler Wertebereich des Zielattributs.
  - Ordinale Regression: Ordinaler Wertebereich des Zielattributs.
  - Regression: Numerischer Wertebereich des Zielattributs.
- Gesucht: Modell $f : \mathbf{x} \mapsto y$.

# Überwachtes Lernen

## Beispiel

- Beispiel *binäre Klassifikation*:

| Tag | Bewölkung | Temperatur | Luftfeuchtigkeit | Wind | Tennis spielen? |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | sonnig | warm | hoch | wenig | nein |
| 2 | sonnig | warm | hoch | stark | nein |
| 3 | bedeckt | warm | hoch | wenig | ja |
| 4 | Regen | mild | hoch | wenig | ja |
| 5 | Regen | kühl | normal | wenig | ja |
| 6 | Regen | kühl | normal | stark | nein |
| 7 | bedeckt | kühl | normal | stark | ja |
| 8 | sonnig | mild | hoch | wenig | nein |
| 9 | sonnig | kühl | normal | wenig | ja |
| 10 | Regen | mild | normal | wenig | ja |
| 11 | sonnig | mild | normal | stark | ? |
| 12 | bedeckt | mild | hoch | stark | ? |
| 13 | bedeckt | warm | normal | wenig | ? |
| 14 | Regen | mild | hoch | stark | ? |

Trainingsdaten

Testdaten

Zielgröße

# Überwachtes Lernen

## Arten von Modellen

- Entscheidungsbäume/Regelsysteme:
  - Klassifikations-, Regressions-, Modellbaum.
- Lineare Modelle:
  - Trennebenen, Regressionsgerade.
- Nicht-lineare Modelle, linear in den Parametern:
  - Probabilistisches Modell.
  - Nicht-lineare Datentransformation + lineares Modell.
  - Kernel-Modell.
- Nicht-lineare Modelle, nicht-linear in den Parametern:
  - Neuronales Netz.

# Entscheidungsbäume

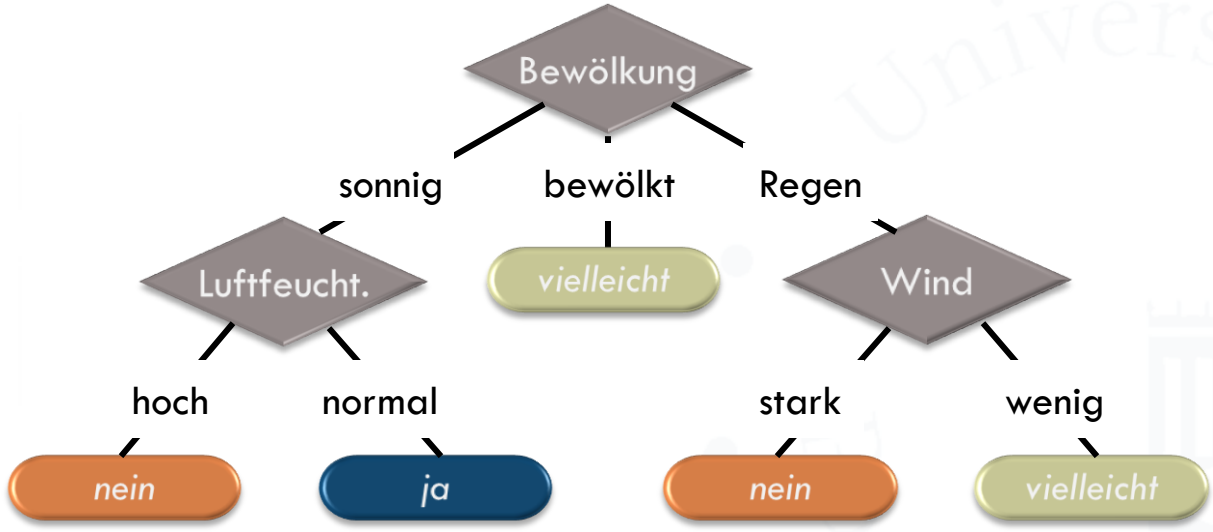
## Definition

- Entscheidungsbaum: Graph-Darstellung von Regeln zur Klassifikation/Regression.
- Innere Knoten: Attributbelegung prüfen.
  - Nominale/binäre Attribute (prüfen auf gleich/ungleich).
  - Numerische/ordinale Attribute (prüfen auf größer/kleiner).
- Kanten: Attributbelegung.
- Blätter: Liefern Klassenlabel/Regressionswerte.

# Entscheidungsbäume

## Beispiel

- Beispiel „Tennis spielen“:




Regel: (Bewölkung = sonnig) ^ (Luftfeuchtigkeit = normal) ⇒ ja

# Entscheidungsbäume

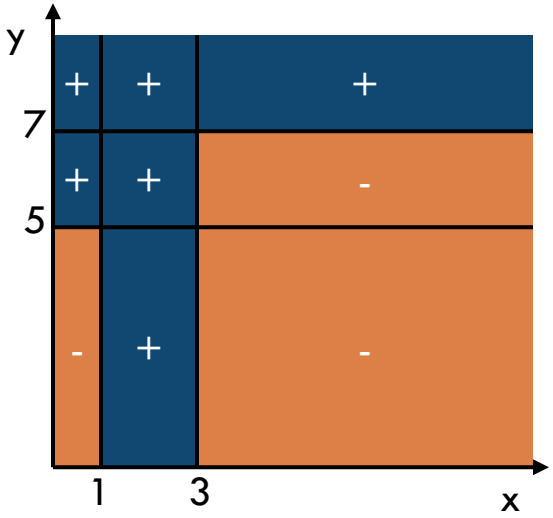
## Besonders geeignet …

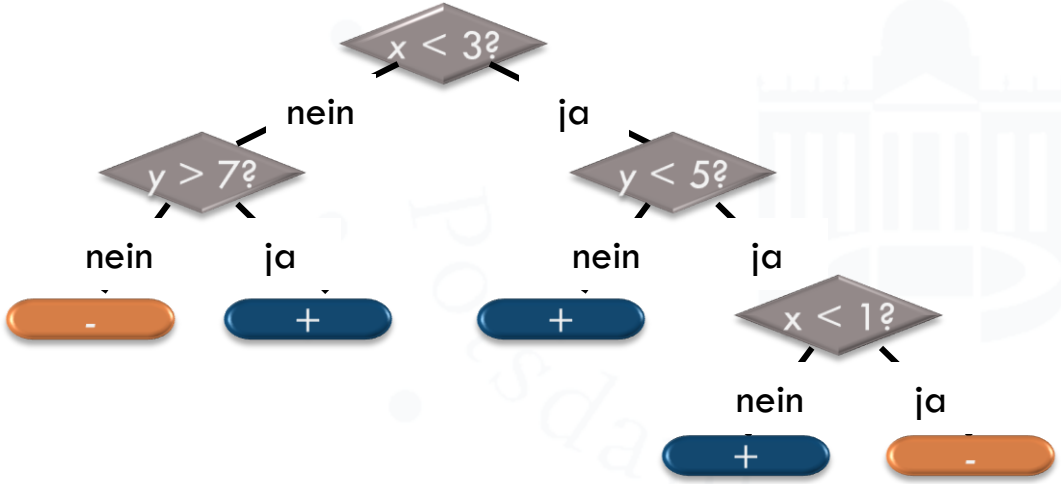
- Für mittelgroße/große Klassifikationsprobleme.
- Falls Interpretierbarkeit/Begründung der Entscheidung notwendig.
- Für Daten mit überwiegend ordinalen/binären Attributen.
- Für Daten mit fehlerhaften/fehlenden Attributen.
- Falls explizite Abhängigkeiten/Regeln erkannt werden sollen.
- Falls schnelles & einfaches Verfahren gewünscht.

# Entscheidungsbäume

## Beispiel

- Instanzen (Vektoren mit $m$ Einträgen) liegen im $m$-dimensionalen Eingaberaum.
- Dieser wird in achsparallele Rechtecke zerlegt.



# Entscheidungsbäume

## Lernen von Entscheidungsbäumen

- Ziel: Optimaler Entscheidungsbaum.
  - Maximum Likelihood (ML): Daten möglichst gut erklären.
  - Maximum A-Posteriori (MAP): Daten möglichst gut erklärt & geringe Komplexität (wenig Knoten/Kanten).
    - Leichter interpretierbar.
    - Bessere Generalisierungsfähigkeit.
    - Entscheidungen in den Blättern stützen sich auf mehr Beispiele.
- Problem: Anzahl binärer Entscheidungsbäume der Tiefe $t$ für $m$ Attributen ist $O(m^{2^t})$; kleinsten konsistenten Baum finden ist NP-hart!

# Entscheidungsbäume

## Lernen von Entscheidungsbäumen (nominale Attribute)

- Ansatz: Greedy-Suche (z.B. Top-Down-Suche).
- Beispiel: Klassifikationsbaum für nominale Attribute.

```
BuildTree(Instanzen,Attribute)
  IF Alle Instanzen sind aus einer Klasse THEN
    RETURN (Blatt mit Klasse)
  IF Attribute = ∅ THEN
    RETURN (Blatt mit häufigster Klasse)
  Wähle bestes Attribute A ∈ Attribute als Wurzel W
  FOR Alle Belegungen v von A
    Erzeuge Kante (mit Bedingung A = v) zwischen Wurzel und
    BuildTree({x ∈ Instanzen mit x.A = v}, Attribute \ {A})
  RETURN (Baum mit Wurzel W)
```

Welches Attribut ist das Beste?

# Entscheidungsbäume

## Lernen von Entscheidungsbäumen (nominale Attribute)

- Splitting-Kriterium („bestes Attribut“ finden):
  - Daten $D = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), ..., (\mathbf{x}_n, y_n)\}$ partitionieren bzgl. Attribut $A$ (mit $k$ möglichen Belegungen): $\{D_1, D_2, ..., D_k\}$.
  - Ziel: „Unsicherheit“ (Entropie) über das Klassenlabel durch Partitionierung verringern.
- Entropie: $\mathrm{H}_Z = \mathrm{E}[h(Z)]$
  - Theoretische Verteilung der Zufallsvariable $Z$ (gegeben durch Verteilungsfunktion): $\mathrm{H}_Z = -\int p(z) \log p(z) \partial z$
  - Empirische Verteilung der Zufallsvariable $Z$ (gegeben durch Datenpunkte/Instanzen): $\mathrm{H}_Z = -\sum_z p(z) \log p(z)$

# Entscheidungsbäume

## Lernen von Entscheidungsbäumen (nominale Attribute)

- Entropie über Klassenlabel vor Partitionierung:

$$\mathrm{H}_{Y\sim D} = -\sum_{y\in\{+1,-1\}} p_D(y)\log p_D(y)$$

- Erwartete Entropie über Klassenlabel nach Partitionierung:

$$\mathrm{E}\left[\mathrm{H}_{Y\sim D_i}\right] = \sum_{i=1}^{k} \frac{|D_i|}{|D|}\mathrm{H}_{Y\sim D_i}$$

- Erwartete Verringerung der Entropie (*Information Gain*):

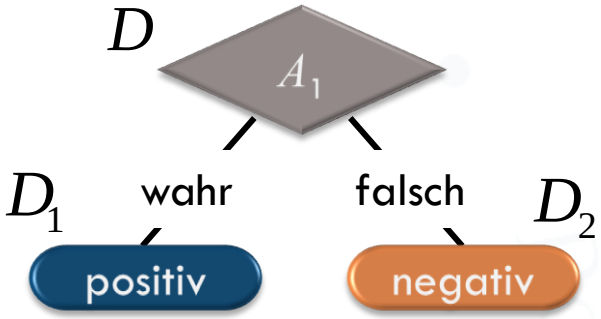
$$\mathrm{IG}_{Y,\{D_1,\ldots,D_k\}} = \mathrm{H}_{Y\sim D} - \mathrm{E}\left[\mathrm{H}_{Y\sim D_i}\right]$$

# Entscheidungsbäume

## Lernen von Entscheidungsbäumen (nominale Attribute)

- Beispiel: Partitionierung der Daten $D$ bzgl. binären Attributs $A_1$ in $D_1$ und $D_2$.

$$\mathrm{H}_{Y\sim D} = -\sum_{y\in\{+1,-1\}} p_D(y)\log p_D(y)$$




$$\mathrm{H}_{Y\sim D_1} = -\sum_{y\in\{+1,-1\}} p_{D_1}(y)\log p_{D_1}(y)$$

$$\mathrm{H}_{Y\sim D_2} = -\sum_{y\in\{+1,-1\}} p_{D_2}(y)\log p_{D_2}(y)$$

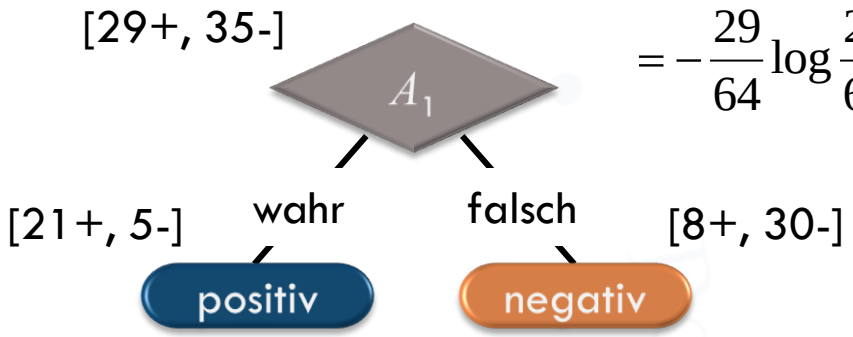
# Entscheidungsbäume

## Lernen von Entscheidungsbäumen (nominale Attribute)

- Beispiel: Partitionierung der Daten $D$ bzgl. binären Attributs $A_1$ in $D_1$ und $D_2$.

$$H_{Y \sim D} = -\sum_{y \in \{+1,-1\}} p_D(y) \log p_D(y)$$

$$= -\frac{29}{64}\log\frac{29}{64} - \frac{35}{64}\log\frac{35}{64} = 0,994$$




$$H_{Y \sim D_1} = -\sum_{y \in \{+1,-1\}} p_{D_1}(y) \log p_{D_1}(y)$$

$$= -\frac{21}{26}\log\frac{21}{26} - \frac{5}{26}\log\frac{5}{26} = 0,706$$

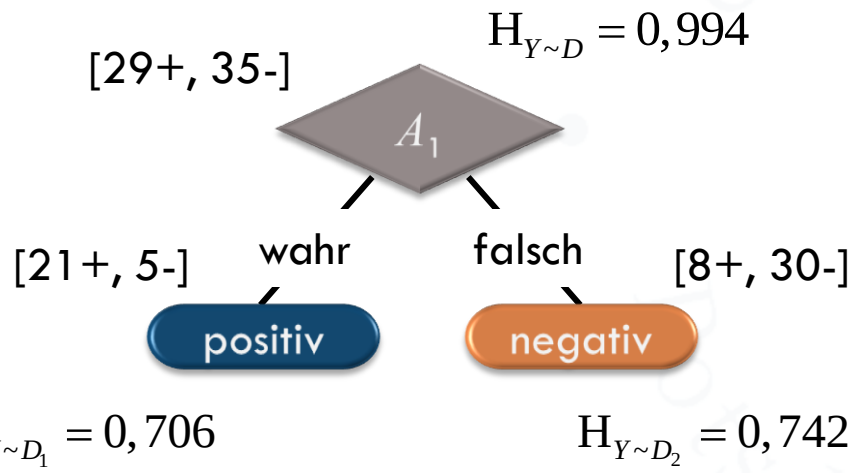
$$H_{Y \sim D_2} = -\sum_{y \in \{+1,-1\}} p_{D_2}(y) \log p_{D_2}(y)$$

$$= -\frac{8}{38}\log\frac{8}{38} - \frac{30}{38}\log\frac{30}{38} = 0,742$$

# Entscheidungsbäume

## Lernen von Entscheidungsbäumen (nominale Attribute)

- Beispiel: Partitionierung der Daten $D$ bzgl. binären Attributs $A_1$ in $D_1$ und $D_2$.




$$IG_{Y,\{D_1,\ldots,D_k\}} = H_{Y\sim D} - E\left[H_{Y\sim D_i}\right] = 0,994 - \left(\frac{26}{64}\cdot 0,706 + \frac{38}{64}\cdot 0,742\right) = 0,266$$

# Entscheidungsbäume

## Lernen von Entscheidungsbäumen (nominale Attribute)

- *Information Gain* abhängig von Anzahl & Größe der $k$ Partitionen: $\mathrm{IG}_{Y,\{D_1,\ldots,D_k\}} = \mathrm{H}_{Y\sim D} - \mathrm{E}\left[\mathrm{H}_{Y\sim D_i}\right]$

- Beispiel: ID der $n$ Beispiele als Attribut
  $\Rightarrow$ Jedes Beispiel ist eine Partition ($k = n$).
  $\Rightarrow \mathrm{E}\left[\mathrm{H}_{Y\sim D_i}\right] = 0 \Rightarrow \mathrm{IG}_{Y,\{D_1,\ldots,D_k\}}$ maximal.

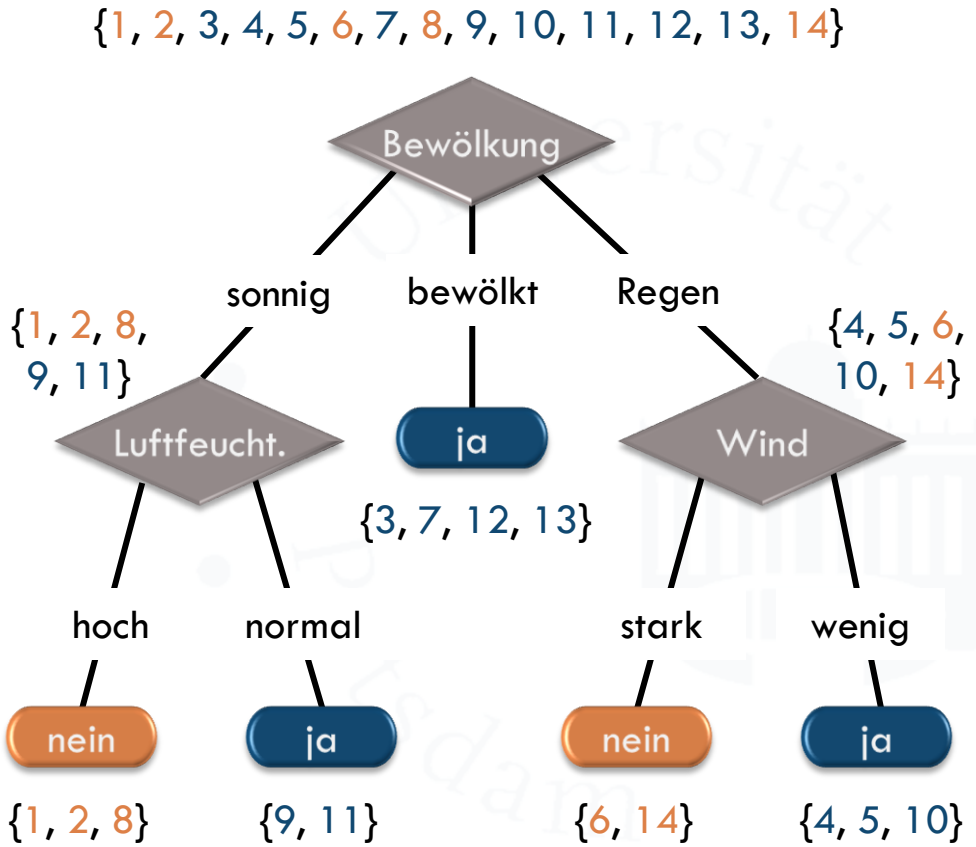
- Information *Gain Ratio* korrigiert diesen Bias:

$$\mathrm{GR}_{Y,\{D_1,\ldots,D_k\}} = \frac{\mathrm{IG}_{Y,\{D_1,\ldots,D_k\}}}{\mathrm{H}_{\{D_1,\ldots,D_k\}}} \qquad \mathrm{H}_{\{D_1,\ldots,D_k\}} = -\sum_{i=1}^{k} \frac{|D_i|}{|D|} \log \frac{|D_i|}{|D|}$$

# Entscheidungsbäume

## Lernen von Entscheidungsbäumen (nominale Attribute)

| Tag | Bewölkung | Temp. | Luftfeucht. | Wind | Spielen? |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | sonnig | warm | hoch | wenig | nein |
| 2 | sonnig | warm | hoch | stark | nein |
| 3 | bedeckt | warm | hoch | wenig | ja |
| 4 | Regen | mild | hoch | wenig | ja |
| 5 | Regen | kühl | normal | wenig | ja |
| 6 | Regen | kühl | normal | stark | nein |
| 7 | bedeckt | kühl | normal | stark | ja |
| 8 | sonnig | mild | hoch | wenig | nein |
| 9 | sonnig | kühl | normal | wenig | ja |
| 10 | Regen | mild | normal | wenig | ja |
| 11 | sonnig | mild | normal | stark | ja |
| 12 | bedeckt | mild | hoch | stark | ja |
| 13 | bedeckt | warm | normal | wenig | ja |
| 14 | Regen | mild | hoch | stark | nein |

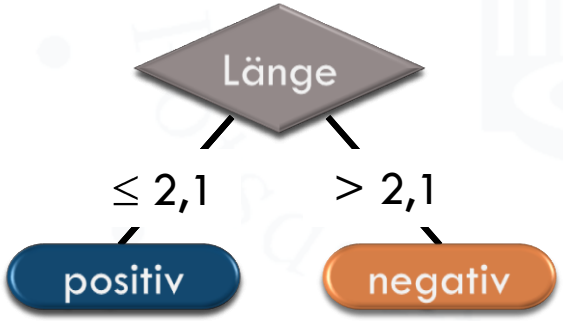


# Entscheidungsbäume

## Lernen von Entscheidungsbäumen (numerische/ordinale Attribute)

- Partitionierung bzgl. Attribut mit unendlichen Wertebereich?
- Idee: Endliche Menge an Instanzen
  $\Rightarrow$ Endliche Menge an binären Partitionierungen.
- Beispiel:

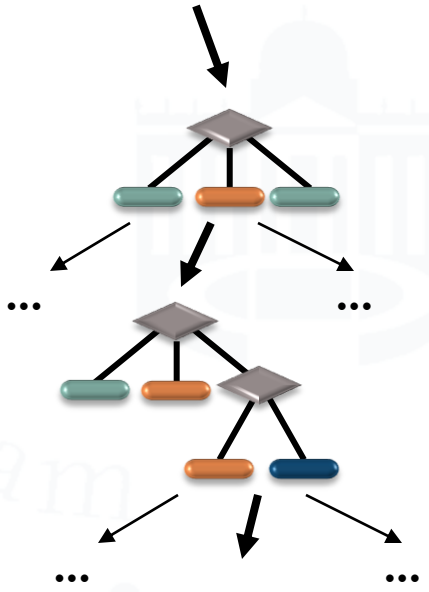
| ID | Länge | ... | Label |
|---|---|---|---|
| 1 | 2,1 | ... | - |
| 2 | 3,7 | ... | - |
| 3 | 1,5 | ... | + |



# Entscheidungsbäume

## Erweiterungen

- Pruning: Knoten nicht weiterentwickeln bzw. zusammenfassen falls zu wenig Beispiele.
- Backtracking: Testattribut ändern falls Entropie in den Blättern zu hoch.
- Anderes Qualitätsmaß für Partitionierung (z.B. Gini-Index, Reduktion des MSE).
- Komplexere Partitionierungskriterien (z.B. Linearkombination von Attributen).
- Komplexere Modelle in den Blättern (z.B. lineare Regression).



# Entscheidungsbäume

## Algorithmen

- Klassifikation, d.h. Vorhersage nominaler Zielgröße:
  - Nominale Attribute: ID3
  - Numerische Attribute & Pruning: C4.5
  - Skalierbar für große Datenbanken: SLIQ
- Regression, d.h. Vorhersage numerischer Zielgröße:
  - Regressionsbäume (konstante Werte in Blättern): CART
  - Modellbäume (Modelle in den Blättern).

# Zusammenfassung

- Entscheidungsbäume geeignet für Klassifikations- & Regressionsprobleme.
  - Geeignet bei wenigen binären/nominalen Attributen.
- Lernen von Entscheidungsbäumen durch Greedy-Suche im Raum aller Entscheidungsbäume.
  - Partitionierungskriterium ($=, \leq, >, \ldots$).
  - Qualitätsmaß für Partitionierung (IG, GR, Gini, MSE, …).
  - Erweiterungen: Backtracking, Pruning, …
- Gefundene Lösung lokal aber i.A. nicht global optimal!