INTELLIGENTE DATENANALYSE IN MATLAB

Evaluation & Exploitation von Modellen

Michael Brückner/Tobias Scheffer

Überblick

- Schritte der Datenanalyse:

Daten-vorverarbeitung → **Problemanalyse** → **Problemlösung** → **Anwendung der Lösung**

Daten-vorverarbeitung

- Aggregation und Selektion von Daten.
- Integration und Säuberung der Daten.
- Feature-Extraktion.

Problemanalyse

- Bestimmen von gegeb./gesuchten Größen.
- Wahl des Performanzmaß/ Zielkriteriums.
- Modellraum und Modellannahmen.

Problemlösung

- Algorithmen für das Optimieren des Zielkriteriums finden.
- Implementieren der Algorithmen.

Anwendung der Lösung

- Modell-Selektion & -Anpassung.
- Training & Evaluation des Modells auf gegebenen Daten.
- Vorhersage für neue Daten.

Überblick

- Evaluation von Lernverfahren.
- Selektion und Anpassung von Modellen.
- Evaluation von Klassifikatoren.
- Exploitation von Modellen.

Evaluation von Lernverfahren

- Ziel: Qualitätsbewertung der Modelle eines Lernverfahrens.
  - Nachdem wir Problem analysiert haben und Verfahren identifiziert & implementiert haben.
- Qualität eines Modells: Wie gut sind die Vorhersagen des Modells?
  - Was genau heißt „gut“?
  - Wie berechnet/schätzt man die Genauigkeit der Vorhersagen (für zukünftige Daten)?

Evaluation von Lernverfahren

Problemstellung

- Gegeben:
  - Repräsentative Evaluierungsdaten E mit bekannter Zielgröße.
  - Bewertungsmaß (Verlustfunktion) welche Qualität einer Vorhersage misst, z.B.

    Muss nicht identisch sein zur Verlustfunktion des Lernverfahrens

    - Klassifikation: Anzahl falsch klassifizierter Beispiele (Fehlerrate).

      $$l(y^{prediction}, y) = \left[y^{prediction} \neq y \right]$$

    - Regression: Mittlerer quadratischer Fehler.

      $$l(y^{prediction}, y) = (y^{prediction} - y)^2$$

    - Ranking: Mittlerer Abstand zw. echter und vorhergesagter Position.

Evaluation von Lernverfahren

Problemstellung

- Eingabe: Lernverfahren welches ein Modell h ausgibt.
- Ziel: Bewertung der mittleren Qualität des Lernverfahrens.
  - Theoretischer Mittelwert des Verlusts auf der Testverteilung:

$$R_{theo} = \mathrm{E}[l(h(X),Y)] = \int p(x,y) l(h(x),y) \mathrm{d}(x,y)$$

  - Aber: Testverteilung $p(X,Y)$ unbekannt!
  - Evaluierungsdaten $E = \{(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$ sind repräsentativ aus $p(X,Y)$ gezogen $\Rightarrow$ theoretischen Mittelwert durch empirischen Mittelwert (empirisches Risiko) schätzen:

$$R_{emp} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} l(h(x_i), y_i)$$

Evaluation von Lernverfahren
Problemstellung

- Welche Daten für Evaluation verwenden:
  - Daten auf welchen das Modell trainiert wurde?

    Nein! Empirischer Verlust auf diesen Daten meist 0.
  - Daten auf welche das Modell angewendet werden soll?

    Nein! Zielgröße für diese Daten unbekannt.
- Idee:
  - Gelabelte Trainingsdaten aufteilen in
    - *Lerndaten* zum Lernen eines Modells, und
    - *Evaluierungsdaten* zum Evaluieren des Modells.

Evaluation von Lernverfahren

Aufteilung der Trainingsdaten: Holdout Validation

- Gegeben: Trainingsdaten $D = \{(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)\}$.
- Aufteilen der Daten in Lerndaten $L = \{(x_1, y_1), \ldots, (x_k, y_k)\}$ und Evaluierungsdaten $E = \{(x_{k+1}, y_{k+1}), \ldots, (x_n, y_n)\}$.
- Lerne Modell h' auf Daten L und bestimme empirisches Risiko auf Daten E: $R_{emp}(h') = \frac{1}{n-k} \sum_{i=k+1}^{n} l(h'(x_i), y_i)$
- Lerne Modell h auf Daten D.
- Ausgabe: Modell h mit Risiko-Schätzer $\hat{R}_{emp}(h) = R_{emp}(h')$.

Pessimistische Schätzung

Evaluation von Lernverfahren

Aufteilung der Trainingsdaten: Cross Validation

- Gegeben: Trainingsdaten $D = \{(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$.
- Aufteilen der Daten in p Blöcke $D_i = \{(x_{i_1}, y_{i_1}), \dots, (x_{i_k}, y_{i_k})\}$ mit $D = \bigcup_i D_i$ und $D_i \cap D_j = \emptyset$ für 2 verschiedene Blöcke.
- Wiederhole für $i = 1 \dots p$
  - Trainiere Modell h_i auf Daten $D \backslash D_i$.
  - Berechne empirisches Risiko auf D_i: $R_{emp}(h_i) = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^{k} l(h_i(x_{i_j}), y_{i_j})$
- Lerne Modell h auf Daten D.
- Ausgabe: Modell h mit mittlerem Risiko $\hat{R}_{emp}(h) = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^{p} R_{emp}(h_i)$.

Evaluation von Lernverfahren

Aufteilung der Trainingsdaten: Leave-One-Out Validation

- Gegeben: Trainingsdaten $D=\{(x_1,y_1),\ldots,(x_n,y_n)\}$.
- Spezialfall von Cross Validation mit $D_i=(x_i,y_i)$.
- Wiederhole für $i=1\ldots n$
  - Trainiere Modell h_i auf Daten $D\backslash(x_i,y_i)$.
  - Berechne empirisches Risiko für (x_i,y_i): $R_{emp}(h_i)=l(h_i(x_i),y_i)$
- Lerne Modell h auf Daten D.
- Ausgabe: Modell h mit Loo-Fehler $\hat{R}_{emp}(h)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}R_{emp}(h_i)$.
  - I.d.R. aufwendig zu berechnen.
  - Für einige Probleme existiert analytische Lösung für Loo-Fehler.

Evaluation von Lernverfahren

Signifikanz des empirischen Risikos

- Wie gut ist der Schätzer $\hat{R}_{emp}(h)$ für das echte Risiko $R_{theo}(h)$?
- Idee: m-malige Validation ergibt m Schätzwerte für empirisches Risiko mit Mittelwert μ_R.
  - Standardfehler (Standardabw. des Schätzers): $\sigma_R = \sqrt{\frac{\mu_R \;\; 1-\mu_R}{m-1}}$
  - Test der Hypothese $\left|R_{theo}(h) - \hat{R}_{emp}(h)\right| \leq \varepsilon$:

$$p \;\; \left|R_{theo}(h) - \hat{R}_{emp}(h)\right| \leq \varepsilon \;\; = 1 - (p(R_{theo}(h) - \hat{R}_{emp}(h) > \varepsilon) + p(\hat{R}_{emp}(h) - R_{theo}(h) > \varepsilon))$$

$$\approx 1 - 2\Phi \;\; -\varepsilon\sigma_R^{-2}$$

Dichtefunktion der Normalverteilung

Evaluation von Lernverfahren

Signifikanz des empirischen Risikos

- Test der Hypothese $\left|R_{theo}(h) - \hat{R}_{emp}(h)\right| \leq \varepsilon$ mit Signifikanzniverau 5% (*signifikantes Ereignis*).
- Beispiel: 10-malige Wiederholung einer Leave-One-Out-Validation (auf 10 verschiedenen Datensätzen).
  - 10 Schätzwerte mit Mittelwert $\mu_R = 8\% \Rightarrow \sigma_R = 0{,}09$.
  - Gesucht ist ε mit Konfidenzintervall $1-\delta$ und $\delta = 5\%$:

$$\begin{aligned} p\left(\left|R_{theo}(h) - \hat{R}_{emp}(h)\right| \leq \varepsilon\right) &\geq 0{,}950 \\ 1 - 2\Phi(-0{,}09^{-2} \cdot \varepsilon) &\geq 0{,}950 \\ \Phi(123{,}3 \cdot \varepsilon) &\geq 0{,}975 \end{aligned} \quad \Longrightarrow \quad \begin{aligned} \Phi(z) &\geq 0{,}975 \\ z &= 0{,}835 \\ \varepsilon &= \frac{z}{123{,}3} = 0{,}68\% \end{aligned} \quad \Longrightarrow \mu_R = 8{,}0 \pm 0{,}68\%$$

Selektion und Anpassung von Modellen

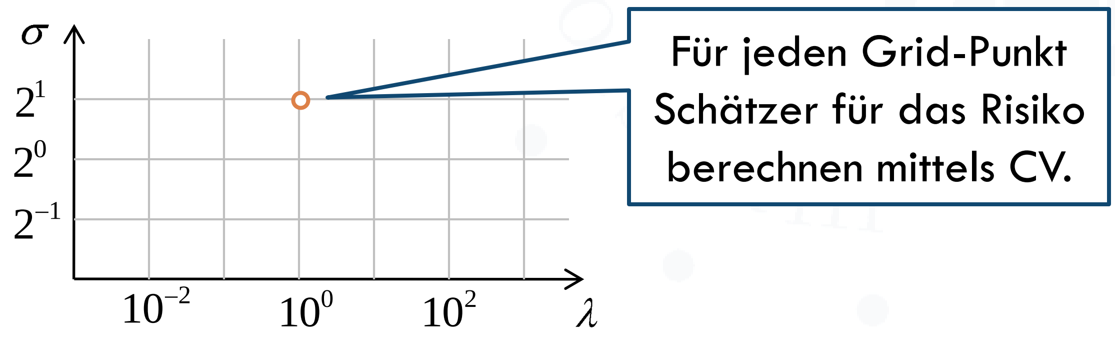
- Ziel: Hohe Qualität des Modells durch Selektion/ Anpassung des Modells bzw. Lernverfahrens.

- Anpassen von
  - Modellkomponenten (z.B. Verlustfunktion/Regularisierung, Splitting-Kriterium).
  - Parameter des Lernverfahrens (z.B. maximale Anzahl Iterationen).
  - Parameter der Verlustfunktion (z.B. Klassen-Kosten).
  - Parameter des Regularisierers (z.B. λ des Ω_2-Regularsierers).
  - Parameter der Daten-Transformation bzw. des Kernels (z.B. σ des RBF-Kernels).

Selektion und Anpassung von Modellen

Grid-Suche

- Idee:
  - Stichprobenartig aus der Menge aller möglichen Parameter bzw. Parameterkombinationen ziehen.
  - Für jede gezogene Kombination mittels Cross-Validation (CV) Schätzer für $R_{theo}(h)$ bestimmen.
  - Parameter wählen mit minimalem Risiko.
- Beispiel für Parameter-Auswahl: *Grid-Suche*



Selektion und Anpassung von Modellen
Aufteilung der Lerndaten

- Welche Daten für Modell-Anpassung verwenden:
  - Daten auf welchen das Modell evaluiert wird?

    Nein! Evaluierung des Modells wäre zu optimistisch.
- Idee:
  - Lerndaten aufteilen in Daten für …
    - *Learning*: zum Lernen eines Modells mit festen Parametern und
    - *Tuning*: zum Anpassen der Modellparameter.
  - Art der Aufteilung:
    - Holdout-Validation.
    - Cross-Validation.
    - Loo-Validation.

Selektion und Anpassung von Modellen

Aufteilung der Lerndaten

- Beispiel: Geschachtelte Cross-Validation.
  - Aufteilen der Trainingsdaten D in p Blöcke D_i.
  - Wiederhole für $i = 1 \ldots p$
    - Aufteilen der Lerndaten $L=D \backslash D_i$ in q Blöcke L_j.
    - Wiederhole für alle Modell-Parameterkombinationen
      - Wiederhole für $j = 1 \ldots q$
        - Trainiere für aktuelle Parameterkombination ein Modell auf $L \backslash L_j$.
        - Berechne empirisches Risiko auf L_j.
      - Bestimme mittleres empirisches Risiko für aktuelle Parameterkombination.
    - Trainiere für beste Parameterkombination Modell h_i auf $D \backslash D_i$.
    - Berechne empirisches Risiko auf D_i.
  - Trainiere für beste Parameterkombination Modell h auf D.

Evaluation von Klassifikatoren

- Ziel: Bewertung eines konkreten Modells für binäre Klassifikation.
  - Nachdem wir Problem analysiert haben, Verfahren identifiziert & implementiert haben, und Klassifikations-Modell (Klassifikator) trainiert haben.
- Qualität eines Klassifikators:
  - Precision/Recall-Analyse.
  - ROC-Analyse.

Evaluation von Klassifikatoren

Definitionen (für binäre Klassifikation)

- Entscheidungsfunktion: Ordnet einer Eingabe $\mathbf{x}$ einen numerischen Wert zu, $f:\mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$.
  - Beispiel: $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{w}$
- Klassifikationsfunktion: Ordnet einem Entscheidungs-funktionswert $f(\mathbf{x})$ ein Klassenlabel zu, $g:\mathbb{R} \rightarrow Y$.
  - Beispiel: $g(f(\mathbf{x})) = sign(f(\mathbf{x}) + \theta)$

Klassifikations-Schwellwert

- Kontingenztabelle:

	Tatsächlich positiv	Tatsächlich negativ
Positiv vorhergesagt	TP (true positives)	FP (false positives)
Negativ vorhergesagt	FN (false negatives)	TN (true negatives)

Evaluation von Klassifikatoren

Definitionen (für binäre Klassifikation)

- Beispiel HIV-Erkrankungen in Deutschland:
  - In Deutschland leben 82.099.232 Menschen.
  - Davon sind 63.554 Menschen an HIV erkrankt.
  - Ein HIV-Test ergab (hochgerechnet auf alle Menschen):

	Tatsächlich positiv	Tatsächlich negativ	*Summe*
Positiv vorhergesagt	63.487	114.276	*177.763*
Negativ vorhergesagt	67	81.921.402	*81.921.469*
Summe	*63.554*	*82.035.678*	*82.099.232*

False Negatives:
fälschlicherweise als
HIV-negativ klassifiziert

False Positives:
fälschlicherweise als
HIV-positiv klassifiziert

Evaluation von Klassifikatoren

Qualität eines Klassifikators

- Gegeben:
  - <u>Repräsentative</u> Evaluierungsdaten E mit <u>bekannter</u> Zielgröße.
  - Entscheidungs- und Klassifikationsfunktion.
- Gesucht:
  - Bewertung der Entscheidungsfunktion.
    - Beispiele: Precision/Recall-Kurve, ROC-Kurve.
  - Bewertung der Klassifikationsfunktion (Entscheidungsfunktion für einen konkreten Schwellwert).
    - Beispiele: Fehlerrate, F-Maß.

Evaluation von Klassifikatoren

Qualität eines Klassifikators

- Für jeden Klassifikations-Schwellwert ergibt sich eine Kontigenztabelle, d.h. Werte für *TP*, *FP*, *TN* und *FN*.
- Unterschiedliche Bewertungsmaße für einen Klassifikator (für einen konkreten Schwellwert):
  - Trefferquote (Recall): $$\frac{TP}{TP+FN} = \frac{63.487}{63.487+67} = 99,89\%$$
  - Genauigkeit (Precision): $$\frac{TP}{TP+FP} = \frac{63.487}{63.487+114.276} = 35,71\%$$
  - Ausfallquote (Fallout): $$\frac{FP}{TN+FP} = \frac{114.276}{81.921.402+114.276} = 0,14\%$$

Evaluation von Klassifikatoren

Qualität eines Klassifikators

	Tatsächlich positiv	Tatsächlich negativ	*Summe*
Positiv vorhergesagt	63.487	114.276	*177.763*
Negativ vorhergesagt	67	81.921.402	*81.921.469*
Summe	*63.554*	*82.035.678*	*82.099.232*

- Trefferquote (Recall): $\frac{TP}{TP+FN} = \frac{63.487}{63.487+67} = 99,89\%$
- Genauigkeit (Precision): $\frac{TP}{TP+FP} = \frac{63.487}{63.487+114.276} = 35,71\%$
- Ausfallquote (Fallout): $\frac{FP}{TN+FP} = \frac{114.276}{81.921.402+114.276} = 0,14\%$

Evaluation von Klassifikatoren

Recall versus Precision

- Kombinierte Bewertungsmaße aus Recall und Precision:
  - Sensitivität (Sensitivity): Recall bzgl. positiver Beispiele.
  - Spezifität (Specificity): Recall bzgl. negativer Beispiele.
  - F-Maß (F-score): Harmonisches Mittel aus Precision & Recall.

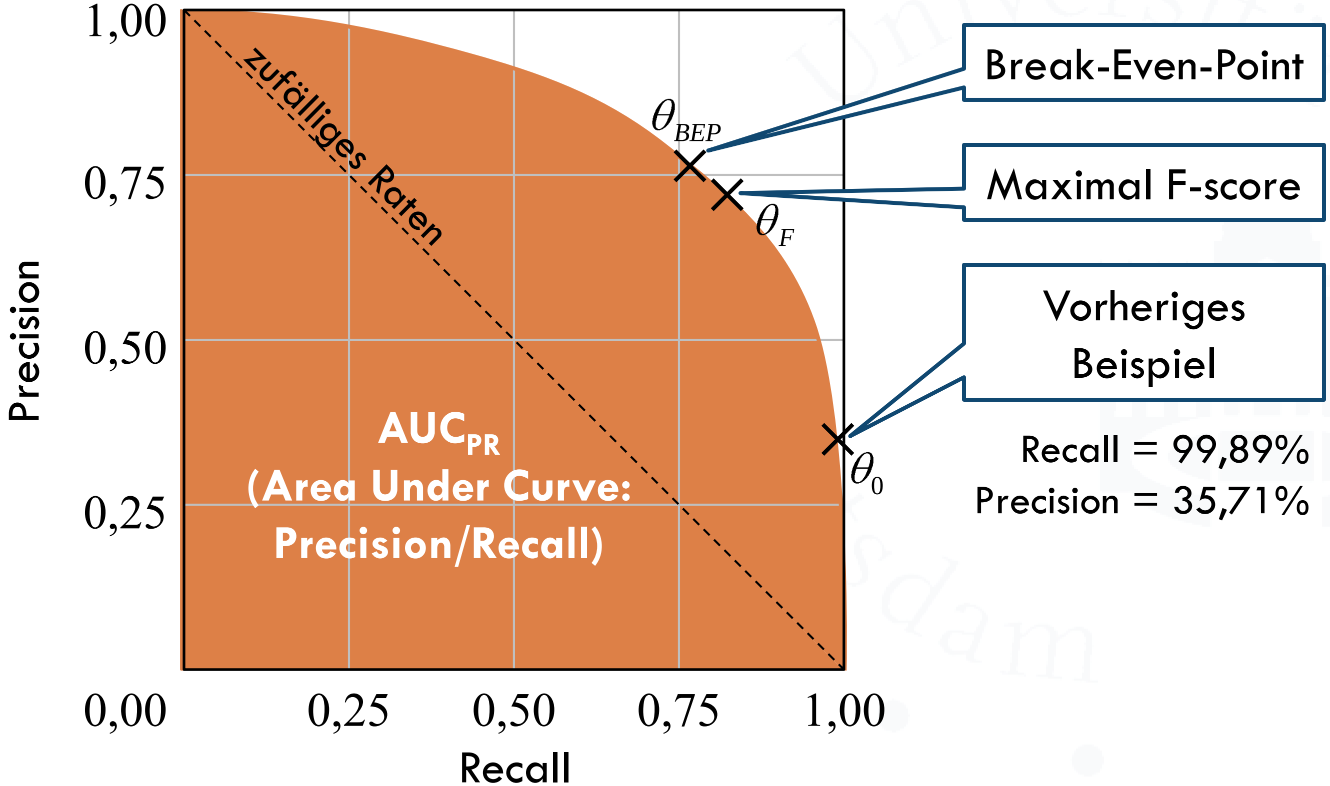
$$\text{F-score} = 2 \cdot \frac{\text{Precision} \cdot \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}} = 2 \cdot \frac{35,71\% \cdot 99,89\%}{35,71\% + 99,89\%} = 52,61\%$$

- Spezielle Schwellwerte θ:
  - Gewinnschwelle (Break-Even-Point): Schwellwert für welchen Precision = Recall.
  - F-Schwellwert (Maximal F-score): Schwellwert für welchen F-score maximal ist.

Evaluation von Klassifikatoren

Recall versus Precision

- Precision/Recall-Kurve: Precision vs. Recall für unterschiedliche Schwellwerte θ.



Evaluation von Klassifikatoren

Recall versus Fallout

- Receiver-Operating-Characteristic (ROC):
  - Bewertung der Entscheidungsfunktion unabhängig vom Schwellwert durch Fallout statt Precision.
  - Großer Schwellwert: Mehr positive Beispiel falsch klassifiziert.
  - Kleiner Schwellwert: Mehr negative Beispiel falsch klassifiziert.
- Fläche unter der ROC-Kurve (AUC_{ROC}) bewertet Entscheidungsfunktion.
  - Analog zur Fläche unter Precision/Recall-Kurve.

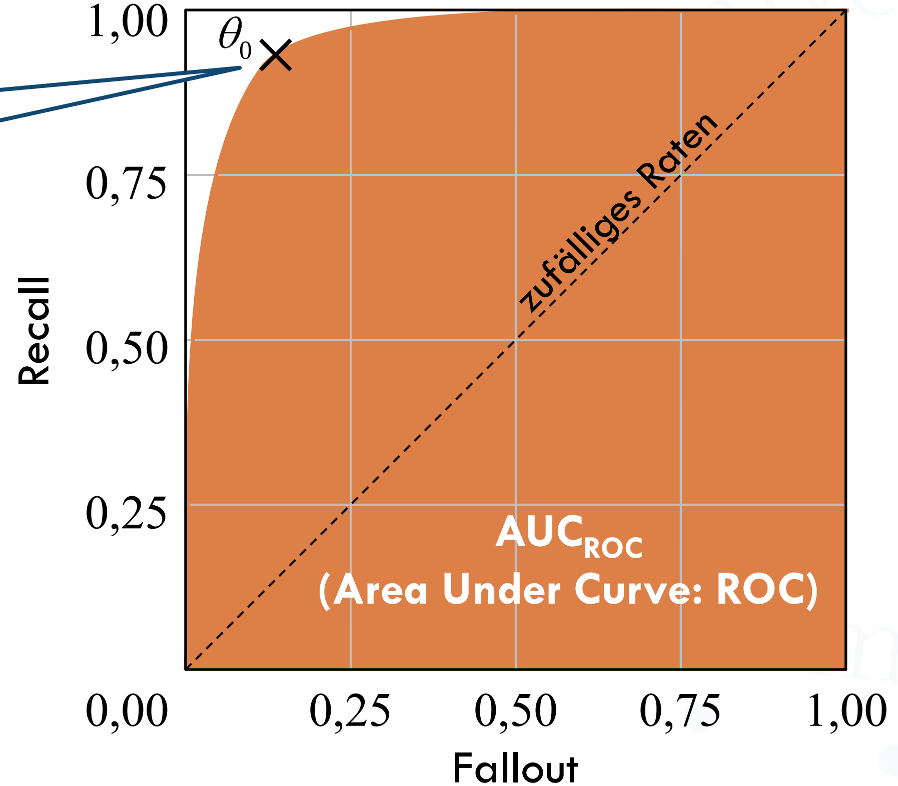
Evaluation von Klassifikatoren

Recall versus Fallout

- ROC-Kurve bzw. Recall/Fallout-Kurve: Recall (True Positives Rate) vs. Fallout (False Positives Rate).

Vorheriges Beispiel

Recall = 99,89%
Fallout = 0,14%



Evaluation von Klassifikatoren

Recall versus Fallout

- Algorithmus zur Bestimmung des AUC_{ROC}-Wertes.

AUC_ROC($\mathbf{f}$, $\mathbf{y}$)

Sortiere Paare (f_i, y_i)

aufsteigend nach f_i

Setze $TN = 0, FN = 0, AUC = 0$

FOR $i = 1 \ldots n$

IF $y_i > 0$ THEN

$FN = FN + 1$

$AUC = AUC + TN$

ELSE

$TN = TN + 1$

$AUC = AUC / (FN * TN)$

RETURN AUC

$\mathbf{f}$	Vektor mit n Entscheidungsfunktionswerten
$\mathbf{y}$	Vektor mit zugehörigen Klassenlabels

Exploitation von Modellen

- Anwenden von Modellen in der Praxis:
  - Einstellen von Modellparametern nach dem Lernen (z.B. Schwellwerte, Default-Klasse).
  - Kombination mehrerer gelernter Modelle (z.B. Verwendung mehrerer Spam-Filter).
  - Integration des Modells in bestehende Softwarearchitektur.
  - Monitoren der Qualität (Verteilung der Eingabedaten ändert sich oft über die Zeit $\Rightarrow$ Qualität verringert sich).
  - Sammeln neuer Trainingsdaten zur Verbesserung des Modells.

Zusammenfassung

- Qualität von Lernverfahren/Modellen messen…
  - Auf Evaluierungsdaten; nicht auf Trainingsdaten!
  - Signifikanz des Ergebnisses prüfen.
- Modell-Seleketion/-Anpassung…
  - Auf Tuningdaten; nicht auf Evaluierungsdaten!
  - Modellparameter z.B. durch Grid-Suche + Cross-Validation.
- Bewertung eines Klassifikators durch Recall, Precision, Fallout, F-Maß usw.
- Bewertung einer Entscheidungsfunktion durch Fläche unter der ROC-Kurve (oder Precision/Recall-Kurve).