UVRŠČANJE

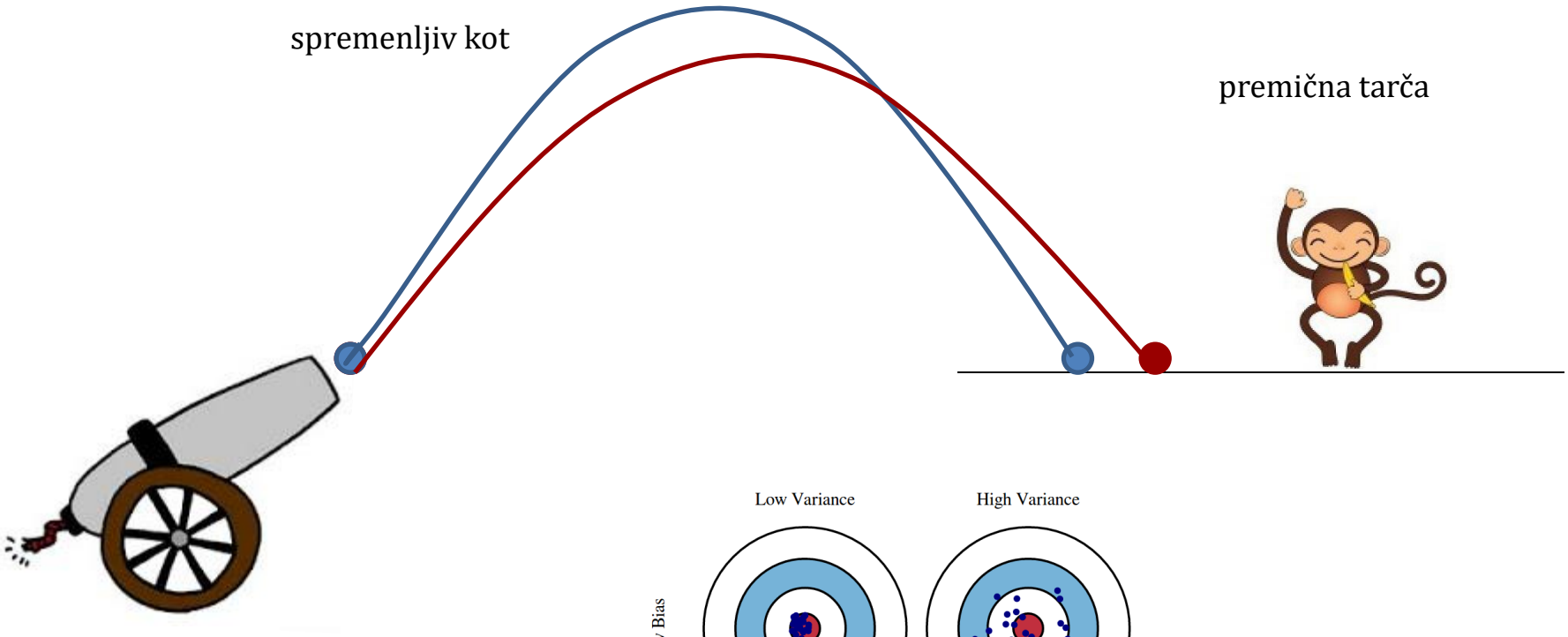
classification

doc. dr. Matej Guid

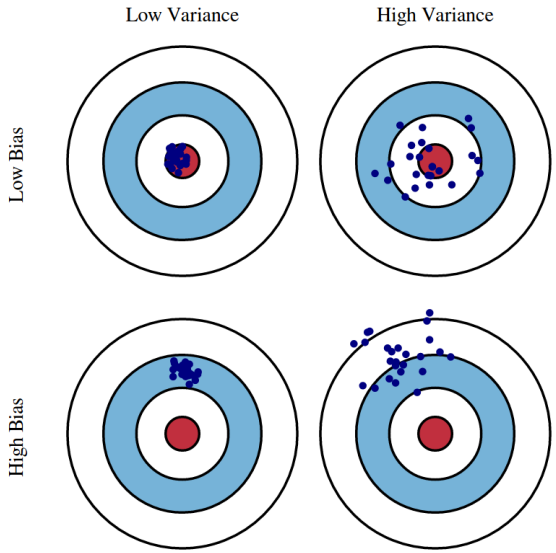
Fakulteta za računalništvo in informatiko
Univerza v Ljubljani

maj 2023

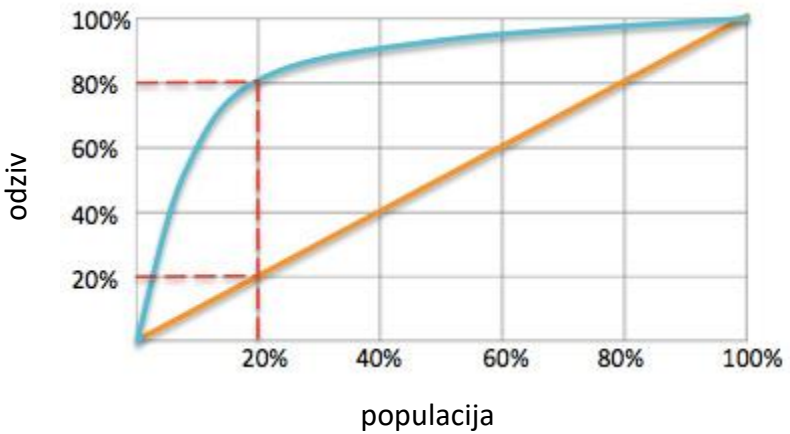
Odklon, varianca, šum



nepredvidljiva moč izstrelka



PRIMER S PODROČJA DIREKTNEGA MARKETINGA



promocija preko direktne pošte...

1.000.000 naslovov: odziv je 0.1% (1.000 odgovorov)

s pomočjo napovednega modela lahko rezultate izboljšamo...

200.000 naslovov: odziv je 0.4% (800 odgovorov)

25.000 naslovov: odziv je 0.8% (200 odgovorov)

Komu naj najprej pošljemo pošto?

Kako razvrstimo potencialne kupce?

Koliko pošiljk naj pošljemo, da maksimiziramo dobiček?

MERJENJE NAPAK PRI NAPOVEDIH

confusion matrix

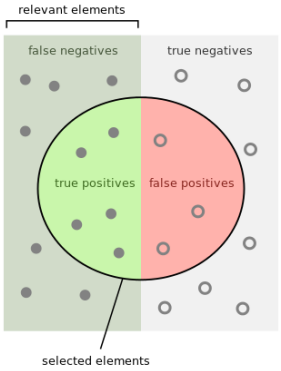
NAPOVED	RESNIČNOST: dobro	RESNIČNOST: slabo
dobra ocena	**TRUE POSITIVE** tp	**FALSE POSITIVE** fp
slaba ocena	**FALSE NEGATIVE** fn	**TRUE NEGATIVE** tn

natančnost
precision

vsi priporočeni izdelki

$$Precision = \frac{tp}{tp + fp} = \frac{|good\ movies\ recommended|}{|\text{all recommendations}|}$$

% priporočenih filmov, ki so res dobri

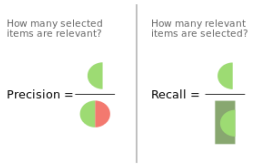


vsi dobri izdelki

$$Recall = \frac{tp}{tp + fn} = \frac{|good\ movies\ recommended|}{|all\ good\ movies|}$$

% priporočenih od vseh dobrih filmov

priklic
recall

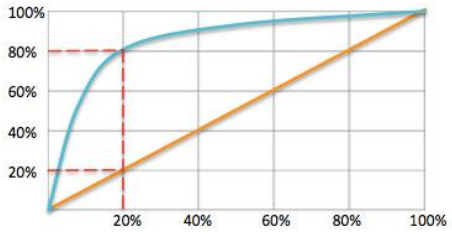


klasifikacijska točnost $= \frac{TP + TN}{P + N}$

Kaj pa „stroški“ napak?

Kaj je hujše: FP ali FN?

- banka: posoditi denar nekomu, ki ga ne vrača **ali** ne odobriti kredita?
- detekcija vlomov: sprožiti lažen alarm **ali** ne detektirati vloma?
- medicina: postaviti napačno diagnozo zdravemu **ali** bolnemu pacientu?
- marketing: poslati pošto nezainteresiranemu kupcu **ali** ne poslati pošte zainteresiranemu kupcu?



Kaj pa, če nimamo na voljo vseh podatkov o naslovnikih?

Kaj se lahko naučimo iz preteklih marketinških akcij?

Iz česa (iz katerih atributov) se lahko naučimo največ?

Kako oceniti, kako dober je naš klasifikator?

UVRŠČANJE ALI KLASIFIKACIJA

classification

imamo podano

množica podatkov ...

... opisana z značilkami (atributi) ...

... posamezni primeri pripadajo različnim razredom

dobiti želimo

klasifikacijski model oz. klasifikator, ki bo primere uvrstil v pravilen razred

Uspešnosti klasifikacije nikoli ne ocenjujemo na učnih primerih!

Množico primerov D zato najprej razdelimo:

- na množico učnih primerov D_L
- na množico testnih primerov D_T

$$D_L \cap D_T = \emptyset$$

$$D_L \cup D_T = D$$

učni podatki

testni podatki

OSNOVNE METODE VREDNOTENJA USPEŠNOSTI NAPOVEDOVANJA

prečno preverjanje reda k (*k-fold cross validation*)

izloči enega (leave-one-out) ... primerno za manjše množice podatkov

metoda stremena (*bootstrap*) ... iz množice N primerov z vračanjem naključno izberemo enako veliko množico za učenje, vse neizbrane primere uporabimo za testiranje...
vzorčenje, gradnja modela, vrednotenje... ponovimo tipično od 100 do 1000-krat

„Klasična“ napaka

Izbor metode in njenih parametrov, **klasična napaka:**

- na celotni množici primerov s prečnim preverjanjem ocenimo, pri kateri vrednosti parametrov (npr. k pri kNN) daje izbrana metoda najboljše rezultate
- nato poročamo o izračunani meri točnosti

Kaj je tu narobe?

Izbor optimalnih parametrov (tako kot gradnjo modela) je potrebno preveriti na neodvisni množici podatkov! Najprej notranje prečno preverjanje, nato zunanja zanka!

KLASIFIKATORJI

diskretni (oz. binarni) klasifikator

binary classifier

binarni → v primeru dveh razredov

P pozitivnih, N negativnih primerov, klasifikator (pravilno/napačno) določi razred

verjetnostni (oz. točkovalni) klasifikator

probabilistic classifier ... probability estimating... scoring

funkcija $f : X \rightarrow [0,1]$ ... vsak primer x preslika v realno vrednost

$f(x)$ ... točkovna ocena

prag (*threshold*) t ... primeri x, za katere velja $f(x) \geq t$ so klasificirani kot P, ostali kot N

vsak par (verjetnostni klasifikator, t) predstavlja binarni klasifikator

TP(t) in FP(t) sta monotono padajoči funkciji ... Zakaj?

s spreminjanjem vrednosti praga t dobimo **družino binarnih klasifikatorjev**

Analiza ROC

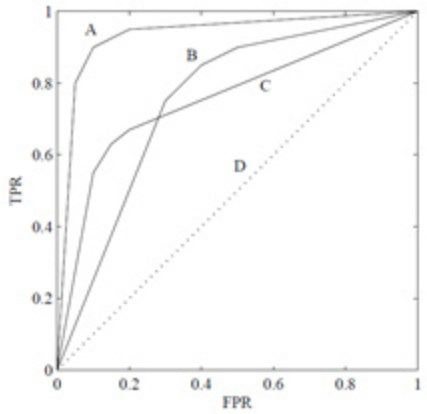
ROC (*Receiver Operating Characteristics*) ... karakteristika sprejemnika (iz zgodovine, II. svetovna vojna)

analiza ROC metoda za vrednotenje, primerjanje in izbiro klasifikatorjev

krivulja ROC krivulja na dvodimenzionalnem grafu..

prikazuje sposobnost klasifikatorja za izdajanje dobrih točkovnih ocen (*scores*)

ponazoritev kompromisa med
- pogostost zadetka (*hit rate*)
- pogostost lažnega alarma

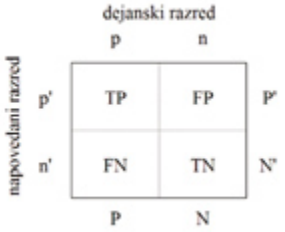


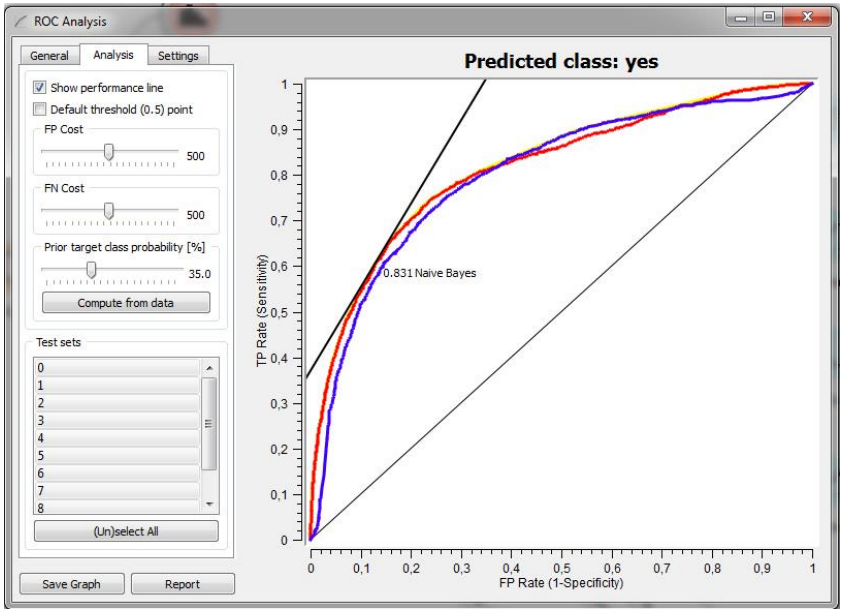
mera AUC (*Area Under the ROC Curve*) ... površina pod ROC krivuljo
primerjanje krivulj je lahko težavno... AUC povzema krivulje ROC v obliki številske informacije

ROC KRIVULJE

$$\text{senzitivnost} = TPR = \frac{TP}{P} = \frac{TP}{TP+FN}$$

$$\text{1 - specifičnost} = FPR = \frac{FP}{P} = \frac{FP}{TP+FN}$$

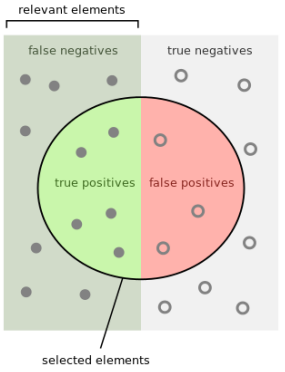


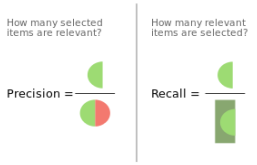


(0,0) ... (TPR = 0, FPR = 0) → klasifikator, ki nikoli ne napove pravilnega razreda

(0,1) ... (TPR = 1, FPR = 0) → klasifikator, ki vedno napove pravilen razred

klasifikatorji na diagonali → naključno ugibanje

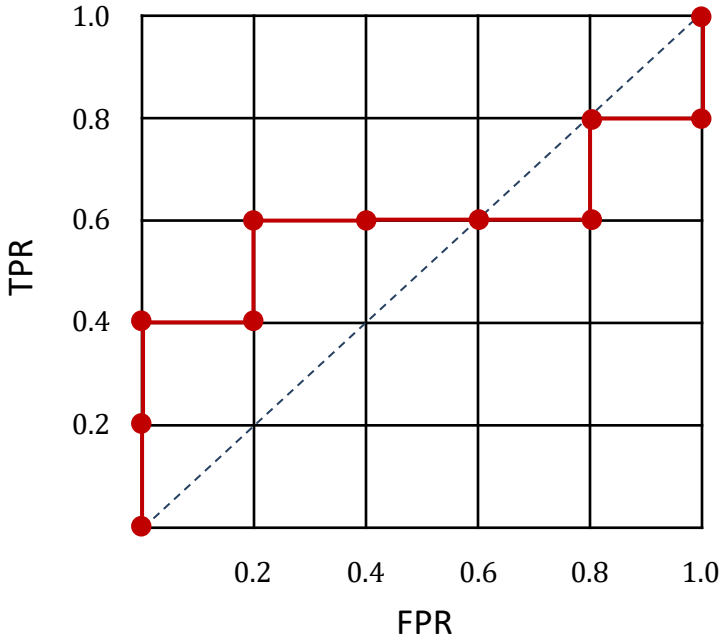




ROC krivulje so neodvisne od P/N razmerja (kaj to pomeni?) ... glej stolpca v kontingenčni tabeli...

Risanje ROC krivulj

Primer	razred	točke	TP	FP	TN	FN	TPR	FPR
		1.00	0	0	5	5	0	0
1	**+**	**0.95**	1	0	5	4	0.2	0
2	**+**	**0.93**	2	0	5	3	0.4	0
3	**-**	**0.87**	2	1	4	3	0.4	0.2
4	**+**	**0.85**	3	1	4	2	0.6	0.2
5	**-**	**0.85**	3	2	3	2	0.6	0.4
6	**-**	**0.85**	3	3	2	2	0.6	0.6
7	**-**	**0.76**	3	4	1	2	0.6	0.8
8	**+**	**0.53**	4	4	1	1	0.8	0.8
9	**-**	**0.43**	4	5	0	1	0.8	1
10	**+**	**0.25**	5	5	0	0	1	1



Potek risanja krivulje:

(0, 0) → (0.2, 0) → (0.4, 0) → (0.4, 0.2) → (0.6, 0.2) → (0.6, 0.2)
→ (0.6, 0.4) → (0.6, 0.6) → (0.6, 0.8) → (0.8, 0.8) → (0.8, 1) → (1, 1)

interpretacija AUC

verjetnost, da ima naključni pozitivni primer več točk od naključno izbranega negativnega primera

KLASIFIKACIJSKA TOČNOST IN ROC KRIVULJE

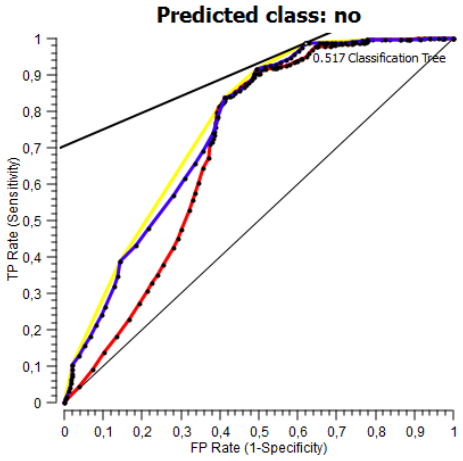
Kaj pa optimalna klasifikacijska točnost?

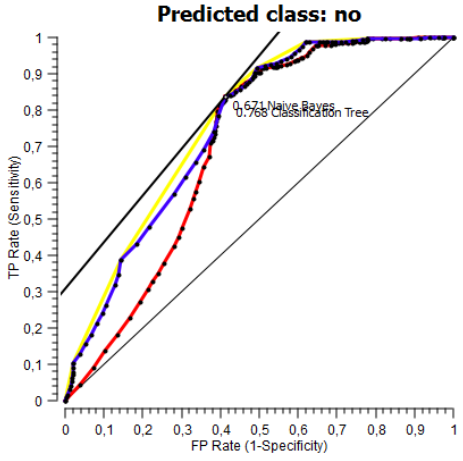
... celo verjetnostni klasifikator s popolno ROC ima optimalno klasifikacijsko točnost le v eni točki! levo zgoraj... (0,1)

$$\text{klasifikacijska točnost (CA)} = \frac{TP + TN}{P + N} = \frac{TPR * P + (1 - FPR) * N}{P + N}$$

izpeljemo črto, pri kateri so klasifikacijske točnosti enake:

$$TPR = \frac{CA * (P + N) - (1 - FPR) * N}{P} = \frac{N}{P} * FPR + \frac{CA * (P + N) - N}{P}$$



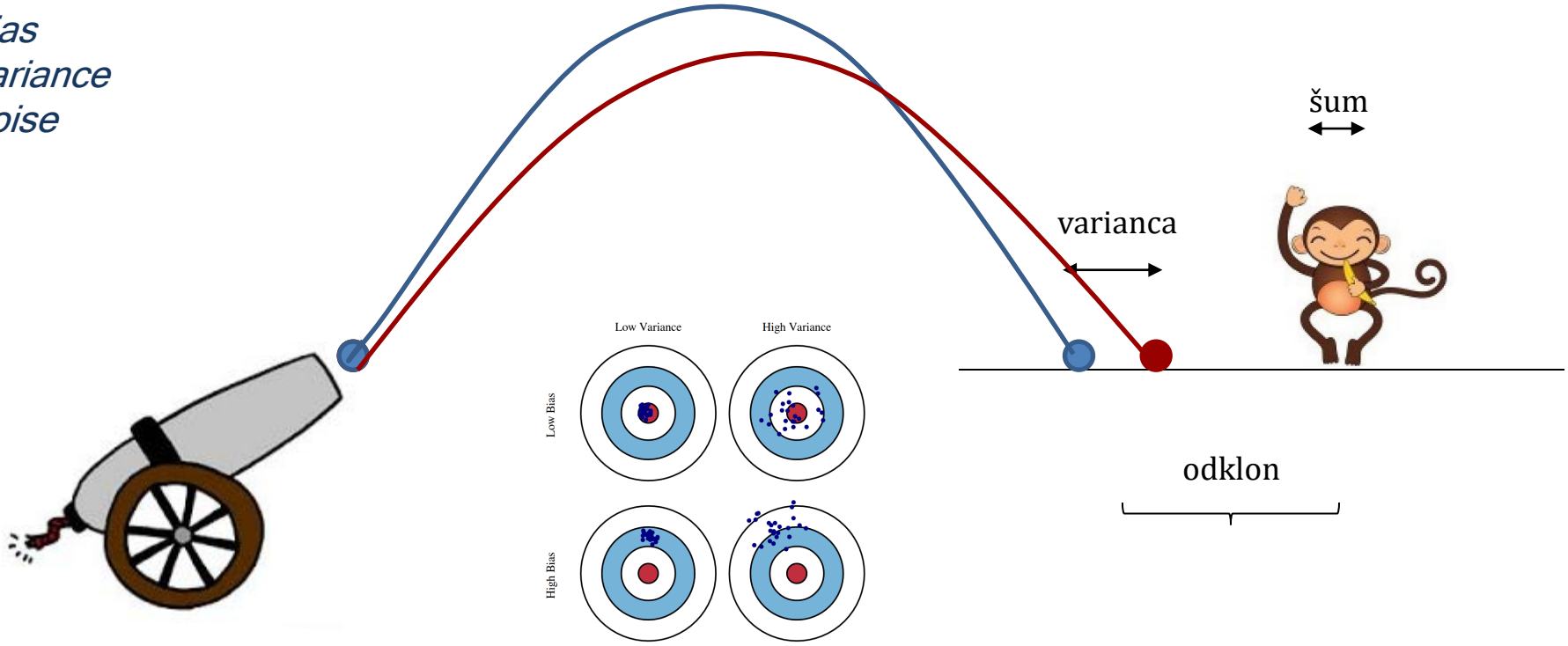


Kaj pa stroški FP in FN?

- dobimo paralelne črte, vsaka od njih predstavlja določeno klasifikacijsko točnost
- točka optimalne klasifikacijske točke je tista, kjer se srečata iso-performance tangenta in ROC krivulja
- želimo recept za določanje praga *t*, ki v obzir jemlje tudi stroške

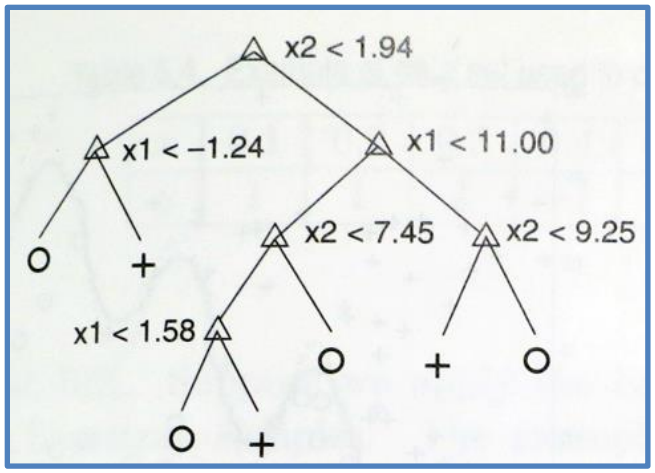
Odklon, varianca, šum

bias
variance
noise

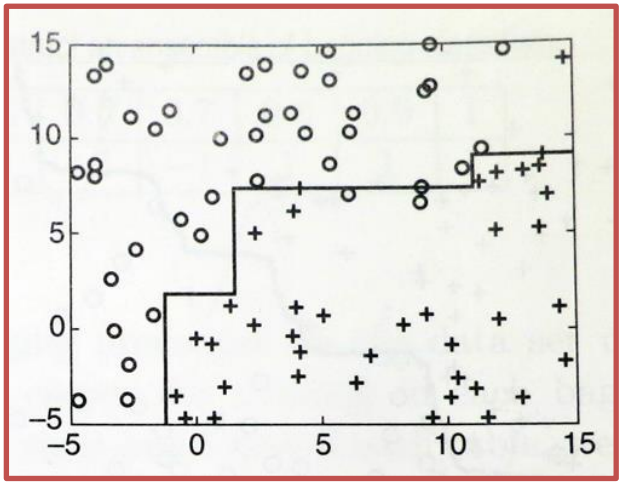


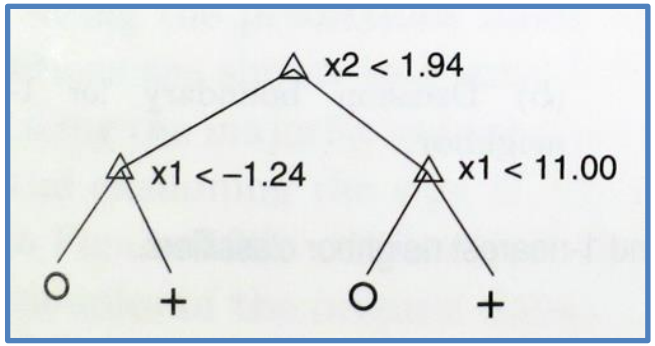
varianca... napovedni model je morda preveč kompleksen	**odklon...** napovedni model je morda preveč enostaven
uporaba manj značilk	več in močnejše značilke
več podatkov za trening	povečati kompleksnost modela
več regularizacije	manj regularizacije

Ilustrativen primer I

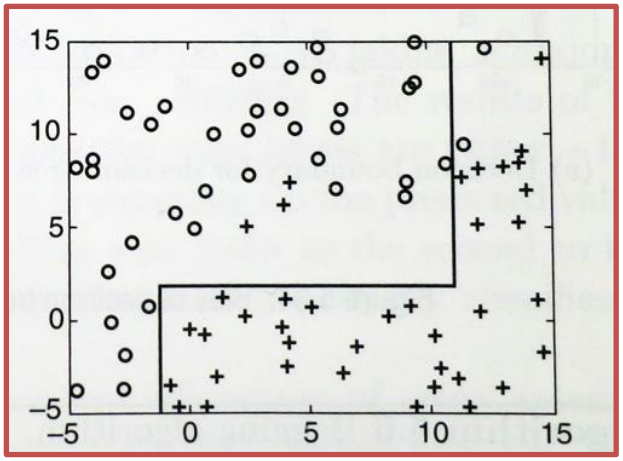


klasifikacijsko drevo





porezano klasifikacijsko drevo

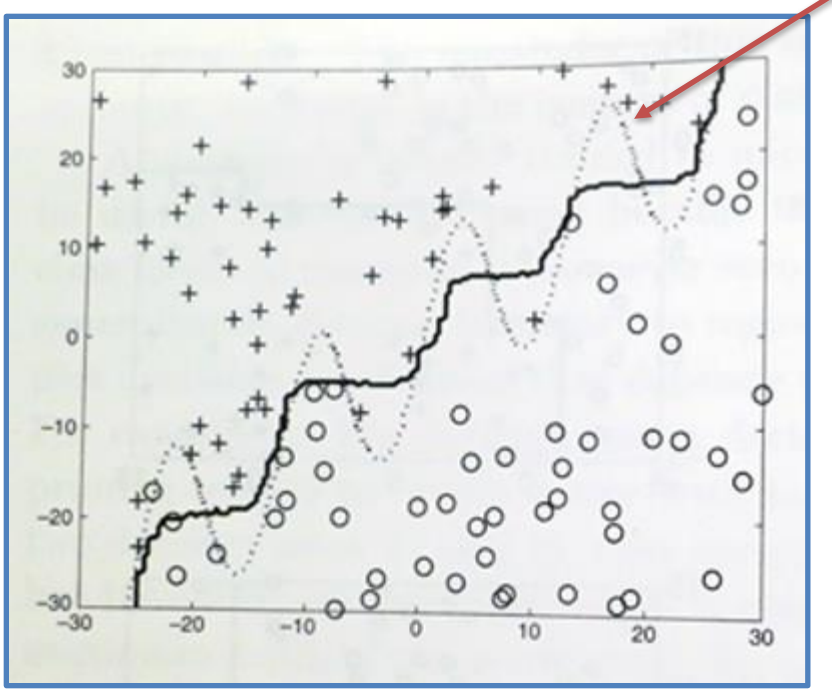


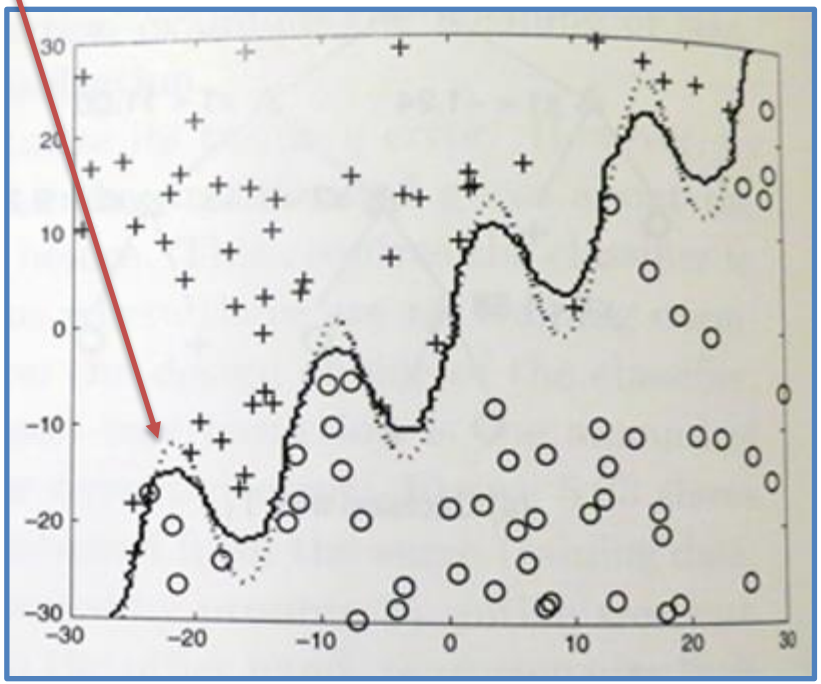
Ilustrativen primer II

resnična meja

nižja varianca

nižji odklon





klasifikator: klasifikacijsko drevo

klasifikator: 1-najbližji sosed

100 učnih množic, vsaka vsebuje 100 učnih primerov, povprečenje modelov...

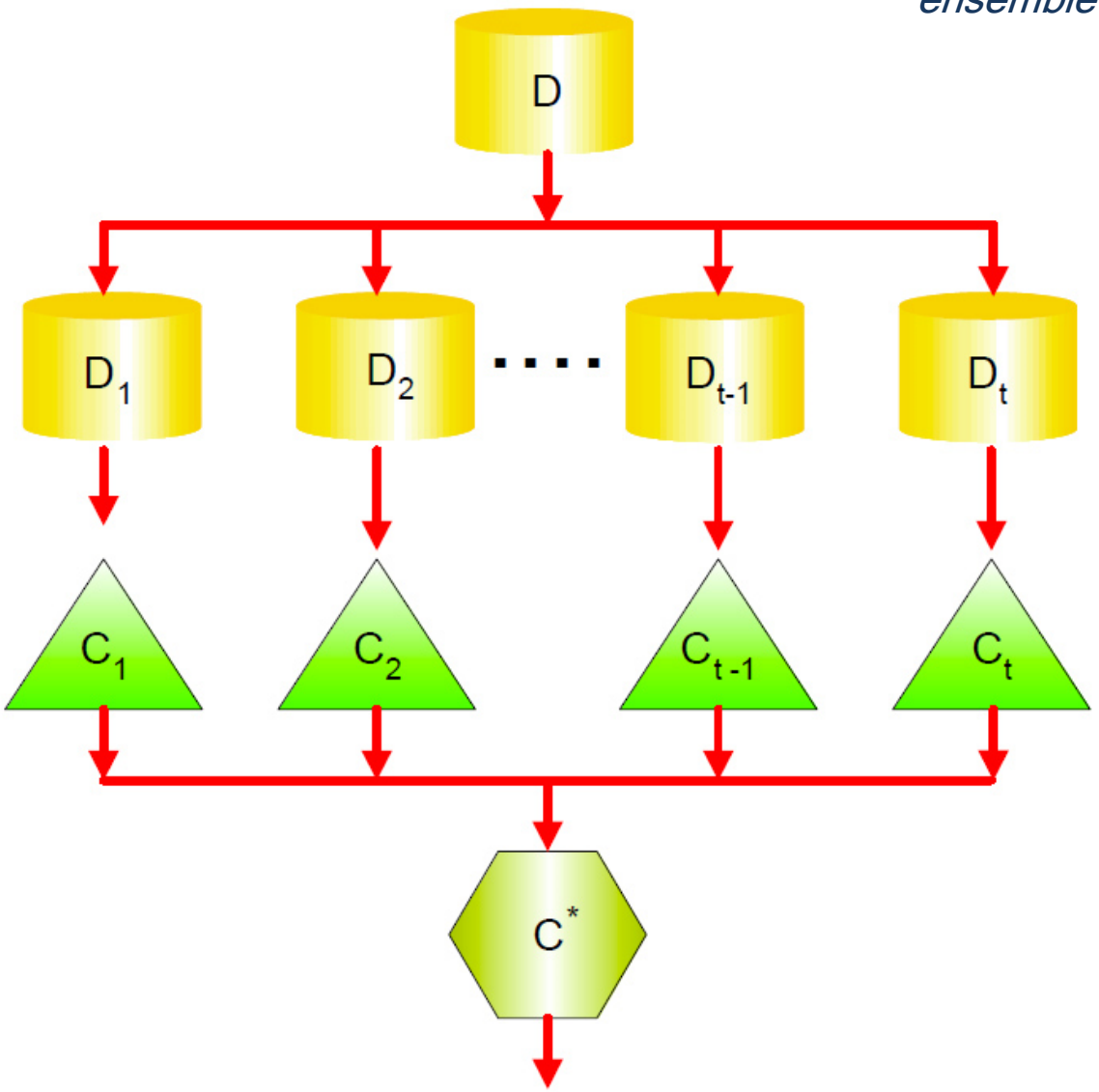
KOMBINIRANJE KLASIFIKATORJEV

ensemble methods

ustvarimo več množic učnih podatkov

zgradimo več klasifikatorjev

kombiniramo napovedi klasifikatorjev



KOMBINIRANJE KLASIFIKATORJEV: SKUPINSKE METODE

ensemble methods

```
import orange, orngEnsemble, orngTree
import orngTest, orngStat

tree = orngTree.TreeLearner(mForPruning=2, name="tree")
bg = orngEnsemble.BaggedLearner(tree, name="bagged tree")
forest = orngEnsemble.RandomForestLearner(trees=50, name="forest")

data = orange.ExampleTable("marketing.tab")

learners = [tree, bg, forest]
results = orngTest.crossValidation(learners, data, folds=10)
print "Learner      CA     Brier  AUC"
for i in range(len(learners)):
    print "%-12s %5.3f  %5.3f  %5.3f" % (learners[i].name, \
        orngStat.CA(results)[i],
        orngStat.BrierScore(results)[i],
        orngStat.AUC(results)[i])
```

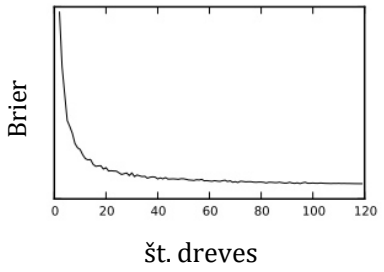
Learner	CA	Brier	AUC
tree	0.754	0.413	0.736
bagged tree	0.768	0.351	0.811
forest	0.778	0.314	0.837

$$Brier = \frac{1}{c}\sum_{i=1}^{c}(p_i' - pi)^2$$

Metoda *bagging* (*bootstrap aggregating*)

- izkorišča nestabilnost (varianco) klasifikatorjev
- vzorčenje z zamenjavo oz. vračanjem *(„bootstrap 0.632“)*
- napovedi klasifikatorjev združimo v skupno z večinskim glasovanjem

Tipičen odnos med Brierjevo oceno (*Brier score*) in naključnim gozdom:



Naključni gozd

- kombinira napovedi več različnih odločitvenih dreves
- vsako drevo temelji na neodvisni množici naključnih vektorjev

METODA *BAGGING*

Naj bo x enodimenzionalni atribut, y pa razred:

x	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
y	+	+	+	-	-	-	-	+	+	+

Za klasifikator uporabimo kar klasifikacijsko drevo globine 1:

- testni pogoj naj bo $x \leq k$,
- k naj bo vrednost, ki minimizira entropijo v listih tega drevesa

decision stump

Brez uporabe metode *bagging* bi učne primere razdelili pri $x \leq 0.35$ ali $x \leq 0.75$, v obeh primerih bi dosegli zgolj 70% klasifikacijsko točnost.

Postopek po korakih

- izvedemo vzorčenje z zamenjavo oz. vračanjem (*sampling with replacement*)
- na vsaki tako pridobljeni množici podatkov uporabimo klasifikator
- napovedi klasifikatorjev združimo v skupno z večinskim glasovanjem

METODA *BAGGING*: VZORČENJE IN KLASIFIKACIJA (PRIMER)

1

x	0.1	0.2	0.2	0.3	0.4	0.4	0.5	0.6	0.9	0.9
y	+	+	+	+	-	-	-	-	+	+

$x \leq 0.35 \rightarrow y = +$
$x > 0.35 \rightarrow y = -$

2

x	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.8	0.9	1	1	1
y	+	+	+	-	-	+	+	+	+	+

$x \leq 0.65 \rightarrow y = +$
$x > 0.65 \rightarrow y = +$

3

x	0.1	0.2	0.3	0.4	0.4	0.5	0.7	0.7	0.8	0.9
y	+	+	+	-	-	-	-	-	+	+

$x \leq 0.35 \rightarrow y = +$
$x > 0.35 \rightarrow y = -$

4

x	0.1	0.1	0.2	0.4	0.4	0.5	0.5	0.7	0.8	0.9
y	+	+	+	-	-	-	-	-	+	+

$x \leq 0.30 \rightarrow y = +$
$x > 0.30 \rightarrow y = -$

5

x	0.1	0.1	0.2	0.5	0.6	0.6	0.6	1	1	1
y	+	+	+	-	-	-	-	+	+	+

$x \leq 0.35 \rightarrow y = +$
$x > 0.35 \rightarrow y = -$

6

x	0.2	0.4	0.5	0.6	0.7	0.7	0.7	0.8	0.9	1
y	+	-	-	-	-	-	-	+	+	+

$x \leq 0.75 \rightarrow y = -$
$x > 0.75 \rightarrow y = +$

7

x	0.1	0.4	0.4	0.6	0.7	0.8	0.9	0.9	0.9	1
y	+	-	-	-	-	+	+	+	+	+

$x \leq 0.75 \rightarrow y = -$
$x > 0.75 \rightarrow y = +$

8

x	0.1	0.2	0.5	0.5	0.5	0.7	0.7	0.8	0.9	1
y	+	+	-	-	-	-	-	+	+	+

$x \leq 0.75 \rightarrow y = -$
$x > 0.75 \rightarrow y = +$

9

x	0.1	0.3	0.4	0.4	0.6	0.7	0.7	0.8	1	1
y	+	+	-	-	-	-	-	+	+	+

$x \leq 0.75 \rightarrow y = -$
$x > 0.75 \rightarrow y = +$

10

x	0.1	0.1	0.1	0.1	0.3	0.3	0.8	0.8	0.9	0.9
y	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+

$x \leq 0.05 \rightarrow y = -$
$x > 0.05 \rightarrow y = +$

METODA *BAGGING*: GLASOVANJE (PRIMER)

Iteracija	x = 0.1	x = 0.2	x = 0.3	x = 0.4	x = 0.5	x = 0.6	x = 0.7	x = 0.8	x = 0.9	x = 1.0
1	+	+	+	-	-	-	-	-	-	-
2	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
3	+	+	+	-	-	-	-	-	-	-
4	+	+	+	-	-	-	-	-	-	-
5	+	+	+	-	-	-	-	-	-	-
6	-	-	-	-	-	-	-	+	+	+
7	-	-	-	-	-	-	-	+	+	+
8	-	-	-	-	-	-	-	+	+	+
9	-	-	-	-	-	-	-	+	+	+
10	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Vsota +	6	6	6	2	2	2	2	6	6	6
Vsota -	4	4	4	8	8	8	8	2	2	2
Razred	**+**	**+**	**+**	**-**	**-**	**-**	**-**	**+**	**+**	**+**

x	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
y	+	+	+	-	-	-	-	+	+	+

Kako in kdaj metoda *bagging* (ne) pomaga?

- zmanjšuje napako pri napovedih **s pomočjo zmanjševanja variance** osnovnega klasifikatorja
- če je osnovni klasifikator nestabilen, reducira napake povezane z naključnimi fluktuacijami v podatkih
- ne pomaga: če je osnovni klasifikator odporen na perturbacije v podatkih, vzrok napak pa je odklon

Naključni gozd

random forest

- skupina **klasifikacijskih dreves** pri klasifikaciji primera v razred glasuje
- napovemo razred, kamor primer uvrsti večina dreves
- zaželena je variabilnost med drevesi (jih dodatno „ponaključimo“)

- ena od najbolj zanesljivih tehnik uvrščanja, tipično višje napovedne točnosti
- slabost: izgubljena možnost interpretacije modela

NAKLJUČNI GOZD: POSTOPEK

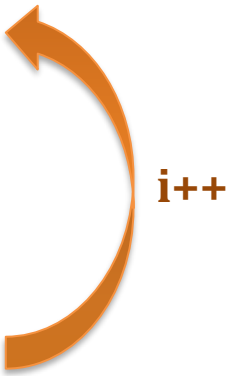
1. Pričnemo z učno množico ***D***, ki vsebuje ***N*** primerov in ***M*** atributov.

Izberemo parametre...

2. Izberemo število ***m***: med koliko naključno izbranih atributov iz primerov v vozliščih drevesa bomo izbrali najboljšega ... $m << M$, npr. $m = \sqrt{M}$
3. Izberemo tudi število dreves ***K*** v gozdu ... npr. $K = 100$

... in „gradimo“ gozd

4. Uporabimo metodo stremena (*bootstrap*): med ***N*** primeri učne množice ***D*** naključno z vračanjem izberemo novo množico primerov ... dobimo D_i
5. Na množici primerov D_i zgradimo klasifikacijsko drevo T_i:
   - v vsakem vozlišču naključno izberemo in uporabimo ***m*** atributov
   - med njimi za delitev teh primerov izberemo najbolj informativnega
   - dreves ne režemo... ali to pomaga pri reduciranju variance ali odklona?



UGOTAVLJANJE POMEMBNOSTI ZNAČILK Z NAKLJUČNIM GOZDOM

```
import orange, orngEnsemble, random

data = orange.ExampleTable("marketing.tab")

measure = orngEnsemble.MeasureAttribute_randomForests(trees=50)

#call by attribute index
imp0 = measure(0, data)
#call by orange.Variable
imp1 = measure(data.domain.attributes[1], data)
print "first: %0.2f, second: %0.2f\n" % (imp0, imp1)

print "different random seed"
measure = orngEnsemble.MeasureAttribute_randomForests(trees=50, rand=random.Random(10))

imp0 = measure(0, data)
imp1 = measure(data.domain.attributes[1], data)
print "first: %0.2f, second: %0.2f\n" % (imp0, imp1)

print "All importances:"
imps = measure.importances(data)
for i,imp in enumerate(imps):
    print "%17s: %6.2f" % (data.domain.attributes[i].name, imp)
```

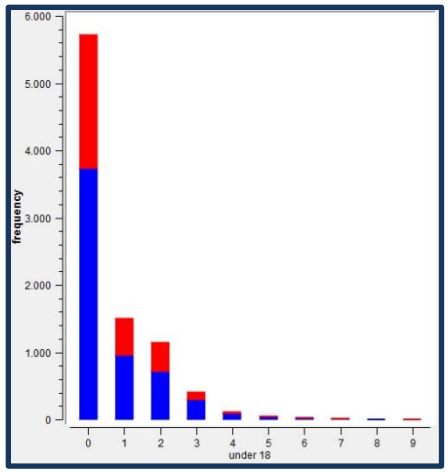
```
first: 0.30, second: 4.29

different random seed
first: 0.12, second: 3.35

All importances:
              sex:   0.12
   marital status:   3.35
              age:   1.17
        education:   2.04
       occupation:   1.86
      years in sf:   0.04
      dual income:   2.62
household members:   0.14
         under 18:  -0.01
 household status:   6.61
     type of home:   0.75
     ethnic class:   0.04
         language:   0.13
```

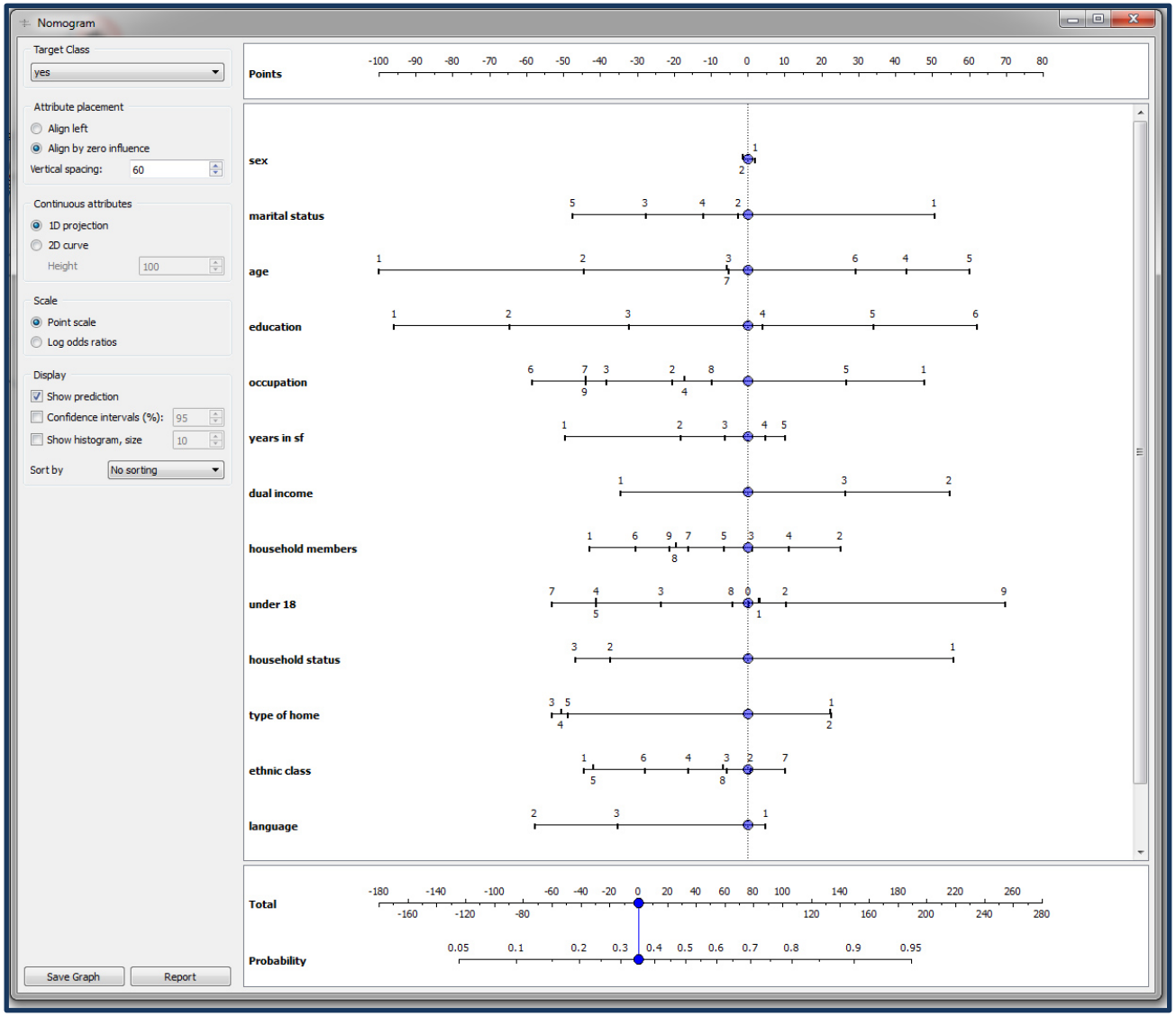
$$\mathrm{RI}(X) = \frac{1}{K}\sum_{i=1}^{K} C_i - C_{i,X}$$

- drevo T_i smo izgradili iz učnih primerov D_i, ostali primeri so D'_i
- naj bo C_i število primerov iz D_i, za katere je drevo T_i pravilno napovedalo razred
- za vsak atribut X premešajmo njegove vrednosti v D_i
- na tej spremenjeni množici izmerimo število pravilno napovedanih $C_{i,X}$

zakaj?

Nomogram





http://orange.biolab.si/datasets/marketing.htm

Kateri atribut je najmanj uporaben? Kateri atributi so najbolj uporabni?

UGOTAVLJANJE POMEMBNOSTI ZNAČILK: *GRADIENTBOOSTING TREES*

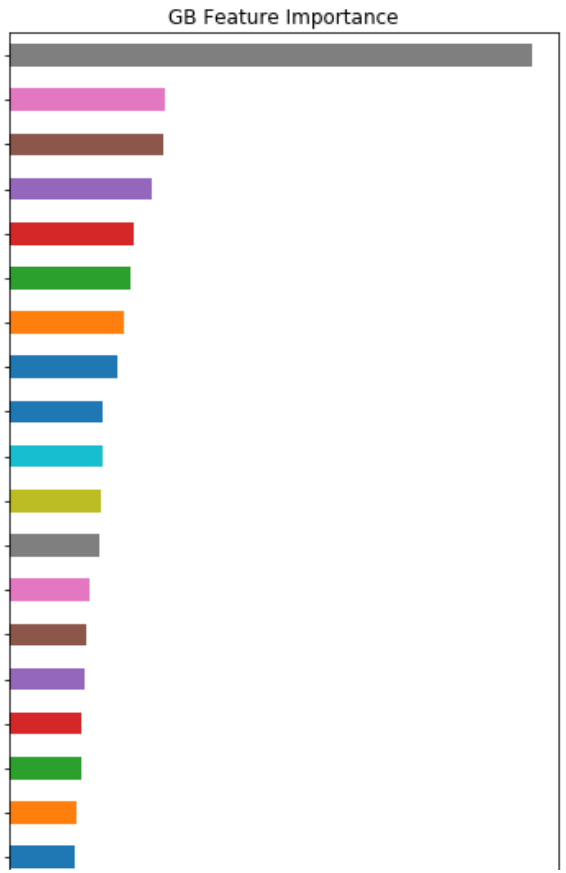
```
# ensembles
ensembles = []
ensembles.append(('AB', AdaBoostClassifier()))
ensembles.append(('GB', GradientBoostingClassifier()))
ensembles.append(('RF', RandomForestClassifier()))
ensembles.append(('ET', ExtraTreesClassifier()))
```

```
results = []
names = []
for name, model in ensembles:
    kfold = KFold(n_splits=num_folds, random_state=seed, shuffle=False)
    cv_results = cross_val_score(model, X_train, Y_train, cv=kfold, scoring=scoring)
    results.append(cv_results)
    names.append(name)
    msg = "%s: %f (%f)" % (name, cv_results.mean(), cv_results.std())
    print(msg)
```

```
AB: 0.777778 (0.059252)
GB: 0.823611 (0.039308)
RF: 0.805556 (0.031056)
ET: 0.787500 (0.036244)
```

```
# prepare the model
model = GradientBoostingClassifier()  # GB
model.fit(X_train, Y_train)
```

```
GradientBoostingClassifier(criterion='friedman_mse', init=None,
              learning_rate=0.1, loss='deviance', max_depth=3,
              max_features=None, max_leaf_nodes=None,
              min_impurity_decrease=0.0, min_impurity_split=None,
              min_samples_leaf=1, min_samples_split=2,
              min_weight_fraction_leaf=0.0, n_estimators=100,
              presort='auto', random_state=None, subsample=1.0, verbose=0,
              warm_start=False)
```




```
importance = dict(zip(feature_names, model.feature_importances_))
```

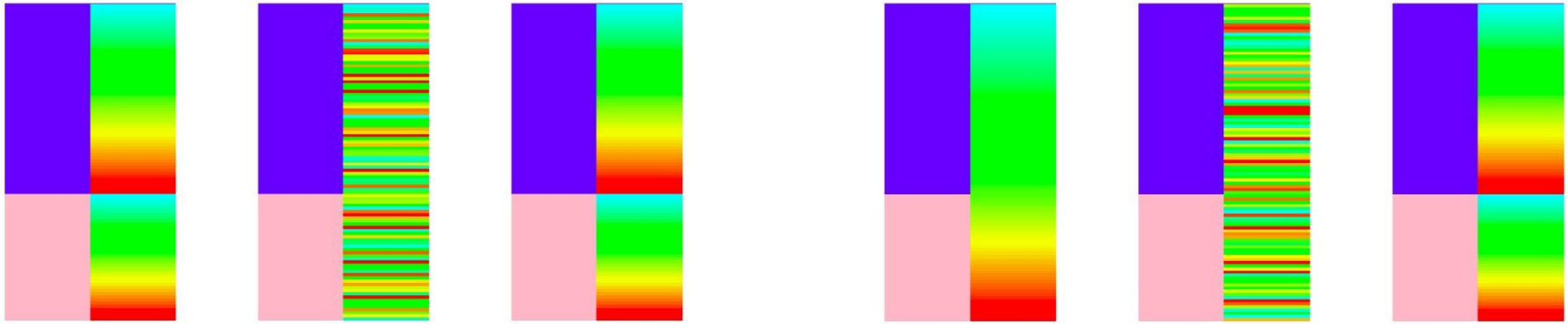
```
importance = sorted(importance.items(), key=operator.itemgetter(1))
importance.reverse()
```

```
df_importance = pd.DataFrame(importance, columns=['feature', 'score'])
```

```
df_importance['score'] = df_importance['score'] / df_importance['score'].sum()
```

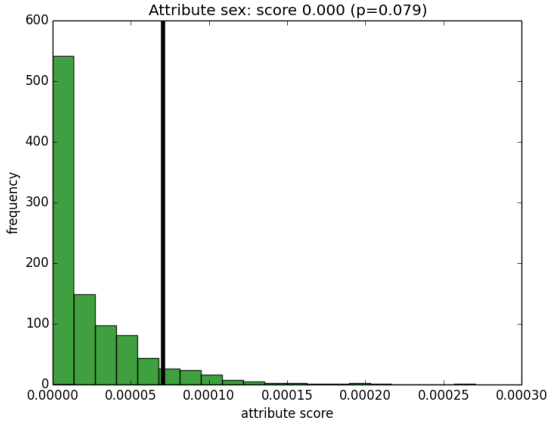
PERMUTACIJSKI TEST

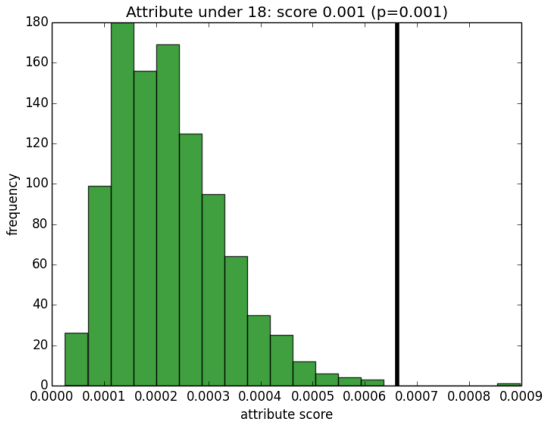
ničelna hipoteza: premešati vrednosti atributa ne bo vplivalo na napovedi

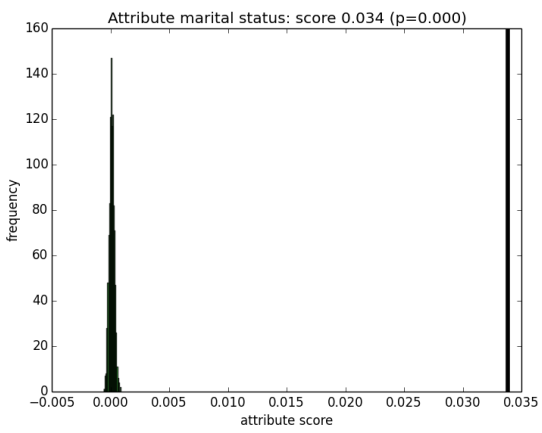


null = true

null = false







Viri in literatura

- Tan P.-N., Steinbach M. in Kumar V. ***Introduction to Data Mining***, Pearson Addison Wesley, 2006.

  http://www-users.cs.umn.edu/~kumar/dmbook/

  Classification (četrto poglavje)

  Classification: Alternative techniques (peto poglavje)

- Witten, Ian H., and Eibe Frank. *Data Mining: Practical machine learning tools and techniques*.

  Morgan Kaufmann, 2005.

- Orange: Open source data visualization and analysis for novice and experts.

  http://orange.biolab.si/

- scikit-learn: Machine Learning in Python

  https://scikit-learn.org/