PROBLEM KLASYFIKACJI

Nguyen Hung Son

www.mimuw.edu.pl/~son/datamining/

Plan wykładu

- Wprowadzenie do klasyfikacji
- Leniwe klasyfikatory
  - k-NN
  - „Naive Bayes”
- Przegląd metod klasyfikacji
- Ocena klasyfikatorów
- Drzewo decyzyjne

Co to jest problem klasyfikacji?

- Dany jest zbiór obiektów (**training set**)
  - Każdy obiekt jest opisany zbiorem atrybutów zwanych *atrybutami warunkowymi*
  - Wyróżniony jest jeden atrybut, zwany *atrybutem decyzyjnym*
- **Cel**: wyznaczyć klasę, do której należy nowy nieznany rekord.
- **Jak?** Znaleźć zależność (funkcyjną) między atrybutem decyzyjnym a warunkowymi atrybutami.

Przykład

- Chcemy nauczyć się pojęcia **”człowieka o średniej budowie ciała”.**
- Dane – czyli osoby – są reprezentowane przez punkty (waga(Kg),wzrost(cm)) i są etykietowane przez + dla pozytywnych przykładów i − dla negatywnych.
- Dodatkowa wiedza: szukane pojęcie można wyrazić za pomocą PROSTOKĄTA

- *Na przykład dany jest etykietowany zbiór:*

  {((84, 184),+), ((70, 170),+), ((75, 163),−), ((80,180),+), ((81, 195),−), ((63, 191),−), ((77, 187),−), ((68, 168),+)}
- *Znajdź etykietę ((79, 183, ?)*

Zastosowania w BI

- Analiza i zarządzanie:
  - Przewidywanie zainteresowania klientów,
  - Zatrzymywanie klientów,
  - Analiza konkurencji,
  - Ulepszenie ubezpieczenia
- Detekcja oszustw:
  - Ubezpieczenie samochodowe: detekcja grup ludzi, którzy wyłudzą piedządze z ubezpieczenia
  - Pranie pieniędzy: detekcja podejrzanych transakcji pieniędzy (US Treasury's Financial Crimes Enforcement Network)
  - Ubezpieczenie medyczne: detekcja „profesjonalnych" pacjentów i okręgu doktorów z nimi pracujących, następnie rozszerzyć okrąg podejrzanych pacjentów
- I inne.

Dwuetapowy proces klasyfikacji

- **Tworzenie modelu:** opisywanie klas decyzyjnych (wyznaczonych przez atrybut decyzyjny).
  - Każdy obiekt z tablicy decyzyjnej należy do jednej z klas decyzyjnych.
  - **Klasyfikator:** algorytm określenia klasy decyzyjnej obiektów za pomocą ich wartości na atrybutach warunkowych.
  - Klasyfikatory mogą być opisane za pomocą formuł logicznych, drzew decyzyjnych lub formuł matematycznych.
- **Korzystanie z modelu:** do przypisanie nowych nieznanych obiektów do odpowiedniej klasy.

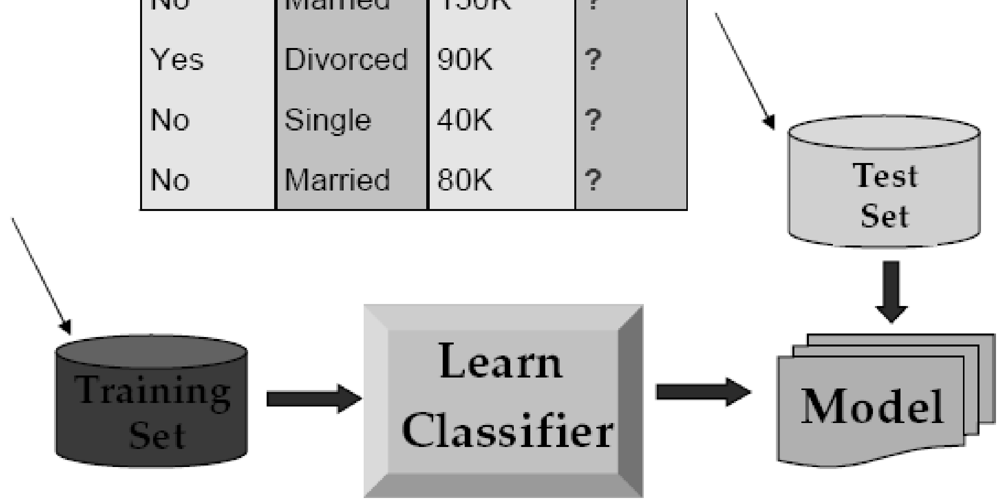
- **Problem:** Jak oceniać model?

Ogólne podejście

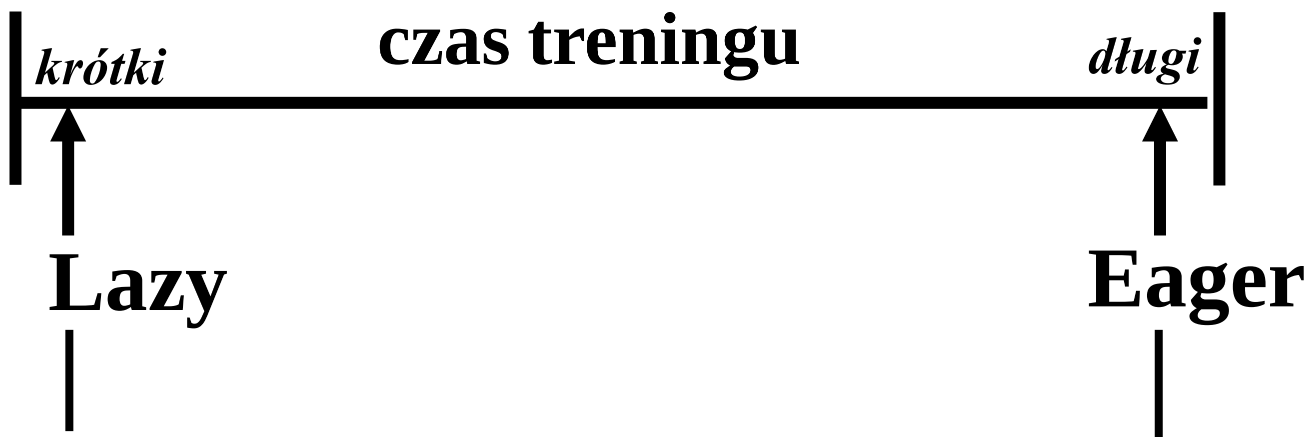
categorical | categorical | continuous | class

Tid	Refund	Marital Status	Taxable Income	Cheat
1	Yes	Single	125K	No
2	No	Married	100K	No
3	No	Single	70K	No
4	Yes	Married	120K	No
5	No	Divorced	95K	Yes
6	No	Married	60K	No
7	Yes	Divorced	220K	No
8	No	Single	85K	Yes
9	No	Married	75K	No
10	No	Single	90K	Yes

Refund	Marital Status	Taxable Income	Cheat
No	Single	75K	?
Yes	Married	50K	?
No	Married	150K	?
Yes	Divorced	90K	?
No	Single	40K	?
No	Married	80K	?



Leniwe i gorliwe metody klasyfikacji



1. **Uczenia się**: Brak. Nie generuje się modelu (hipotezy) dla funkcji docelowej
2. **Klasyfikacja**: Odpowiedź jest kombinowana bezpośrednio ze danych treningowych

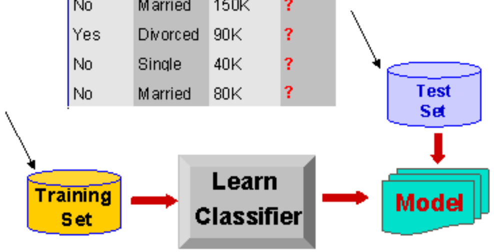
1. **Uczenie się**: Buduje się pełny model opisujący funkcję docelującą
2. **Klasyfikacja**: Odpowiedź jest oparte na generowanym modelu

Leniwe i gorliwe metody klasyfikacji

categorical, categorical, continuous, class

Tid	Refund	Marital Status	Taxable Income	Cheat
1	Yes	Single	125K	No
2	No	Married	100K	No
3	No	Single	70K	No
4	Yes	Married	120K	No
5	No	Divorced	95K	Yes
6	No	Married	60K	No
7	Yes	Divorced	220K	No
8	No	Single	85K	Yes
9	No	Married	75K	No
10	No	Single	90K	Yes

Refund	Marital Status	Taxable Income	Cheat
No	Single	75K	?
Yes	Married	50K	?
No	Married	150K	?
Yes	Divorced	90K	?
No	Single	40K	?
No	Married	80K	?

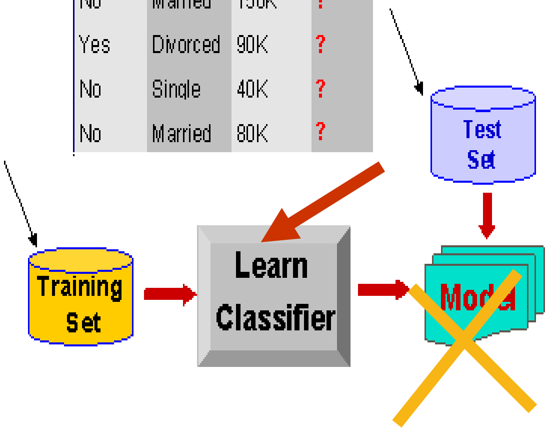


Gorliwa metoda

categorical, categorical, continuous, class

Tid	Refund	Marital Status	Taxable Income	Cheat
1	Yes	Single	125K	No
2	No	Married	100K	No
3	No	Single	70K	No
4	Yes	Married	120K	No
5	No	Divorced	95K	Yes
6	No	Married	60K	No
7	Yes	Divorced	220K	No
8	No	Single	85K	Yes
9	No	Married	75K	No
10	No	Single	90K	Yes

Refund	Marital Status	Taxable Income	Cheat
No	Single	75K	?
Yes	Married	50K	?
No	Married	150K	?
Yes	Divorced	90K	?
No	Single	40K	?
No	Married	80K	?

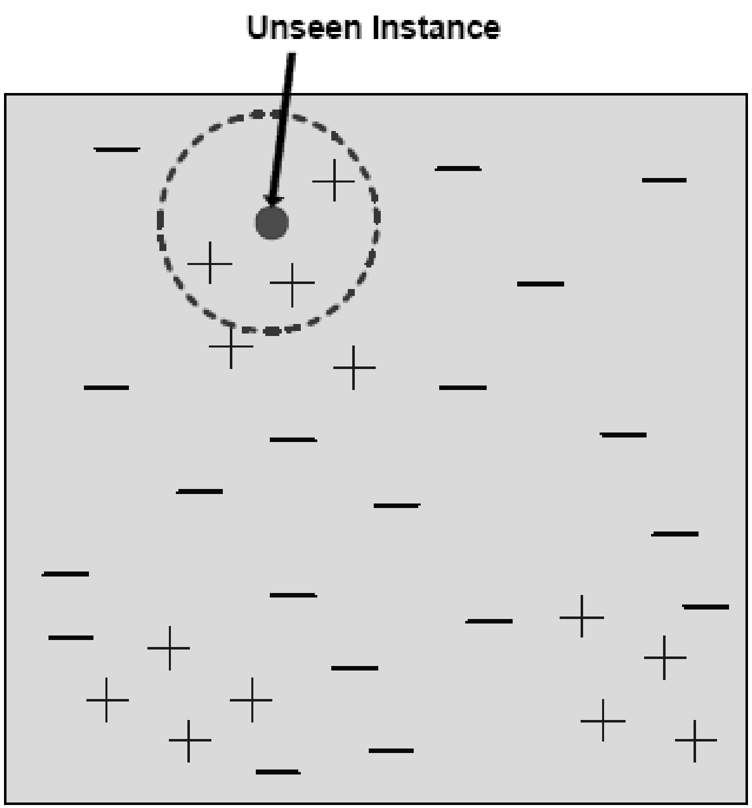


Leniwa metoda

Przegląd metod

- K najbliższych sąsiadów (*k-NN classifier*)
- Klasyfikacja w oparciu o przykłady (*case-based reasoning*)
- Metoda „Naive Bayes";
- Algorytm genetyczny
- Podejście zbiorów przybliżonych
- Podejście zbiorów rozmytych

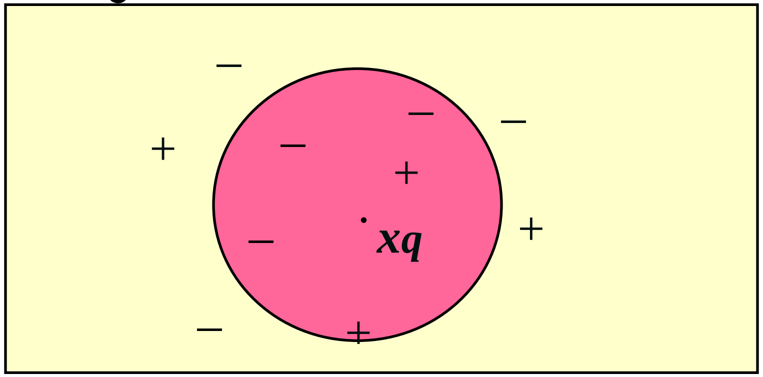
Klasyfikator kNN

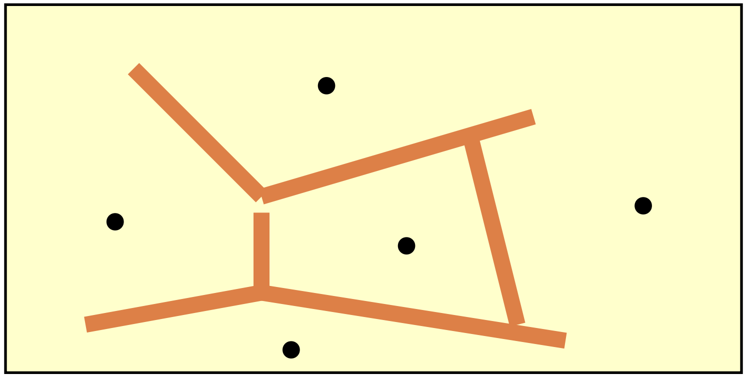


- Najczęściej wykorzystany dla danych z atrybutami numerycznymi
- Wymagania:
  - Zbiór treningowy
  - Funkcja odległości między obiektami
  - Wartość parametru *k*, liczba rozpatrywanych sąsiadów
- Podczas klasyfikacji:
  - Wyznaczanie *k* najbliższych sąsiadów
  - Wyznaczenie klasy decyzyjnej nowego obiektu na podstawie klas decyzyjnych najbliższych sąsiadów (np. przez głosowanie).

Klasyfikator kNN

- Jeśli $k = 1$, możemy ilustrować granice klas decyzyjnych za pomocą diagramu *Voronoi*.





- Odległość euklidesowa

$$d(x, y) = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2 + \ldots + (x_k - y_k)^2}$$

- Odległość ważona
  - Ważenie atrybutów, $w = 1/d^2$
  - Ważenie głosów wzg. odległości
- Inne metryki: metryka miasta (*city-block (Manhattan) metric*)

Uwagi na temat k-NN

- Jest to przykład metody leniwej, gdyż
  - Nie buduje jawnego modelu wiedzy
  - Proces klasyfikacji może być czasochłonny
- Jeśli *k* jest za mała, klasyfikator będzie wrażliwa na drobne szumy w danych
- Jeśli *k* jest zbyt duża –
  - Wysoka złożoność obliczeniowa
  - Otoczenia mogą zawierać obiekty z innych klas
- Algorytm k-NN dla ciągłej decyzji
  - Wystarczy obliczyć średnią z decyzji najbliższych sąsiadów

Uwagi na temat k-NN (c.d.)

- Problemy z funkcją odległości
  - Problem skalowania atrybutów
    - Np. opis człowieka:
      - (Wzrost [m], Waga [kg], Klasa)
      - Wzrost odchyla się od 1.5 m do 1.85 m
      - Waga może mieć wartość od 45 kg do 120 kg

      Odległość euklidesowa jest bardziej wrażliwa na różnicę wag niż różnicę wzrostu.
  - Przekleństwo wymiarów
  - Może produkować wyniki niezgodne z intuicją (np. klasyfikacji dokumentów)
    - Rozwiązanie: Normalizacja
  - Sąsiedzi ważeni względem odległości
    - Wpływ sąsiada x_i na obiekt testowy x_q jest ważony przez $w \equiv \frac{1}{d(x_q, x_i)^2}$
    - Bliżsi sąsiedzi mają większy wpływ

Klasyfikator Bayesowski

- Probabilistic learning: Calculate explicit probabilities for hypothesis, among the most practical approaches to certain types of learning problems
- Incremental: Each training example can incrementally increase/decrease the probability that a hypothesis is correct. Prior knowledge can be combined with observed data.
- Probabilistic prediction: Predict multiple hypotheses, weighted by their probabilities
- Standard: Even when Bayesian methods are computationally intractable, they can provide a standard of optimal decision making against which other methods can be measured

Twierdzenie Bayesa

- Dany jest zbiór treningowy *D*, prawdopodobieństwo *posteriori* hipotezy *h* – *P*(*h*|*D*) – można liczyć wzorem Bayesa

$$P(h|D)=\frac{P(D|h)P(h)}{P(D)}$$

- MAP (maximum posteriori) hypothesis

$$h_{MAP} \equiv \arg\max_{h\in H} P(h|D) = \arg\max_{h\in H} P(D|h)P(h).$$

- Trudności: ta metoda wymaga znajomości wielu rozkładów prawdopodobieństw ➔ wysoki koszt obliczeniowy

Klasyfikator Bayesa

- Klasyfikacja obiektu opisanego przez $\mathbf{x}$

$$P(dec=c|\mathbf{x})=\frac{P(\mathbf{x}|dec=c)P(dec=c)}{P(\mathbf{x})}$$

- $\mathrm{P}(\mathbf{x})$ jest wspólna dla wszystkich hipotez
- $\mathrm{P}(dec = c)$ – częstość występowania klasy c
- Znaleźć c t., że $\mathrm{P}(dec = \mathrm{c}|\mathbf{x})$ było maksymalne, czyli

  $\mathrm{P}(\mathbf{x}|dec=c)\cdot\mathrm{P}(dec=c)$ is maximum
- **Problem**: obliczenie $\mathrm{P}(\mathbf{x}|dec=c)$ jest czasochłonne!

Klasyfikator „Naive Bayes”

- Naiwne założenie: atrybuty są warunkowo niezależne! Wówczas

$$P(x_1,\ldots,x_k|C) = P(x_1|C)\cdot\ldots\cdot P(x_k|C)$$

- Czyli

$$P(d=c_j\mid\mathbf{x}) \approx P(d=c_j)\prod_{i=1}^{n}P(x_i\mid d=c_j)$$

- To założenie znacznie obniża złożoność obliczeniowy.

Przykład

Pacjent poddał się testowi na pewną chorobę i wynik okazał się pozytywny. Wiadomo, że ten test jest poprawny w 98% przypadków kiedy wynik był pozytywnych, i poprawny w 97% przypadków kiedy wynik był negatywnych. Wiemy również, że ok. 0.8% społeczeństwa choruje na tą chorobę.

$$\mathrm{P(cancer)} = .008 \qquad \mathrm{P}(\neg\mathrm{cancer}) = .992$$

$$\mathrm{P}(+ \mid \mathrm{cancer}) = .98 \qquad \mathrm{P}(- \mid \mathrm{cancer}) = .02$$

$$\mathrm{P}(+ \mid \neg\mathrm{cancer}) = .03 \qquad \mathrm{P}(- \mid \neg\mathrm{cancer}) = .97$$

$$\mathrm{P}(+) = \mathrm{P}(+ \mid \mathrm{c'r})\,\mathrm{P(c'r)} + \mathrm{P}(+ \mid \neg\mathrm{c'r})\,\mathrm{P}(\neg\mathrm{c'r}) = .0376$$

$$\mathrm{P}(\mathrm{cancer} \mid +) = \frac{P(+ \mid cancer)\,P(cancer)}{P(+)} = \mathbf{.209}$$

Ćwiczenie

Załóżmy, że drugi test też daje pozytywny wynik. Jak się zmienia prawdopodobieństwo posteriori

$$P(\text{cancer}) = .008 \qquad P(\neg\text{cancer}) = .992$$

$$P(+ \mid \text{cancer}) = .98 \qquad P(- \mid \text{cancer}) = .02$$

$$P(+ \mid \neg\text{cancer}) = .03 \qquad P(- \mid \neg\text{cancer}) = .97$$

$$P(+_1+_2) = P(+_1+_2 \mid \text{c'r})\, P(\text{c'r}) + P(+_1+_2 \mid \neg\text{c'r})\, P(\neg\text{c'r}) \quad =.00858$$

$$P(\text{cancer} \mid +_1+_2) = \frac{P(+_1+_2 \mid cancer)\, P(cancer)}{P(+_1+_2)} \quad \mathbf{= .896}$$

Inny przykład: „play tennis”

Outlook	Temperature	Humidity	Windy	Class
sunny	hot	high	false	N
sunny	hot	high	true	N
overcast	hot	high	false	P
rain	mild	high	false	P
rain	cool	normal	false	P
rain	cool	normal	true	N
overcast	cool	normal	true	P
sunny	mild	high	false	N
sunny	cool	normal	false	P
rain	mild	normal	false	P
sunny	mild	normal	true	P
overcast	mild	high	true	P
overcast	hot	normal	false	P
rain	mild	high	true	N

P(p) = 9/14
P(n) = 5/14

outlook	
P(sunny|p) = 2/9	P(sunny|n) = 3/5
P(overcast|p) = 4/9	P(overcast|n) = 0
P(rain|p) = 3/9	P(rain|n) = 2/5
temperature	
P(hot|p) = 2/9	P(hot|n) = 2/5
P(mild|p) = 4/9	P(mild|n) = 2/5
P(cool|p) = 3/9	P(cool|n) = 1/5
humidity	
P(high|p) = 3/9	P(high|n) = 4/5
P(normal|p) = 6/9	P(normal|n) = 2/5
windy	
P(true|p) = 3/9	P(true|n) = 3/5
P(false|p) = 6/9	P(false|n) = 2/5

Przykład: „play tennis” (c.d.)

Nowy obiekt X = <rain, hot, high, false>

- P(X|p)·P(p) =
  = P(rain|p)·P(hot|p)·P(high|p)·P(false|p)·P(p)
  = 3/9·2/9·3/9·6/9·9/14 = 0.010582

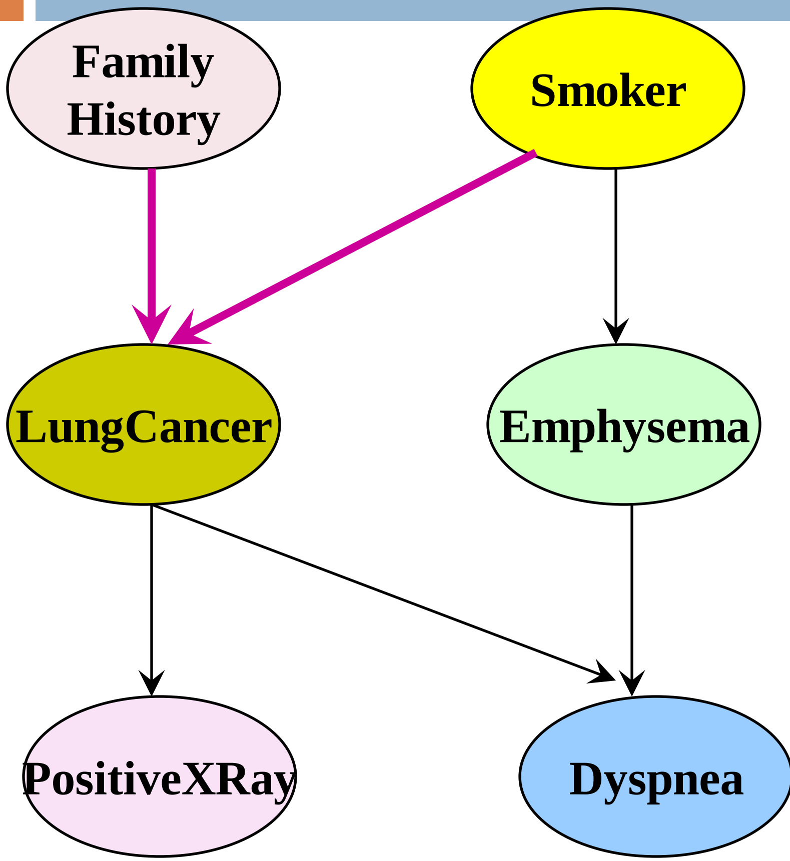
- P(X|n)·P(n) =
  = P(rain|n)·P(hot|n)·P(high|n)·P(false|n)·P(n)
  = 2/5·2/5·4/5·2/5·5/14 = 0.018286

- X jest klasyfikowany do klasy n (don’t play)

Założenie o niezależności

- … powoduje, że obliczenia staje się możliwe
- … mamy optymalny klasyfikator o ile ono jest prawdziwe
- … ale warunek bardzo rzadko spełniony w praktyce (atrybuty są często korelowane).
- Próby pokonania te ograniczenia:
  - Sieci Bayesowskie, that combine Bayesian reasoning with causal relationships between attributes
  - Drzewa decyzyjne, that reason on one attribute at the time, considering most important attributes first

Bayesian Belief Networks (I)



Bayesian Belief Networks

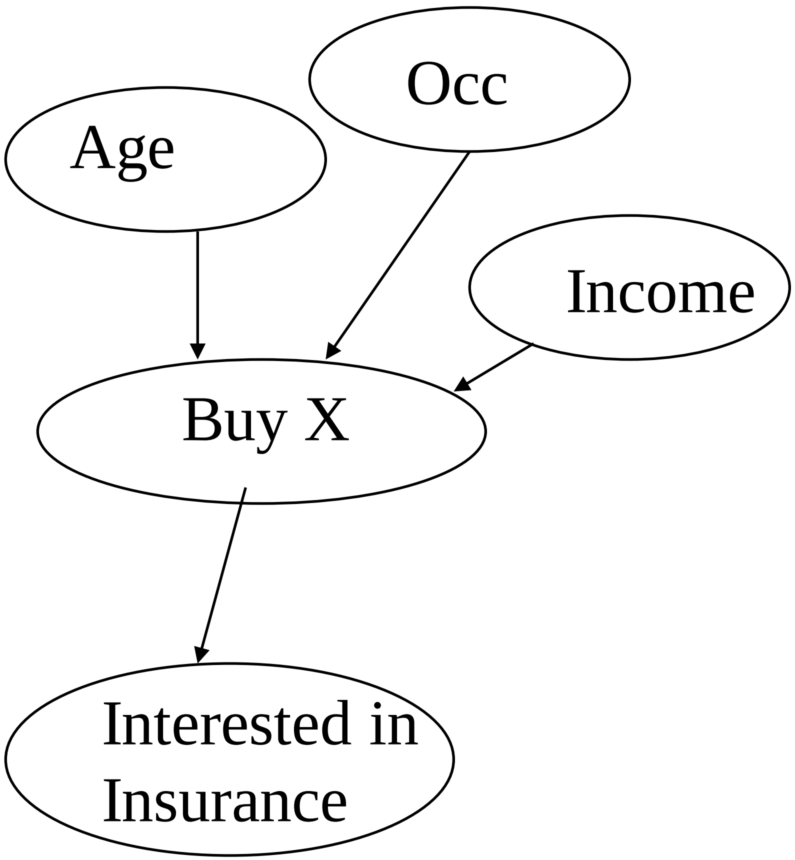
	(FH, S)	(FH, ~S)	(~FH, S)	(~FH, ~S)
LC	0.8	0.5	0.7	0.1
~LC	0.2	0.5	0.3	0.9

The conditional probability table for the variable LungCancer

Bayesian Belief Networks (II)

- Bayesian belief network allows a *subset* of the variables conditionally independent
- A graphical model of causal relationships
- Several cases of learning Bayesian belief networks
  - Given both network structure and all the variables: easy
  - Given network structure but only some variables
  - When the network structure is not known in advance

Example



- Age, Occupation and Income decides whether a costumer buys a product
- If a costumer buys a product then his Interest in insurance is independent with Age, Occupation, Income.

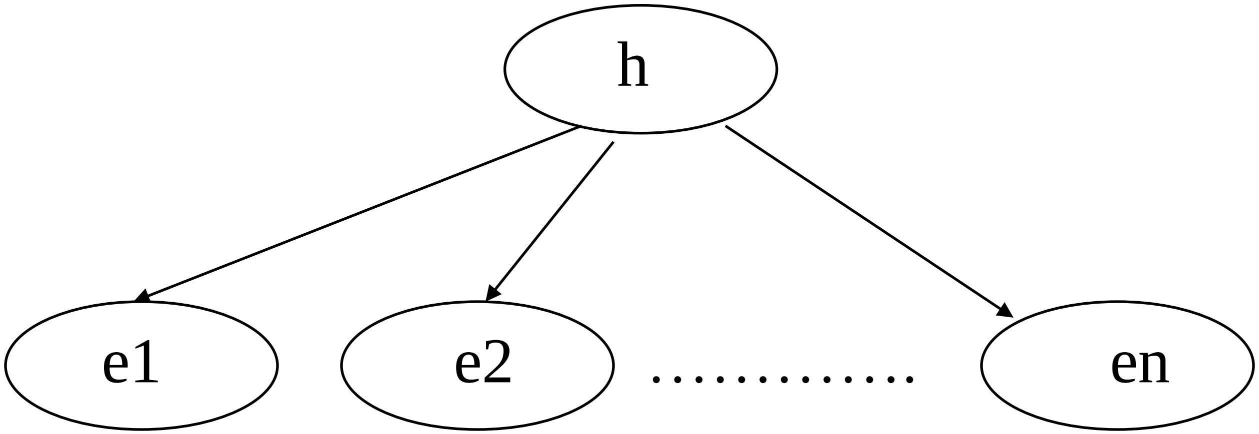
P(Age, Occ, Inc, Buy, Ins) =
= P(Age)P(Occ)P(Inc)
P(Buy|Age,Occ,Inc)P(Int|Buy)

Basic formula

$$P(x_1,\ldots,x_n \mid M) = \prod_{i=1}^{n} P(x_i \mid Pa_i, M)$$

$$Pa_i = parent(x_i)$$

The case of „naive Bayes”



$$P(e1, e2, \ldots\ldots en, h) = P(h)\, P(e1 \mid h) \ldots\ldots P(en \mid h)$$

CZĘŚĆ II
OCENA KLASYFIKATORÓW

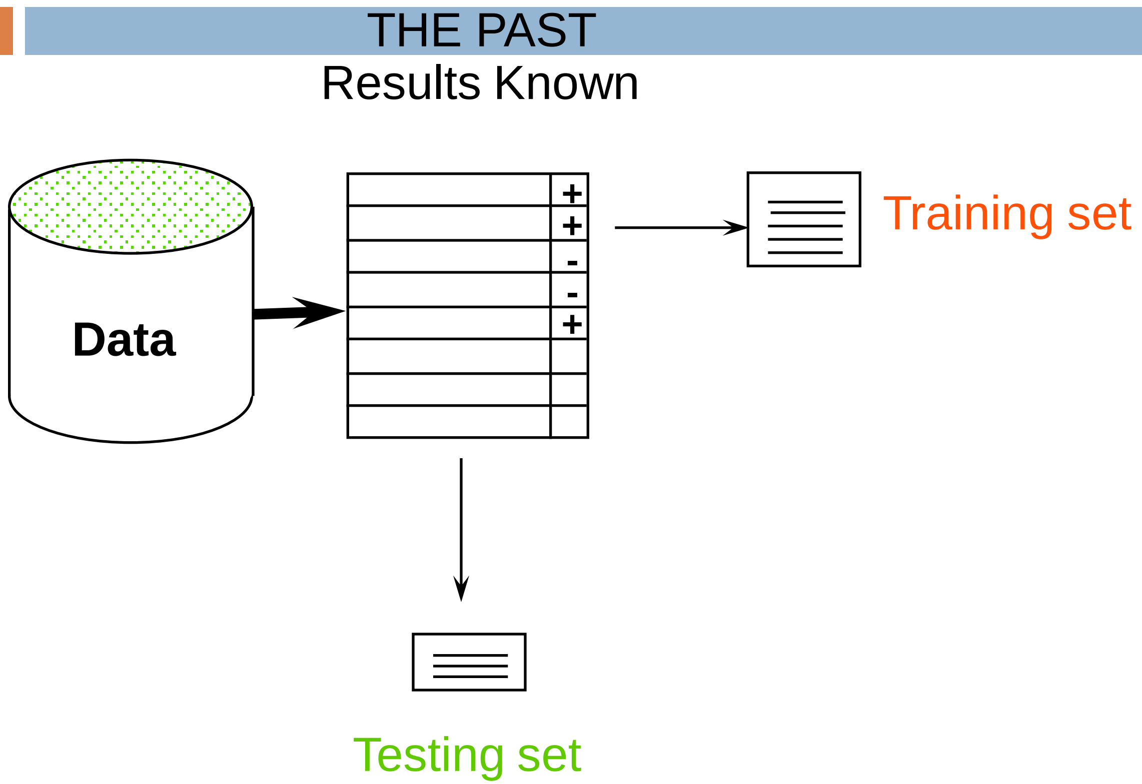
Metody oceniania klasyfikatorów

- Znane metody oceniania:
  - Skuteczność predykcji
  - Łączny koszt (gdy różne typy błędów powoduje różne koszty)
  - Krzywy „Lift” i „ROC”
  - Błędy przy predykcji wartości rzeczywistych.
- Jak wiarygodne są te miary?

Błąd klasyfikacji

- *error rate = l.błędów / l. obieków testowych*
  - *Sukces*: gdy obiekt jest prawidłowo klasyfikowany
  - *Błąd*: gdy obiekt jest źle klasyfikowany
  - Error rate: odsetka błędów podczas klasyfikacji
- *Błąd klasyfikacji na zbiorze*: zbyt optymistyczny!
  - Powinniśmy sprawdzić na losowych danych.

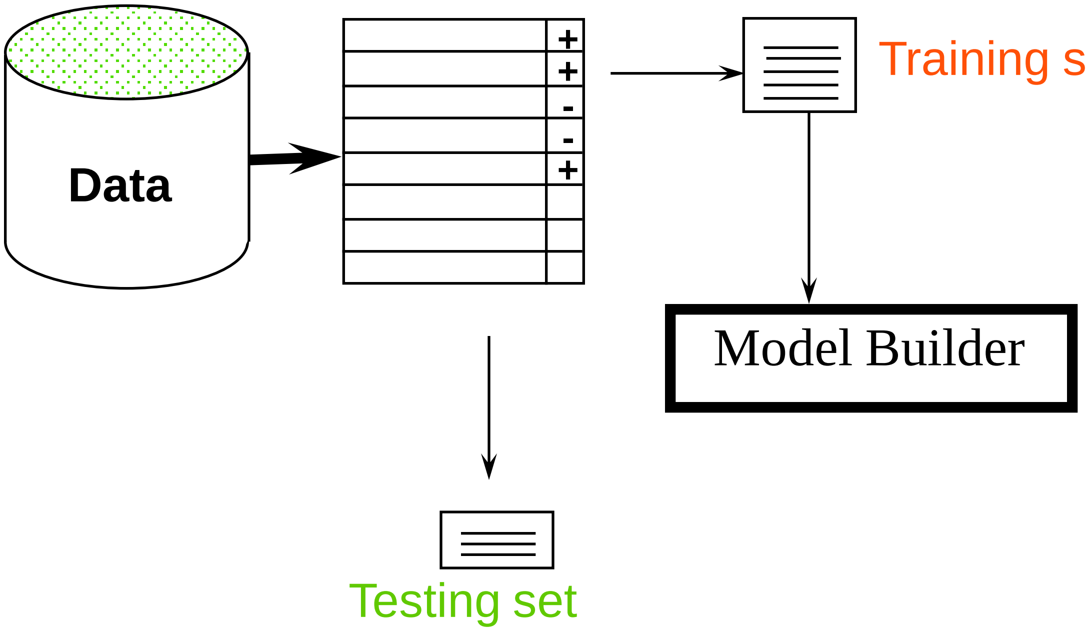
Classification Step 1:
Split data into train and test sets



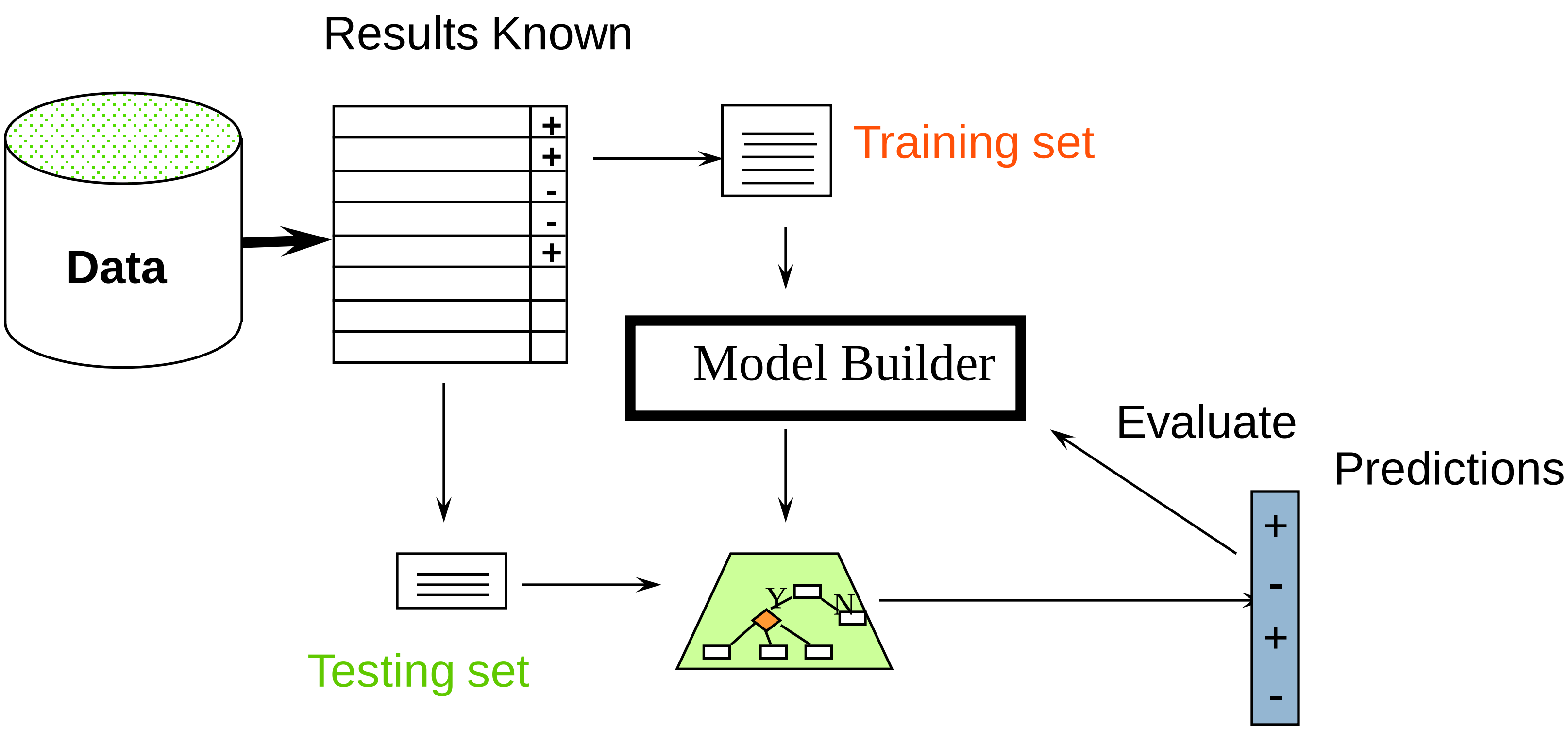
Classification Step 2:
Build a model on a training set

THE PAST

Results Known



Classification Step 3: Evaluate on test set (Re-train?)



A note on parameter tuning

- It is important that the test data is not used *in any way* to create the classifier
- Some learning schemes operate in two stages:
  - Stage 1: builds the basic structure
  - Stage 2: optimizes parameter settings
- The test data can't be used for parameter tuning!
- Proper procedure uses three sets: **training data, validation data, and test data**
  - Validation data is used to optimize parameters

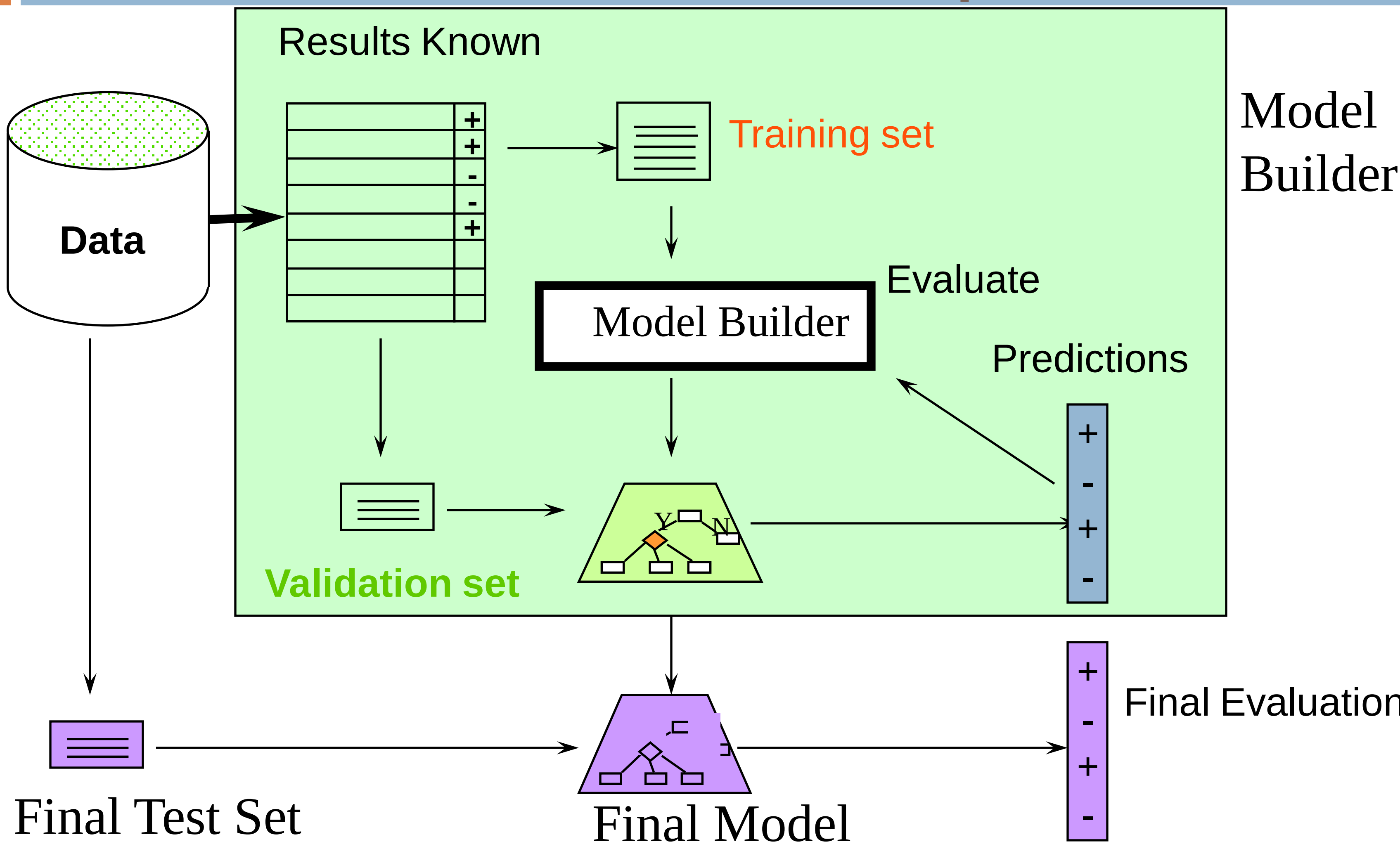
Making the most of the data

- Once evaluation is complete, *all the data* can be used to build the final classifier
- Generally, the larger the training data the better the classifier (but returns diminish)
- The larger the test data the more accurate the error estimate

Evaluation on "LARGE" data

- If many (thousands) of examples are available, including several hundred examples from each class, then a simple evaluation is sufficient
  - Randomly split data into training and test sets (usually 2/3 for train, 1/3 for test)
- Build a classifier using the *train* set and evaluate it using the *test* set.

Classification: Train, Validation, Test split



Handling unbalanced data

- Sometimes, classes have very unequal frequency
  - Attrition prediction: 97% stay, 3% attrite (in a month)
  - medical diagnosis: 90% healthy, 10% disease
  - eCommerce: 99% don't buy, 1% buy
  - Security: >99.99% of Americans are not terrorists
- Similar situation with multiple classes
- Majority class classifier can be 97% correct, but useless

Balancing unbalanced data

- With two classes, a good approach is to build **BALANCED** train and test sets, and train model on a balanced set
  - randomly select desired number of minority class instances
  - add equal number of randomly selected majority class
- Generalize "balancing" to multiple classes
  - Ensure that each class is represented with approximately equal proportions in train and test

*Predicting performance

- Assume the estimated error rate is 25%. How close is this to the true error rate?
  - Depends on the amount of test data
- Prediction is just like tossing a biased (!) coin
  - "Head" is a "success", "tail" is an "error"
- In statistics, a succession of independent events like this is called a Bernoulli process
- Statistical theory provides us with confidence intervals for the true underlying proportion!

*Przedział ufności

- We can say: p lies within a certain specified interval with a certain specified confidence
- Example: $S=750$ successes in $N=1000$ trials
  - Estimated success rate: 75%
  - How close is this to true success rate p?
    - Answer: with 80% confidence $p\in[73.2,76.7]$
- Another example: $S=75$ and $N=100$
  - Estimated success rate: 75%
  - With 80% confidence $p\in[69.1,80.1]$

*Wartość średnia i wariancja

- Mean and variance for a Bernoulli trial:
  p, $p\,(1-p)$
- Expected success rate $f=S/N$
- Mean and variance for f : p, $p\,(1-p)/N$
- For large enough N, f follows a Normal distribution
- c% confidence interval $[-z \le X \le z]$ for random variable with 0 mean is given by:

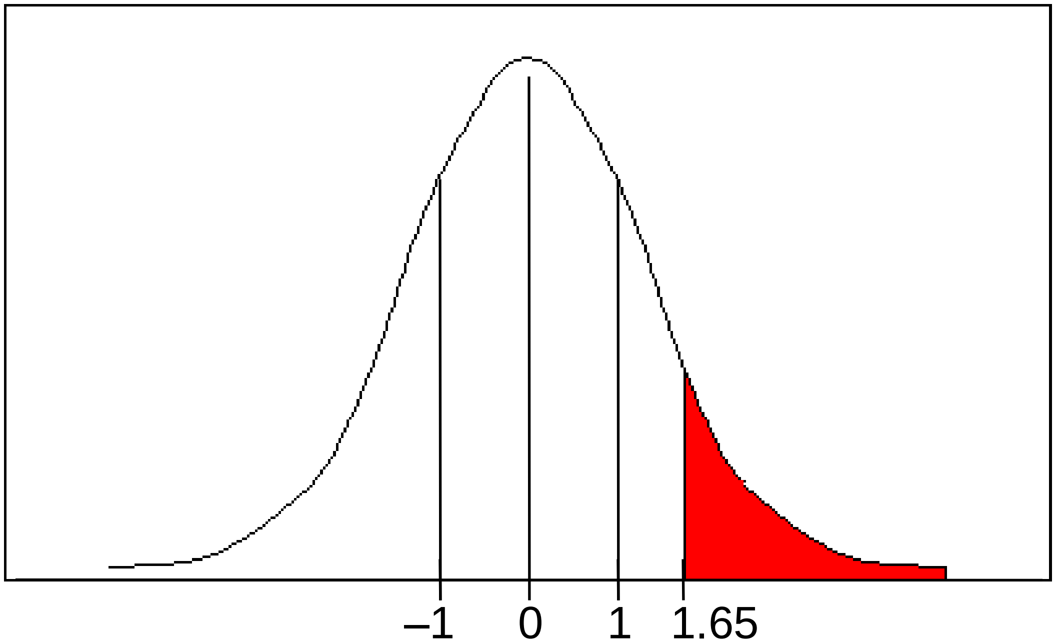
$$\Pr[-z \le X \le z] = c$$

- With a symmetric distribution:

$$\Pr[-z \le X \le z] = 1 - 2 \times \Pr[X \ge z]$$

*Granice ufności

- **Idea:** Sprowadzamy wszytskie problemy do rozkładu normalnego N(0,1):



$\Pr[-1.65 \leq X \leq 1.65] = 90\%$

Pr[*X* ≥ *z*]	*z*
0.1%	3.09
0.5%	2.58
1%	2.33
5%	1.65
10%	1.28
20%	0.84
40%	0.25

- Dla zmiennej X o rozkładzie N(0,1)

*Dla rozkładu Bernouliego

- Wartość oczekiwana i wariancję dla f : p, p (1–p)/N
- Normalizacja zm. *f*: $\boxed{\dfrac{f-p}{\sqrt{p(1-p)/N}}}$
- Mamy równanie na *p*: $\boxed{\Pr\left[-z \le \dfrac{f-p}{\sqrt{p(1-p)/N}} \le z\right] = c}$
- Rozwiązanie dla *p*:

$$\boxed{p = \left(f + \frac{z^2}{2N} \pm z\sqrt{\frac{f}{N} - \frac{f^2}{N} + \frac{z^2}{4N^2}}\right) \bigg/ \left(1 + \frac{z^2}{N}\right)}$$

*Przykład

- f = 75%, N = 1000, c = 80% (so that z = 1.28):

$$p \in [0.732, 0.767]$$

- f = 75%, N = 100, c = 80% (so that z = 1.28):

$$p \in [0.691, 0.801]$$

- Note that normal distribution assumption is only valid for large N (i.e. N > 100)
- f = 75%, N = 10, c = 80% (so that z = 1.28):

$$p \in [0.549, 0.881]$$

(should be taken with a grain of salt)

Ocena małych zbiorów danych

- Metoda podziału na trening i test:
  - Zwykle: 1/3 na test, 2/3 na trening
- Jeśli zbiór danych jest zbyt mały, zbiory treningowe i testowe nie są reprezentatywne:
  - Próbki muszą zawierać obiekty z każdej klasy
- *Stratified sample: advanced version of balancing the data*
  - Make sure that each class is represented with approximately equal proportions in both subsets

Repeated holdout method

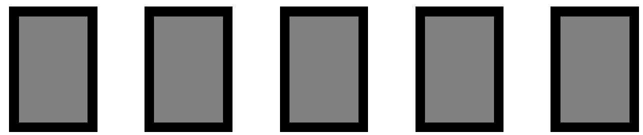
- Holdout estimate can be made more reliable by repeating the process with different subsamples
  - In each iteration, a certain proportion is randomly selected for training (possibly with stratification)
  - The error rates on the different iterations are averaged to yield an overall error rate
- This is called the *repeated holdout* method
- Still not optimum: the different test sets overlap
  - Can we prevent overlapping?

Cross-validation

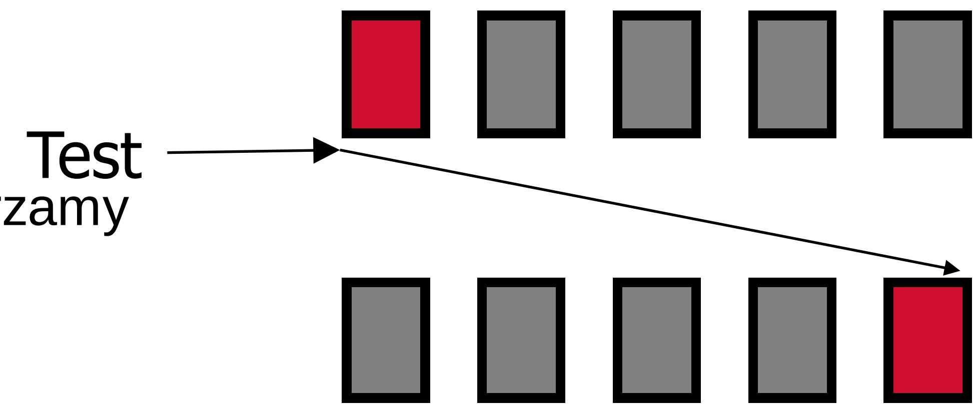
- *Cross-validation* avoids overlapping test sets
  - First step: data is split into *k* subsets of equal size
  - Second step: each subset in turn is used for testing and the remainder for training
- This is called *k-fold cross-validation*
- Often the subsets are stratified before the cross-validation is performed
- The error estimates are averaged to yield an overall error estimate

Cross-validation:

- Losowy podział zbioru danych na *k* grup



- Zatrzymamy jedną grupę do testu a reszty używamy do treningu



- Powtarzamy

More on cross-validation

- Standard method for evaluation: stratified ten-fold cross-validation
- Why ten? Extensive experiments have shown that this is the best choice to get an accurate estimate
- Stratification reduces the estimate's variance
- Even better: repeated stratified cross-validation
  - E.g. ten-fold cross-validation is repeated ten times and results are averaged (reduces the variance)

Leave-One-Out cross-validation

- Leave-One-Out:
  przypadek szczególny cross-validation
  Liczba grup = liczba przykładów
  - Tzn., dla n obiektów budujemy klasyfikator *n* razy
- Najlepiej ocenia klasyfikatora
- Obliczeniowo kosztowna metoda
  - (wyjątek: NN)

Leave-One-Out-CV and stratification

- Disadvantage of Leave-One-Out-CV: stratification is not possible
  - It *guarantees* a non-stratified sample because there is only one instance in the test set!
- Przykład ekstremalny: dane są podzielone losowo na 2 równe zbiory:
  - Głosowanie większościowe jest najlepszym klasyfikatorem.
  - Na nowych zbiorach danych - 50% skuteczności
  - Leave-One-Out-CV oszacuje, że jest 100% błędu!

*The bootstrap

- CV uses sampling *without replacement*
  - The same instance, once selected, can not be selected again for a particular training/test set
- Metoda *bootstrap* próbkuje ze zwracaniem, żeby stworzyć zbiory treningowe i testowe
  - Próbkuje ze zwracaniem n razy
  - Wybrane obiekty tworzą zbiór treningowy
  - Reszta – zbiór testowy.

*The 0.632 bootstrap

- Obiekt nie zostanie wybrany do zbioru treningowego z prawdopodobieństwem $1-1/n$
- Prawdopodobieństwo tego, że pozostaje w zbiorze testu:

$$\left(1-\frac{1}{n}\right)^n \approx e^{-1} = 0.368$$

- To oznacza, że zbiór treningowy zawiera ok. 63.2% przykładów

*Estimating error with the bootstrap

- The error estimate on the test data will be very pessimistic
  - Trained on just ~63% of the instances
- Therefore, combine it with the resubstitution error:

$$err = 0.632 \cdot e_{\text{test instances}} + 0.368 \cdot e_{\text{training instances}}$$

- The resubstitution error gets less weight than the error on the test data
- Repeat process several times with different replacement samples; average the results

*More on the bootstrap

- Probably the best way of estimating performance for very small datasets
- However, it has some problems
  - Consider the random dataset from above
  - A perfect memorizer will achieve
    0% resubstitution error and
    ~50% error on test data
  - Bootstrap estimate for this classifier:
    $$err = 0.632 \cdot 50\% + 0.368 \cdot 0\% = 31.6\%$$
  - True expected error: 50%

Comparing data mining schemes

- Frequent situation: we want to know which one of two learning schemes performs better
- Note: this is domain dependent!
- Obvious way: compare 10-fold CV estimates
- Problem: variance in estimate
- Variance can be reduced using repeated CV
- However, we still don't know whether the results are reliable

Direct Marketing Paradigm

- Find most likely prospects to contact
- Not everybody needs to be contacted
- Number of targets is usually much smaller than number of prospects

- Typical Applications
  - retailers, catalogues, direct mail (and e-mail)
  - customer acquisition, cross-sell, attrition prediction
  - ...

Direct Marketing Evaluation

- **Accuracy on the entire dataset is not the right measure**
- Approach
  - develop a target model
  - score all prospects and rank them by decreasing score
  - select top P% of prospects for action
- How to decide what is the best selection?

Cost Sensitive Learning

- There are two types of errors

		Predicted class	
		Yes	No
Actual class	Yes	TP: True positive	FN: False negative
	No	FP: False positive	TN: True negative

- Machine Learning methods usually minimize FP+FN
- Direct marketing maximizes TP

Model-Sorted List

Use a model to assign score to each customer
Sort customers by decreasing score
Expect more targets (hits) near the top of the list

No	Score	Target	CustID	Age	
1	0.97	Y	1746	…	
2	0.95	N	1024	…	
3	0.94	Y	2478	…	
4	0.93	Y	3820	…	
5	0.92	N	4897	…	
…	…		…	…	
99	0.11	N	2734	…	
100	0.06	N	2422		

3 hits in top 5% of the list

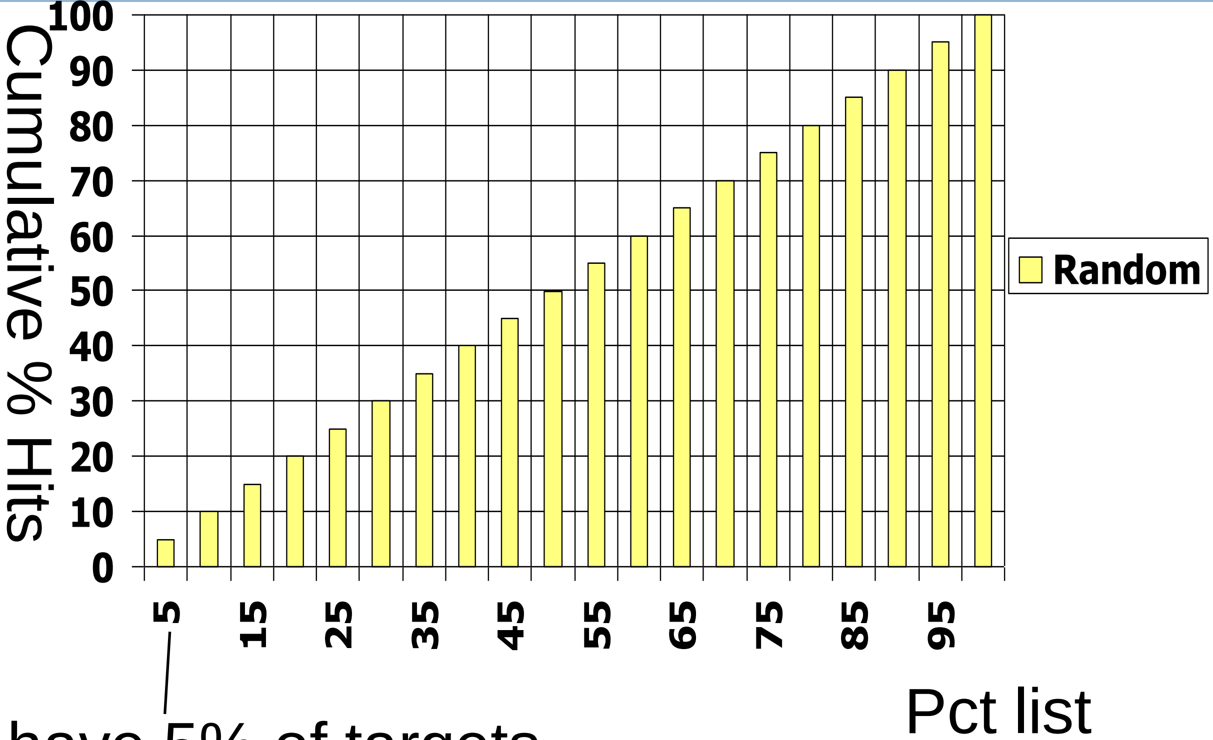
If there 15 targets overall, then top 5 has 3/15=20% of targets

Gain chart

CPH (Cumulative Pct Hits)

CPH(P,M) = % of all targets in the first P% of the list scored by model M

CPH frequently called Gains

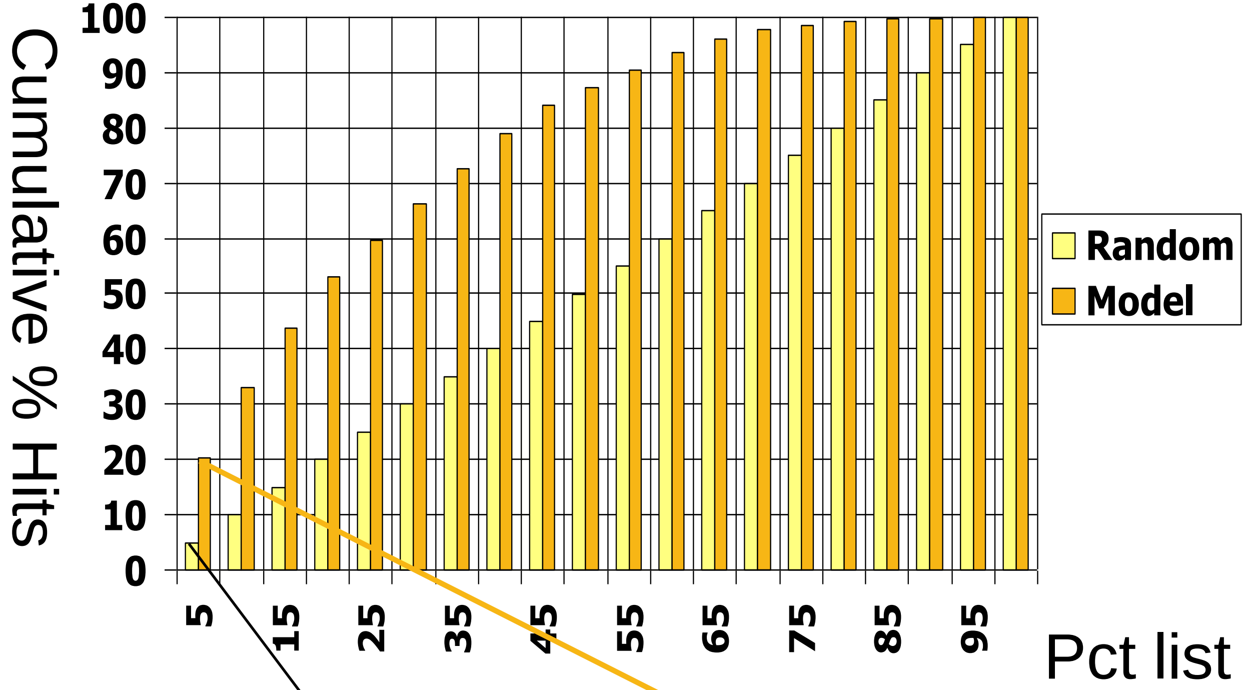


5% of random list have 5% of targets

Q: What is expected value for CPH(P,Random) ?

A: Expected value for CPH(P,Random) = P

CPH: Random List vs Model-ranked list



5% of random list have 5% of targets,

but 5% of model ranked list have 21% of targets
CPH(5%,model)=21%.

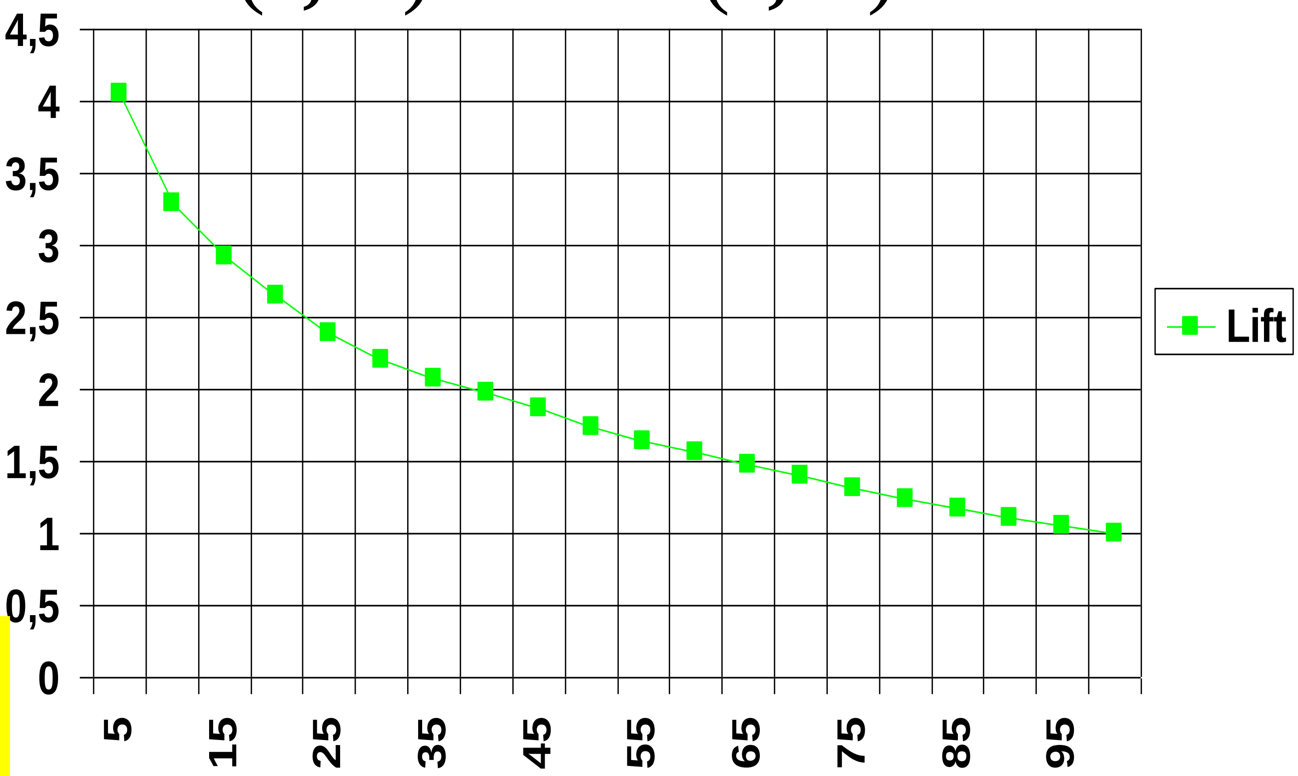
Lift

Lift (at 5%)

= 21% / 5%

= 4.2
better
than random

Lift(*P*,*M*) = CPH(*P*,*M*) / *P*



P -- percent of the list

Note: Some (including Witten & Eibe) use "Lift" for what we call CPH.

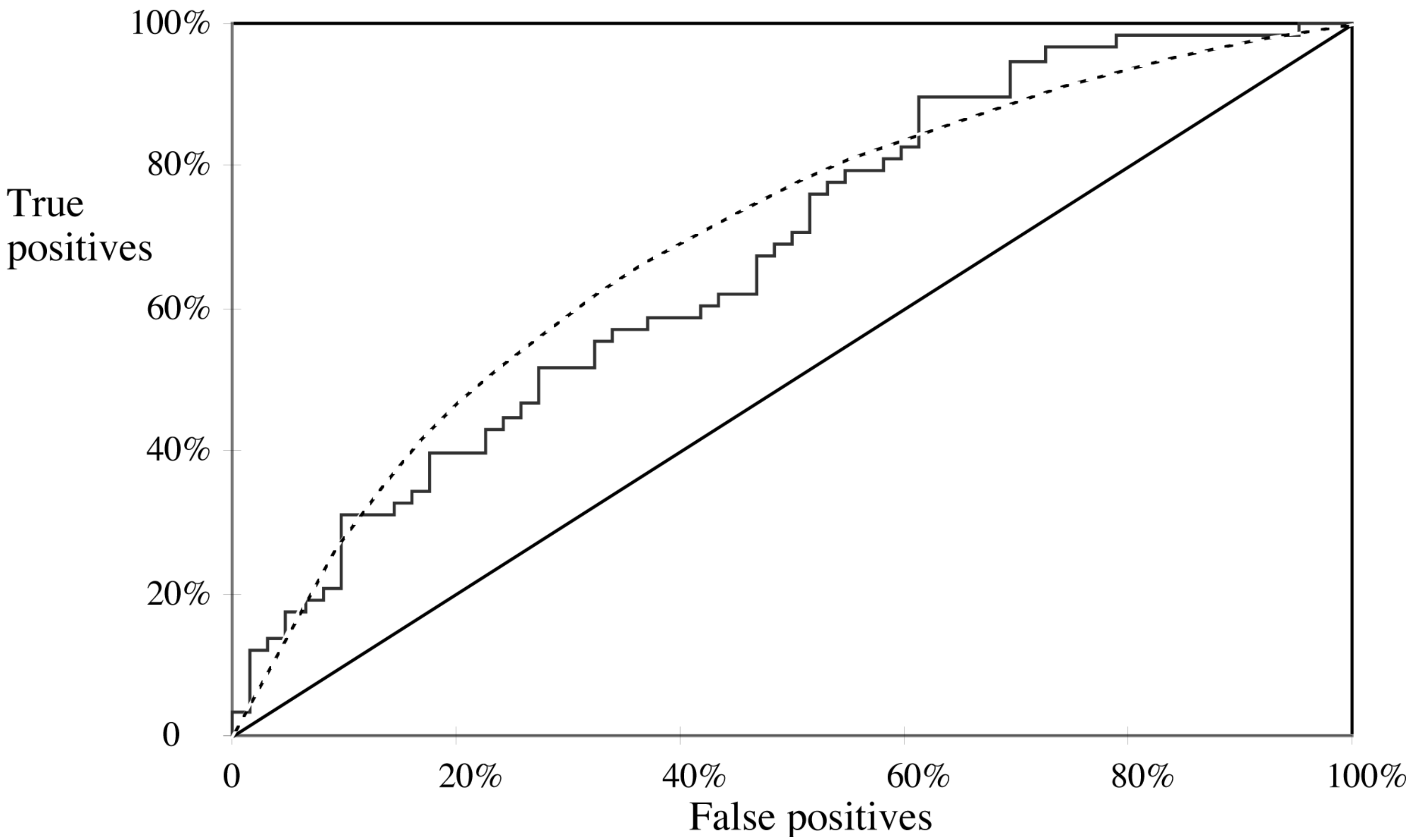
Lift Properties

- **Q: *Lift(P,Random) =***
  - ***A:*** 1 (expected value, can vary)
- **Q: *Lift(100%, M) =***
  - ***A:*** 1 (for any model M)
- **Q: *Can lift be less than 1?***
  - ***A***: yes, if the model is inverted (all the non-targets precede targets in the list)
- Generally, a better model has higher lift

*ROC curves

- *ROC curves* are similar to gains charts
  - Stands for "receiver operating characteristic"
  - Used in signal detection to show tradeoff between hit rate and false alarm rate over noisy channel
- Differences from gains chart:
  - *y* axis shows percentage of true positives in sample *rather than absolute number*
  - *x* axis shows percentage of false positives in sample *rather than sample size*

*A sample ROC curve

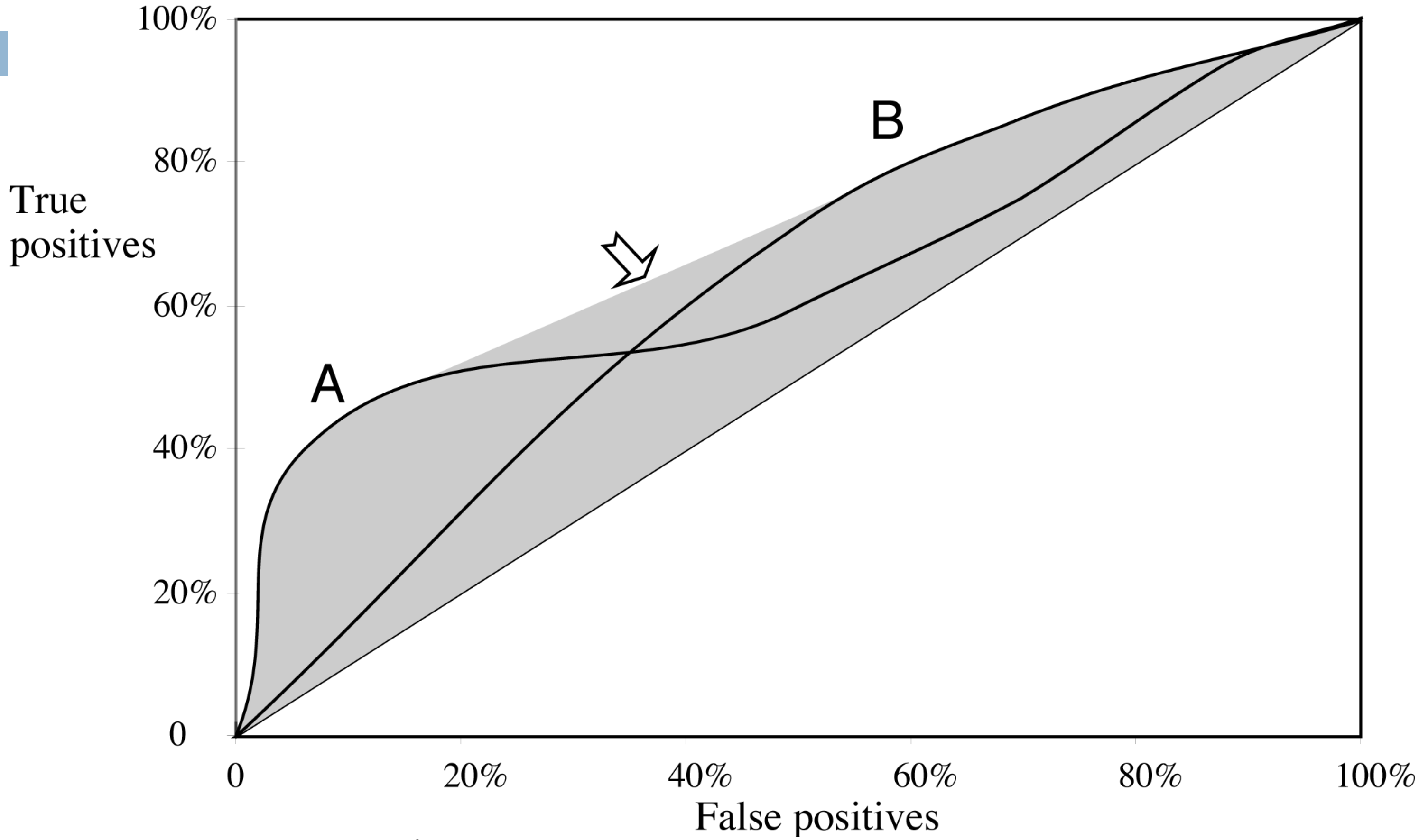


- Jagged curve—one set of test data
- Smooth curve—use cross-validation

*Cross-validation and ROC curves

- Simple method of getting a ROC curve using cross-validation:
  - Collect probabilities for instances in test folds
  - Sort instances according to probabilities
- This method is implemented in WEKA
- However, this is just one possibility
  - The method described in the book generates an ROC curve for each fold and averages them

*ROC curves for two schemes



- For a small, focused sample, use method A
- For a larger one, use method B
- In between, choose between A and B with appropriate probabilities

*The convex hull

- Given two learning schemes we can achieve any point on the convex hull!
- TP and FP rates for scheme 1: t_1 and f_1
- TP and FP rates for scheme 2: t_2 and f_2
- If scheme 1 is used to predict $100 \times q$ % of the cases and scheme 2 for the rest, then
  - TP rate for combined scheme:
    $q \times t_1 + (1-q) \times t_2$
  - FP rate for combined scheme:
    $q \times f_2 + (1-q) \times f_2$

Different Costs

- In practice, true positive and false negative errors often incur different costs
- Examples:
  - Medical diagnostic tests: does X have leukemia?
  - Loan decisions: approve mortgage for X?
  - Web mining: will X click on this link?
  - Promotional mailing: will X buy the product?
  - …

Cost-sensitive learning

- Most learning schemes do not perform cost-sensitive learning
  - They generate the same classifier no matter what costs are assigned to the different classes
  - Example: standard decision tree learner
- Simple methods for cost-sensitive learning:
  - Re-sampling of instances according to costs
  - Weighting of instances according to costs
- Some schemes are inherently cost-sensitive, e.g. naïve Bayes

KDD Cup 98 – a Case Study

- Cost-sensitive learning/data mining widely used, but rarely published
- Well known and public case study: KDD Cup 1998
  - Data from Paralyzed Veterans of America (charity)
  - Goal: select mailing with the highest profit
  - Evaluation: Maximum actual profit from selected list (with mailing cost = $0.68)
    - Sum of (actual donation-$0.68) for all records with predicted/ expected donation > $0.68
- More in a later lesson

*Measures in information retrieval

- Percentage of retrieved documents that are relevant:

  precision=TP/(TP+FP)

- Percentage of relevant documents that are returned:

  recall =TP/(TP+FN)

- **Precision/recall curves** have hyperbolic shape
- **Summary measures:** average precision at 20%, 50% and 80% recall (*three-point average recall*)
- *F-measure*=(2×recall×precision)/(recall+precision)

*Summary of measures

	Domain	Plot	Explanation
Lift chart	*Marketing*	**TP** **Subset size**	**TP** **(TP+FP)/(TP+FP+TN+FN)**
ROC curve	*Communications*	**TP rate** **FP rate**	**TP/(TP+FN)** **FP/(FP+TN)**
Recall-precision curve	*Information retrieval*	**Recall** **Precision**	**TP/(TP+FN)** **TP/(TP+FP)**