Maschinelles Lernen: Symbolische Ansätze

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Wintersemester 2012/2013
Musterlösung für das 8. Übungsblatt

Aufgabe 1 RISE

Gegeben sei folgende Beispielmenge:

Outlook	Temperature	Humidity	Wind	PlayTennis
Overcast	Hot	High	False	Yes
Rainy	Cool	Normal	True	No
Rainy	Cool	Normal	False	Yes
Sunny	Mild	High	False	No
Overcast	Mild	High	True	Yes
Sunny	Cool	Normal	False	Yes
Overcast	Cool	Normal	True	Yes
Rainy	Mild	High	True	No
Sunny	Hot	High	False	No
Sunny	Mild	Normal	True	Yes
Rainy	Mild	Normal	False	Yes
Sunny	Hot	High	True	No
Rainy	Mild	High	False	Yes
Overcast	Hot	Normal	False	Yes

a) Wenden Sie den Algorithmus RISE (Foliensatz Instance-based Learning, Folie 42) auf den obigen Datensatz an. Berechnen Sie zur Vereinfachung nur die *erste Iteration* und diese nur für die *negativen Beispiele* und nur für die Regeln aus der Theorie mit *negativem Head*.

Bedenken Sie, dass bei der Berechnung der Accuracy für ein Beispiel die Regel, die aus diesem Beispiel selbst erzeugt wurde, nicht einbezogen wird, da dies bereits zu einer perfekten Klassifikation führen würde und der Algorithmus somit bereits beendet wäre. Beachten Sie auch, daß die Accuracy für die gesamte Theorie berechnet wird, obwohl wir in der Iteration nur die negativen Regeln daraus betrachten.

Benutzen Sie zur Berechnung der Distanz der Attribute die *Value Difference Metric* und nehmen Sie hierbei an, dass $k = 1$ gilt. Als Vereinfachung müssen Sie die *VDM* nicht normieren.

Zur Bestimmung des Abstandes eines Beispiels zu einer Regel verwenden Sie die euklidische Distanz, wobei Sie das Ziehen der Wurzel weglassen können.

Müssen Sie 2 Regeln zusammenfassen, so ist es Voraussetzung, dass diese die gleiche Klasse vorhersagen.

Lösung:

VDM Distanzen

Als erstes berechnen wir die *VDM*:

	outlook		
	sunny	overcast	rainy
yes	2	4	3
no	3	0	2

	temperature		
	cool	hot	mild
yes	3	2	4
no	1	2	2

	humidity	
	high	normal
yes	3	6
no	4	1

	wind	
	false	true
yes	6	3
no	2	3

Daraus folgen dann die Abstände, die für die Berechnung der euklidischen Distanz bereits hier quadriert werden:

- für das Attribut *outlook*

  $d(sunny, overcast) = |\frac{2}{5} - 1| + |\frac{3}{5} - 0| = 1,2 \rightarrow 1,2^2 = 1,44$

  $d(sunny, rainy) = |\frac{2}{5} - \frac{3}{5}| + |\frac{3}{5} - \frac{2}{5}| = 0,4 \rightarrow 0,4^2 = 0,16$

  $d(overcast, rainy) = |1 - \frac{3}{5}| + |0 - \frac{2}{5}| = 0,8 \rightarrow 0,8^2 = 0,64$

- für das Attribut *temperature*

  $d(cool, hot) = |\frac{3}{4} - \frac{1}{2}| + |\frac{1}{4} - \frac{1}{2}| = 0,5 \rightarrow 0,5^2 = 0,25$

  $d(cool, mild) = |\frac{3}{4} - \frac{2}{3}| + |\frac{1}{4} - \frac{1}{3}| = \frac{1}{6} \rightarrow \frac{1}{6}^2 = \frac{1}{36}$

  $d(hot, mild) = |\frac{1}{2} - \frac{2}{3}| + |\frac{1}{2} - \frac{1}{3}| = \frac{1}{3} \rightarrow \frac{1}{3}^2 = \frac{1}{9}$

- für das Attribut *humidity*

  $d(high, normal) = |\frac{3}{7} - \frac{6}{7}| + |\frac{4}{7} - \frac{1}{7}| = \frac{6}{7} \rightarrow \frac{6}{7}^2 = \frac{36}{49}$

- für das Attribut *wind*

  $d(false, true) = |\frac{3}{4} - \frac{1}{2}| + |\frac{1}{4} - \frac{1}{2}| = 0,5 \rightarrow 0,5^2 = 0,25$

Accuracy der initialen Regelmenge

Nun müssen wir die initiale Accuracy ausrechnen. Dazu müssen wir herausfinden, von welcher Regel jedes Beispiel klassifiziert wird und wie es klassifiziert wird. Hierzu müssen wir die Distanzen berechnen. Als erstes ordnen wir die Beispiele, indem wir zuerst alle negativen und dann alle positiven aufführen und benennen diese mit dem Buchstaben *N* für “No” sowie dem Index des Beispiels (*Y* für “Yes”):

Name	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	PlayTennis
N1	Rainy	Cool	Normal	True	No
N2	Sunny	Mild	High	False	No
N3	Rainy	Mild	High	True	No
N4	Sunny	Hot	High	False	No
N5	Sunny	Hot	High	True	No
Y1	Rainy	Mild	High	False	Yes
Y2	Sunny	Mild	Normal	True	Yes
Y3	Rainy	Mild	Normal	False	Yes
Y4	Overcast	Hot	Normal	False	Yes
Y5	Overcast	Mild	High	True	Yes
Y6	Overcast	Cool	Normal	True	Yes
Y7	Overcast	Hot	High	False	Yes
Y8	Sunny	Cool	Normal	False	Yes
Y9	Rainy	Cool	Normal	False	Yes

Dann finden wir für jedes Beispiel die Regel, die es klassifiziert (also deren euklidische Distanz am geringsten ist). Wir zeigen dies beispielhaft für das erste Beispiel:

zu klass. Beispiel	Regel	*Outlook*	*Temperature*	*Humidity*	*Rainy*	Distanz
N1		**Rainy**	**Cool**	**Normal**	**True**	0
	N2	0,16	1/36	36/49	0,25	0,16+1/36+36/49+0,25=1,17
	N3	0	1/36	36/49	0	0,76
	N4	0,16	0,25	36/49	0,25	1,39
	N5	0,16	0,25	36/49	0	1,14
	Y1	0	1/36	36/49	0,25	1,01
	Y2	0,16	1/36	0	0	0,19
	Y3	0	1/36	0	0,25	0,28
	Y4	0,64	0,25	0	0,25	1,14
	Y5	0,64	1/36	36/49	0	1,40
	Y6	0,64	0	0	0	0,64
	Y7	0,64	0,25	36/49	0,25	1,87
	Y8	0,16	0	0	0,25	0,41
	Y9	0	0	0	0,25	0,25

Wie man in der Tabelle sehen kann hat die Regel Y2 die geringste Distanz. Daher würde das Beispiel mit dieser Regel klassifiziert werden als *Yes*. Nachfolgend sind alle Distanzen aufgeführt:

	N1	N2	N3	N4	N5	Y1	Y2	Y3	Y4	Y5	Y6	Y7	Y8	Y9	NN	Dist.
N1		1,17	0,76	1,39	1,14	1,01	0,19	0,28	1,14	1,40	0,64	1,87	0,41	0,25	Y2	0,19
N2	1,17		0,41	0,11	0,36	0,16	0,98	0,89	2,29	1,69	2,45	1,55	0,76	0,92	N4	0,11
N3	0,76	0,41		0,52	0,27	0,25	0,89	0,98	1,74	0,64	1,40	1,00	1,17	1,01	Y1	0,25
N4	1,39	0,11	0,52		0,25	0,27	1,10	1,01	2,17	1,80	2,67	1,44	0,98	1,14	N2	0,11
N5	1,14	0,36	0,27	0,25		0,52	0,85	1,26	2,42	1,55	2,42	1,69	1,23	1,39	N4	0,25
Y1	1,01	0,16	0,25	0,27	0,52		1,14	0,73	1,49	0,89	1,65	0,75	0,92	0,76	N2	0,16
Y2	0,19	0,98	0,89	1,10	0,85	1,14		0,41	1,8	2,17	1,47	2,54	0,28	0,44	N1	0,19
Y3	0,28	0,89	0,98	1,01	1,26	0,73	0,41		0,75	1,62	0,92	1,49	0,19	0,03	Y9	0,03
Y4	1,14	2,29	1,74	2,17	2,42	1,49	1,8	0,75		1,10	0,5	0,73	1,69	0,89	Y6	0,50
Y5	1,40	1,69	0,64	1,80	1,55	0,89	2,17	1,62	1,10		0,76	0,36	2,45	1,65	Y7	0,36
Y6	0,64	2,45	1,40	2,67	2,42	1,65	1,47	0,92	0,5	0,76		1,23	1,69	0,89	Y4	0,50
Y7	1,87	1,55	1,00	1,44	1,69	0,75	2,54	1,49	0,73	0,36	1,23		2,42	1,62	Y5	0,36
Y8	0,41	0,76	1,17	0,98	1,23	0,92	0,28	0,19	1,69	2,45	1,69	2,42		0,16	Y9	0,16
Y9	0,25	0,92	1,01	1,14	1,39	0,76	0,44	0,03	0,89	1,65	0,89	1,62	0,16		Y3	0,03

Zusammenfassend:

zu klass. Beispiel	Regel	Distanz	Vorhersage
N1	Y2	0,19	Yes
N2	N4	0,11	No
N3	Y1	0,25	Yes
N4	N2	0,11	No
N5	N4	0,25	No
Y1	N2	0,16	No
Y2	N1	0,19	No
Y3	Y9	0,03	Yes
Y4	Y6	0,50	Yes
Y5	Y7	0,36	Yes
Y6	Y4	0,50	Yes
Y7	Y5	0,36	Yes
Y8	Y9	0,16	Yes
Y9	Y3	0,03	Yes

Zu beachten ist hier, dass man bereits berechnete Distanzen wiederverwenden kann und so zB. die Distanzen zu N1 bis N3 für das Beispiel N4 nicht berechnen braucht (Symmetrie der Distanzmatrix).

Nun sieht man, dass folgende Beispiele falsch klassifiziert werden: N1 (ist “No”, klassifiziert als “Yes”), N3 (ist “No”, klassifiziert als “Yes”), Y1 und Y2 (sind “Yes”, klassifiziert als “No”). Daher ist die initiale Accuracy $\frac{10}{14} \approx 0,71$.

Erste Iteration: N1

Als nächstes beginnen wir mit dem ersten Schritt des Algorithmus. Dazu verwenden wir als unsere Theorie die Regeln aus der vorherigen Teilaufgabe, die jeweils aus den Beispielen erzeugt wurden. Dann gehen wir alle (laut Aufgabenstellung negativen) Regeln durch und suchen jeweils das nicht abgedeckte (negative) Beispiel mit dem geringsten Abstand.

Für die Regel (das Beispiel) N1:

Regel	Beispiel	Distanz
N1	N2	1,17
N1	N3	0,76
N1	N4	1,39
N1	N5	1,14

Wir generalisieren damit N1 und N3 minimal, was zu folgender Regel N13 führt:

Outlook	Temperature	Humidity	Windy	PlayTennis
Rainy	?	?	True	No

Nun müssen wir überprüfen, ob sich die Accuracy nicht verschlechtert hat. Dazu müssen wir die Abstände zu N13 neu berechnen und überprüfen, ob sich die kürzeste Distanz verändert hat:

Beispiel	neue Distanz	momentan kürzester Abstand	beste Regel
N1	0	0,19	N13 (Y2)
N2	0,41	0,11	N4
N3	0	0,25	N13 (Y1)
N4	0,41	0,11	N2
N5	0,16	0,25	N13 (N4)
Y1	0,25	0,16	N2
Y2	0,16	0,19	N13 (N1)
Y3	0,25	0,03	Y9
Y4	0,89	0,50	Y6
Y5	0,64	0,36	Y7
Y6	0,64	0,50	Y4
Y7	0,89	0,36	Y5
Y8	0,41	0,16	Y9
Y9	0,25	0,03	Y3

Wie man sehen kann, ändern sich die Abstände zu den Beispielen N1, N3, N5 und Y2 (hier ist die vorherige beste Regel in Klammern dargestellt). N1 und N2 werden nun richtig klassifiziert, bei N5 und Y2 ändert sich nichts, wobei Y2 weiterhin falsch klassifiziert wird. Daher wird die Accuracy etwas besser und beträgt nun $\frac{12}{14} \approx 0,86$. Aus diesem Grund ist die Generalisierung zulässig und wird durchgeführt.

Erste Iteration: N2

Für die Regel (das Beispiel) N2:

Als erstes müssen nun wir uns die Distanzen ansehen:

Regel	Beispiel	Distanz
N2	N1	1,17
N2	N3	0,41
N2	N4	0,11
N2	N5	0,36

Wir generalisieren somit N2 und N4 minimal, was zu folgender Regel N24 führt:

Outlook	Temperature	Humidity	Windy	PlayTennis
Sunny	?	High	False	No

Nun müssen wir überprüfen, ob sich die Accuracy nicht verschlechtert hat. Dazu müssen wir die Abstände zu N24 neu berechnen und überprüfen, ob sich die kürzeste Distanz verändert hat (grün kennzeichnet die letzte unmittelbare Änderung):

Beispiel	neue Distanz	momentan kürzester Abstand	Regel
N1	1,14	0	N13
N2	0	0,11	N24 (N4)
N3	0,41	0	N13
N4	0	0,11	N24 (N2)
N5	0,25	0,16	N13
Y1	0,16	0,16	N24, N2
Y2	0,98	0,16	N13
Y3	0,89	0,25	Y9
Y4	2,17	0,5	Y6
Y5	1,69	0,36	Y7
Y6	2,42	0,5	Y4
Y7	1,44	0,36	Y5
Y8	0,73	0,16	Y9
Y9	0,89	0,16	Y8

Es ändert sich nichts an der Accuracy, da kein Beispiel nun anders klassifiziert wird. Daher ist auch diese Generalisierung zulässig und wird hinzugefügt.

Erste Iteration: N3

Für die Regel (das Beispiel) N3:

Wir sehen uns wieder die Distanzen an:

Regel	Beispiel	Distanz
N3	N1	0,76
N3	N2	0,41
N3	N4	0,52
N3	N5	0,27

Wir generalisieren damit N3 und N5 minimal, was zu folgender Regel N35 führt:

Outlook	Temperature	Humidity	Windy	PlayTennis
?	?	High	True	No

Nun müssen wir überprüfen, ob sich die Accuracy nicht verschlechtert hat. Dazu müssen wir die Abstände zu N35 neu berechnen und überprüfen, ob sich die kürzeste Distanz verändert hat:

Beispiel	neue Distanz	momentan kürzester Abstand	beste Regel
N1	0,73	0	N13
N2	0,25	0	N24
N3	0	0	N13
N4	0,25	0	N24
N5	0	0,16	N35 (N13)
Y1	0,25	0,16	N24, N2
Y2	0,73	0,16	N13
Y3	0,98	0,25	Y9
Y4	0,98	0,5	Y6
Y5	0	0,36	N35 (Y7)
Y6	0,73	0,5	Y4
Y7	0,25	0,36	N35 (Y5)
Y8	0,98	0,16	Y9
Y9	0,98	0,16	Y8

Bei N3 und N5 ändert sich nichts, aber Y5 und Y7 werden nun (fehlerhaft) negativ klassifiziert. Daher verschlechtert sich die Accuracy und wir fügen diese Generalisierung nicht hinzu.

Erste Iteration: N4

Für die Regel (das Beispiel) N4:

Die Distanzen sind wie folgt:

Regel	Beispiel	Distanz
N4	N1	1,39
N4	N2	0,11
N4	N3	0,52
N4	N5	0,25

N4 und N2 werden minimal generalisiert, was zu folgender Regel N42 führt:

Outlook	Temperature	Humidity	Windy	PlayTennis
Sunny	?	High	False	No

Da diese Regel bereits in der Liste enthalten ist, wird sie nicht hinzugefügt; N4 wird dennoch aus der Theorie entfernt, da sie nicht mehr benötigt wird (im Algorithmus im Foliensatz Instance-based Learning, Folie 42 in Zeile 2. iv).

Erste Iteration: N5

Für die Regel (das Beispiel) N5:

Die Distanzen sind wie folgt:

Regel	Beispiel	Distanz
N5	N1	1,14
N5	N2	0,36
N5	N3	0,27
N5	N4	0,25

N5 und N4 werden minimal generalisiert, was zu folgender Regel N54 führt:

Outlook	Temperature	Humidity	Windy	PlayTennis
Sunny	Hot	High	?	No

Nun müssen wir überprüfen, ob sich die Accuracy nicht verschlechtert hat. Dazu müssen wir die Abstände zu N54 neu berechnen und überprüfen, ob sich die kürzeste Distanz verändert hat:

Beispiel	neue Distanz	momentan kürzester Abstand	beste Regel
N1	1,14	0	N13
N2	0,11	0	N24
N3	0,27	0	N13
N4	0	0	N24
N5	0	0,16	N54 (N13)
Y1	0,27	0,16	N24
Y2	0,85	0,16	N13
Y3	1,01	0,25	Y9
Y4	2,17	0,5	Y6
Y5	1,55	0,36	Y7
Y6	2,42	0,5	Y4
Y7	1,44	0,36	Y5
Y8	0,98	0,16	Y9
Y9	1,14	0,16	Y8

Nur bei N5 könnte sich etwas ändern, hier war aber die Klassifikation bereits richtig. Daher ändert sich an der Accuracy nichts, die Generalisierung wird hinzugefügt und wir erhalten folgende Regelmenge:

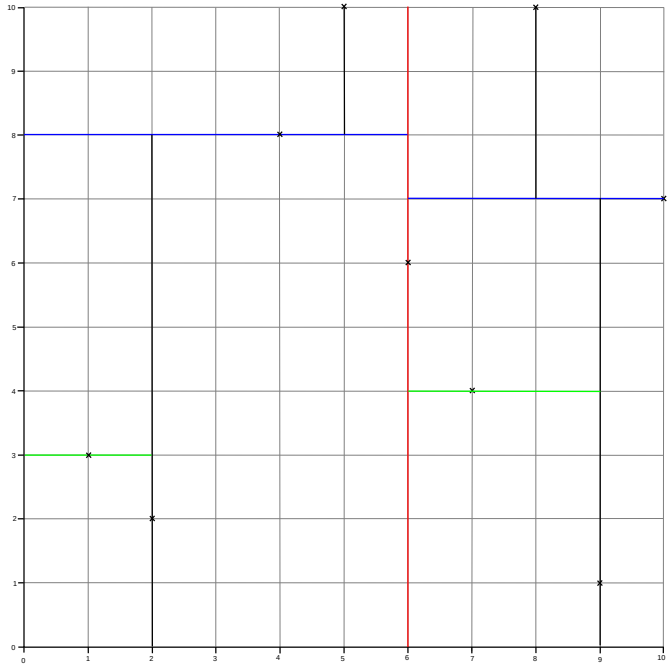
Name	Outlook	Temperature	Humidity	Windy	PlayTennis
N13	Rainy	?	?	True	No
N24	Sunny	?	High	False	No
N3	Rainy	Mild	High	True	No
N54	Sunny	Hot	High	?	No
Y1	Rainy	Mild	High	False	Yes
Y2	Sunny	Mild	Normal	True	Yes
Y3	Rainy	Mild	Normal	False	Yes
Y4	Overcast	Hot	Normal	False	Yes
Y5	Overcast	Mild	High	True	Yes
Y6	Overcast	Cool	Normal	True	Yes
Y7	Overcast	Hot	High	False	Yes
Y8	Sunny	Cool	Normal	False	Yes
Y9	Rainy	Cool	Normal	False	Yes

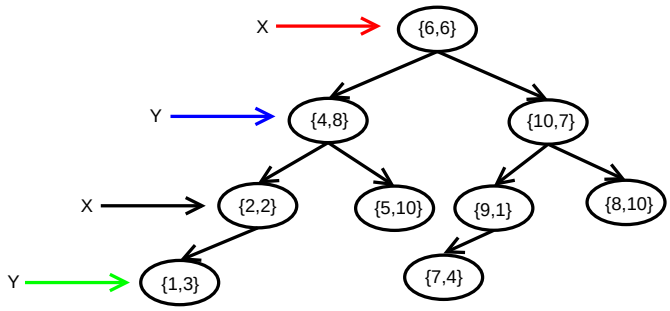
Aufgabe 2 KD-Trees

a) Bauen Sie einen `KD-Tree` aus der folgenden 2D Punktmenge auf und zeichnen Sie sowohl den Baum als auch die grafische Lösung im 2D-Raum:
$\{\{4,8\},\{7,4\},\{5,10\},\{1,3\},\{2,2\},\{9,1\},\{10,7\},\{8,10\},\{6,6\}\}$.

Verwenden Sie bei gerader Anzahl Punkte den größeren Wert bei der Bestimmung des Medians.

Lösung: Zuerst wird nach der Variablen x geschaut. Daher müssen die Punkte aufsteigend nach ihrer x-Koordinate sortiert werden: $X = \{\{1,3\},\{2,2\},\{4,8\},\{5,10\},\{6,6\},\{7,4\},\{8,10\},\{9,1\},\{10,7\}\}$. Dann macht man die erste Trennung beim Median, also beim Punkt $\{6,6\}$ (in der Grafik entspricht das der roten Linie). Als nächstes trennt man nach der Variabeln y. Man sortiert wieder beide Mengen: $Y_1 = \{\{2,2\},\{1,3\},\{4,8\},\{5,10\}\}$,
$Y_2 = \{\{9,1\},\{7,4\},\{10,7\},\{8,10\}\}$. Nun nimmt man wieder die Mediane der beiden Menge als Trennlinien (in der Grafik blau). Da es sich um eine gerade Anzahl handelt, entschließen wir uns für den größeren Wert. Danach teilt man wieder nach x auf: $X_1 = \{\{1,3\},\{2,2\}\}$, $X_2 = \{\{5,10\}\}$, $X_3 = \{\{7,4\},\{9,1\}\}$ und $X_4 = \{\{8,10\}\}$ (schwarze Linien). Dann muss man nur noch die beiden verbleibenden Punkte $\{1,3\}$ und $\{7,4\}$ als Trennlinien für y nehmen (grüne Linien).





b) Wenden Sie 1-NN für die folgenden beiden Queries $\{7,9\}$ und $\{1,1\}$ auf den Baum an und geben Sie die genaue Traversierung des Baumes an.

Lösung: Der Algorithmus verfährt so, wie wenn er die neue Instanz in den Baum einordnen würde. In einem Blatt bildet er dann einen Kreis um die zu klassifizierende Instanz, der den Radius des Abstands zwischen dieser und der aktuellen Instanz hat. Er setzt die aktuelle Instanz als beste Instanz und schaut nach, ob der Kreis andere Trennlinien schneidet. Ist dies so, so muss nochmal in dem anderen Blatt nachgeschaut werden (genau so wie beim Start des Algorithmus). Ist dies nicht so, dann geht man im Baum eine Ebene weiter hoch und braucht den kompletten anderen Teilbaum nicht mehr zu betrachten.

Instanz $\{7,9\}$

Man landet im Blatt $\{8,10\}$, die Distanz zu diesem Punkt ist $\sqrt{1^2+1^2}=\sqrt{2}$. Dann geht man eine Ebene weiter hoch im Baum zu $\{10,7\}$. Diese Distanz ist größer ($d(\{7,9\},\{*,7\})=\sqrt{0+2^2}>\sqrt{2}$), daher braucht man die Kinder ($\{9,1\}$ und $\{7,4\}$) nicht zu durchsuchen.

Nun geht man wieder eine Ebene höher in die Wurzel, dessen Trennlinie geschnitten wird, da $d(\{7,9\},\{6,*\})\leq\sqrt{2}$, und sucht den Quadranten, in dem der Schnitt vorliegt, d.h. man ordnet den Punkt $\{7,9\}$ diesmal an der Wurzel links ein. Man kommt bei $\{5,10\}$ an.

Die Distanz von $\{7,9\}$ zu diesem Punkt ist größer, also geht man einen Knoten hoch zu Knoten $\{4,8\}$. Da die Distanz zur Grenzlinie $\{*,8\}$ nicht größer ist, muss der linke Teilbaum noch durchsucht werden. Man landet nun bei Punkt $\{2,2\}$ dessen Grenzline $\{2,*\}$ bereits weiter entfernt ist als das aktuelle Minimum von $\sqrt{2}$. Nun hat man beide Teilbäume von $\{4,8\}$ durchsucht und auch die Distanz von diesem Punkt ist größer als unser Minimum.

Nun geht man wieder eine Ebene höher und findet heraus, dass die Wurzel ebenfalls eine größere Distanz hat. Daher ist der Knoten mit der geringsten Distanz (immer noch) $\{8,10\}$.

Instanz $\{1,1\}$

Man landet im Blatt $\{1,3\}$. Der Kreis um den Punkt mit dem Radius $d(\{1,1\},\{1,3\})=2$ schneidet die Linie von der Instanz $\{2,2\}$, da $d(\{1,1\},\{2,*\})=1\leq 2$, und die Distanz $d(\{1,1\},\{2,2\})=\sqrt{2}$ zu diesem Knoten ist auch kleiner. Daher wird dieser Knoten der neue beste Knoten.

Man geht zu $\{4,8\}$ und merkt, dass die Distanz zur Trennlinie größer ist. Daher schneidet man die Kindknoten ab und geht zu $\{6,6\}$, dessen Distanz auch größer ist. Der rechte Teilbaum wird abgeschnitten und der Knoten mit der geringsten Distanz ist $\{2,2\}$.