Maschinelles Lernen: Symbolische Ansätze

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Wintersemester 2008/2009
Musterlösung für das 8. Übungsblatt

Aufgabe 1: Decision Trees

Gegeben sei folgende Beispielmenge:

Age	Education	Married	Income	Credit?
old	secondary	no	medium	yes
young	college	yes	low	yes
old	secondary	yes	medium	yes
young	college	no	high	yes
young	secondary	no	high	yes
old	secondary	no	high	yes
old	college	no	high	yes
old	college	yes	low	yes
young	primary	yes	medium	no
old	primary	yes	low	no
young	secondary	yes	medium	no
young	college	no	medium	no

a) Erzeugen Sie einen Entscheidungsbaum mittels des Verfahrens ID3 (TDIDT mit Maß Gain) und zeichnen Sie diesen.

Lösung: In dieser Aufgabe verwenden wir die Klasse yes als positive Klasse (+) bzw. no als negative Klasse (-). Für die Berechnung des (Information) Gains für ein Attribut benötigen wir die Entropien der ursprünglichen Beispielmenge und der Beispielmengen, die sich durch dessen Attributwerte ergeben. Die Entropie aller Beispiele (Menge S, davon sind 8 positive und 4 negative Beispiele) berechnet sich wie folgt:

$$\begin{aligned} Entropy(S) &= -\frac{8}{8+4}\log_2\left(\frac{8}{8+4}\right) - \frac{4}{8+4}\log_2\left(\frac{4}{8+4}\right) \\ &= 0,918 \end{aligned}$$

Jetzt benötigen wir noch die Entropien aller Tests (Attribute). Mögliche Attribute sind *Age*, *Education*, *Married* und *Income*. Wir verwenden *Age* exemplarisch zur Berechnung der Entropie eines Tests und dessen Information Gains. Die Abdeckung von $Age = old$ sind 5 positive und 1 negatives Beispiel ($p_+ = 5/6, p_- = 1/6$) und für $Age = young$ sind jeweils 3 Beispiele ($p_+ = 1/2, p_- = 1/2$) abgedeckt. Weiterhin ergeben sich $S_{Age=old}/S = 6/(6+6) = 0,5$ und $S_{Age=young}/S = 0,5$. Berechnen wir nun die Entropien dieser beiden Testausgänge:

$$Entropy(S_{Age=old}) = -\frac{5}{6}\log_2\left(\frac{5}{6}\right) - \frac{1}{6}\log_2\left(\frac{1}{6}\right) \approx 0,65$$

$$Entropy(S_{Age=young}) = -\frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\right) = 1$$

Subtrahieren wir nun diese Entropien mit $S_{Age=old}$ und $S_{Age=young}$ gewichtet von der Entropie der ursprünglichen Beispielmenge ab:

$$\begin{aligned} Gain(S,Age) &= Entropy(S) - \frac{S_{Age=old}}{S}\cdot Entropy(S_{Age=old}) - \frac{S_{Age=young}}{S}\cdot Entropy(S_{Age=young}) \\ &= 0,918 - 0,5\cdot 0,65 - 0,5\cdot 1 = 0,093 \end{aligned}$$

Die Berechnung der Information Gains der verbleibenden Tests erfolgt analog. Die hierfür benötigten Werte und die erhaltenen Information Gains können Sie der folgenden Tabelle entnehmen:

Attribut	Wert	+	-	p_+	p_-	Entropie	s_i/s	Gain
Verteilung		8	4	0,67	0,33	0,918	-	
Age	old	5	1	0,83	0,17	0,650	1/2	0,093
	young	3	3	0,50	0,50	1,000	1/2	
Education	college	4	1	0,80	0,20	0,722	5/12	**0,317**
	primary	0	2	0,00	1,00	0,000	1/6	
	secondary	4	1	0,80	0,20	0,722	5/12	
Married	no	5	1	0,83	0,17	0,650	1/2	0,093
	yes	3	3	0,50	0,50	1,000	1/2	
Income	high	4	0	1,00	0,00	0,000	1/3	0,284
	low	2	1	0,67	0,33	0,918	1/4	
	medium	2	3	0,40	0,60	0,971	5/12	

Da das Maß Information Gain maximiert werden soll, entscheiden wir uns für den Test *Education*. Die ursprüngliche Beispielmenge wird auf die 3 Testausgänge von *Education* (*college, primary* und *secondary*) aufgeteilt. Für *college* und *secondary* müssen wir noch weitere Tests einführen, da deren Beispielmengen noch positive und negative Beispiele enthalten. Die Beispielmenge von $primary$ besteht nur aus negativen Beispielen, hier werden keine weiteren Tests benötigt (*Education=primary* ist somit das erste Blatt des Baums mit der Vorhersage *no*).

Betrachen wir nun zuerst die Beispielmenge von $Education = college$. Auf die Berechnung werden wir nicht im Detail eingehen, die benötigten Werte und die Ergebnisse sind wieder in der folgenden Tabelle zusammengefaßt:

Attribut	Wert	+	-	p_+	p_-	Entropie	s_i/s	Gain
Verteilung		4	1	0,80	0,20	0,722	-	
Age	old	2	0	1,00	0,00	0,000	2/5	0,171
	young	2	1	0,67	0,33	0,918	3/5	
Married	no	2	1	0,67	0,33	0,918	3/5	0,171
	yes	2	0	1,00	0,00	0,000	2/5	
Income	high	2	0	1,00	0,00	0,000	2/5	**0,722**
	low	2	0	1,00	0,00	0,000	2/5	
	medium	0	1	0,00	1,00	0,000	1/5	

Der Test *income* trennt die verbleibenden Beispiele perfekt. Keine weiteren Tests sind nötig, wir können also mit der Beispielmenge von $Education = secondary$ weitermachen:

Attribut	Wert	+	-	p_+	p_-	Entropie	s_i/s	Gain
Verteilung		4	1	0,80	0,20	0,722	-	
Age	old	3	0	1,00	0,00	0,000	3/5	**0,322**
	young	1	1	0,50	0,50	1,000	2/5	
Married	no	3	0	1,00	0,00	0,000	3/5	0,322
	yes	1	1	0,50	0,50	1,000	2/5	
Income	high	2	0	1,00	0,00	0,000	2/5	0,171
	low	0	0	0,00	0,00	0,000	-	
	medium	2	1	0,67	0,33	0,918	3/5	

Die Tests *Age* und *Married* weisen den gleichen Information Gain auf. Wir entscheiden uns für den ersten Test, also *Age*, um diesen Konflikt aufzulösen. Die Beispielmenge wird also auf zwei Beispielmengen, für $Age = old$ und $Age = young$, aufgeteilt. Da die Beispielmenge von $Age = old$ nur positive Beispiele enthält, müssen wir nur noch die Beispielmenge von $Age = young$ betrachten:

Attribut	Wert	+	-	p_+	p_-	Entropie	s_i/s	Gain
Verteilung		1	1	0,5	0,5	1,000	-	
Married	no	1	0	1,00	0,00	0,000	1/2	1,000
	yes	0	1	0,00	1,00	0,000	1/2	
Income	high	1	0	1,00	0,00	0,000	1/2	1,000
	low	0	0	0,00	0,00	0,000	-	
	medium	0	1	0,00	1,00	0,000	1/2	

Die verbleibenden Tests erzielen wiederum den gleichen Information Gain (beide trennen die Beispiele perfekt), wir entscheiden uns abermals für den ersten Test *Married*. Da keinen weiteren Tests nötig sind, erhalten wir den folgenden Baum:

Education = college
| income = high: yes
| income = low: yes
| income = medium: no
Education = primary: no
Education = secondary
| Age = old: yes
| Age = young
| | Married = no: yes
| | Married = yes: no

b) Wiederholen Sie die Berechnungen für die Auswahl des Tests in der Wurzel mit den Maßen Information-Gain-Ratio und Gini-Index. Ändert sich etwas?

Lösung:

- Gain Ratio:

  Zur Berechnung wird zusätzlich zu den Berechnungen des Information Gains die intrinsische Information von jedem Test benötigt. Das heißt für jeden Test muß die Verteilung der Einheiten auf die möglichen Testausgänge bestimmt werden. Betrachten wir beispielsweise den Test *Income*, die Beispiele teilen sich auf die Testausgänge wie folgt auf: 4, 3 und 5 Beispiele (in relativen Häufigkeiten $4/12$, $3/12$ und $5/12$).

$$IntI(S, Income) = -\frac{4}{12} \cdot \log\left(\frac{4}{12}\right) - \frac{3}{12} \cdot \log\left(\frac{3}{12}\right) - \frac{5}{12} \cdot \log\left(\frac{5}{12}\right) \approx 1,555$$

  Teilen wir nun den Information Gain (siehe Teilaufgabe a)) durch den eben berechneten Wert, erhalten wird den Gain Ratio von Income.

$$GR(S, Income) = \frac{Gain(S, Income)}{IntI(S, Income)} = \frac{0,284}{1,555} \approx 0,183$$

  Entsprechend berechnen sich die Gain Ratios der anderen Attribute.

Attribut	Gain	S_i/S	Intrinsic	GainRatio
Age	0,093	$\{1/2, 1/2\}$	1,00	0,093
Education	0,317	$\{5/12, 1/6, 5/12\}$	1,483	**0,214**
Married	0,093	$\{1/2, 1/2\}$	1,00	0,093
Income	0,284	$\{1/3, 1/4, 5/12\}$	1,555	0,183

  Da GainRatio maximiert werden soll, ist auch hier der Test *Education* optimal.

- GiniIndex:

  Die Berechnung des GiniIndex ist ähnlich zur Berechnung des Information Gains. Wobei hier anstatt der Entropie das Unreinheitsmaß Gini verwendet wird. Die so erhaltenen Werte werden aufaddiert, aber nicht von der ursprünglichen Unreinheit abgezogen. Aus diesem Grund wird der GiniIndex nicht maximiert, sondern minimiert. Berechnen wir beispielhaft den GiniIndex von *Age*. Die Tabelle aus Teilaufgabe a) können wir verwenden. Berechnen wir nun zunächst die Gini-Werte für die beiden Testausgänge old und young.

$$Gini(S_{Age=old}) = 1 - p_+^2 - p_-^2 \approx 1 - 0,83^2 - 0,17^2 \approx 0,278$$
$$Gini(S_{Age=young}) = 1 - p_+^2 - p_-^2 \approx 1 - 0,5^2 - 0,5^2 \approx 0,5$$

  Addieren wir diese Werte gewichtet durch die relative Häufigkeiten der beiden Testausgänge auf, erhalten wir den GiniIndex von *Age*.

$$Gini(S, Age) \approx 0,5 \cdot 0,278 + 0,5 \cdot 0,5 \approx 0,389$$

  Die GiniIndizes der anderen Tests werden analog berechnet.

Attribut	Wert	+	-	p_+	p_-	Gini(S)	s_i/s	Gini(S,A)
Verteilung		8	4	0,67	0,33	0,918	-	
Age	old	5	1	0,83	0,17	0,278	1/2	0,389
	young	3	3	0,50	0,50	0,500	1/2	
Education	college	4	1	0,80	0,20	0,320	5/12	**0,267**
	primary	0	2	0,00	1,00	0,000	1/6	
	secondary	4	1	0,80	0,20	0,320	5/12	
Married	no	5	1	0,83	0,17	0,278	1/2	0,389
	yes	3	3	0,50	0,50	0,500	1/2	
Income	high	4	0	1,00	0,00	0,000	1/3	0,311
	low	2	1	0,67	0,33	0,444	1/4	
	medium	2	3	0,40	0,60	0,480	5/12	

Wie bereits erwähnt wird ein minimaler GiniIndex gesucht. Wiederum ist *Education* der optimale Test.

c) Klassifizieren Sie die folgenden Beispiele mit dem Baum aus der Teilaufgabe a):
'?' steht hier für einen unbekannten/fehlenden Attributwert.

Age	Education	Married	Income	Credit?
?	secondary	no	medium	?
young	?	yes	low	?

Lösung: Die zu klassifizierenden Beispiele sind unvollständig, d.h. manche Attributwerte sind unbekannt. Aus diesem Grund müssen wir uns überlegen wie fehlende Attributwerte während der Klassifikation zu behandeln sind. Sollte der fehlende Wert auf dem Pfad zu einem Blatt nicht getestet werden, stört uns der fehlende Wert nicht und die Klassifikation kann ohne Probleme durchgeführt werden. Wird das betreffende Attribut aber auf einem solchen Pfad als Test verwendet, teilen wir die Beispiele in mehrere gewichtete Beispiele auf. Insgesamt werden genausoviel Beispiele erzeugt wie das Attribut Attributwerte besitzt. Die Gewichte entsprechen der relativen Häufigkeiten der Trainingsbeispiele, die sich auf die verschiedenen Attributwerte verteilt haben.

Verdeutlichen wir diese Vorgehensweise an dem ersten zu klassifizierenden Beispiel. Der erste Test ist *Education*, der Attributwert *secondary* liegt vor. Wir können also zum nächsten Knoten weitergehen (siehe folgenden Teilbaum).

Education = secondary
| Age = old: yes
| Age = young
| | Married = no: yes
| | Married = yes: no

Wie man sieht, wird als nächstes das Attribut *Age* getestet. Diesmal liegt uns der Attributwert nicht vor, das Beispiel muß nun aufgeteilt werden. Aus der Teilaufgabe a) wissen wir, daß sich 3/5 bzw. 2/5 der Beispiele auf den Attributwert *old* bzw. *young* verteilen. Demnach wird ein Beispiel auf der Kante *Age = old* mit dem Gewicht 3/5 durchgeleitet, entsprechend für *Age = young* ein Beispiel mit dem Gewicht 2/5. Verfolgen wir nun den Weg dieser Beispiele in dem folgenden Baum.

Education = secondary
| Age = old: yes (3/5)
| Age = young
| | Married = no: yes (2/5)

Beide Pfade enden in einem Blatt, das jeweils die Klasse yes vorraussagt. Demnach wird das Beispiel als yes klassifiziert.

Analog gehen wir bei dem zweiten zu klassifizierenden Beispiel vor, bei dem schon das erste Testattribut (der Wurzelknoten) fehlt. Das Beispiel wird in dem Verhältnis 5/12,1/6 und 5/12 aufgeteilt.

Education = college
| income = low: yes (5/12)
Education = primary: no (1/6)
Education = secondary
| Age = young

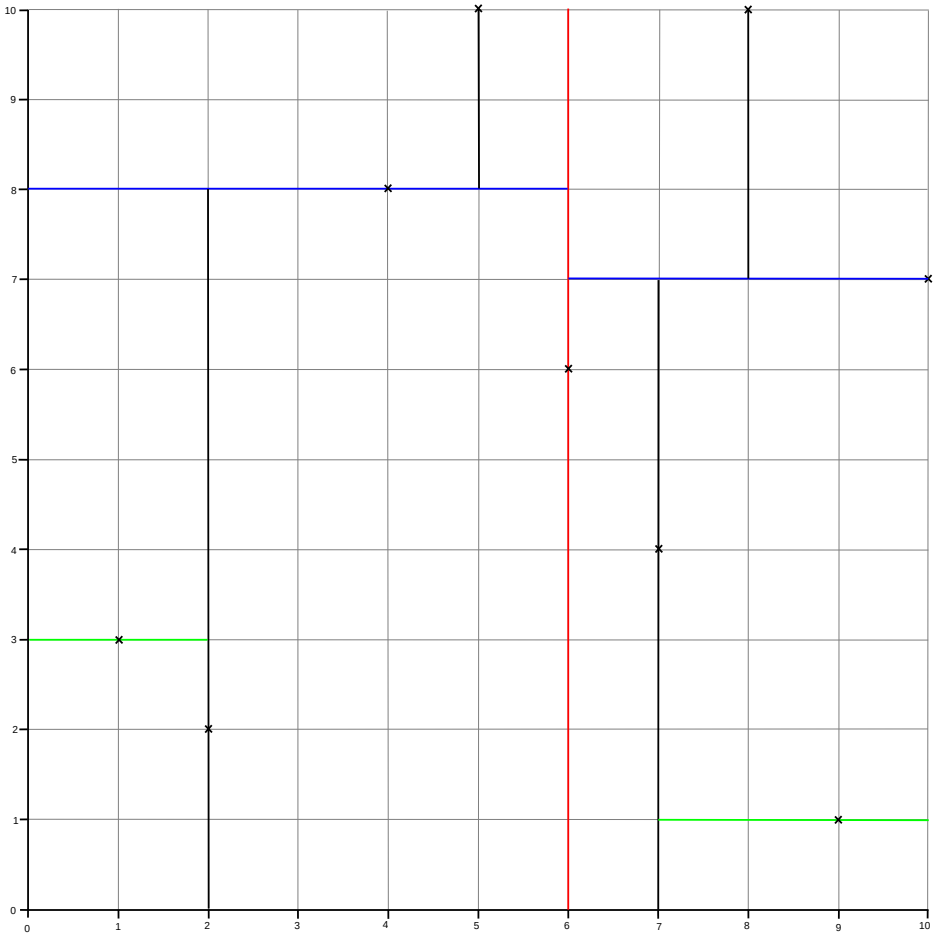
| | Married = yes: no ($5/12$)

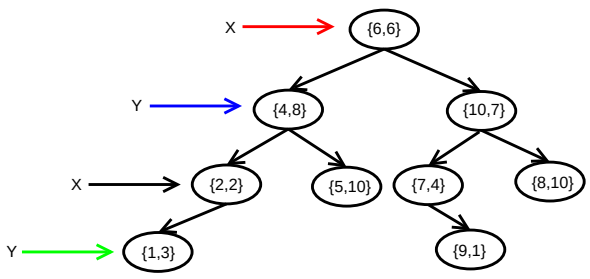
Insgesamt erhalten die Klassen yes $5/12$ und no $1/6 + 5/12 = 7/12$. Demnach wird die Klasse no vorhergesagt.

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:
$\{\{4,8\},\{7,4\},\{5,10\},\{1,3\},\{2,2\},\{9,1\},\{10,7\},\{8,10\},\{6,6\}\}$.

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 rechten Wert. Danach teilt man wieder nach x auf: $X_1 = \{\{1,3\},\{2,2\}\}$, $X_2 = \{\{5,10\}\}$, $X_3 = \{\{9,1\},\{7,4\}\}$ und $X_4 = \{\{8,10\}\}$ (schwarze Linien). Dann muss man nur noch die beiden verbleibenden Punkte $\{1,3\}$ und $\{9,1\}$ 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 $\{8, 10\}$. Der Kreis schneidet die Trennlinie der Instanz $\{6, 6\}$. Mögliche Kindknoten von $\{8, 10\}$ müssen nicht durchsucht werden. Dann geht man eine Ebene weiter hoch im Baum zu $\{10, 7\}$. Diese Distanz ist größer, daher braucht man die Kinder ($\{7, 4\}$ und $\{9, 1\}$) nicht zu durchsuchen. Nun geht man wieder eine Ebene höher in die Wurzel und sucht den Quadranten in dem der Schnitt vorliegt ($\{5, 10\}$). Die möglichen Kinder müssen nicht durchsucht werden, da die Distanz größer ist. Danach geht man zum Knoten $\{4, 8\}$ dessen Distanz ebenfalls größer ist. Daher muss der linke Teilbaum nicht durchsucht werden. 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 $\{8, 10\}$.

Instanz $\{1, 1\}$:
Man landet im Blatt $\{1, 3\}$. Der Kreis schneidet die Linie von der Instanz {2,2} und die Distanz uz diesem Knoten ist kleiner. Daher wird dieser Knoten der neue beste Knoten. Man geht zu $\{4, 8\}$ und merkt, dass die Distanz 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 $\{2, 2\}$.