Data Mining und Maschinelles Lernen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Wintersemester 2015/2016 Lösungsvorschlag für das 6. Übungsblatt

Aufgabe 1a) Auffüllen von Attributen (1)



Gegeben sei folgende Beispielmenge:

Day	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	PlayTennis
D1	Sunny	26	High		No
D2	Sunny	28	High	Strong	No
D3	Overcast	29	High	Weak	Yes
D4	Rain	23	High	Weak	Yes
D5	Rain		Normal	Weak	Yes
D6	Rain	12	Normal	Strong	No
D7	Overcast	8		Strong	Yes
D8	Sunny	25	High	Weak	No
D9	Sunny	18	Normal	Weak	Yes
D10	Rain	20	Normal	Weak	Yes
D11	Sunny	20	Normal	Strong	
D12	Overcast	21	High	Strong	Yes
D13		26	Normal	Weak	Yes
D14	Rain	24	High	Strong	No
D15	Sunny	23	Normal	Weak	No
D16	Sunny	21	Normal	Weak	Yes

Aufgabe 1a) Auffüllen von Attributen (2)



a) Um fehlende Werte zu behandeln, kann man diese einfach auffüllen, indem man die am naheliegendsten Nachbarn zu diesem Beispiel verwendet. Benutzen Sie hierfür 3-NN zum Ausfüllen dieser Werte. Normieren Sie das numerische Attribut, wie im Skript beschrieben (Foliensatz Instance-based Learning, Folie "Distance Functions for Numeric Attributes"), nehmen Sie für nominale Attribute die 0/1-Distanz (Foliensatz Instance-based Learning, Folie "Distance Functions for Symbolic Attributes") und benutzen Sie als Distanzfunktion für 3-NN die Manhattan-Distanz.

Beziehen Sie für das Auffüllen von Werten die Klassifikation der Beispiele mit ein oder nicht? Warum? Überlegen Sie sich auch, wie sie beim Auffüllen mit fehlenden Attributen in den Nachbarn umgehen. Verwenden Sie die so ausgefüllten Werte auch für die nächsten Aufgaben.

Welche Distanzfunktion ergibt sich für das numerische Attribut?

Aufgabe 1a) Auffüllen von Attributen (3)



Lösung:

Beziehen Sie für das Auffüllen von Werten die Klassifikation der Beispiele mit ein oder nicht? Wir betrachten beim Ausfüllen der fehlenden Werte eines Beispiels **dessen eigene Klasse**. Das heißt, wir suchen die k nächsten Nachbarn des Beispieles, die zu dessen Klasse gehören.

Warum?

Damit ist gewährleistet, daß keine Eigenschaften einer anderen Klasse übernommen werden. Wie in der Übung bereits diskutiert geht es hier darum, dass jede Klasse eigene Eigenschaften (also Attribut-Wert-Paare) aufweist, die für die jeweilige Klasse charakterisierend sind. Würde man nun fehlende Werte auffüllen, indem man Beispiele, die zu einer anderen Klasse gehören, verwendet, würde man Eigenschaften dieser Klasse verwenden, die nicht für die Klasse charakterisierend sind, zu der das Beispiel gehört.

Zusatzfrage: Was geschieht, wenn Klasseninformation nicht vorhanden sind, z.B. in zu klassifizierenden Testdaten?

Numerische Attribute (1)



Welche Distanzfunktion ergibt sich für das numerische Attribut?

Für numerische Attribute verwenden wir die im Skript angebene normierte Abstandsfunktion, da deren Funktionswerte auch im Intervall [0, 1] liegen und deshalb besser mit den Abständen bei nominalen Attributen vergleichbar sind.

 $\min_j v_j$ und $\max_j v_j$: Im Augenblick liegen die Werte des Attributes Temperatur zwischen 8 und 29, damit ergibt sich eine maximale Differenz von 21.

Zukünftige Attributewerte außerhalb des Intervalls:

Sollten später weitere Instanzen hinzukommen, deren Attributwerte nicht in dem Intervall [8, 29] liegen, müssen die Grenzen und die maximale Differenz angepaßt werden, da der normierte Wert ansonsten auch größer als 1 werden kann.

Nichtsdestotrotz ergibt sich für die vorliegenden Daten die folgende Abstandsfunktion:

$$d(a_1, a_2) = \frac{|a_1 - a_2|}{\max_j v_j - \min_j v_j} = \frac{|a_1 - a_2|}{21}$$

Nominale Attribute (1)



Für nominale Attibute setzen wir die 0/1 Distanz ein. Zur Erinnerung, diese sieht für zwei nominale Attribute a_1 und a_2 wie folgt aus:

$$d(a_1, a_2) = \begin{cases} 0, & \text{falls } a_1 = a_2 \\ 1, & \text{sonst} \end{cases}$$

Die endgültige Distanzfunktion ergibt sich dann aus der Summe der Distanzen aller Attribute (Manhattan Distanz).

Auffüllen der Lücken (1)



D1: Betrachten wir nun die Beispiele, die zum Ausfüllen der Werte des Beispiels D1 benötigt werden, und berechnen deren Abstand zu D1.

Welche sind das?

Day	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	Abstand
D2	Sunny	28	High	Strong	2/21
D6	Rain	12	Normal	Strong	2 14/21
D8	Sunny	25	High	Weak	1/21
D14	Rain	24	High	Strong	1 2/21
D15	Sunny	23	Normal	Weak	1 ¾21

Die Beispiele D2, D8 und D14 sind die nächsten Beispiele. Wir erhalten zweimal *Strong* und einmal *Weak* und setzen deshalb den fehlenden Wert von D1 auf *Strong*.

Auffüllen der Lücken (2)



D5: Diesmal müssen wir einen numerischen Wert auffüllen. Hierfür bestimmen wir wiederum die nächsten Nachbarn und berechnen die mittlere Distanz ihrer Attributwerte.

Day	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	Abstand
D3	Overcast	29	High	Weak	2
D4	Rain	23	High	Weak	1
D7	Overcast	8		Strong	3
D9	Sunny	18	Normal	Weak	1
D10	Rain	20	Normal	Weak	0
D12	Overcast	21	High	Strong	3
D13		26	Normal	Weak	1
D16	Sunny	21	Normal	Weak	1

Zwei Probleme bei D5:

- Instanzen D7 und D13 fehlen auch Attributwerte
- ► Keine genau 3 nächste Nachbarn bestimmbar, da 4 Beispiele den Abstand 1 haben

Auffüllen der Lücken (3)



Zwei Probleme bei D5:

- Instanzen D7 und D13 fehlen auch Attributwerte: Wir treffen die Annahme, daß sich diese (fehlenden) Attributwerte von dem von D5 unterscheiden (Abstand 1).
- Keine genau 3 nächste Nachbarn bestimmbar, da 4 Beispiele den Abstand 1 haben: Wir können nun einfach den Mittelwert der Attributwerte der fünf nächsten Beispiele verwenden oder einfach 3 zufällig auswählen. Wir entscheiden uns für die erste Variante, bei der wir anschließend auf die nächste ganze Zahl abrunden:

$$\left\lfloor \frac{23+18+20+26+21}{5} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{108}{5} \right\rfloor = 21$$

Wir füllen den fehlenden Wert also mit 21 auf.

Auffüllen der Lücken (4)



D7, D13: Das Auffüllen der fehlende Werte erfolgt analog zu D1. → Übung für zu Hause! Aufkommende Zusatzfrage: Was ist die Distanz zu einem fehlenden numerischen Attribut? **D11:** Fehlendes Klassenattribut!

Das Beispiel D11 entfernen wir komplett aus den Daten, da es uns keinen Nutzen für unsere Klassifikation bringt.

Auffüllen der Lücken (5)



Damit erhalten wir den folgenden vollständigen Datensatz.

Day	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	PlayTennis
D1	Sunny	26	High	Strong	No
D2	Sunny	28	High	Strong	No
D3	Overcast	29	High	Weak	Yes
D4	Rain	23	High	Weak	Yes
D5	Rain	21	Normal	Weak	Yes
D6	Rain	12	Normal	Strong	No
D7	Overcast	8	High	Strong	Yes
D8	Sunny	25	High	Weak	No
D9	Sunny	18	Normal	Weak	Yes
D10	Rain	20	Normal	Weak	Yes
D12	Overcast	21	High	Strong	Yes
D13	Rain	26	Normal	Weak	Yes
D14	Rain	24	High	Strong	No
D15	Sunny	23	Normal	Weak	No
D16	Sunny	21	Normal	Weak	Yes

Aufgabe 2b) Klassifizierung (1)



- b) Benutzen Sie für die Berechnung von *k*-NN die gleichen Eckdaten wie in der vorherigen Aufgabe (Normierung für numerische Attribute, 0/1-Distanz für nominale Attribute und die Manhattan Distanz). Klassifizieren Sie so mit 1-NN das folgende Beispiel.
 - ▶ D17: Outlook=Sunny, Temperature=23, Humidity=High, Wind=Strong

Aufgabe 2b) Klassifizierung (2)



Lösung:Wir berechnen zuerst die Abstände der einzelnen Trainingsbeispiele zum Klassifikationsbeispiel.

Day	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	Klasse	Abstand
D1	Sunny	26	High	Strong	No	3/21
D2	Sunny	28	High	Strong	No	5/21
D3	Overcast	29	High	Weak	Yes	2 %21
D4	Rain	23	High	Weak	Yes	2
D5	Rain	21	Normal	Weak	Yes	3 4/21
D6	Rain	12	Normal	Strong	No	2 11/21
D7	Overcast	8	High	Strong	Yes	1 15/21
D8	Sunny	25	High	Weak	No	1 %21
D9	Sunny	18	Normal	Weak	Yes	2 5/21
D10	Rain	20	Normal	Weak	Yes	3 3/21
D12	Overcast	21	High	Strong	Yes	1 %21
D13	Rain	26	Normal	Weak	Yes	3 3/21
D14	Rain	24	High	Strong	No	1 ½1
D15	Sunny	23	Normal	Weak	No	2
D16	Sunny	21	Normal	Weak	Yes	2 4/21

Aufgabe 2b) Klassifizierung (3)



Wir sortieren die Beispiele aufsteigend nach ihrem Abstand zum Klassifikationsbeispiel.

Day	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	Klasse	Abstand
D1	Sunny	26	High	Strong	No	3/21
D2	Sunny	28	High	Strong	No	5/21
D14	Rain	24	High	Strong	No	1 1/21
D8	Sunny	25	High	Weak	No	1 %21
D12	Overcast	21	High	Strong	Yes	1 %21
D7	Overcast	8	High	Strong	Yes	1 15/21
D4	Rain	23	High	Weak	Yes	2
D15	Sunny	23	Normal	Weak	No	2
D16	Sunny	21	Normal	Weak	Yes	2 ¾21
D9	Sunny	18	Normal	Weak	Yes	2 5/21
D3	Overcast	29	High	Weak	Yes	2 %21
D6	Rain	12	Normal	Strong	No	2 11/21
D5	Rain	21	Normal	Weak	Yes	3 %21
D10	Rain	20	Normal	Weak	Yes	3 3/21
D13	Rain	26	Normal	Weak	Yes	3 3/21

Betrachten wir nun diese Tabelle sehen wir, daß das Beispiel für k = 1 (1 Beispiel negativ, 0 positiv) negativ klassifiziert wird.

Aufgabe 1c) (1)



c) Testen Sie nun verschiedene k. Für welches k ändert sich die Klassifikation gegenüber k = 1?

Day	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	Klasse	Abstand
D1	Sunny	26	High	Strong	No	3/21
D2	Sunny	28	High	Strong	No	5/21
D14	Rain	24	High	Strong	No	1 1/21
D8	Sunny	25	High	Weak	No	1 %21
D12	Overcast	21	High	Strong	Yes	1 %21
D7	Overcast	8	High	Strong	Yes	1 15/21
D4	Rain	23	High	Weak	Yes	2
D15	Sunny	23	Normal	Weak	No	2
D16	Sunny	21	Normal	Weak	Yes	2 %21
D9	Sunny	18	Normal	Weak	Yes	2 5/21
D3	Overcast	29	High	Weak	Yes	2 %21
D6	Rain	12	Normal	Strong	No	2 11/21
D5	Rain	21	Normal	Weak	Yes	3 2/21
D10	Rain	20	Normal	Weak	Yes	3 3/21
D13	Rain	26	Normal	Weak	Yes	3 ¾21

Lösung:Betrachten wir wieder die sortierte Tabelle aus der vorherigen Aufgabe, sehen wir, dass sich erst beim Einbeziehen des elftnächsten Beispiels (D3, 6 positiv, 5 negativ, k = 11) eine Veränderung der Klassifikation ergibt.

Aufgabe 1d) (1)



d) Berechnen Sie den Klassifikationswert obiger Instanz mittels abstandsgewichtetem NN (Inverse Distance Weighting). Überlegen Sie sich hierzu, wie Sie diese Methode auf nominale Attribute anwenden können.

Lösung:Die im Skript angebene Methode (Foliensatz *Instance-based Learning*, Folie "Weighted *Prediction*") bezieht sich auf einen numerischen Klassenwert. Möglichkeiten der Anwendung auf nominale Klassen?

Benutzte Alternative: Wir berechnen für beide Klassen getrennt die Summe der quadrierten Kehrwerte der Abstände zwischen dem Trainingsbeispiel der jeweiligen Klasse und des Klassifikationsbeispieles. Anschließend normieren wir diese Summen, indem wir sie durch ihre Summe teilen.

Positive Klasse:

$$sum_{+} = \left(\frac{21}{23}\right)^{2} + \left(\frac{21}{36}\right)^{2} + \left(\frac{21}{42}\right)^{2} + \left(\frac{21}{44}\right)^{2} + \left(\frac{21}{47}\right)^{2} + \left(\frac{21}{48}\right)^{2} + \left(\frac{21}{66}\right)^{2} + \left(\frac{21}{66}\right)^{2} + \left(\frac{21}{66}\right)^{2} \approx 2,337$$

Negative Klasse:

$$sum_{-} = \left(\frac{21}{3}\right)^2 + \left(\frac{21}{5}\right)^2 + \left(\frac{21}{22}\right)^2 + \left(\frac{21}{23}\right)^2 + \left(\frac{21}{42}\right)^2 + \left(\frac{21}{53}\right)^2$$

$$\approx 68.792$$

Aufgabe 1d) (2)



$$sum_{+} = \left(\frac{21}{23}\right)^{2} + \left(\frac{21}{36}\right)^{2} + \left(\frac{21}{42}\right)^{2} + \left(\frac{21}{44}\right)^{2} + \left(\frac{21}{47}\right)^{2} + \left(\frac{21}{48}\right)^{2} + \left(\frac{21}{65}\right)^{2} + \left(\frac{21}{66}\right)^{2} + \left(\frac{21}{66}\right)^{2} \approx 2,337$$

$$sum_{-} = \left(\frac{21}{3}\right)^2 + \left(\frac{21}{5}\right)^2 + \left(\frac{21}{22}\right)^2 + \left(\frac{21}{23}\right)^2 + \left(\frac{21}{42}\right)^2 + \left(\frac{21}{53}\right)^2 \approx 68,792$$

Welche Probleme ergeben sich bei dieser Berechnungsform? Wieso wird quadriert?

Aufgabe 1d) (3)



Man sieht jetzt schon, daß die negative die bessere (höhere) Bewertung bekommt. Der Form halber normieren wir diese Werte noch.

Für positiv gilt:

$$\frac{\textit{sum}_+}{\textit{sum}_+ + \textit{sum}_-} \approx 0,033$$

Für negativ gilt:

$$\frac{sum_{-}}{sum_{+} + sum_{-}} \approx 0,967$$

Wie bereits zuvor erwähnt, wird das Beispiel mittels abstandsgewichtetem NN als negativ klassifiziert.

Zusatzaufgabe: Was sind weitere Alternativen und ihre Vor- und Nachteile? Welche Vorhersage käme dabei heraus?

Aufgabe 1e) Value Difference Metric (1)



e) Gehen Sie nun vom originalen, unveränderten Datensatz von Aufgabe 1c) aus und benutzen Sie für die Berechnung von k-NN wieder für numerische Attribute die normierte Distanzfunktion und für nominale Attribute diesmal die *Value Difference Metric (VDM)* (Foliensatz Instance-based Learning, Folie "Distance Functions for Symbolic Attributes"). Nehmen Sie für die Berechnung der VDM einen Wert von k=1 an und normieren Sie die Distanzen mit der Anzahl der Klassen. Überlegen Sie sich dabei auch, was mit fehlenden Attributwerten geschieht. Klassifizieren Sie so das Beispiel aus Aufgabe b), verwenden Sie dabei 1-NN und die euklidische Distanz (Foliensatz *Instance-based Learning*, Folie "Distance Functions"). Ändert sich die Klassifikation im Vergleich zur Aufgabe b)?

Aufgabe 1e) Value Difference Metric (2)



Lösung:

Für numerische Werte benutzen wir wieder die normierte Distanz wie in Aufgabe a). Für nominale Werte wird nun aber die VDM verwendet.

Die VDM war definiert als:

$$d_A(v_1, v_2) = \sum_c \left| \frac{n_{1,c}}{n_1} - \frac{n_{2,c}}{n_2} \right|^k$$

wobei $n_{1,c}$ die Häufigkeit von Attributwert 1 in Klasse c ist, und n_1 die Häufigkeit von Attributwert 1 über alle Klassen darstellt. Da k = 1 gilt, fällt die Potenz also weg.

Um die Distanzen auszurechnen gehen wir analog zum Skript vor und berechnen Tabellen für die jeweiligen Attribute:

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

Diese Werte kommen zustande, indem man für jede Klasse die Häufigkeit der jeweiligen Ausprägungen des Attributs *outlook* zählt.

Zusatzfrage: Wieso ergibt die Summe der Einträge nicht die Anzahl der Trainingsbeispiele (16)?

Aufgabe 1e) Value Difference Metric (3)



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

Für die Distanzen ergibt sich für das Attribut *outlook*: $d(sunny, overcast) = |\frac{1}{3} - 1| + |\frac{2}{3} - 0| \approx 1, 3 \to \frac{1.3}{2} = 0, 65$ $d(sunny, rain) = |\frac{1}{3} - \frac{3}{5}| + |\frac{2}{3} - \frac{2}{5}| \approx 0, 53 \to \frac{0.53}{2} = 0, 265$ $d(overcast, rain) = |1 - \frac{3}{5}| + |0 - \frac{2}{5}| = 0, 8 \to \frac{0.8}{2} = 0, 4$ Zusatzfrage: Wieso dividieren wir mit der Anzahl der Klassen?

Aufgabe 1e) Value Difference Metric (4)



Nun vervollständigen wir die Tabellen für die beiden verbleibenden Attribute:

	humidity			wir	nd
	high	normal		strong	weak
yes	3	5	yes	2	7
no	4	2	no	3	2

Aufgabe 1e) Value Difference Metric (5)



Wir berechnen nun alle nötigen Distanzen im Voraus und dividieren diese gleich mit der Anzahl der Klassen (2):

- Für das Attribut *outlook* $d(sunny, overcast) = |\frac{1}{3} 1| + |\frac{2}{3} 0| \approx 1, 3 \rightarrow \frac{1.3}{2} = 0, 65$ $d(sunny, rain) = |\frac{1}{3} \frac{3}{5}| + |\frac{2}{3} \frac{2}{5}| \approx 0, 53 \rightarrow \frac{0.53}{2} = 0, 265$ $d(overcast, rain) = |1 \frac{3}{5}| + |0 \frac{2}{5}| = 0, 8 \rightarrow \frac{0.8}{2} = 0, 4$
- Für das Attribut *humidity* $d(high, normal) = |\frac{3}{7} \frac{5}{7}| + |\frac{4}{7} \frac{2}{7}| \approx 0,57 \rightarrow \frac{0,57}{2} = 0,285$
- für das Attribut *wind* $d(strong, weak) = |\frac{2}{5} \frac{7}{9}| + |\frac{3}{5} \frac{2}{9}| \approx 0, 76 \rightarrow \frac{0.76}{2} = 0, 38$

Aufgabe 1e) Value Difference Metric (6)



Wir ermittlen die Distanzen mittels der euklidischen Distanz $d(x_1, x_2) = \sqrt{\sum_A d_A(v_{1,A}, v_{2,A})^2}$ (wir gehen davon aus, dass die Distanz zwischen fehlenden Attributwerten und einem regulären Attributwert maximal ist, wie im Skript (Foliensatz *Instance Based Learning*, Folie "Other Distance Functions" beschrieben), beispielhaft für D10:

Γ	Day	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	Klasse
ſ	D10	Rain	20	Normal	Weak	Yes
L	D17	Sunny	23	High	Strong	?

$$d(D17,D10) = \sqrt{0,265^2 + (\frac{3}{21})^2 + 0,285^2 + 0,38^2} \approx 0,5624$$

Aufgabe 1e) Value Difference Metric (7)



$$d(D17,D1) = \sqrt{0 + (\frac{3}{21})^2 + 0 + 1^2} \approx 1,0102$$

$$d(D17,D9) = \sqrt{0 + (\frac{5}{21})^2 + 0,285^2 + 0,38^2} \approx 0.5313$$

$$d(D17,D10) = \sqrt{0,265^2 + (\frac{3}{21})^2 + 0,285^2 + 0,38^2} \approx 0.5313$$

$$d(D17,D10) = \sqrt{0,265^2 + (\frac{3}{21})^2 + 0,285^2 + 0,38^2} \approx 0.5624$$

$$d(D17,D10) = \sqrt{0,265^2 + (\frac{3}{21})^2 + 0,285^2 + 0,38^2} \approx 0.5624$$

$$d(D17,D11) = \sqrt{0,265^2 + (\frac{3}{21})^2 + 0,285^2 + 0} \approx 0.3188$$

$$d(D17,D11) = \sqrt{0,265^2 + (\frac{3}{21})^2 + 0,285^2 + 0} \approx 0.3188$$

$$d(D17,D12) = \sqrt{0,265^2 + (\frac{1}{21})^2 + 0,285^2 + 0} \approx 0.6569$$

$$d(D17,D12) = \sqrt{0,265^2 + (\frac{11}{21})^2 + 0,285^2 + 0} \approx 0.6569$$

$$d(D17,D13) = \sqrt{1 + (\frac{3}{21})^2 + 0,285^2 + 0,38^2} \approx 1,1163$$

$$d(D17,D13) = \sqrt{0,265^2 + (\frac{11}{21})^2 + 0,285^2 + 0} \approx 0.2692$$

$$d(D17,D13) = \sqrt{0,265^2 + (\frac{1}{21})^2 + 0 + 0} \approx 0.2692$$

$$d(D17,D15) = \sqrt{0+0+0,285^2 + 0,38^2} \approx 0.4845$$

Das nächste Beispiel ist im Vergleich zum Ausfüllen nicht mehr D1, sondern D2. Allerdings ändert sich dadurch an der Vorhersage nichts.

Zusatzfrage: Bei unterschiedlichen nominalen Attributen wurde hier wieder eine Distanz von 1 angenommen. Welche andere Methode würde bei VDM eher Sinn machen?