INF FAKULTÄT FÜR INFORMATIK

Intelligente Systeme
Maschinelles Lernen

Prof. Dr. R. Kruse C. Moewes G. Ruß

{kruse,cmoewes,russ}@iws.cs.uni-magdeburg.de

Institut für Wissens- und Sprachverarbeitung

Fakultät für Informatik

Otto-von-Guericke Universität Magdeburg

Übersicht

Definitionen des Lernens (1)

Learning denotes changes in the system that are adaptive in the sense that they enable the system to do the same task or tasks drawn from the same population more efficiently and more effectively the next time. [Simon, 1983]

- umfasst allerdings auch Veränderungen, die nichts mit Lernen zu tun haben
- Beispiel einer Lernleistung: Verwendung eines schneller getakteten Prozessors als schnellere Abarbeitung einer arithmetischen Berechnung

Definitionen des Lernens (2)

The study and computer modeling von learning processes in their multiple manifestations constitutes the subject matter von machine learning. [Michalski et al., 1986]

- direkte Anspielung auf „Lernprozesse in verschiedenen Ausprägungen“

Definitionen des Lernens (3)

Learning is constructing or modifying representations von what is being experienced. [Michalski and Michalski, 1986]

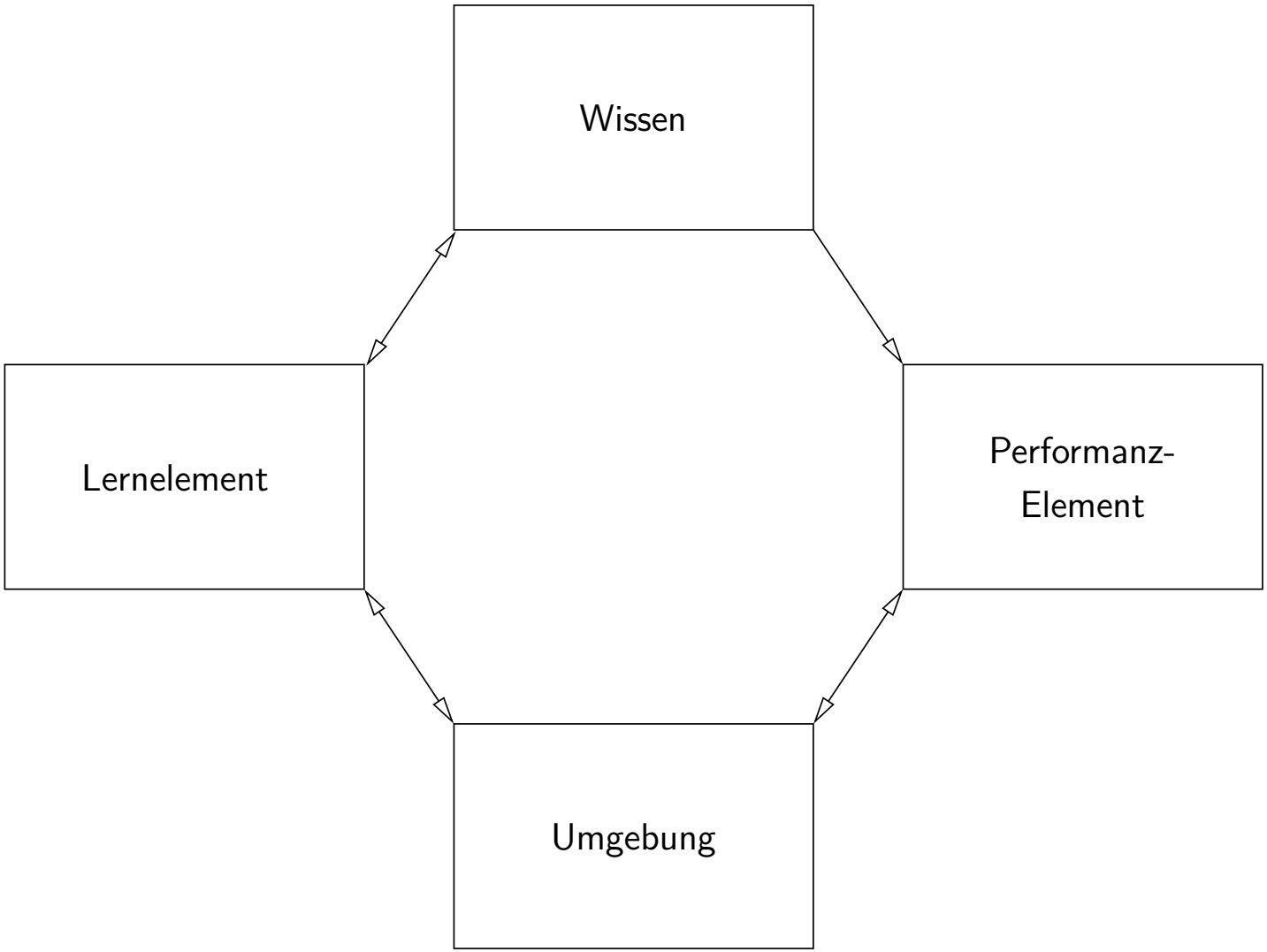
- zentraler Aspekt: Konstruktion einer Repräsentation

Definitionen des Lernens (4)

Research in machine learning has been concerned with building computer programs able to construct new knowledge or to improve already possessed knowledge by using input information.
[Michalski and Kodratoff, 1990]

- Ziel des ML: Computerprogramme sollen durch Erfahrung ihr eigenes Handeln verbessern können

Schema eines allgemeinen Lernmodells



Lernmodell

Performanzelement: interagiert mit der Umgebung, wird durch vorhandenes Wissen gesteuert

Lernelement: nimmt Erfahrungen und Beobachtungen aus der Umgebung auf, erzeugt/modifiziert Wissen

Zusätzlich meist:

Kritikelement: teilt dem Lernelement mit, wie erfolgreich es ist

Problemgenerator: erzeugt Aufgaben, die zu neuen und informativen Erfahrungen führen sollen

Klassifikation der Ansätze

Klassifikation der Ansätze gemäß [Carbonell et al., 1984]:

- Klassifikation gemäß der zugrundeliegenden *Lernstrategie:* Unterscheidung wie viel Information bereits vorgegeben wird und in welchem Maße das Lernsystem eigene Inferenzen durchführt
- Klassifikation gemäß der benutzten *Repräsentation von Wissen*, welches das System erlernt
- Klassifikation gemäß dem *Anwendungsbereich* des Lernsystems

Klassifikation gemäß der benutzten Lernstrategie

direkte Eingabe neuen Wissens und Auswendiglernen:

- keinerlei Inferenz oder andere Art der Wissenstransformation erforderlich
- z.B. Speichern von Daten/Fakten, Lernen durch direkte Programmierung

Lernen durch Anweisungen:

- aufbereitetes Wissen wird vorgegeben, was intern verarbeitet werden muss
- Wissen soll effektiv verwendet werden
- Anweisungen werden durch den Lehrenden aufgearbeitet, so dass Wissen des Lernenden schrittweise erweitert werden kann

Klassifikation gemäß der benutzten Lernstrategie

Lernen durch Deduktion:

- leitet aus vorhandenem Wissen mittels deduktiver Schlussweisen neues Wissen ab
- neues Wissen kann zur Effizienz- oder Effektivitätssteigerung verwendet werden

Lernen durch Analogie:

- Erlernen neuer Fakten und Fähigkeiten durch Anpassung vorhandenen Wissens an neue Situationen

Klassifikation gemäß der benutzten Lernstrategie

Lernen aus Beispielen:

- allgemeine Konzeptbeschreibung soll erstellt werden, die alle vorher gegebenen Beispiele umfasst und evtl. vorhandene Gegenbeispiele ausschließt

  Beispiele vom Lehrenden: Konzept ist dem Lehrer bekannt; Beispiele können entsprechend ausgewählt werden; schneller Lernerfolg möglich

  Beispiele vom Lernenden: Lernender hat Hypothese für das zu lernende Konzept und generiert Beispiele; von außerhalb kommt Feedback zu den Beispielen (positive oder negative Beispiele)

  Beispiele aus der Umgebung: Zufallsbeobachtungen; Notwendigkeit, dem Lernenden mitzuteilen, ob die Beobachtung ein positives oder ein Gegenbeispiel ist

Klassifikation gemäß der benutzten Lernstrategie

alternative Klassifizierung des „Lernens durch Beispiele“:

nur positive Beispiele verfügbar: keine Informationen darüber verfügbar, ob abgeleitetes Konzept zu allgemein ist; dem wird oft durch Minimalitätskriterien entgegenzuwirken versucht

positive und negative Beispiele verfügbar: üblichste Situation beim Lernen; positive Beispiele sorgen dafür, dass abgeleitetes Konzept allgemein genug ist; negative Beispiele verhindern, dass das Konzept zu allgemein wird

Klassifikation gemäß der benutzten Lernstrategie

weitere alternative Klassifizierung des „Lernens durch Beispiele“:

alle Beispiele gleichzeitig: alle Informationen stehen in jedem Fall am Anfang zur Verfügung; Hypothesen können sofort auf Richtigkeit überprüft werden

Beispiele sind inkrementell gegeben: Hypothese in Konsistenz mit den bisherigen Beispielen wird erstellt, die keines der Gegenbeispiele erfasst; anhand nachfolgender Beispiele wird Hypothese überprüft und ggf. verfeinert

Klassifikation gemäß der benutzten Lernstrategie

- **Lernen aus Beobachtungen und durch Entdeckungen:** generelle Ausprägung des induktiven Lernens; keinerlei Steuerung durch Lehrenden; verschiedene Konzepte sind gleichzeitig zu erlernen

  Passive Beobachtungen: Konzepte, die aufgrund der Beobachtungen der Umgebung durch den Lernenden entwickelt werden;

  Aktive Experimente: Umgebung wird gezielt beeinflusst, um die Auswirkungen der Experimente beobachten zu können; Steuerung der Experimente per Zufall, nach allgemeinen Gesichtspunkten oder durch theoretische Überlegungen.

Klassifikation gemäß dem gelernten Typ von Wissen

Parameter in algebraischen Ausdrücken: gegeben ist ein algebraischer Ausdruck; numerische Parameter oder Koeffizienten sind so zu optimieren, dass ein gewünschtes Verhalten erreicht wird

Entscheidungsbäume: zur Unterscheidung zwischen Elementen einer Klasse; Knoten: Attribute der Objekte; Blätter: Menge der Objekte, die der gleichen Unterklasse zugeordnet werden

Formale Grammatiken: zur Beschreibung einer formalen Sprache; ausgehend von Beispielausdrücken wird eine formale Grammatik erlernt

Klassifikation gemäß dem gelernten Typ von Wissen

Regeln: **if** C **then** A; C ist Menge von Bedingungen, A ist eine Aussage

Vier Basisoperationen für Regeln:

- **Erzeugung:** eine neue Regel wird generiert oder aus der Umgebung aufgenommen
- **Verallgemeinerung:** Bedingungen aus dem Bedingungsteil werden entfernt, Regel wird allgemeiner
- **Spezialisierung:** zusätzliche Bedingungen werden dem Bedingungsteil hinzugefügt, Regel ist nur noch auf speziellere Situationen anwendbar
- **Komposition:** Regeln werden zusammengefasst; nicht mehr notwendige Bedingungen und Folgerungen werden eliminiert

Klassifikation gemäß dem gelernten Typ von Wissen

Ausdrücke basierend auf formaler Logik: für die Beschreibung einzelner Objekte als auch für die Bildung des zu erlernden Konzepts; Aussagen, Prädikate, Variablen, logische Ausdrücke

Begriffshierarchien: Begriffe, die in Beziehung zueinander stehen, werden hierarchischen Begriffskategorien zugeordnet; Begriffshierarchien bzw. Taxonomien sind zu lernen

Entscheidungsbäume

- Hier: vereinfachte Entscheidungsbäume, die nur ja/nein-Knoten beinhalten.
  - Die Blätter sind mit dem Wahrheitswert markiert, der als Ergebnis der Funktion zurückgeliefert werden soll, wenn das Blatt erreicht wird.
  - Die inneren Knoten sind mit einem Attribut markiert. Eine solche Markierung *a* repräsentiert eine Abfrage, welchen Wert das betrachtete Objekt für das Attribut *a* hat.
  - Die von einem mit *a* markierten Knoten ausgehenden Kanten sind mit den zu *a* möglichen Attributwerten markiert.

Entscheidungsbäume: Beispiel

Beispiel: Kinobesuch, Definition der Attribute

Attraktivität des Films: hoch, mittel, gering

Preis: normal (n), mit Zuschlag (z)

Loge: noch verfügbar (ja), nicht verfügbar (nein)

Wetter: schön, mittel, schlecht

Warten: ja, nein

Besetzung: top, mittel

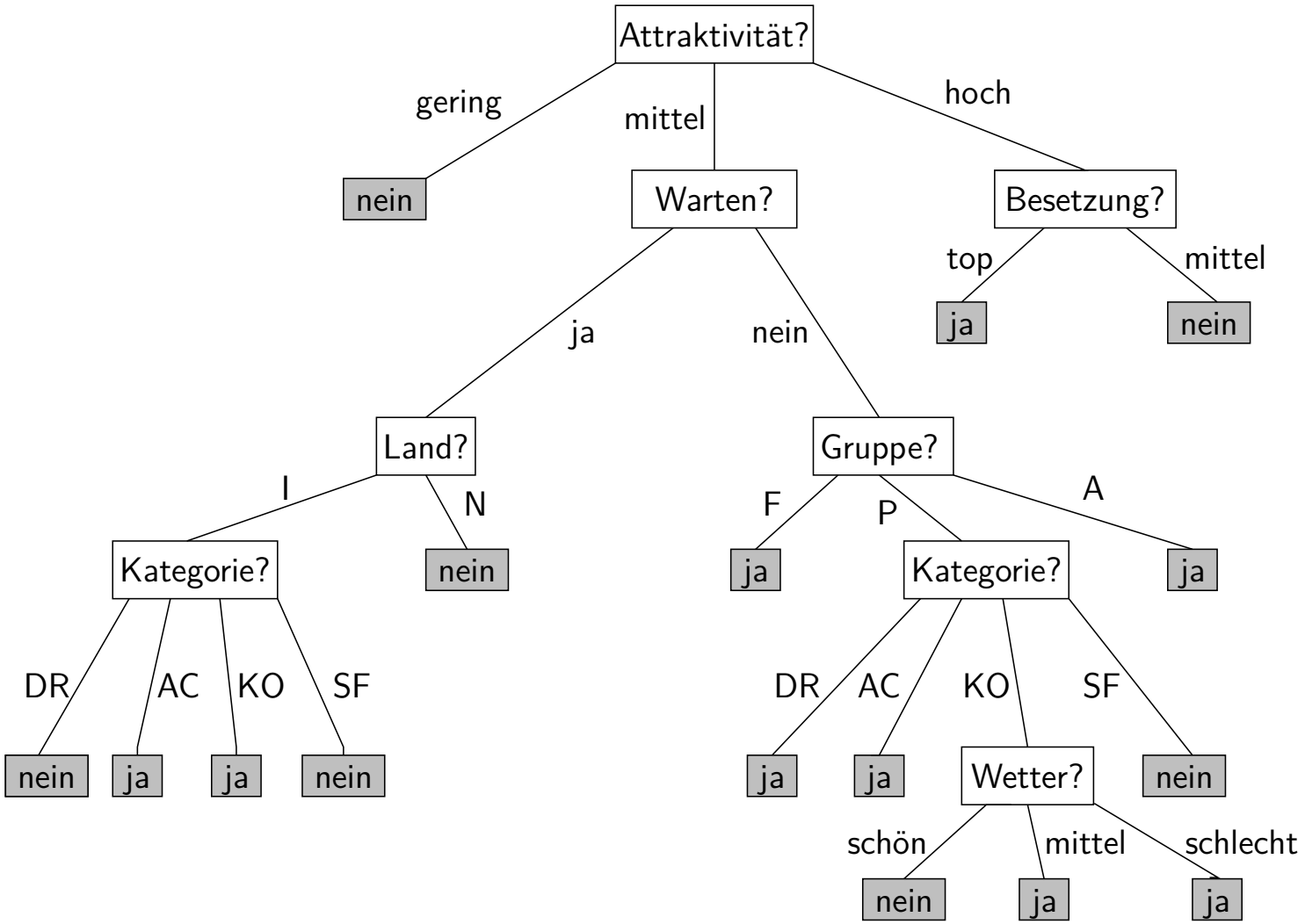
Kategorie: Action (AC), Komödie (KO), Drama (DR), Science Fiction (SF)

Reservierung: ja, nein

Land: national (N), international (I)

Gruppe: Freunde (F), Paar (P), allein (A)

Entscheidungsbäume: Beispiel



Entscheidungsbäume: Regeln

Aus Entscheidungsbäumen können sehr einfach Regeln abgelesen werden:

- **if** Attraktivität = hoch **and** Besetzung = top **then** Kinobesuch = ja.
- **if** Attraktivität = mittel **and** Warten = ja **and** Land = national **then** Kinobesuch = nein.

Ein Lernverfahren für Entscheidungsbäume generiert aus einer Menge von Beispielen (der *Trainingsmenge*) einen Entscheidungsbaum. Ein *Trainingsbeispiel* ist dabei eine Menge von Attribut/Wert-Paaren zusammen mit der Klassifikation.

Entscheidungsbäume: Generierung

- Für jedes Beispiel steht am Ende genau ein Pfad im Baum von der Wurzel zum Blattknoten.
- Diese Vorgehensweise liefert keine sinnvolle Generalisierung, der Baum passt nur auf die vorhandenen Trainingsdaten, aber nicht auf neue Daten.
- **Occam's Razor:** Bevorzuge die einfachste Hypothese, die konsistent mit allen Beobachtungen ist.
- **Problem:** Welches Attribut wird ausgewählt, um in einem Knoten die Beispieldaten aufzuteilen? Welches Attribut ist das *wichtigste*?

Beispiel: Induktion eines Entscheidungsbaums

Patienten-Datenbank

- 12 Beispielfälle
- 3 beschreibende Attribute
- 1 Klassenattribut

Bestimmung des Medikaments M

(ohne Patientenattribute)
immer Medikament A oder immer Medikament B:
50% korrekt (in 6 v. 12 Fällen)

Nr	Geschl.	Alt.	Blutdr.	M.
1	männlich	20	normal	A
2	weiblich	73	normal	B
3	weiblich	37	hoch	A
4	männlich	33	niedrig	B
5	weiblich	48	hoch	A
6	männlich	29	normal	A
7	weiblich	52	normal	B
8	männlich	42	niedrig	B
9	männlich	61	normal	B
10	weiblich	30	normal	A
11	weiblich	26	niedrig	B
12	männlich	54	hoch	A

Beispiel: Induktion eines Entscheidungsbaums

Geschlecht eines Patienten

- Teilung bzgl. männlich/weiblich

Bestimmung des Medikaments

männlich:	50% korrekt	(in 3 von 6 Fällen)
weiblich:	50% korrekt	(in 3 von 6 Fällen)
gesamt:	**50% korrekt**	(in 6 von 12 Fällen)

Nr	Geschl.	M.
1	männlich	A
6	männlich	A
12	männlich	A
4	männlich	B
8	männlich	B
9	männlich	B
3	weiblich	A
5	weiblich	A
10	weiblich	A
2	weiblich	B
7	weiblich	B
11	weiblich	B

Beispiel: Induktion eines Entscheidungsbaums

Alter des Patienten

- Sortieren anhand des Alters
- beste Teilung finden, hier: ca. 40 Jahre

Bestimmung des Medikaments

≤ 40:	A	67% korrekt	(in 4 von 6 Fällen)
> 40:	B	67% korrekt	(in 4 von 6 Fällen)
gesamt:		**67% korrekt**	(in 8 von 12 Fällen)

Nr	Alt.	M.
1	20	A
11	26	B
6	29	A
10	30	A
4	33	B
3	37	A
8	42	B
5	48	A
7	52	B
12	54	A
9	61	B
2	73	B

Beispiel: Induktion eines Entscheidungsbaums

Blutdruck des Patienten

- Teilung bzgl. hoch/normal/niedrig

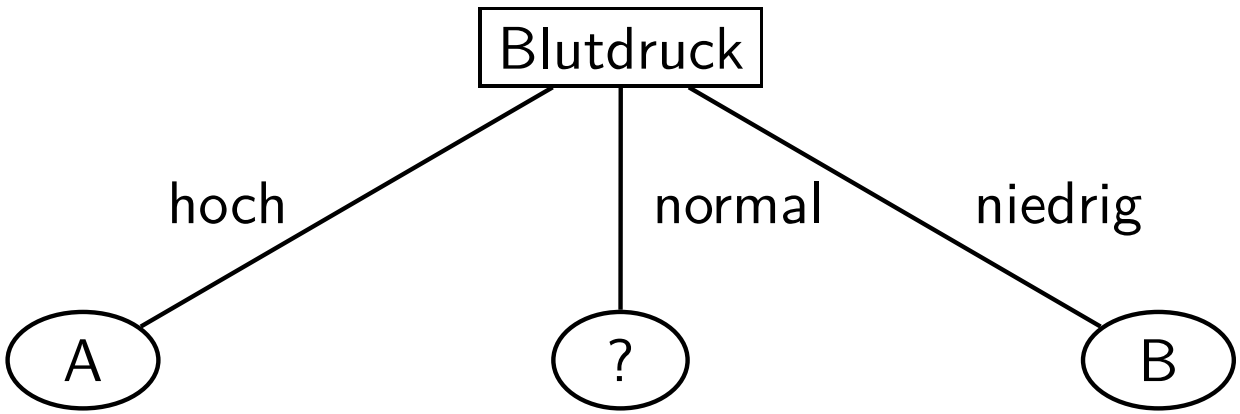
Bestimmung des Medikaments

hoch:	A	100% korrekt	(3 von 3)
normal:		50% korrekt	(3 von 6)
niedrig:	B	100% korrekt	(3 von 3)
gesamt:		**75% korrekt**	(9 von 12)

Nr	Blutdr.	M.
3	hoch	A
5	hoch	A
12	hoch	A
1	normal	A
6	normal	A
10	normal	A
2	normal	B
7	normal	B
9	normal	B
4	niedrig	B
8	niedrig	B
11	niedrig	B

Beispiel: Induktion eines Entscheidungsbaums

Momentaner Entscheidungsbaum:



Beispiel: Induktion eines Entscheidungsbaums

Blutdruck und Geschlecht

- nur Patienten mit normalem Blutdruck
- Zerlegung bzgl. männlich/weiblich

Bestimmung des Medikaments

männlich:	A	67% korrekt	(2 von 3)
weiblich:	B	67% korrekt	(2 von 3)
gesamt:		**67% korrekt**	(4 von 6)

Nr	Blutdr.	Geschl.	M.
3	hoch		A
5	hoch		A
12	hoch		A
1	normal	männlich	A
6	normal	männlich	A
9	normal	männlich	B
2	normal	weiblich	B
7	normal	weiblich	B
10	normal	weiblich	A
4	niedrig		B
8	niedrig		B
11	niedrig		B

Beispiel: Induktion eines Entscheidungsbaums

Blutdruck und Alter

- nur Patienten mit normalem Blutdruck
- Sortieren anhand des Alters
- beste Teilung finden, hier: ca. 40 Jahre

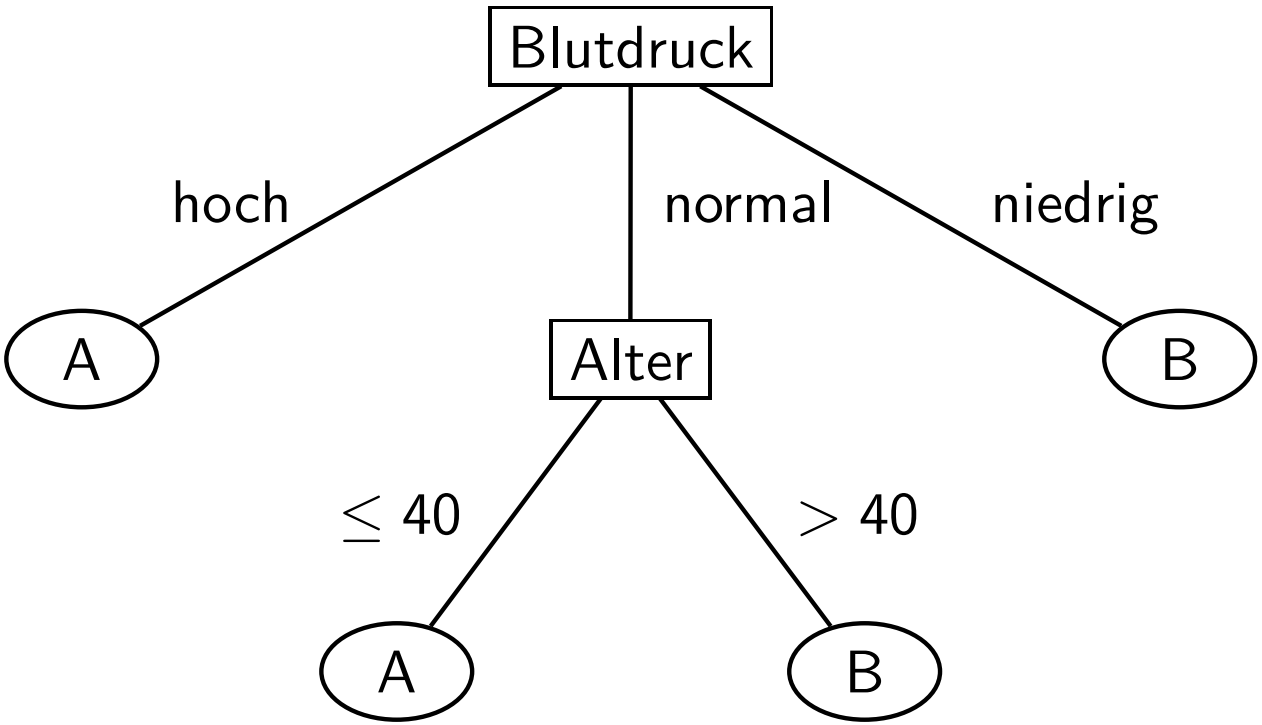
Nr.	Blutdr.	Alt.	M.
3	hoch		A
5	hoch		A
12	hoch		A
1	normal	20	A
6	normal	29	A
10	normal	30	A
7	normal	52	B
9	normal	61	B
2	normal	73	B
11	niedrig		B
4	niedrig		B
8	niedrig		B

Bestimmung des Medikaments

≤ 40:	A	100% korrekt	(3 von 3)
> 40:	B	100% korrekt	(3 von 3)
gesamt:		**100% korrekt**	(6 von 6)

Ergebnis nach Lernen des Entscheidungsbaums

Bestimmung eines Medikaments für einem Patienten:



Bewertungsmaße

- im vorherigen Beispiel:
  Rate der korrekt klassifizierten Beispielfälle
  - Vorteil: leicht zu berechnen, einfach zu verstehen
  - Nachteil: funktioniert nur gut für zwei Klassen
- falls mehr als zwei Klassen: diese Rate ignoriert viele verfügbare Informationen
  - nur Mehrheitsklasse— d.h. Klasse, die am meisten in (einer Teilmenge von) Beispielen vorkommt—wird wirklich berücksichtigt
  - Verteilung der anderen Klassen hat keinen Einfluss
  - aber: gute Wahl can hier wichtig sein für tiefere Ebenen des Entscheidungsbaums
- **darum:** auch andere Bewertungsmaße betrachten, hier:
  - **Informationsgewinn** und seine verschiedenen Normierungen,
  - χ^2-**Maß** (sehr bekannt in der Statistik)

Induktion eines Entscheidungsbaums: Notation

S	Menge von Fällen oder Objektbeschreibungen
C	Klassenattribut
$A^{(1)}, \ldots, A^{(m)}$	beschreibende Attribute (ohne Inidices im Folgenden)
$\mathrm{dom}(C)$	$= \{c_1, \ldots, c_{n_C}\}$, n_C: Anzahl der Klassen
$\mathrm{dom}(A)$	$= \{a_1, \ldots, a_{n_A}\}$, n_A: Anzahl der Attribute
$N_{..}$	Gesamtanzahl der Fälle, d.h. $N_{..} = \lvert S \rvert$
$N_{i.}$	absolute Häufigkeit der Klasse c_i
$N_{.j}$	absolute Häufigkeit des Attributwerts a_j
N_{ij}	absolute Häufigkeit der Kombination aus c_i und a_j
	wobei $N_{i.} = \sum_{j=1}^{n_A} N_{ij}$ und $N_{.j} = \sum_{i=1}^{n_C} N_{ij}$
$p_{i.}$	relative Häufigkeit der Klasse c_i, $p_{i.} = \frac{N_{i.}}{N_{..}}$
$p_{.j}$	relative Häufigkeit des Attributwerts a_j, $p_{.j} = \frac{N_{.j}}{N_{..}}$
p_{ij}	relative Häufigkeit der Kombination aus c_i und a_j, $p_{ij} = \frac{N_{ij}}{N_{..}}$
$p_{i\lvert j}$	relative Häufigkeit von c_i für Fälle mit a_j, $p_{i\lvert j} = \frac{N_{ij}}{N_{.j}} = \frac{p_{ij}}{p_{.j}}$

Ein informationstheoretisches Bewertungsmaß

Informationsgewinn (Kullback und Leibler 1951, Quinlan 1986)
basiert auf Shannon-Entropie $H = -\sum_{i=1}^{n} p_i \log_2 p_i$ (Shannon 1948)

$$I_{\text{gain}}(C, A) = \overbrace{H(C)}^{} - \overbrace{H(C \mid A)}^{}$$

$$= \overbrace{-\sum_{i=1}^{n_C} p_{i.} \log_2 p_{i.}}^{} - \overbrace{\sum_{j=1}^{n_A} p_{.j} \left(-\sum_{i=1}^{n_C} p_{i|j} \log_2 p_{i|j} \right)}^{}$$

$H(C)$	Entropie von der Klassenverteilung (C: Klassenattribut)
$H(C \mid A)$	*erwartete Entropie* von der Klassenverteilungfalls der Wert vom Attribut A bekannt ist
$H(C) - H(C \mid A)$	erwartete Entropie der Verminderung oder des *Informationsgewinns*

Induktion des Entscheidungsbaums

Informationsgewinn von Medikament und Geschlecht:

$$H(\text{Medi.}) = -\left(\frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2}\right) = 1$$

$$H(\text{Medi.} \mid \text{Geschl.}) = \frac{1}{2}\underbrace{\left(-\frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2}\right)}_{H(\text{Medi.}|\text{Geschl.}=\text{männlich})} + \frac{1}{2}\underbrace{\left(-\frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2}\right)}_{H(\text{Medi.}|\text{Geschl.}=\text{weiblich})} = 1$$

$$I_{\text{gain}}(\text{Medi.}, \text{Geschl.}) = 1 - 1 = 0$$

überhaupt kein Informationsgewinn, weil ursprüngliche Gleichverteilung des Medikaments in zwei Gleichverteilungen geteilt wird

Induktion des Entscheidungsbaums

Informationsgewinn von Medikament und Alter:

$$H(\text{Medi.}) = -\left(\frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2}\right) = 1$$

$$H(\text{Medi.} \mid \text{Alt.}) = \frac{1}{2}\underbrace{\left(-\frac{2}{3}\log_2\frac{2}{3} - \frac{1}{3}\log_2\frac{1}{3}\right)}_{H(\text{Medi.}|\text{Alt.}\leq 40)} + \frac{1}{2}\underbrace{\left(-\frac{1}{3}\log_2\frac{1}{3} - \frac{2}{3}\log_2\frac{2}{3}\right)}_{H(\text{Medi.}|\text{Alt.}>40)} \approx 0.9183$$

$$I_{\text{gain}}(\text{Medi.}, \text{Alt.}) = 1 - 0.9183 = 0.0817$$

Teilung bzgl. Alter kann gesamte Entropie reduzieren

Induktion des Entscheidungsbaums

Informationsgewinn von Medikament und Blutdruck:

$$H(\text{Medi.}) = -\left(\frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2}\right) = 1$$

$$H(\text{Medi.} \mid \text{Blutdr.}) = \frac{1}{4}\cdot 0 + \frac{1}{2}\underbrace{\left(-\frac{2}{3}\log_2\frac{2}{3} - \frac{1}{3}\log_2\frac{1}{3}\right)}_{H(\text{Medi.}\mid\text{Blutdr.}=\text{normal})} + \frac{1}{4}\cdot 0 = 0.5$$

$$I_{\text{gain}}(\text{Medi.}, \text{Blutdr.}) = 1 - 0.5 = 0.5$$

größter Informationsgewinn, also wird zuerst bzgl. Blutdruck aufgeteilt (genauso wie im Beispiel mit Fehlklassifikationsrate)

Induktion des Entscheidungsbaums

- nächte Ebene: Teilbaum „Blutdruck ist normal“
- Informationsgewinn für Medikament und Geschlecht:

$$H(\text{Medi.}) = -\left(\frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2}\right) = 1$$

$$H(\text{Medi.} \mid \text{Geschl.}) = \frac{1}{2}\underbrace{\left(-\frac{2}{3}\log_2\frac{2}{3} - \frac{1}{3}\log_2\frac{1}{3}\right)}_{H(\text{Medi.}|\text{Geschl.}=\text{männlich})} + \frac{1}{2}\underbrace{\left(-\frac{1}{3}\log_2\frac{1}{3} - \frac{2}{3}\log_2\frac{2}{3}\right)}_{H(\text{Medi.}|\text{Geschl.}=\text{weiblich})} = 0.9183$$

$$I_{\text{gain}}(\text{Medi.}, \text{Geschl.}) = 0.0817$$

Entropie kann reduziert werden

Induktion des Entscheidungsbaums

- nächste Ebene: Teilbaum „Blutdruck ist normal“
- Informationsgewinn für Medikament und Alter:

$$H(\text{Medi.}) = -\left(\frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2}\right) = 1$$

$$H(\text{Medi.} \mid \text{Alt.}) = \frac{1}{2}\cdot 0 + \frac{1}{2}\cdot 0 = 0$$

$$I_{\text{gain}}(\text{Medi.}, \text{Alt.}) = 1$$

maximaler Informationsgewinn, d.h. perfekte Klassifikation

ID3: Induktion von Entscheidungsbäumen

- ID3 ist mit dieser Heuristik, das Attribut mit dem höchsten Informationsgewinn als „Split-Attribut“ zu verwenden, sehr erfolgreich
- Werte mit sehr vielen Attributen durch ID3 bevorzugt: Beispiel: bei einer Einkommensteuererklärung die jedem Bürger zugeordnete eineindeutige Steuernummer.
  - Genausoviele Ausprägungen, wie es Bürger (n) gibt
  - Partitionierung der Beispielmenge E in n Teilmengen
  - bedingte mittlere Information

$$I(E \mid StNr\text{bekannt}) = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{n} H(0;1) = 0bit$$

  - Informationsgewinn maximal, allerdings Attribut nutzlos.

C4.5: Induktion von Entscheidungsbäumen

- Verbesserung: C4.5
- Statt des absoluten Informationsgewinns wird ein normierter Informationsgewinn genutzt.

$$gain\ ratio(a) = \frac{gain(a)}{split\ info(a)}$$

- $split\ info(a)$ ist hierbei die Entropie des Attributes a:

$$split\ info(a) = H(a) = -\sum_{i=1}^{k} P(a = w_i) log_2 P(a = w_i)$$

- Beispiel Steuernummer: Induktion einer Gleichverteilung, Normierungsfaktor maximal; nächstes Attribut: dasjenige mit maximalem *gain ratio*

Data Mining und Wissensfindung in Daten

- Oberbegriffe für die Automatisierung der Analyse von Daten, Knowledge Discovery in Databases (KDD)
- zentrales Forschungsthema in der Künstlichen Intelligenz
- KDD: Prozess, neues, nützliches und interessantes Wissen aus Daten herauszufiltern und in verständlicher Form zu präsentieren

KDD-Prozess

1. **Hintergrundwissen und Zielsetzung:** Relevantes, bereichsspezifisches Wissen wird zur Verfügung gestellt. Die Ziele des durchzuführenden KDD sollten definiert werden.
2. **Datenauswahl:** Eine Menge von Daten wird als Untersuchungsobjekt festgelegt. Darüberhinaus erfolgt gegebenenfalls eine Vorauswahl der betrachteten Variablen.
3. **Datenbereinigung:** Ausreißer müssen aus der Datenbasis entfernt, Rauscheffekte herausgefiltert werden. Datentypen werden festgelegt und die Behandlung fehlender Daten wird geklärt.
4. **Datenreduktion und -projektion:** Die vorbehandelte Datenmenge wird noch einmal komprimiert durch Reduktion oder Transformation der behandelten Variablen.

KDD-Prozess

5. **Modellfunktionalität:** Welchem Zweck dient das Data Mining? U.a. gibt es Klassifikation, Clustering, Regressionsanalyse.
6. **Verfahrenswahl:** Bestimmung eines Data-Mining-Verfahrens, das zu den untersuchten Daten und der Zielvorgabe des gesamten KDD-Prozesses passt.
7. **Data Mining:** der eigentliche Data-Mining-Prozess, bei dem das ausgewählte Verfahren auf die behandelte Datenmenge angewandt wird, um interessante Informationen z.B. in Form von Klassifikationsregeln oder Clustern zu extrahieren
8. **Interpretation:** Die im Data-Mining-Schritt gewonnene Information wird aufbereitet, indem z.B. redundante Information entfernt wird, und schließlich dem Benutzer in verständlicher Form (Visualisierung!) präsentiert.

Data Mining

Einsatzgebiete für Data Mining:

- *Klassifikation:* Ein Objekt wird einer oder mehreren vordefinierten Kategorien zugeordnet
- *Clustering:* Ein Objekt wird einer oder mehreren Klassen bzw. Clustern zugeordnet, wobei diese im Unterschied zur Klassifikation nicht vorgegeben sind, sondern erst bestimmt werden müssen. Natürliche Gruppierungen von Clustern sollen gefunden werden.
- *Modellierung von Abhängigkeiten:* Lokale Abhängigkeiten zwischen Variablen werden etabliert. Die Stärke der Abhängigkeiten wird bei quantitativen Methoden numerisch angegeben.

Data Mining

Einsatzgebiete für Data Mining:

- *Sequenzanalyse:* beschreibt Muster in sequentiellen Daten, um Regelmäßigkeiten und Trends transparent zu machen, beispielsweise in der Zeitreihenanalyse
- *Assoziationen:* sind Zusammenhänge zwischen mehreren Merkmalen und werden meist durch *Assoziationsregeln* repräsentiert.

Im Folgenden werden Assoziationen in Form von Assoziationsregeln eingehender behandelt.

Assoziationsregeln

- beschreiben gewisse Zusammenhänge und Regelmäßigkeiten zwischen verschiedenen Dingen wie z.B. den Artikeln eines Warenhauses oder sozio-ökonomischen Merkmalen
- Zusammenhänge sind allgemeiner Art, nicht notwendigerweise kausaler Natur
- Annahme: in diesen Assoziationen manifestieren sich implizite strukturelle Abhängigkeiten

Beispiel: Warenkorbanalyse

Label	Artikel	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_6	t_7	t_8	t_9	t_{10}	support
A	Seife	•				•		•		•		0,4
B	Shampoo	•	•	•	•		•		•	•	•	0,8
C	Haarspülung		•	•	•		•		•	•		0,6
D	Duschgel	•			•		•	•		•	•	0,6
E	Zahnpasta	•		•		•		•				0,4
F	Zahnbürste			•		•						0,2
G	Haarfärbung		•		•				•			0,3
H	Haargel		•									0,1
J	Deodorant			•	•	•	•	•	•			0,6
K	Parfüm						•		•			0,2
L	Kosmetikartikel		•		•		•		•		•	0,5

Einkaufstransaktionen in einem Drogeriemarkt

Assoziationsregeln, Formales

- behandelte Dinge: *Items*, $\mathcal{I} = \{i_1, i_2, \ldots\}$
- $\mathcal{X} \subseteq \mathcal{I}$: Itemmenge
- k-Itemmenge: Itemmenge mit k Elementen
- Transaktion $t \subseteq \mathcal{I}$ ist eine Itemmenge
- $\mathcal{D} = \{t_1, t_2, \ldots\}$ Menge von Transaktionen als Datenbasis
- Relativer Anteil aller Transaktionen, die X enthalten:

$$support(X) = \frac{|\{t \in \mathcal{D} \mid X \subseteq t\}|}{|\mathcal{D}|}$$

Assoziationsregeln, Formales

- Assoziationsregel: $X \rightarrow Y$
  - $X, Y \subseteq \mathcal{I}$
  - $X \cap Y = \emptyset$
- $support(X \rightarrow Y) = support(X \cup Y)$
- Relativer Anteil derjenigen X enthaltenden Transaktionen, die auch Y enthalten:

$$confidence(X \rightarrow Y) = \frac{|\{t \in \mathcal{D} \mid (X \cup Y) \subseteq t\}|}{|\{t \in \mathcal{D} \mid X \subseteq t\}|} \quad (1)$$

$$= \frac{support(X \rightarrow Y)}{support(X)} \quad (2)$$

Assoziationsregeln, Algorithmus

- **Aufgabe:** Finde alle Assoziationsregeln, die in der betrachteten Datenbasis mit einem Support von mindestens *minsupp* und einer Konfidenz von mindestens *minconf* gelten, wobei *minsupp* und *minconf* benutzerdefinierte Werte sind.
- **Teilaufgabe 1:** Finde alle Itemmengen, deren Support über der *minsupp*-Schwelle liegt. Diese Mengen werden *häufige Itemmengen* (frequent itemsets) genannt.
- **Teilaufgabe 2:** Finde in jeder häufigen Itemmenge I alle Assoziationsregeln $I' \rightarrow (I - I')$ mit $I' \subset I$, deren Konfidenz mindestens *minconf* beträgt.
- Nützliche Tatsache für den folgenden *apriori*-Algorithmus: Alle Teilmengen einer häufigen Itemmenge sind ebenfalls häufig. Alle Obermengen einer nicht häufigen Itemmenge sind ebenfalls nicht häufig.

Apriori-Algorithmus

Algorithmus: Apriori

Eingabe: Datenbasis $\mathcal{D}$

Ausgabe: Menge häufiger Itemmengen

1. $L_1 := \{\text{häufige 1-Itemmengen}\}$
2. $k := 2$
3. **while** $L_{k-1} \neq \emptyset$ **do**
4. $\quad C_k :=$ AprioriGen(L_{k-1})
5. $\quad$ **for all** Transaktionen $t \in \mathcal{D}$ **do**
6. $\quad\quad C_t := \{c \in C_K \mid c \subseteq t\}$
7. $\quad\quad$ **for all** Kandidaten $c \in C_t$ **do**
8. $\quad\quad\quad$ c.count := c.count + 1
9. $\quad\quad$ **end for**
10. $\quad$ **end for**
11. $\quad L_k := \{c \in C_k \mid c.count \geq |\mathcal{D}| \cdot minsupp\}$
12. $\quad k := k + 1$
13. **end while**
14. **return** $\bigcup_k L_k$

Apriori-Algorithmus

Algorithmus: AprioriGen(L_{k-1})

Eingabe: Menge häufiger (k-1)-Itemmengen L_{k-1}

Ausgabe: Obermenge der Menge häufiger k-Itemmengen

1. $C_k := \emptyset$
2. **for all** $p, q \in L_{k-1}$ mit $p \neq q$ **do**
3. **if** p und q haben $k-2$ gleiche Elemente
4. $p = \{e_1, \ldots, e_{k-2}, e_p\}$
5. $q = \{e_1, \ldots, e_{k-2}, e_q\}$
6. **und** $e_p < e_q$ **then**
7. $C_k := C_K \cup \{\{e_1, \ldots, e_{k-2}, e_p, e_q\}\}$
8. **end if**
9. **end for**
10. **for all** $c \in C_k$ **do**
11. **for all** $(k-1)$-Teilmengen s von c **do**
12. **if** $s \notin L_{k-1}$ **then**
13. $C_k := C_K \setminus \{c\}$
14. **end if**
15. **end for**
16. **end for**
17. **return** C_k

Beispiel: Warenkorbanalyse

- ideales Einsatzszenario für Assoziationsregeln
  - Modellbildung ist nicht nötig
  - Regeln können isoliert betrachtet werden
  - Daten stehen in der Regel bereits zur Verfügung

Beispiel: Warenkorbanalyse

Label	Artikel	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_6	t_7	t_8	t_9	t_{10}	support
A	Seife	•				•		•		•		0,4
B	Shampoo	•	•	•	•		•		•	•	•	0,8
C	Haarspülung		•	•	•		•		•	•		0,6
D	Duschgel	•			•		•	•		•	•	0,6
E	Zahnpasta	•		•		•		•				0,4
F	Zahnbürste			•		•						0,2
G	Haarfärbung		•		•				•			0,3
H	Haargel		•									0,1
J	Deodorant			•	•	•	•	•	•			0,6
K	Parfüm						•		•			0,2
L	Kosmetikartikel		•		•		•		•		•	0,5

Einkaufstransaktionen in einem Drogeriemarkt

Beispiel: Warenkorbanalyse

- gesucht: alle Assoziationsregeln mit:
  - minsupp $= 0{,}4$
  - minconf $= 0{,}7$
- in realen Anwendung wird *minsupp* in der Regel sehr viel kleiner gewählt $(< 0,01)$
- häufige 1-Itemmengen:

$$L_1 = \{\{A\}, \{B\}, \{C\}, \{D\}, \{E\}, \{J\}, \{L\}\}$$

Beispiel: Warenkorbanalyse

Berechnung der Menge C_2: alle paarweisen Kombinationen von Mengen in L_1 bilden und deren Support bestimmen.

C_2-Menge	Support	C_2-Menge	Support	C_2-Menge	Support
{A,B}	0,2	{B,D}	0,5	{C,L}	0,4
{A,C}	0,1	{B,E}	0,2	{D,E}	0,2
{A,D}	0,2	{B,J}	0,4	{D,J}	0,3
{A,E}	0,3	{B,L}	0,5	{D,L}	0,3
{A,J}	0,2	{C,D}	0,3	{E,J}	0,3
{A,L}	0,0	{C,E}	0,1	{E,L}	0,0
{B,C}	0,6	{C,J}	0,4	{J,L}	0,3

Beispiel: Warenkorbanalyse

- häufigste 2-Itemmengen:

$$L_2 = \{\{B, C\}, \{B, D\}, \{B, J\}, \{B, L\}, \{C, J\}, \{C, L\}\}$$

- Berechnung von C_3:

C_3 vor Teilmengencheck	C_3 nach Teilmengencheck	Support
{B,C,D}	{B,C,J}	0,4
{B,C,J}	{B,C,L}	0,4
{B,C,L}		
{B,D,J}		
{B,D,L}		
{B,J,L}		
{C,J,L}		

Beispiel: Warenkorbanalyse

- Damit ist
$$L_3 = \{\{B, C, J\}, \{B, C, L\}\}$$
- einzig mögliche weitere Kombination: $\{B, C, J, L\}$
- allerdings nicht häufig, daher ist $C_4 = L_4 = \emptyset$

Beispiel: Warenkorbanalyse

- Bildung der Assoziationsregeln aus den häufigen Itemmengen:

Regel	Konfidenz	Regel	Konfidenz
B→C	0,75	C→B	1,00
B→D	0,63	D→B	0,83
B→J	0,50	J→B	0,67
B→L	0,63	L→B	1,00
C→J	0,67	J→C	0,67
C→L	0,67	L→C	0,80

- fünf der Regeln erfüllen die Konfidenzbedingung (minconf$= 0,7$)

Beispiel: Warenkorbanalyse

- L_3 enthält $l_{3.1} = \{B, C, J\}$ und $l_{3.2} = \{B, C, L\}$
- $l_{3.1}$ (in [] die Konfidenz der Regel)
  - $H_1 = \{B, C, J\}$
  - Regeln: BC→J [0,67], BJ→C [1,00], CJ→B[1,00]
  - $H_2 = \text{AprioriGen}(H_1) = \{B, C\}$
  - Regel: J→BC [0,67]
- $l_{3.2}$
  - Regeln: BC→L [0,67], BL→C [0,8], CL→B [1,00]
  - durch Erweiterung der Konklusion noch: L→BC [0,8]

Beispiel: Warenkorbanalyse

Regel			Support	Konfidenz
Shampoo	$\rightarrow$	Haarspülung	0,6	0,75
Haarspülung	$\rightarrow$	Shampoo	0,6	1,00
Duschgel	$\rightarrow$	Shampoo	0,5	0,83
Kosmetik	$\rightarrow$	Shampoo	0,5	1,00
Kosmetik	$\rightarrow$	Haarspülung	0,4	0,80
Shampoo, Deodorant	$\rightarrow$	Haarspülung	0,4	1,00
Haarspülung, Deodorant	$\rightarrow$	Shampoo	0,4	1,00
Shampoo, Kosmetik	$\rightarrow$	Haarspülung	0,4	0,80
Haarspülung, Kosmetik	$\rightarrow$	Shampoo	0,4	1,00
Kosmetik	$\rightarrow$	Shampoo, Haarspülung	0,4	0,80

FPM – Frequent Pattern Mining

Werbung in eigener Sache: während der prüfungsfreien Zeit wird die Blockveranstaltung **„Frequent Pattern Mining“** stattfinden, die von PD Christian Borgelt gehalten wird. In dieser Veranstaltung geht es um das Finden häufiger Muster verschiedenster Formen in Daten, u.a. Assoziationsregeln. Verschiedene Algorithmen zum Thema werden vorgestellt und eingehend behandelt.

Weitere Informationen sind verfügbar unter:

`http://www.borgelt.net/teach/fpm`

IDA – Intelligent Data Analysis

Werbung in eigener Sache: im **Sommersemester** wird unsere reguläre Vorlesung **„Intelligent Data Analysis“** stattfinden. Es geht dort unter anderem um klassische Statistik, Assoziationsregeln, Bayes'sche Klassifikation, Entscheidungs- und Regressionsbäume, Fuzzy-Datenanalyse und Clustering-Techniken.

Weitere Informationen werden bald verfügbar sein unter:

`http://fuzzy.cs.ovgu.de/wiki/pmwiki.php?n=Lehre.IDA2011`

Weiterführende Literatur

Carbonell, J. G., Michalski, R. S., and Mitchell, T. M. (1984).
An overview of machine learning.
In Michalski, R. S., Carbonell, J. G., and Mitchell, T. M., editors, *Machine Learning: An Artificial Intelligence Approach*, pages 3–23. Springer, Berlin, Heidelberg.

Michalski, R. S. and Kodratoff, Y. (1990).
Research in machine learning: recent progress, classification of methods, and future directions.
In Kodratoff, Y. and Michalski, R. S., editors, *Machine learning: an artificial intelligence approach volume III*, chapter 1, pages 3–30. Morgan Kaufmann Publishers Inc., San Francisco, CA, USA.

Michalski, R. S. and Michalski, R. S. (1986).
Understanding the nature of learning: Issues and research directions.
In *Machine Learning: An Artificial Intelligence Approach*, pages 3–25. Morgan Kaufmann.

Michalski, S. R., Carbonell, G. J., and Mitchell, M. T., editors (1986).
Machine learning an artificial intelligence approach volume II.
Morgan Kaufmann Publishers Inc., San Francisco, CA, USA.

Simon, H. A. (1983).
Why should machines learn?
In *Machine Learning, An Artificial Intelligence Approach*. Tioga, Palo Alto, California.