6. Andere Paradigmen

Inhalt dieses Kapitels

6.1 Induktive Logik-Programmierung

Einführung [Muggleton & De Raedt 1994]

- Gegeben: Menge von Fakten in einer prädikatenlogischen Sprache 1. Stufe
- Gesucht: prädikatenlogische Regeln 1. Stufe, die in der Faktenmenge gelten
- Methode: Suche im Raum aller möglichen Regeln
- Abgrenzung zu Assoziationsregeln

  dort: Regeln der Form $P(x) \wedge Q(x) \Rightarrow R(x)$

  hier: z.B. Regeln der Form $Kurs(x) \wedge Hyperlink(x, y) \Rightarrow Professor(y)$ oder

  $\forall X \exists Y \exists Z\ P(x,y) \wedge P(x, z) \Rightarrow Q(y, z)$

komplexe Regeln mit *mehreren Variablen*

6.1 Induktive Logik-Programmierung

Einführung

- Zusammenhang mit relationalen Datenbanken

  n-stelliges Prädikat P $\leftrightarrow$ Relation P mit Attributen A_1 bis A_n

  Tupel $(x_1, ..., x_n)$ genau dann in P enthalten, wenn das Fakt $P(x_1, ..., x_n)$ gilt

- Ausdruckskraft der Regelsprache

  ⇒ Zusammenhänge zwischen *verschiedenen* Relationen einer Datenbank

- Integration von vorhandenem Hintergrundwissen (*Domain Knowledge*)

  Formulierung von Hintergrundwissen ebenfalls in Prädikatenlogik 1. Stufe

6.1 Induktive Logik-Programmierung

Methode

- Initialisierung

  einer Menge von Hypothesen

- Generierung weiterer Hypothesen

  aus den vorhandenen

  durch Anwendung von *induktiven Inferenzregeln*

⇒ Regeln zur Ableitung neuer aus bekannten Hypothesen

z.B. Spezialisierung und Generalisierung

6.1 Induktive Logik-Programmierung

Methode

```
Initialisiere eine Menge von Hypothesen QH;
repeat
  Wähle eine Hypothese H ∈ QH und lösche sie aus QH;
  Wähle Inferenzregeln r_1, ..., r_k aus der Menge der
   gegebenen Inferenzregeln;
  Wende die Inferenzregeln r_1, ..., r_k auf H an, um
   neue Hypothesen H_1, ..., H_k „abzuleiten“;
  Füge H_1, ..., H_k zu QH hinzu;
  Filtere aus der Menge QH ungültige oder
   uninteressante Hypothesen wieder heraus;
until Stopkriterium(QH) erfüllt
```


6.1 Induktive Logik-Programmierung

Diskussion

- hohe Ausdruckskraft der Regeln

  z.B. für Temporal Data Mining oder Web Mining
- einfache Integration von Hintergrundwissen
- Ineffizienz

  Suchraum sehr groß
- Ansätze zur Verbesserung der Effizienz

  Vorgabe von *Regelschemata*

  ähnliche Monotonie-Bedingung wie für Frequent Itemsets

6.2 Genetische Algorithmen

Grundlagen [Bäck 1996]

- allgemeines Suchverfahren
- basierend auf dem Prinzip der biologischen Evolution
- *Individuum*:

  potentielle Lösung eines Problems
- *Chromosom*:

  Codierung eines Individuums durch einen (typischerweise binären) String
- *Gen*:

  zusammenhängender Teilstring eines Chromosoms

6.2 Genetische Algorithmen

Grundlagen

- Suchmechanismus: Reproduktion von Individuen und Auswahl der besten
- zwei verschiedene Arten der Reproduktion:
  - *Kombination* von ausgewählten Individuen
  - zufällige Veränderung (*Mutation*) eines existierenden Individuums
- Auswahl der besten Individuen (*Selektion*)

  Zielfunktion: Chromosomen → Fitness-Werte

  Fitness: Maß für die Qualität einer Lösung
- Anwendung der Fitness

  Wahrscheinlichkeit, daß ein Individuum sich reproduziert

  endgültige Auswahl der besten Lösung

6.2 Genetische Algorithmen

Beispiel

- Data-Mining-Problem:

  Suche nach besonders häufigen Attribut-Wert-Paaren

- Gen: Attribut-Wert-Paar
- Chromosom: Konjunktion von Attribut-Wert-Paaren
- Kombination: Mischen der Attribut-Wert-Paare zweier Chromosomen
- Mutation: zufällige Veränderung eines Attributwertes
- Fitness-Wert:

  Häufigkeit, mit der diese Konjunktion der Attribut-Werte-Paare in der Datenmenge auftritt

6.2 Genetische Algorithmen

Methode

```
Initialisiere eine Population von Individuen;
while (Stopkriterium ist nicht erfüllt) do
    Wähle Individuen gemäß ihrer Fitness als Eltern
     aus;
    Kombiniere Eltern, um neue Individuen zu
     erzeugen;
    Mutiere die neuen Individuen;
    Füge die neuen Individuen zur Population hinzu;
return beste Individuen;
```


6.2 Genetische Algorithmen

Diskussion

- besser als zufällige / erschöpfende Suche

  ⇒ maximale Fitness in einer Population wächst monoton im Laufe der Generationen

- im allgemeinen nicht sehr effizient

  langsame Konvergenz

- Einsatz sinnvoll wenn

  keine intelligente, problemspezifische Suchtstrategie bekannt

  Qualität einer Gesamtlösung = „Summe“ der Qualitäten der Teillösungen

6.3 Neuronale Netze

Grundlagen [Bigus 1996], [Bishop 1995]

- Paradigma für ein Maschinen- und Berechnungsmodell
- Funktionsweise ähnlich der von biologischen Gehirnen
- *Neuronales Netz*: Menge von Neuronen, über Kanten miteinander verbunden
- *Neuron*: entspricht biologischem Neuron

  Aktivierung durch Input-Signale an den Synapsen

  Erzeugung eines Output-Signals, das zu anderen Neuronen weitergeleitet wird

- Organisation eines neuronalen Netzes

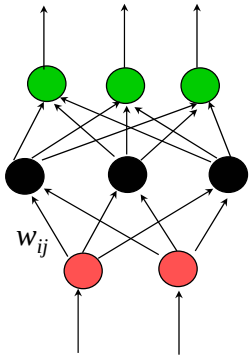
  Input-Schicht, *verborgene Schichten*, *Output-Schicht*

  Knoten einer Schicht mit allen Knoten der vorhergehenden Schicht verbunden

6.3 Neuronale Netze

Grundlagen

- Kanten besitzen *Gewichte*
- Funktion eines neuronalen Netzes



Output-Vektor y

Output-Schicht

verborgene Schicht

Input-Schicht

Input-Vektor x

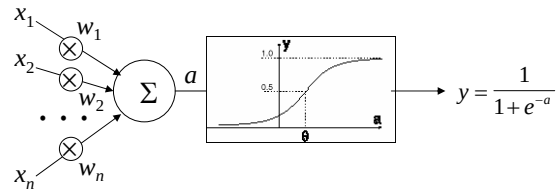
6.3 Neuronale Netze

Neuronen

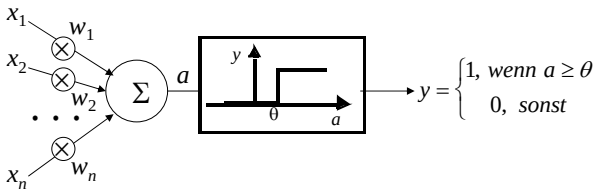
- allgemeines Neuron

  a: *Aktivierungswert*

  $a = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_i$



- *Threshold Logic Unit* (*TLU*)



6.3 Neuronale Netze

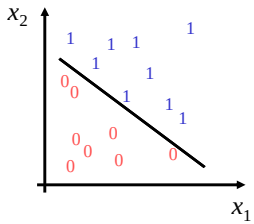
Neuronen

- Klassifikation mit Hilfe einer TLU

  repräsentiert eine (Hyper-)Ebene $\sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_i = \theta$

  links von der Ebene: Klasse 0

  rechts von der Ebene: Klasse 1



- Trainieren einer TLU

  Lernen der „richtigen“ Gewichte zur Unterscheidung der zwei Klassen
  Iterative Anpassung der Gewichte w_{ij}

  Rotation der durch w und θ gegebene Hyperebene um einen kleinen Betrag in Richtung v, wenn v noch nicht auf der richtigen Seite der Ebene liegt

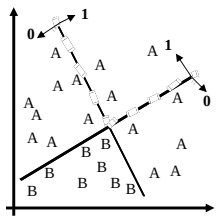
6.3 Neuronale Netze

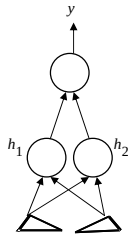
Kombination mehrerer Neuronen

- zwei Klassen, die nicht linear separierbar sind:

  ⇒ zwei innere Knoten und ein Output-Knoten

- Beispiel





$h_1 = 0 \ \wedge \ h_2 = 0$: $y = 0$ (*Klasse B*)

andernfalls: $y = 1$ (*Klasse A*)

Lernalgorithmus für komplexe Neuronale Netze

- bei Abweichung von vorhergesagter und tatsächlicher Klasse:

  Anpassung der Gewichte mehrerer Knoten

- Frage

  in welchem Maße sind die verschiedenen Knoten an dem Fehler beteiligt?

- Anpassung der Gewichte

  durch Gradientenverfahren, das den Gesamtfehler minimiert

  Gesamtfehler: Summe der (quadratischen) Abweichungen des tatsächlichen Outputs *y* vom gewünschten Output *t* für die Menge der Inputvektoren

  Voraussetzung: Output *y stetige* Funktion der Aktivierung *a*

Algorithmus Backpropagation

```
für jedes Paar(v,t) // v = Input,t = gewünschter Output
  „forward pass":
     Bestimme den tatsächlichen Output y für Eingabe v;
  „backpropagation":
     Bestimme den Fehler (t – y) der Output-Einheiten
      und passe die Gewichte der Output-Einheiten in die
      Richtung an, die den Fehler minimiert;
     Solange der Input-Layer nicht erreicht ist:
          Propagiere den Fehler auf die nächste Schicht
            und passe auch dort die Gewichte der
            Einheiten in fehlerminimierender Weise an;
```


Design der Netztopologie

- Bestimmung von
  - – Anzahl der Input-Knoten
  - – Anzahl der inneren Schichten und jeweilige Anzahl der Knoten
  - – Anzahl der Output-Knoten

starker Einfluß auf die Klassifikationsgüte

- zu wenige Knoten

  ⇨ niedrige Klassifikationsgüte

- zu viele Knoten

  ⇨ Overfitting

Bestimmung der Netztopologie [SPSS Clementine 2000]

- Statische Topologie

  Topologie wird apriori festgelegt

  eine verborgene Schicht reicht in vielen Anwendungen aus

- Dynamische Topologie

  dynamisches Hinzufügen von Neuronen (und verborgenen Schichten)

  solange Klassifikationsgüte signifikant verbessert wird

- Multiple Topologien

  Trainieren mehrer dynamischer Netze parallel

  z.B. je ein Netz mit 1, 2 und 3 verborgenen Schichten

Bestimmung der Netztopologie

• Pruning

Trainieren eines Netzes mit statischer Topologie

nachträgliches Entfernen der unwichtigsten Neuronen

solange Klassifikationsgüte verbessert wird

Schlußfolgerung

statische Topologie: niedrige Klassifikationsgüte, aber relativ schnell

Pruning: beste Klassifikationsgüte, aber sehr hoher Laufzeitaufwand zum Training

Diskussion

+ im allgemeinen sehr hohe Klassifikationsgüte

beliebig komplexe Entscheidungsflächen

+ robust gegen Rauschen in den Trainingsdaten
+ Effizienz der Anwendung

- schlechte Verständlichkeit

lernt nur Gewichte, aber keine Klassenbeschreibung

- Ineffizienz des Lernens

sehr lange Trainingszeiten

- keine Integration von Hintergrundwissen