LMU LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITY MUNICH
DEPARTMENT INSTITUTE FOR INFORMATICS
DATABASE SYSTEMS GROUP

Skript zur Vorlesung:

Einführung in die Informatik: Systeme und Anwendungen

Sommersemester 2015

Kapitel 4: Data Mining

Vorlesung: Prof. Dr. Christian Böhm
Übungen: Sebastian Goebl, Dr. Bianca Wackersreuther

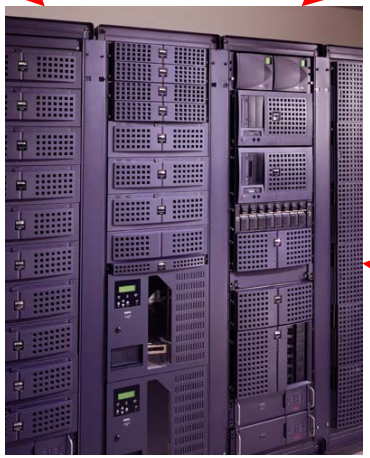
http://www.dbs.ifi.lmu.de/cms/ Einführung_in_die_Informatik_Systeme_und_Anwendungen

Überblick

Motivation


Kreditkarten


Scanner-Kassen


Datenbanken


Telefongesellschaft


Astronomie

- Riesige Datenmengen werden in Datenbanken gesammelt
- Analysen können nicht mehr manuell durchgeführt werden

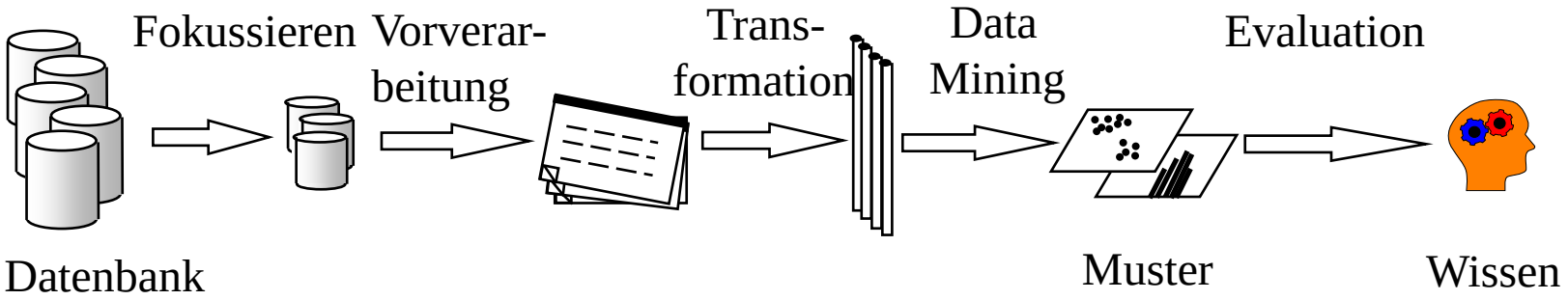
Definition KDD

- *Knowledge Discovery in Databases* (*KDD*) ist der Prozess der (semi-) automatischen Extraktion von Wissen aus Datenbanken, das
  - *gültig*
  - *bisher unbekannt*
  - und *potentiell nützlich* ist.

- Bemerkungen:
  - (*semi*-) *automatisch*: im Unterschied zu manueller Analyse. Häufig ist trotzdem Interaktion mit dem Benutzer nötig.
  - *gültig*: im statistischen Sinn.
  - *bisher unbekannt*: bisher nicht explizit, kein „Allgemeinwissen“.
  - *potentiell nützlich*: für eine gegebene Anwendung.

Der KDD-Prozess (Modell)

Prozessmodell nach Fayyad, Piatetsky-Shapiro & Smyth



Fokussieren:
- Beschaffung der Daten
- Verwaltung (File/DB)
- Selektion relevanter Daten

Vorverarbeitung:
- Integration von Daten aus unterschiedlichen Quellen
- Vervollständigung
- Konsistenzprüfung

Transformation
- Diskretisierung numerischer Merkmale
- Ableitung neuer Merkmale
- Selektion relevanter Merkm.

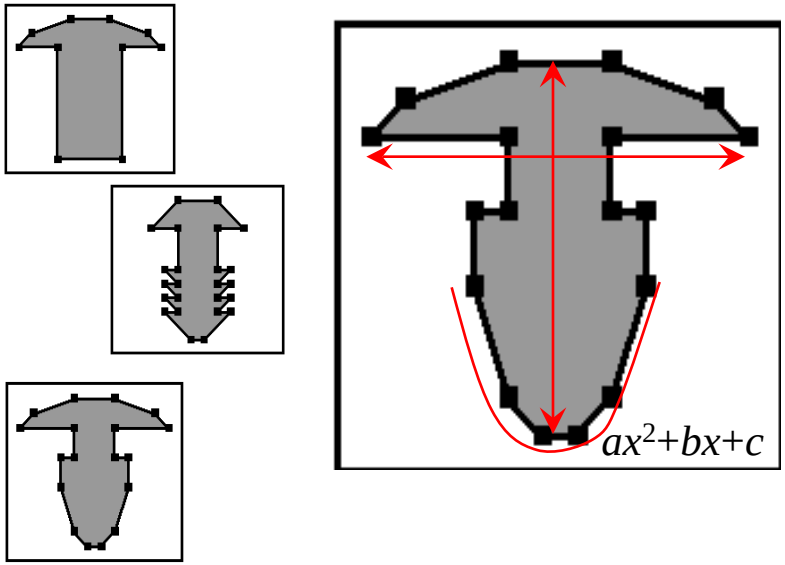
Data Mining
- Generierung der Muster bzw. Modelle

Evaluation
- Bewertung der Interessantheit durch den Benutzer
- Validierung: Statistische Prüfung der Modelle

Objekt-Merkmale (Feature)

- Oft sind die betrachteten Objekte komplex
- Eine Aufgabe des KDD-Experten ist dann, geeignete Merkmale (*Features*) zu definieren bzw. auszuwählen, die für die Unterscheidung (Klassifikation, Ähnlichkeit) der Objekte relevant sind.

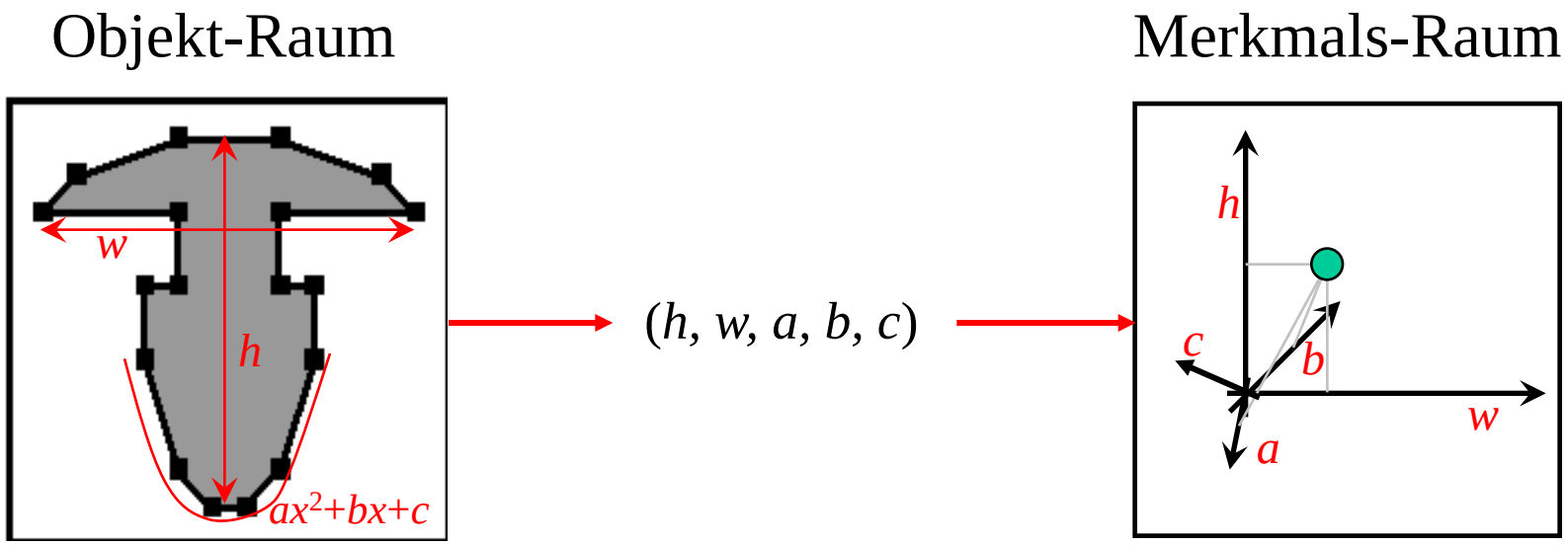
Beispiel: CAD-Zeichnungen:



Mögliche Merkmale:

- Höhe h
- Breite w
- Kurvatur-Parameter (a,b,c)

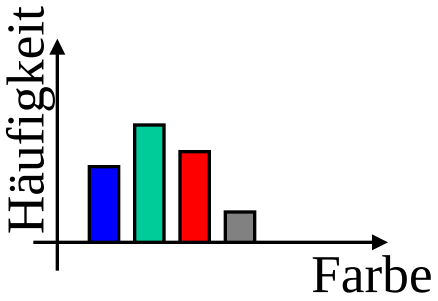
Feature-Vektoren



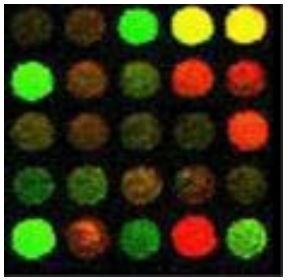
- Im Kontext von statistischen Betrachtungen werden die Merkmale häufig auch als *Variablen* bezeichnet
- Die ausgewählten Merkmale werden zu Merkmals-Vektoren (*Feature Vector*) zusammengefasst
- Der Merkmalsraum ist häufig hochdimensional (im Beispiel 5-dim.)

Feature-Vektoren (weitere Beispiele)

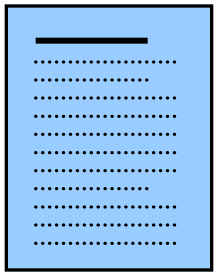
Bilddatenbanken:
Farbhistogramme



Gen-Datenbanken:
Expressionslevel



Text-Datenbanken:
Begriffs-Häufigkeiten



Data	25
Mining	15
Feature	12
Object	7
...	

Der Feature-Ansatz ermöglicht einheitliche Behandlung von Objekten verschiedenster Anwendungsklassen

Feature: verschiedene Kategorien

Nominal (kategorisch)

Charakteristik:

Nur feststellbar, ob der Wert gleich oder verschieden ist. Keine Richtung (besser, schlechter) und kein Abstand.
Merkmale mit nur zwei Werten nennt man *dichotom*.

Beispiele:

Geschlecht (dichotom)
Augenfarbe
Gesund/krank (dichotom)

Ordinal

Charakteristik:

Es existiert eine Ordnungsrelation (besser/schlechter) zwischen den Kategorien, aber kein einheitlicher Abstand.

Beispiele:

Schulnote (metrisch?)
Güteklasse
Altersklasse

Metrisch

Charakteristik:

Sowohl Differenzen als auch Verhältnisse zwischen den Werten sind aussagekräftig. Die Werte können diskret oder stetig sein.

Beispiele:

Gewicht (stetig)
Verkaufszahl (diskret)
Alter (stetig oder diskret)

Ähnlichkeit von Objekten

- Spezifiziere Anfrage-Objekt $q \in DB$ und…
  - … suche ähnliche Objekte – Range-Query (Radius ε)

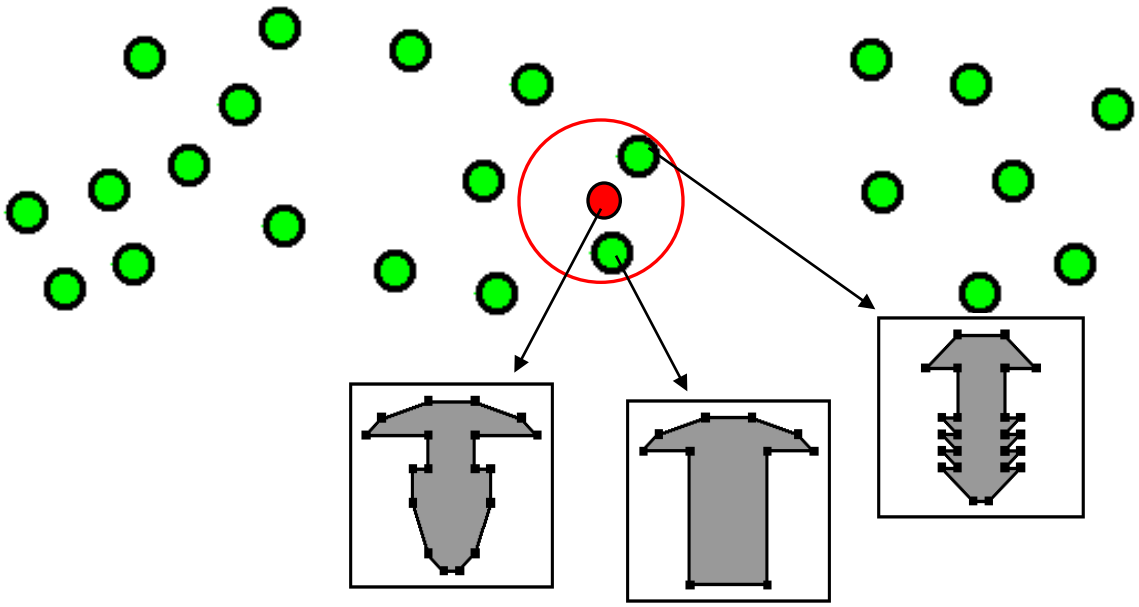
$$RQ(q,\varepsilon) = \{ o \in DB \mid \delta(q,o) \leq \varepsilon \}$$

  - … suche die k ähnlichsten Objekte – Nearest Neighbor Query

$$NN(q,k) \subseteq DB \text{ mit } k \text{ Objekten, sodass}$$

$$\forall o \in NN(q,k), p \in DB \backslash NN(q,k) : \delta(q,o) \leq \delta(q,p)$$

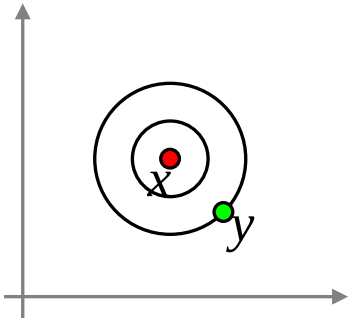
alternative Schreibweise für Mengendifferenz:
$A \backslash B = A - B$



Ähnlichkeitsmaße im Feature-Raum

Euklidische Norm (L_2):

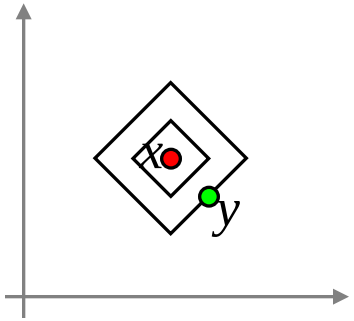
$\delta_1(x,y) = ((x_1-y_1)^2+(x_2-y_2)^2+...)^{1/2}$



Abstand in Euklidischen Raum (natürliche Distanz)

Manhattan-Norm (L_1):

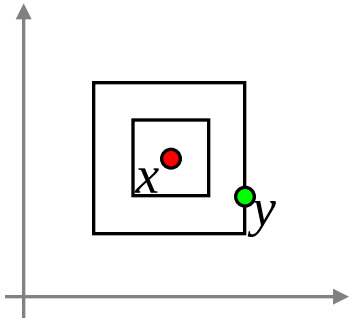
$\delta_2(x,y) = |x_1-y_1|+|x_2-y_2|+...$



Die Unähnlichkeiten der einzelnen Merkmale werden direkt addiert

Maximums-Norm (L_∞):

$\delta_\infty(x,y) = \max\{|x_1-y_1|, |x_2-y_2|,...\}$



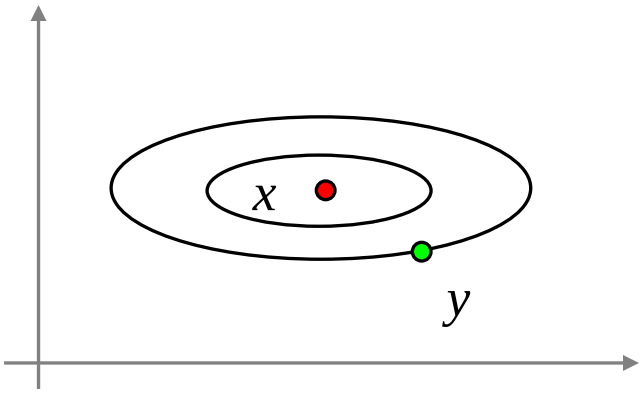
Die Unähnlichkeit des am wenigsten ähnlichen Merkmals zählt

Verallgemeinerung L_p-Abstandsmaß:

$$\delta_p(x,y) = (|x_1-y_1|^p + |x_2-y_2|^p + ...)^{1/p}$$

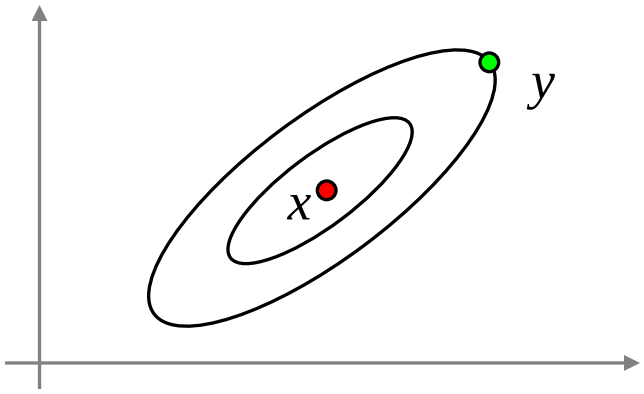
Gewichtete Ähnlichkeitsmaße

- Viele Varianten gewichten verschiedene Merkmale unterschiedlich stark.



Gewichtete Euklidische Distanz

$$\delta_{p,w}(x,y) = \sqrt[p]{\sum_{i=1}^{d} w_i \cdot |x_i - y_i|^p}$$



Mahalanobis Distanz

$$\delta_{\Sigma}(x,y) = \sqrt{(x-y)^T \cdot \Sigma^{-1} \cdot (x-y)}$$

Σ = Kovarianz-Matrix

Kategorien von Data Mining

- Wichtigste Data-Mining-Verfahren auf Merkmals-Vektoren:
  - Clustering
  - Outlier Detection

  } normalerweise unsupervised

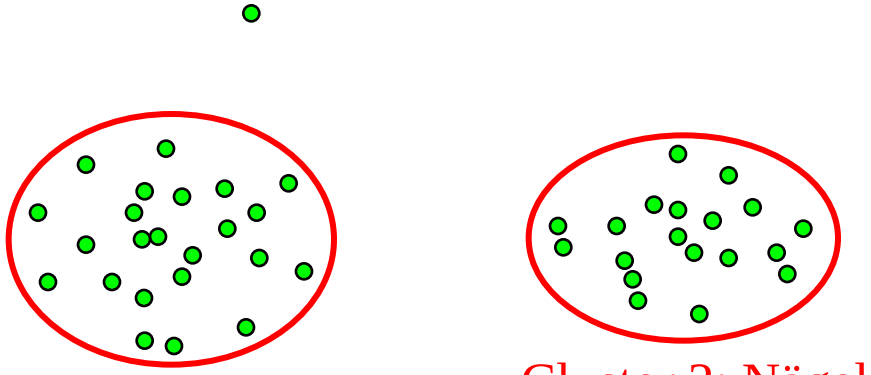
  - Klassifikation
  - Regression

  } normalerweise supervised

- Supervised: In Trainingsphase wird eine Funktion gelernt, die in der Testphase angewandt wird.
- Unsupervised: Es gibt keine Trainingsphase. Die Methode findet Muster, die einem bestimmten Modell entsprechen.

- Darüber hinaus gibt es zahlreiche Verfahren, die nicht auf Merkmalsvektoren, sondern direkt auf Texten, Mengen, Graphen usw. arbeiten.

Clustering



Ein Grundmodell des Clustering ist:

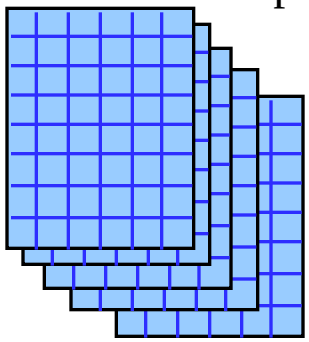
Zerlegung (Partitionierung) einer Menge von Objekten (bzw. Feature-Vektoren) in Teilmengen (Cluster), so dass

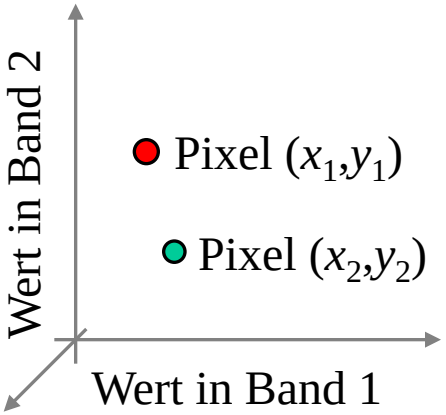
- die Ähnlichkeit der Objekte innerhalb eines Clusters maximiert
- die Ähnlichkeit der Objekte verschiedener Cluster minimiert wird

Idee: Die verschiedenen Cluster repräsentieren meist unterschiedliche Klassen von Objekten; bei evtl. unbek. Anzahl und Bedeutung der Klassen

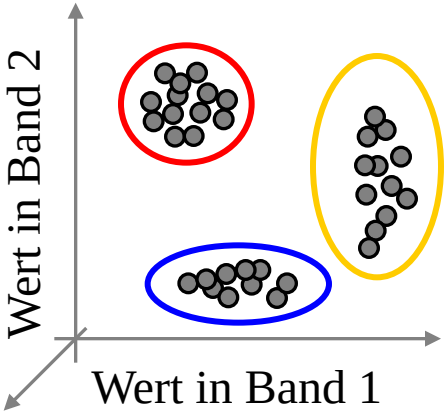
Anwendung: Thematische Karten

Aufnahme der Erdoberfläche
in 5 verschiedenen Spektren



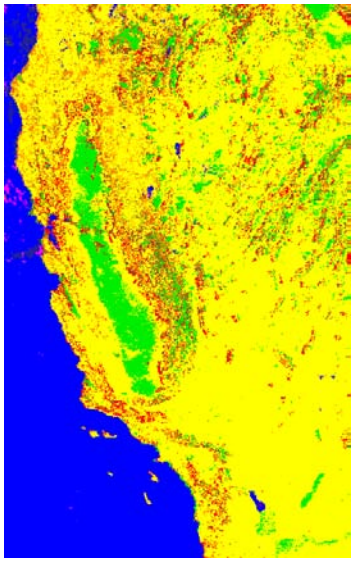


Cluster-Analyse

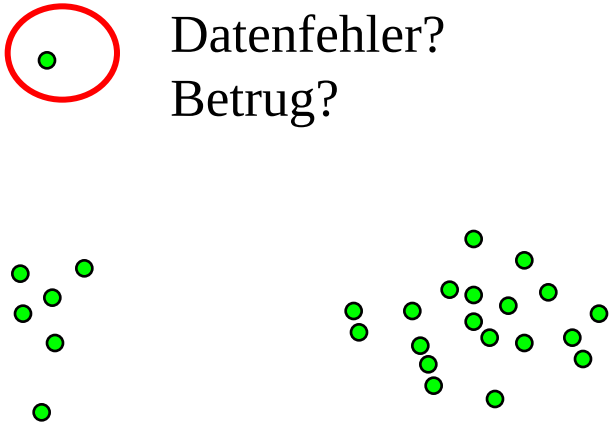


Rücktransformation
in *xy*-Koordinaten

Farbcodierung nach
Cluster-Zugehörigkeit



Outlier Detection



Datenfehler?
Betrug?

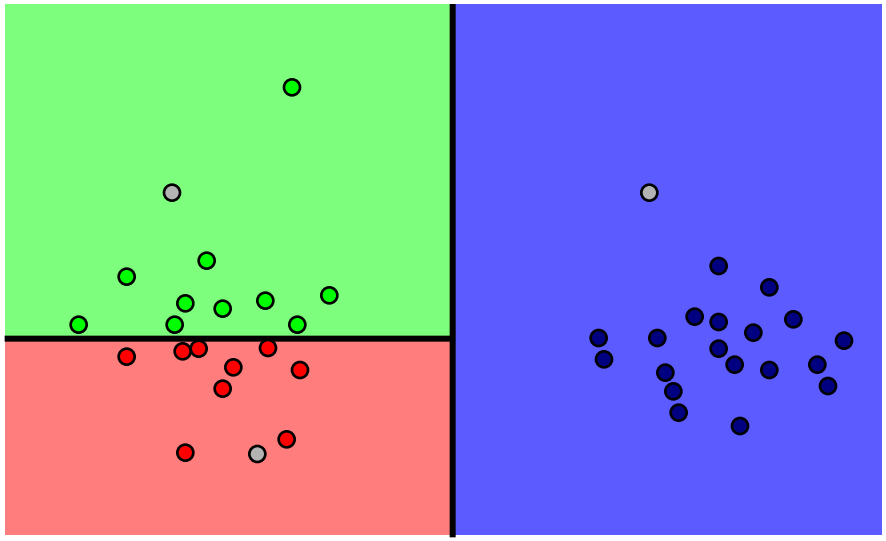
Outlier Detection bedeutet:

Ermittlung von untypischen Daten

Anwendungen:

- Entdeckung von Missbrauch etwa bei
  - Kreditkarten
  - Telekommunikation
- Datenbereinigung (Messfehler)

Klassifikation



- Schrauben
- Nägel
- Klammern

} Trainings-daten

- Neue Objekte

Aufgabe:

Lerne aus den bereits klassifizierten *Trainingsdaten* die *Regeln*, um neue Objekte nur aufgrund der Merkmale zu klassifizieren

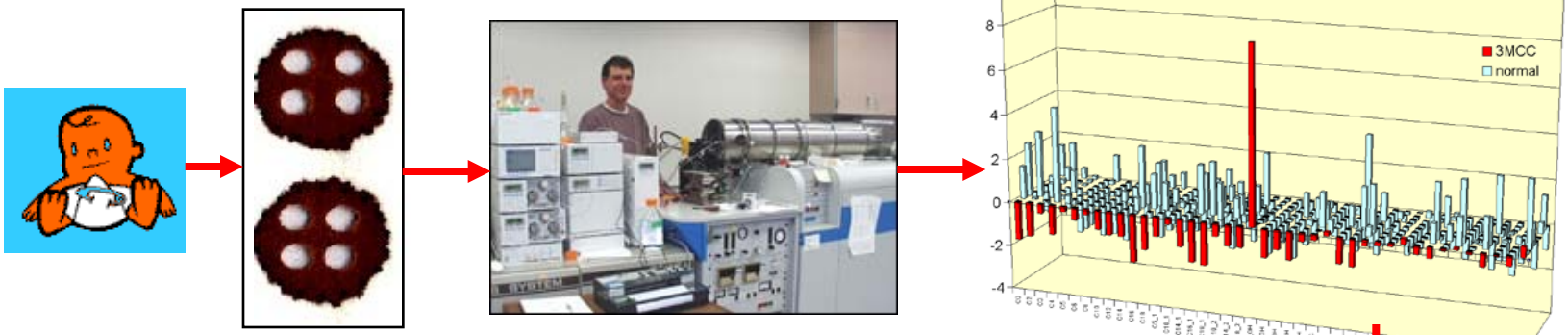
Das Ergebnismerkmal (Klassenvariable) ist nominal (*kategorisch*)

Anwendung: Neugeborenen-Screening

Blutprobe des Neugeborenen

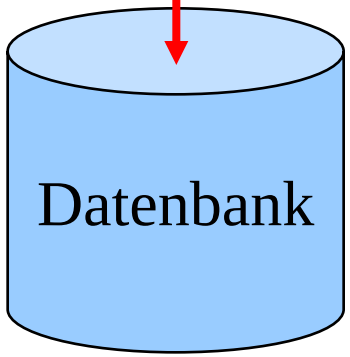
Massenspektrometrie

Metabolitenspektrum

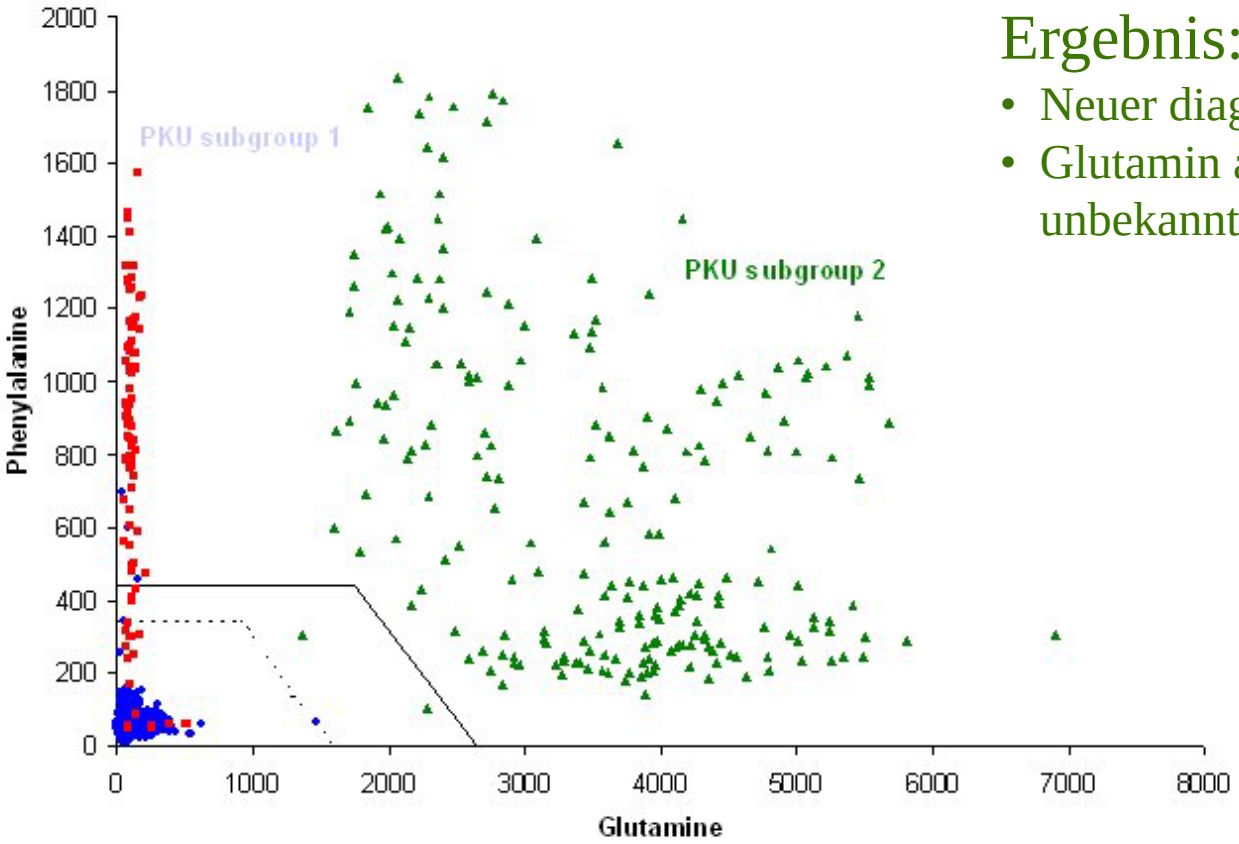


14 analysierte Aminosäuren:

alanine
arginine
argininosuccinate
citrulline
glutamate
glycine
methionine
phenylalanine
pyroglutamate
serine
tyrosine
valine
leuzine+isoleuzine
ornitine



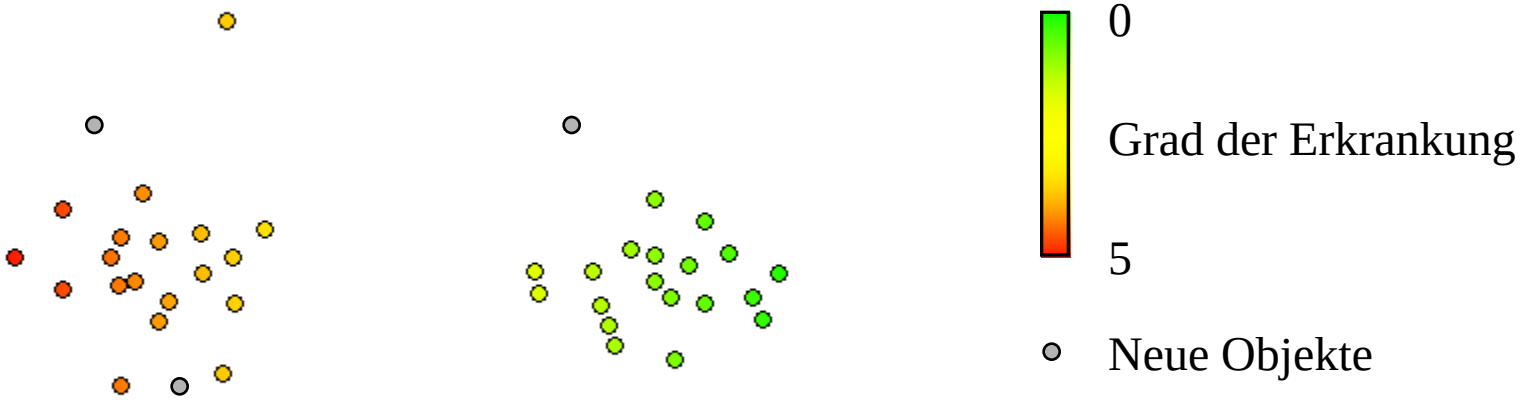
Anwendung: Neugeborenen-Screening



Ergebnis:

- Neuer diagnostischer Test
- Glutamin als bisher unbekannter Marker

Regression



Aufgabe:

Ähnlich zur Klassifikation, aber das Ergebnis-Merkmal, das gelernt bzw. geschätzt werden soll, ist *metrisch*.