

Knowledge Discovery in Databases

WS 2017/18

Kapitel 1: Einleitung

Vorlesung: Prof. Dr. Peer Kröger

Übungen: Anna Beer, Florian Richter

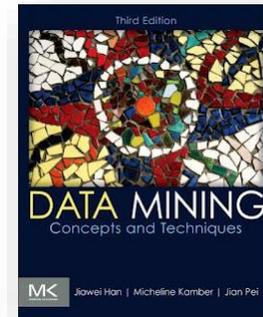
- Wöchentliche Veranstaltungen
 - Vorlesung:
 - Mittwoch, 09:30 – 12:00 h, Raum S 004 (Schellingstr. 3)
 - Übungen (Beginn: siehe Vorlesungs-Homepage):
 - Do, 14:00 - 16:00 Uhr , Raum D Z005 (HGB)
 - Do, 16:00 - 18:00 Uhr, Raum D Z005 (HGB)
 - Fr, 12:00 - 14:00 Uhr, Raum A 015 (HGB)
 - Fr, 14:00 - 16:00 Uhr, Raum A 015 (HGB)
- Klausur: tbd

- Material (Folien, Übungsblätter, Links, etc.):
 - Vorlesungs-Homepage:
http://www.dbs.ifi.lmu.de/cms/studium_lehre/lehre_master/kdd1718/index.html
 - Übungen:
 - Bitte vor der Übung downloaden und zu hause vorbereiten
 - Präsentation und Diskussion der Lösung in den Übungen
 - Klausur:
 - Stoff: alles, was in der Vorlesung und Übung bis dahin dran kam.
 - Registrierung via UniWorX (in den nächsten Tagen)

1. Einleitung
2. Daten Repräsentation, Data Warehousing, Business Intelligence (BI)
3. Frequent Pattern Mining
4. Clustering
5. Outlier Detection
6. Classification
7. Regression
8. Further Topics

Diese Folien verwenden u.a. verändertes Material aus den geschützten Folien der Autoren der folgenden Bücher:

© Jiawei Han, Micheline Kamber, Jian Pei:
Data Mining – Concepts and Techniques,
3rd ed., Morgan Kaufmann Publishers, 2011.
<http://www.cs.uiuc.edu/~hanj/bk3>



© Martin Ester and Jörg Sander:
*Knowledge Discovery in Databases –
Techniken und Anwendungen*
Springer Verlag, 2000 (in German).



An vielen Stellen wird zudem auf die Original-Literatur verwiesen.

- Data Mining = Extraktion von Mustern aus Daten
- Muster
 - „Normale“ Muster („Regularities“) – z.B. häufige Itemsets, Clusters
 - „Abnormalitäten“ („Irregularities“) – z.B. Ausreißer
- Hervorstechende Muster
 - Viele Muster sind trivial oder repräsentieren bereits bekannte Informationen
 - „all mothers in our database are female“
 - Viele Muster sind redundant
 - „Ist die Kombi {bread, butter, salt} häufig, so ist die Kombi „{bread, butter} auch häufig“
- Aggregation der Daten kann hier Abhilfe schaffen

Was ist Data Mining?

- Knowledge Discovery in Databases (Data Mining):
 - Extraction of interesting (*non-trivial, implicit, previously unknown and potentially useful*) information or patterns from data in large databases

- Alternative Name:
 - Data mining: eine Fehlbezeichnung?
 - knowledge extraction, data/pattern analysis, data archeology, data dredging (“Ausbaggern”), information harvesting, business intelligence, etc.
 - Neuerdings: Data Science, Machine Learning (nicht so neu), Artificial Intelligence (noch weniger neu)

- Roots of data mining
 - Statistics
 - Machine learning
 - Database systems
 - Information visualization



“Necessity is the mother of invention”

- Datenexplosion, Digitalisierung
 - “Automated data collection tools and mature database technology lead to tremendous amounts of data stored in databases, data warehouses and other information repositories”
- “We are drowning in data, but starving for knowledge!”
- Lösungen für dieses Problem: data warehousing and data mining
 - Data Warehousing and on-line analytical processing (OLAP), BI
 - Data Mining um interessante Muster in Daten zu identifizieren(rules, regularities, patterns, constraints) from data in large databases

- Big Data
 - McKinsey-Report 2011
- Data Science
 - Die Eierlegende-Woll-Milch-Sau
- Machine Learning und KI (AI)
 - Altes in neuem Gewand?
 - Klassisches ML: induktives Lernen (aus Fakten = Beobachtungen Abhängigkeiten lernen)
 - Klassische AI: deduktives Lernen (aus Fakten, Regeln, Axiome, neue Theoreme ableiten)
 - Paul ist Schotte, alle Schotten sind geizig
=> Paul ist geizig
- Data Lake
- Digitalisierung, Industrie 4.0, ...

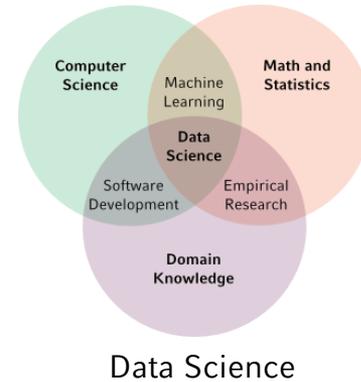
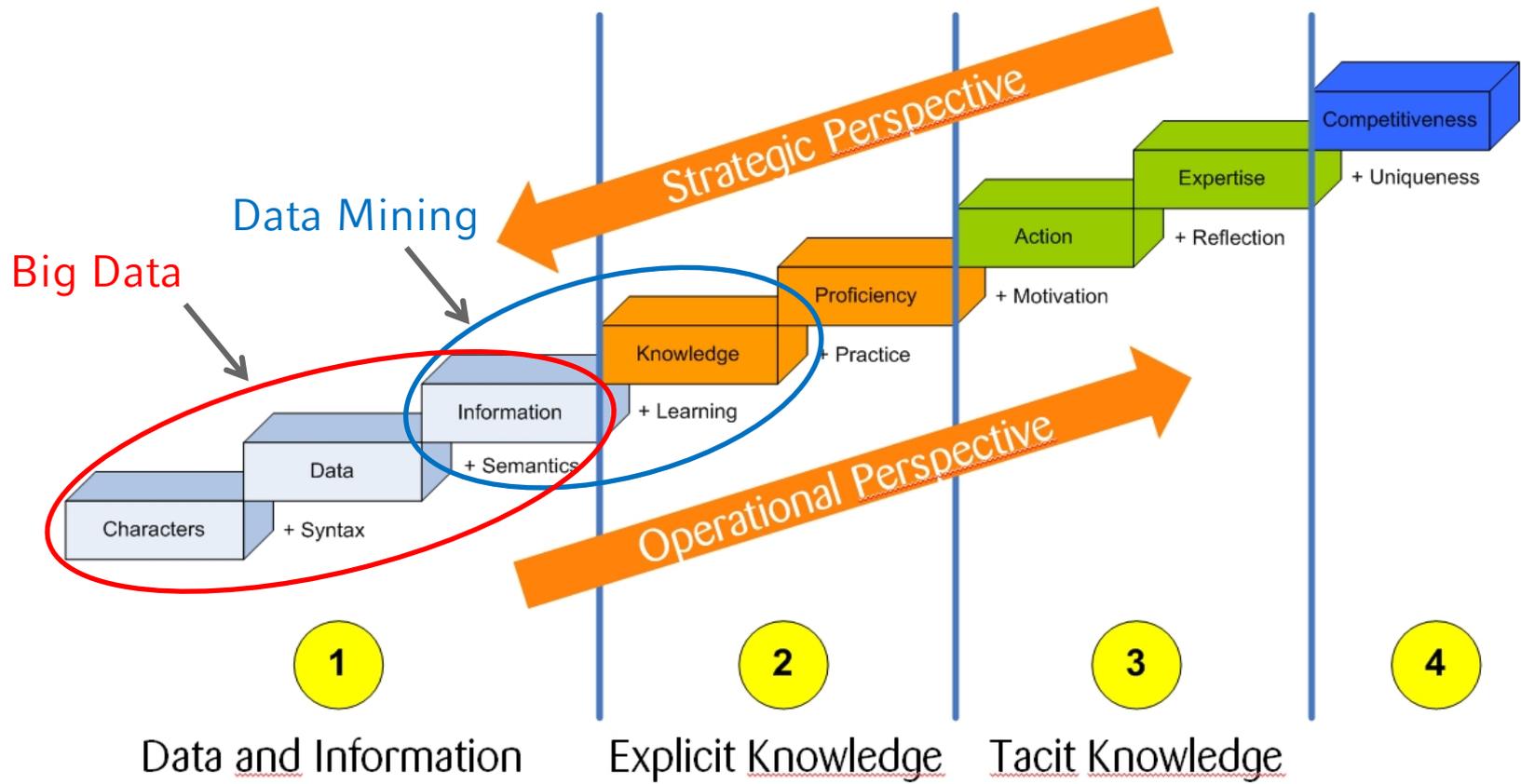


Figure 1. Hype Cycle for Data Science, 2016



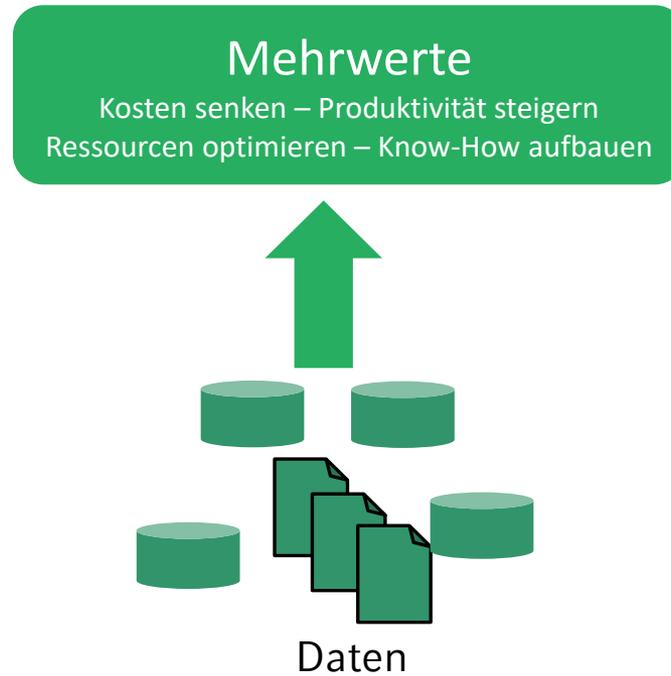
- Nochmal ML
 - Basierend auf Fakten/Beobachtungen werden Abhängigkeiten/Muster abgeleitet („generalisiert“)
 - Paul ist Schotte, Tom ist Schotte, Alex ist Schotte,
 - Paul ist geizig, Tom ist geizig, Alex ist geizig
 - => Alle Schotten sind geizig
 - Wesentlich: Modellierung des (Lern-)Problems (meist als Optimierungsproblem) steht im Vordergrund
 - Lösung wird dann oft Standard-Algorithmen überlassen (d.h. die „Maschine lernt“) => funktionaler Ansatz
- Data Mining
 - Im Fokus steht die Berechnung der Muster (durch ein Verfahren/einen Algorithmus); dazu werden oft keine Fakten vorab benötigt
 - Dieser Algorithmus wird von einer Person geliefert (d.h. hier lernt nicht die Maschine sondern der Mensch steuert das Lernen)
 - => prozeduraler Ansatz

- Stairs of Knowledge (K. North):

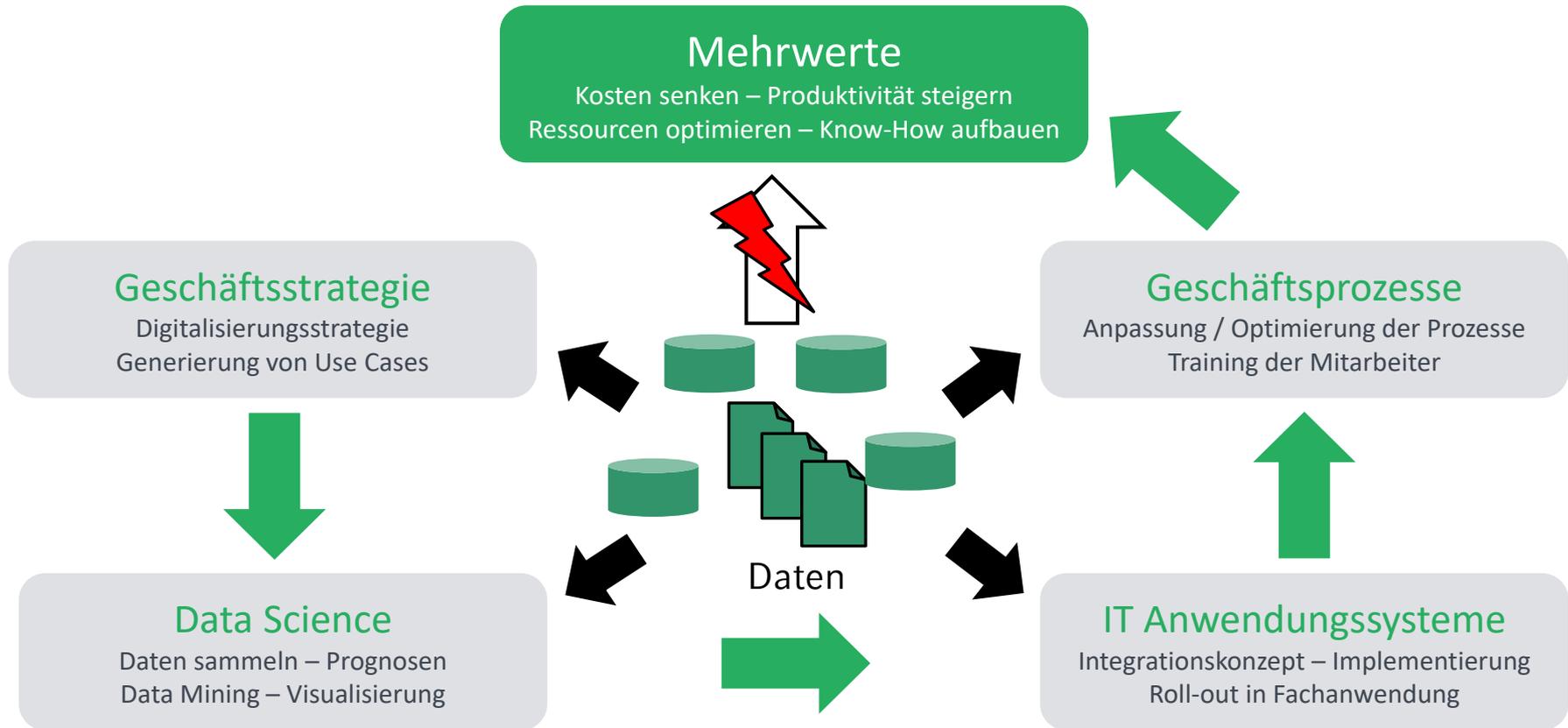


Stairs of Knowledge: North, K.: Wissensorientierte Unternehmensführung - Wertschöpfung durch Wissen. Gabler, Wiesbaden 1998. Picture from: <http://wissensarbeiter.wordpress.com/2012/10/29/information-wissen-und-expertise-dazwischen-liegen-welten/>

- Data Science Prozess im Unternehmen

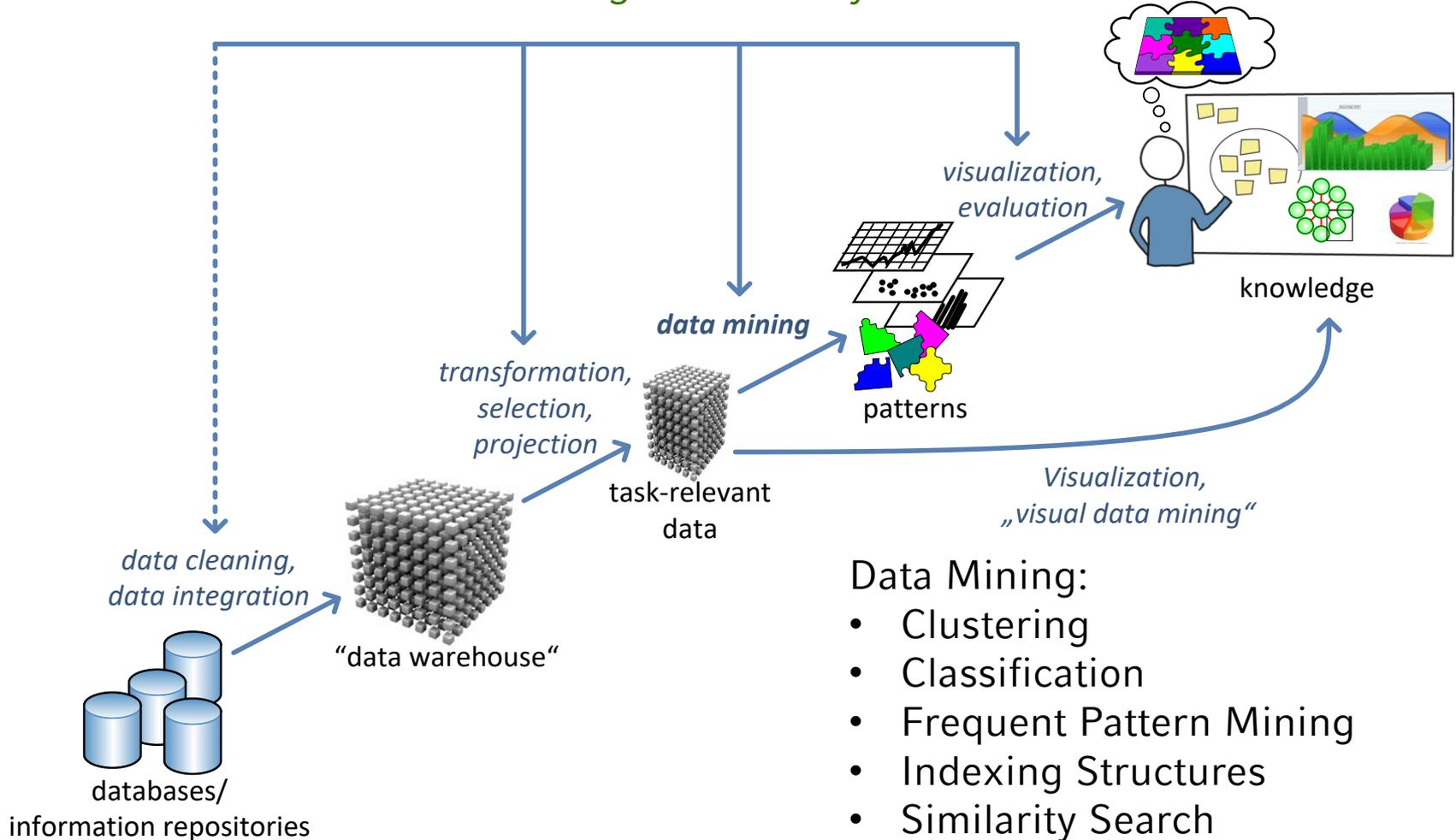


- Data Science Prozess im Unternehmen

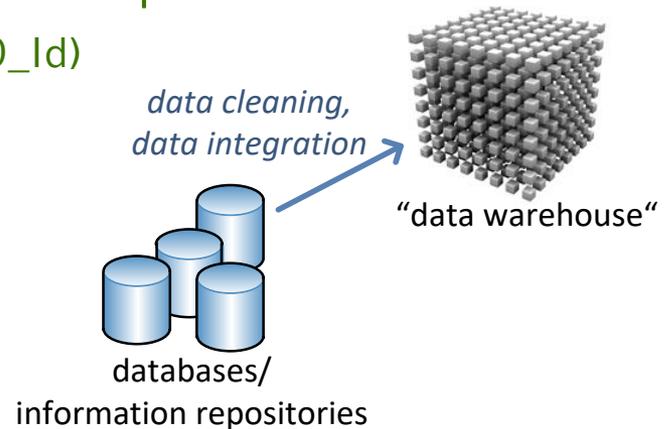


- Datenanalyse und Entscheidungsfindung (Decision Support)
 - Markt-Analyse und Markt-Management
 - target marketing, customer relation management (CRM), market basket analysis, cross selling, market segmentation
 - Risiko-Analyse und Risiko-Management
 - Forecasting, customer retention (“Kundenbindung”), improved underwriting, quality control, competitive analysis
 - Betrugserkennung und Betrugs-Management
 - ...
- Weitere Anwendungen
 - Text mining (news group, email, documents) and Web analysis.
 - Intelligent query answering
 - ...

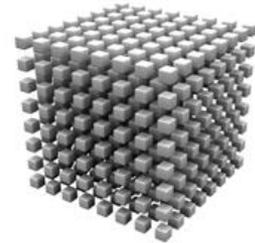
- The KDD-Prozess (Knowledge Discovery in Databases)



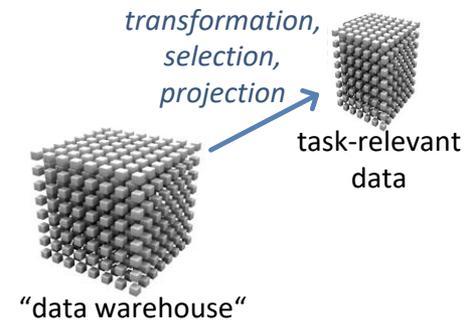
- ... macht meist 60% und mehr des Gesamtaufwands aus!!!!
- Integration von Daten aus verschiedenen Datenquellen
 - Mapping von Attributsnamen (z.B. C_Nr → O_Id)
 - Join von verschiedenen Tabellen
(e.g. Table1 = [C_Nr, Info1]
and Table2 = [O_Id, Info2] ⇒
JoinedTable = [O_Id, Info1, Info2])
- Finden & Eliminieren von Inkonsistenzen
- Eliminieren von Rauschen
- Umgang mit fehlenden Werten
 - Wenn möglich, fehlende Werte ersetzen (z.B. mit Default Werten, Mittelwert, Anwendungsspezifische Berechnungen, ...)
- ...



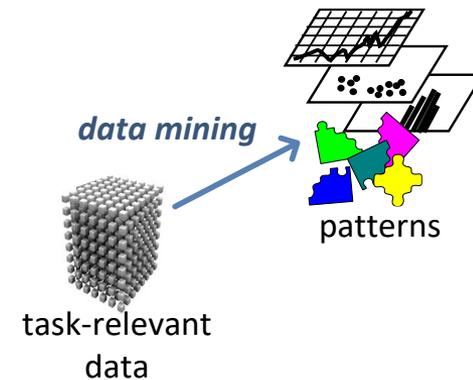
- Im Data Warehouse Bereich spricht man vom ETL-Prozess (Extract-Transform-Load)
- Das klassische Data Warehouse besteht aus einem Data Cube
 - Multidimensionales Datenmodell
 - Intern meist als relationales Schema realisiert (3NF; Snowflake- vs. Star-Schema)
- Business Intelligence (BI) setzt hier an mit:
 - Reports: Verschiedene Visualisierungen des Data Cube
 - Entlang verschiedener Dimensionen
 - Auf verschiedenen Aggregationsstufen
 - ...



- Bestimmen von wichtigen Merkmalen (Features), Dimensionsreduktion, invariante Repräsentationen
- Selektionen
 - Auswahl relevanter Tupel/Reihen (z.B., Sales-Daten von 2001)
- Projektionen
 - Auswahl relevanter Attribute/Spalten (z.B., "id", "date" "amount" from (Id, name, date, location, amount))
- Transformationen, z.B.:
 - Normalisieren (z.B., age:[18, 87] → n_age:[0, 100])
 - Diskretisieren von numerischen Attributen (z.B., amount:[0, 100] → d_amount:{low, medium, high})
 - Ableiten von Tupeln und Attributen
 - Aggregation von Mengen von Tupeln (z.B., total amount per months)
 - Neue Attribute (z.B., diff = sales current month – sales previous month)



- Suche nach interessanten Mustern oft abhängig von der Art der Daten
- Data Mining „Funktionen“ (Verfahrensklassen):
 - Frequent Patterns (häufige Muster)
 - Clustering
 - Classification
 - Characterization and Discrimination
 - Weitere (spezialisierte) Verfahrensklassen
 - Outlier detection (Ausreißerererkennung)
 - Sequential patterns (typw. in Sequenz-Daten)
 - Trends and analysis of changes (typw. in zeitlichen Daten)
 - Spatial data mining, web mining
 - ...
- Eine wichtige Aufgabe des Data Scientists
 - Die richtige Verfahrensklasse bestimmen
 - Den richtigen Data Mining Algorithmus auswählen



- Die einfachste Art von Mustern: Häufigkeiten von Vorkommen (einzelner Werte, Wertkombinationen, etc.) zählen
- Bestimme häufige Muster in Transaktionsdatenbanken
 - Daten: Menge von Transaktionen/"Itemsets" (z.B. Warenkörbe)
 - Items, die häufig gemeinsam in Transaktionen vorkommen (*frequent itemsets*): Hinweis auf Korrelationen/Kausalitäten

- **Anwendugen:**

- Market-basket analysis
- Cross-marketing
- Catalog design
- Manchmal auch als Basis Operation für Clustering und Klassifikation
- Association rule mining: Bestimme Korrelationen zwischen Itemsets

Transaction ID	Items Bought
2000	A,B,C
1000	A,C
4000	A,D
5000	B,E,F

Beispiele:

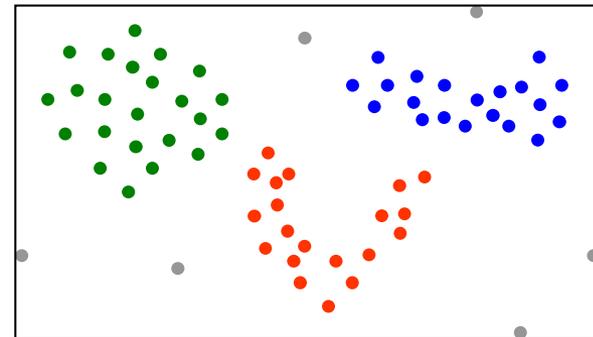
$\text{buys}(x, \text{"diapers"}) \rightarrow \text{buys}(x, \text{"beers"})$ [support: 0.5%, confidence: 60%]

$\text{major}(x, \text{"CS"}) \wedge \text{takes}(x, \text{"DB"}) \rightarrow \text{grade}(x, \text{"A"})$ [support: 1%, confidence: 75%]

Identität vs. Ähnlichkeit

- Oft kann man nicht einfach nur Häufigkeiten von Werten/Wertkombinationen/etc. zählen (z.B. bei numerischen Werten)
- Dann kann man z.B. Ähnlichkeits-Maße verwenden, um zu entscheiden, ob zwei Werte/Wertkombinationen/etc. „gleich“ sind
- Anstatt häufige Werte/Wertkombinationen zu finden, möchte man dann Werte/Wertkombinationen (Datenobjekte) finden, die ähnlich zueinander sind

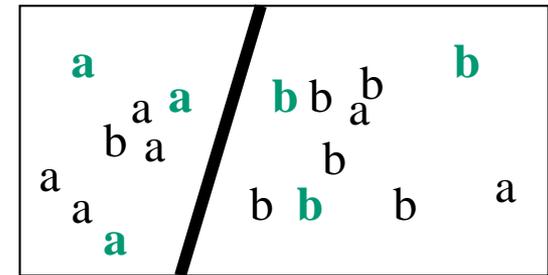
- Cluster = Gruppe von Datenobjekten (Tupel, ...) die ähnlich zu einander sind
- Die Cluster sind *a priori* unbekannt („unsupervised“), insbesondere
 - die Semantik der Cluster
 - die Charakteristik der Cluster
- Wesentliche „Zutat“: Ähnlichkeits-Maß (oder Distanz-Maß)
 - Quantifiziert die Ähnlichkeit von Objekten
 - Beispiel: Objekte sind Punkte im 2D; Ähnlichkeit ist die Nähe der Punkte zueinander (z.B. Euklidische Distanz)
- Anwendung
 - Customer profiling/segmentation
 - Document or image collections
 - Web access patterns
 - ...



- Grundidee ähnlich wie Clustering, nur
 - die Gruppen (=Klassen) sind *a priori* bekannt („supervised“): sog. „class labels“
 - Es existieren bereits Beispiel-Objekte für die Klassen (“training data”), d.h. die Charakteristik/Semantik der Klassen ist (z.T.!!!) bekannt

- Aufgabe:

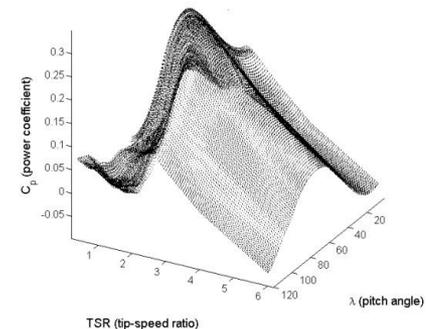
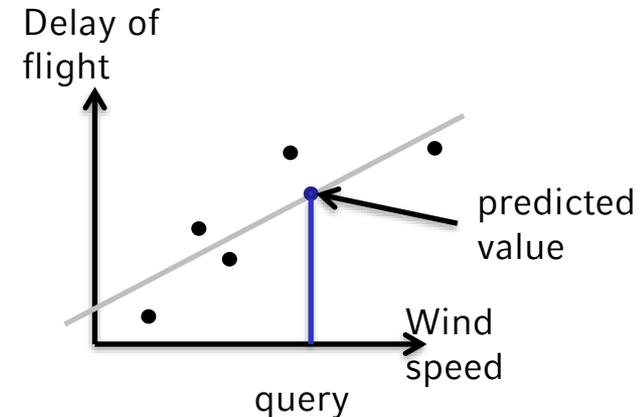
- Finde ein Modell (Funktion/Regel), das (basierend auf den Trainingsdaten)
 - Die einzelnen Klassen beschreibt und trennt
 - Die Klassenzugehörigkeit “neuer” Objekte vorhersagt



- Anwendungen

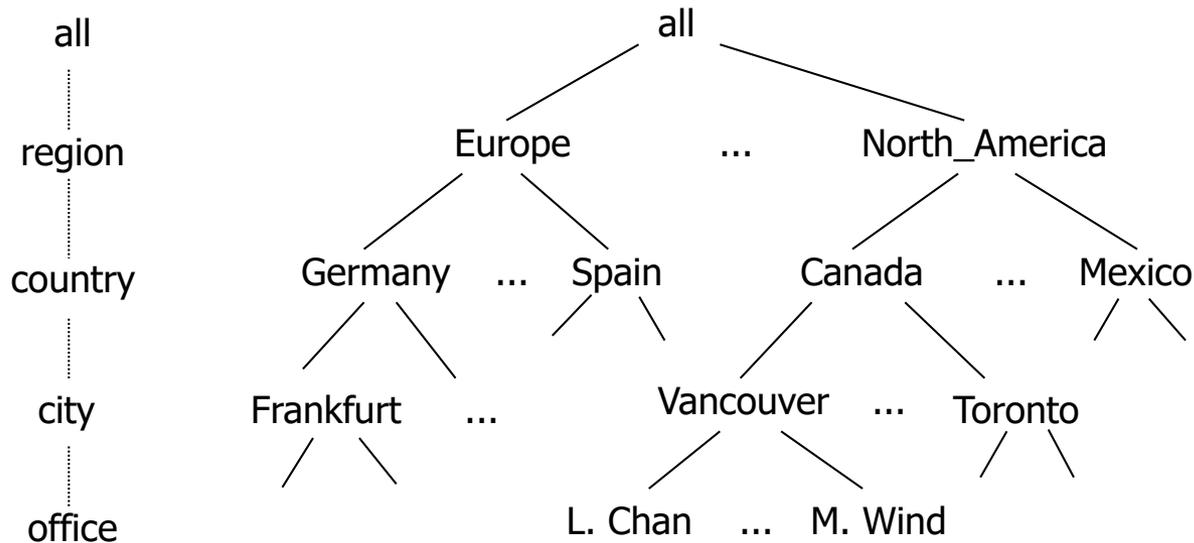
- Classify gene expression values for tissue samples to predict disease type and suggest best possible treatment
- Automatic assignment of categories to large sets of newly observed celestial objects
- Predict unknown or missing values (→ KDD pre-processing step)
- ...

- Ähnlich wie Klassifikation, der Output ist aber nicht kategorisch sondern numerisch
- Aufgabe: finde ein Modell/Funktion (basierend auf Trainingsdaten), das
 - Den Zusammenhang zwischen Input und Output darstellt
 - Den numerischen Output-Wert für ein "neues" Objekt vorhersagt
- Applications
 - Build a model of the housing values, which can be used to predict the price for a house in a certain area
 - Build a model of an engineering process as a basis to control a technical system
 - ...



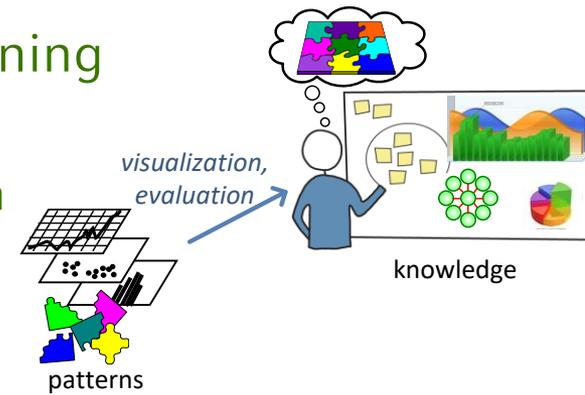
Wind turbine

- Generalisierung/Spezialisierung, Aggregation
 - Basierend auf einer Aggregation von Attributen entlang einer Konzept-Hierarchie (ggfls. Ontologie)
 - Data Cube Ansatz aus dem Data Warehouse-Bereich (OLAP)
 - Attribute-oriented induction Ansatz



- Outlier detection
 - Orthogonal zum Clustering: Finde Objekte, die nicht zur generellen Charakteristik der (Mehrheit der) Daten passen
(fraud detection, rare events analysis)
- Trends and Evolution Analysis
 - Sequential patterns (finde wiederkehrende Event-Sequenzen)
- Spezielle Datentypen und Anwendungen benötigen eigene Methoden:
 - Spatial data mining
 - Web mining
 - Bio-KDD
 - Graphen
 - ...

- Evaluierung von Mustern und Wissens-(re)präsentation:
 - Visualisierung, Transformation, Elimination von redundanten Mustern, etc.
- Integration von Visualisierung und Data Mining
 - Daten Visualisierung
 - Visualisierung von Data Mining Ergebnissen
 - Visualisierung des Data Mining Prozesses
 - Interaktives „visual data mining“
- Verschiedene Arten von 2D/3D Visualisierungsformen (plots, charts, diagrams), z.B. :
 - box-plots, trees, X-Y-Plots, parallel coordinates
- Anwenden des neu gewonnenen Wissens



- Data Mining: Bestimmung von interessanten Mustern aus großen Datenmengen
- Entstanden aus Datenbank-Technologie, Machine Learning, Statistik, Visualisierung
 - „in great demand“
 - „with wide applications“
- Der KDD Prozess beinhaltet typw. Data Cleaning, Datenintegration, Data Selection, Transformation, **Data Mining**, Evaluation, und Wissens-(re)präsentation
- Data Mining Methoden: Charakterisierung, Diskriminierung, Assoziation, Klassifikation, Clustering, Outlier- und Trend-Erkennung, etc.

Wie gehts weiter?

1. Einleitung
2. Daten Repräsentation, Data Warehousing, Business Intelligence (BI)
3. Frequent Pattern Mining
4. Clustering
5. Outlier Detection
6. Classification
7. Regression
8. Further Topics

Wie gehts weiter?

- Wir werden im Rahmen der Vorlesung zu Illustrationszwecken das open source data Mining Tool WEKA verwenden
- Sie finden WEKA unter: <https://www.cs.waikato.ac.nz/ml/index.html>
- Tipp: laden Sie sich die aktuelle Version 3.8 herunter und spielen Sie sich mit dem Tool
- Falls Sie mit echten Daten spielen wollen, sei Ihnen das UCI Machine Learning Repository empfohlen: <http://archive.ics.uci.edu/ml/index.php>

- Data mining and KDD:
 - Conference proceedings: KDD, PKDD, PAKDD, SDM, ICDM etc.
 - Journal: Data Mining and Knowledge Discovery
- Database field:
 - Conference proceedings: ACM-SIGMOD, ACM-PODS, VLDB, ICDE, EDBT, CIKM
 - Journals: ACM-TODS, J. ACM, IEEE-TKDE, JIIS, VLDBJ, etc.
- AI and Machine Learning:
 - Conference proceedings: Machine learning, AAI, IJCAI, etc.
 - Journals: Machine Learning, Artificial Intelligence, etc.
- Statistics:
 - Conference proceedings: Joint Stat. Meeting, etc.
 - Journals: Annals of statistics, etc.
- Visualization:
 - Conference proceedings: CHI (Comp. Human Interaction), etc.
 - Journals: IEEE Trans. visualization and computer graphics, etc.

- U. M. Fayyad, G. Piatetsky-Shapiro, P. Smyth, and R. Uthurusamy. *Advances in Knowledge Discovery and Data Mining*. AAAI/MIT Press, 1996.
- J. Han and M. Kamber. *Data Mining: Concepts and Techniques*. 2nd ed., Morgan Kaufmann, 2006.
- T. Imielinski and H. Mannila. *A database perspective on knowledge discovery*. Communications of the ACM, 39:58-64, 1996.
- G. Piatetsky-Shapiro, U. Fayyad, and P. Smith. *From data mining to knowledge discovery: An overview*. In U.M. Fayyad, et al. (eds.), *Advances in Knowledge Discovery and Data Mining*, 1-35. AAAI/MIT Press, 1996.
- G. Piatetsky-Shapiro and W. J. Frawley. *Knowledge Discovery in Databases*. AAAI/MIT Press, 1991.
- M. Ester and J. Sander. *Knowledge Discovery in Databases: Techniken und Anwendungen*. Springer Verlag, 2000 (in German).
- M. H. Dunham. *Data Mining: Introductory and Advanced Topics*. Prentice Hall, 2003.
- D. Hand, H. Mannila, P. Smyth. *Principles of Data Mining*. MIT Press, 2001.