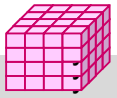
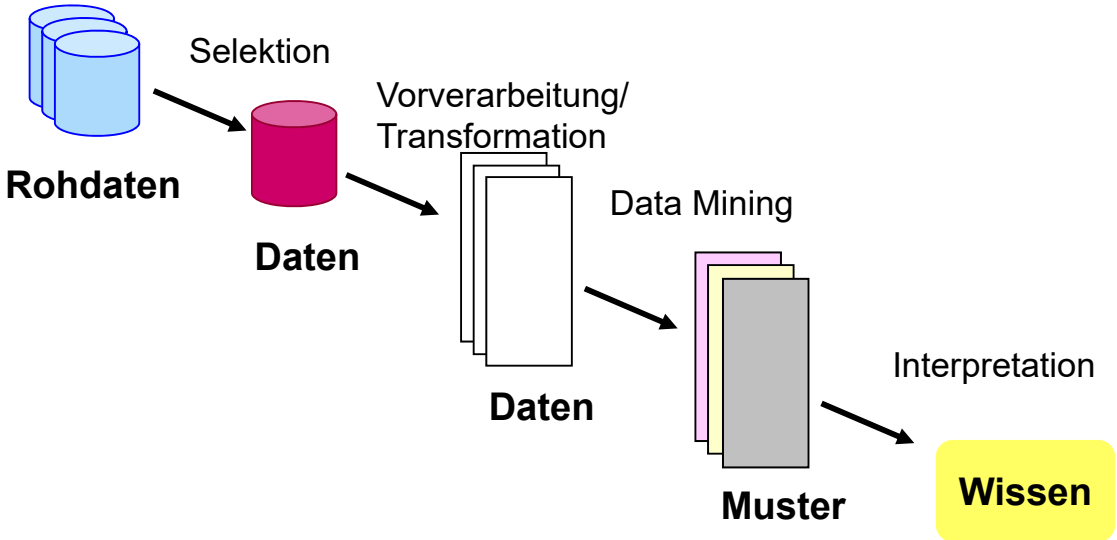
6. Überblick Data Mining/ML-Verfahren

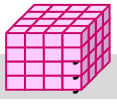
- Einführung Data Mining / maschinelles Lernen
  - KDD-Prozess
  - Anwendungsbeispiele
- Assoziationsregeln / Warenkorbanalyse
  - Support und Konfidenz
  - A Priori-Algorithmus
  - Frequent Pattern (FP)-Trees
- Clusteranalyse
  - k-Means-Algorithmus
  - Canopy Clustering
- Klassifikation
  - Klassifikationsprozess
  - Entscheidungsbäume
  - Neuronale Netze



Knowledge Discovery in Databases (KDD)

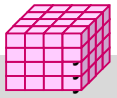
- (semi-)automatische Extraktion von Wissen aus Datenbanken, das
  - gültig (im statistischen Sinn)
  - bisher unbekannt
  - und potenziell nützlich ist
- Kombination von Verfahren zu Datenbanken, Statistik und KI (maschinelles Lernen)





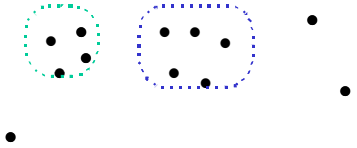
Data Mining / Machine Learning

- Data Mining: Anwendung effizienter Algorithmen zur Erkennung von Mustern in großen Datenmengen
- Machine Learning: lernbasierte (KI-) Ansätze für Vorhersagen / Wissensgenerierung
- Data Mining/ML für Big Data / Datenbanken bzw. Data Warehouses
  - Skalierbarkeit auf große Datenmengen (nicht nur im Hauptspeicher)
  - parallele Realisierungen
- umfassende Datenaufbereitung und Vorverarbeitung erforderlich
  - Diskretisierung numerischer Attribute (Aufteilung von Wertebereichen in Intervalle, z.B. Altersgruppen)
  - Erzeugen abgeleiteter Attribute (z.B. Aggregationen für bestimmte Dimensionen, Umsatzänderungen)
  - Extraktion von analyserelevanten Merkmalen / Features aus unstrukturierten Daten

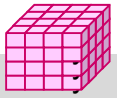


Analysetechniken

- Assoziationsregeln
  - Warenkorbanalyse (z.B. Kunde kauft A und B => Kunde kauft C)
  - Sonderformen zur Berücksichtigung von Dimensionshierarchien (z.B. Produktgruppen), quantitativen Attributen, zeitlichen Beziehungen (sequence mining)
- Clusteranalys
  - Objekte werden aufgrund von Ähnlichkeiten in Klassen eingeteilt (Segmentierung)

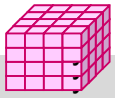


- Klassifikation
  - Zuordnung von Objekten zu Gruppen/Klassen mit gemeinsamen Eigenschaften bzw. Vorhersage von Attributwerten
  - Verwendung von Stichproben (Trainingsdaten)
  - Ansätze: Entscheidungsbaum-Verfahren, neuronale Netze, statistische Auswertungen (z.B. Maximum Likelihood-Schätzung / Bayes-Schätzer)
- weitere Ansätze:
  - genetische Algorithmen (multivariate Optimierungsprobleme, z.B. Identifikation der besten Bankkunden)
  - Regressionsanalyse zur Vorhersage numerischer Attribute . . .



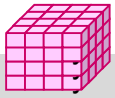
Data Mining/ML: Anwendungsbeispiele

- Warenkorbanalyse: Produkt-Platzierung im Supermarkt, Preisoptimierung, ...
- Kundensegmentierung für Marketing
  - Gruppierung von Kunden mit ähnlichem Kaufverhalten / ähnlichen Interessen
  - Nutzung für gruppenspezifische Empfehlungen, Product Bundling, ...
- Bestimmung der Kreditwürdigkeit von Kunden
  - elektronische Vergabe von Kreditkarten
  - schnelle Entscheidung über Versicherungsanträge, ...
- Entdeckung wechselbereiter Kunden
- Entdeckung von Kreditkarten-Missbrauch
- Erkennung von Spam-Emails
- Auswahl personalisierter Behandlungsstrategien für Krebspatienten …



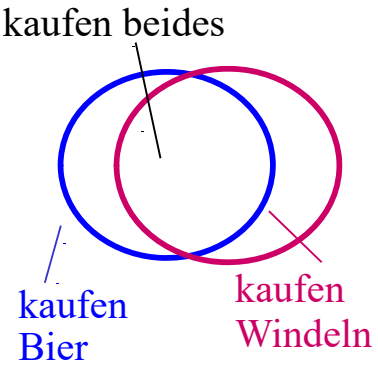
Evaluation/Interpretation

- Ablauf
  - Präsentation der gefundenen Muster, z.B. über Visualisierungen
  - Bewertung der Muster durch den Benutzer
  - falls schlechte Bewertung: erneute Analyse mit anderen Parametern, anderem Verfahren oder anderen Daten
  - falls gute Bewertung: Integration des gefundenen Wissens in die Wissensbasis / Metadaten und Nutzung für zukünftige KDD-Prozesse
- Bewertung der gefundenen Muster: Interessantheit, Vorhersagekraft
  - sind Muster schon bekannt oder überraschend?
  - wie gut lassen sich mit „Trainingsdaten“ (Stichproben) gefundene Muster auf zukünftige Daten verallgemeinern?
  - Vorhersagekraft wächst mit Größe und Repräsentativität der Stichprobe

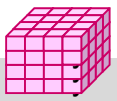


Assoziationsregeln

- Warenkorbanalyse auf Transaktions-Datenbank
  - Transaktion umfasst alle gemeinsam getätigten Einkäufe, innerhalb eines Dokuments vorkommenden Worte, innerhalb einer Web-Sitzung referenzierten Seiten, ...
- Regeln der Form "Rumpf → Kopf [support, confidence]"
- Beispiele
  - kauft("Windeln") → kauft("Bier") [0.5%, 60%]
  - 80% aller Kunden, die Reifen und Autozubehör kaufen, bringen ihr Auto auch zum Service



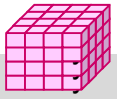
- relevante Größen
  - Support einer Regel X → Y: Anteil der Transaktionen, in denen alle Objekte X und Y vorkommen
  - Konfidenz einer Regel X → Y: Anteil der Transaktionen mit Rumpf-Objekten X, für die Regel erfüllt ist (d.h. für die auch Objekte Y vorliegen)
  - Interessantheit: hoher Wahrscheinlichkeitsunterschied für Y gegenüber zufälliger Verteilung



Assoziationsregeln (2)

- Aufgabe: Bestimmung aller Assoziationsregeln, deren Support und Konfidenz über bestimmten Grenzwerten liegen
- Gegeben:
  - R eine Menge von Items/Objekten (z.B. Produkte, Webseiten)
  - t eine Transaktion, $t \subseteq R$
  - r eine Menge von Transaktionen
  - $s_{min} \in [0,1]$ die minimale Unterstützung,
  - $conf_{min} \in [0,1]$ die minimale Konfidenz
- Aufgabe: Finde alle Regeln c: $X \rightarrow Y$ mit $X \subseteq R$, $Y \subseteq R$, $X \cap Y = \{\}$

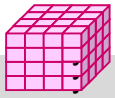
$$supp\,(r,c) = \frac{\left|\left\{t \in r \middle| X \cup Y \in t\right\}\right|}{|r|} \geq s_{\min} \qquad conf\,(r,c) = \frac{\left|\left\{t \in r \middle| X \cup Y \in t\right\}\right|}{\left|\left\{t \in r \middle| X \in t\right\}\right|} \geq conf_{\min}$$



Beispiel: Warenkorbanalyse

EinkaufsID	Aftershave	Bier	Chips
1	0	1	1
2	1	1	0
3	0	1	1
4	1	0	1
5	1	1	1

{Aftershave} → {Bier} s = 2/5, conf = 2/3
{Bier} → {Chips} s= 3/5, conf = 3/4
{Aftershave} → {Chips}
{Chips} → {Aftershave}
{Aftershave} → {Bier,Chips} s= conf=



Weitere Beispiele

- Assoziationsregeln:
  - A → C s=2/4=0,5 c=2/3
  - C → A s= 0,5 c=

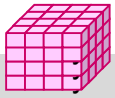
TransaktionsID	Items
2000	A,B,C
1000	A,C
4000	A,D
5000	B,E,F

s_{min} = 0,5

$conf_{min}$ = 0,5

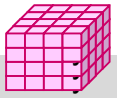
- 5 Warenkörbe:
  - Drucker, Papier, PC, Toner
  - PC, Scanner
  - Drucker, Papier, Toner
  - Drucker, PC
  - Drucker, Papier, PC, Scanner, Toner

Assoziationsregel: PC → Drucker s=
c=

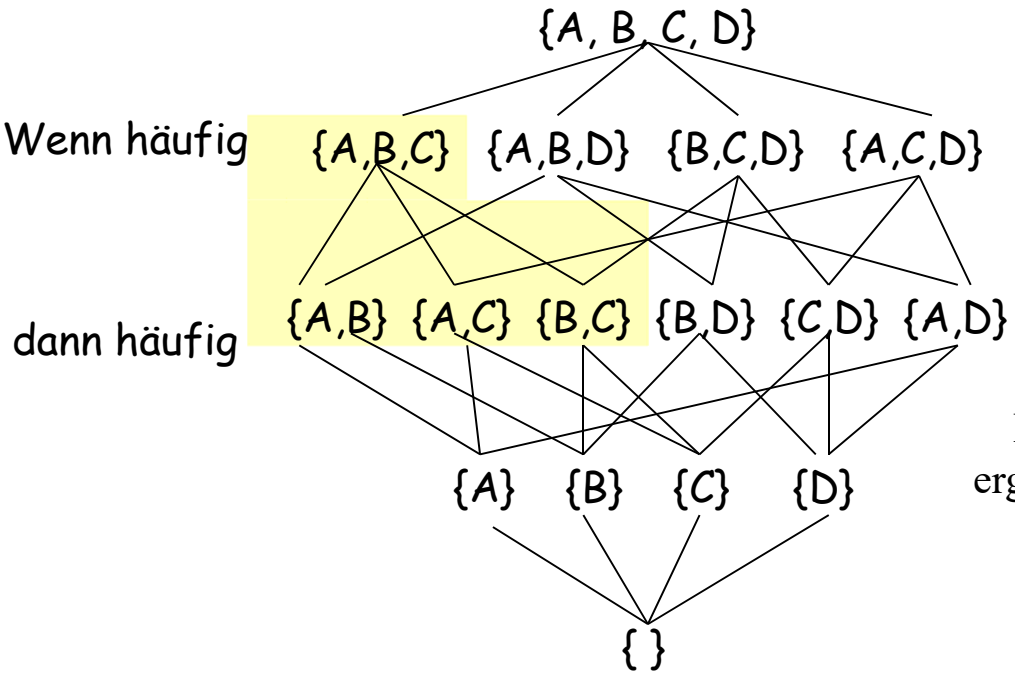


Frequent Itemsets

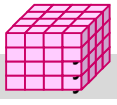
- Frequent Item-Set (häufige Mengen):
  - Menge von Items/Objekten, deren Support Schranke s_{min} übersteigt
  - Bestimmung der Frequent-Itemsets wesentlicher Schritt zur Bestimmung von Assoziationsregeln
- effiziente Realisierung über A-Priori-Algorithmus
- Nutzung der sog. A-Priori-Eigenschaft:
  - wenn eine Menge häufig ist, so auch all ihre Teilmengen (Anti-Monotonie)
  - wenn eine Menge selten ist, so auch all ihre Obermengen (Monotonie)
- Support jeder Teilmenge und damit jedes einzelnen Items muss über Schranke s_{min} liegen
- iterative Realisierung beginnend mit 1-elementigen Itemsets
  - schrittweise Auswertung von k-Itemsets (k Elemente, k >=1),
  - Ausklammern von Kombinationen mit Teilmengen, die Support s_{min} nicht erreichen („Pruning“)
  - wird „A Priori“ getestet, bevor Support bestimmt wird



Verbandstruktur von Itemsets



Häufige Mengen L_k
ergeben Kandidaten C_{k+1}



A-Priori-Algorithmus

Apriori(R, r, s_{min}, $conf_{min}$)

L:= Häufige-Mengen(R, r, s_{min})

c:= Regeln (L, $conf_{min}$)

Return c.

Häufige-Mengen(R, r, s_{min})

k=1

L_1:= {i ∈ R, supp(i)>= s_{min}} // häufige Items

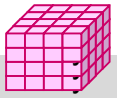
while $L_k \neq \{\}$

  C_{k+1} := Erzeuge-Kandidaten(L_k)

  L_{k+1} := Prune(C_{k+1}, r) // eliminiere Itemsets, die s_{min} nicht erreichen

  k:= k+1

Return $\bigcup_{j=2}^{k} L_j$



A-Priori-Algorithmus (2)

Erzeuge-Kandidaten(L_k)

C_{k+1} := {}

Forall l_1, l_2 in L_k , so dass $l_1 = \{i_1, ..., i_{k-1}, i_k\}$

$l_2 = \{i_1, ..., i_{k-1}, i'_k\}$ $i_k < i'_k$

  $l := \{i_1, ..., i_{k-1}, i_k, i'_k\}$ // sortierte Items pro Itemset

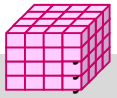
  if (alle k-elementigen Teilmengen von l in L_k)

  then $C_{k+1} := C_{k+1} \cup \{l\}$

Return C_{k+1}

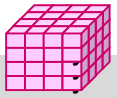
Beispiel:

k=3	*k=4*
ABC	
ABD	ABCD?
ACD	
BCD	ACDE?
CDE	BCDE?



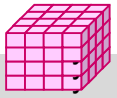
A-Priori-Algorithmus: Beispiel

- 5 PC-Warenkörbe (Forderung: minimaler Support s_{min} 60%)
  - Drucker, Papier, PC, Toner
  - PC, Scanner
  - Drucker, Papier, Toner
  - Drucker, PC
  - Drucker, Papier, PC, Scanner, Toner
- Algorithmus-Ausführung
  - k=1: Drucker 4, Papier 3, PC 4, Toner 3, Scanner 2
    L1= C1 = {Drucker, Papier, PC, Toner}
  - k=2: Drucker-Papier: 3, Drucker-PC: 3, Drucker-Toner: 3,
    Papier-PC: 2, Papier-Toner: 3, PC-Toner: 2
    L2= {Drucker-Papier, Drucker-PC, Drucker-Toner, Papier-Toner}
  - k=3: Drucker-Papier-PC? Drucker-Papier-Toner? Drucker-PC-Toner?
  - k=4:



Regelgenerierung

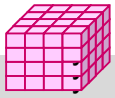
- Itemset $l = \{i_1, ..., i_{k-1}, i_k\}$ erlaubt viele Regeln der Form X → Y,
  mit $X \cup Y = I$, $X \cap Y = \{\}$
- Konfidenz: conf (X → Y)= supp (l) / supp (X)
- Generierung der Assoziationsregeln aus Itemset I
  - wenn die Konklusion (rechte Seite) länger wird, kann Konfidenz sinken.
  - die Ordnung der Attribute kann ausgenutzt werden
    $c_1 = \{i_1, ..., i_{k-1}\} \rightarrow \{i_k\}$ $conf_1$
    $c_2 = \{i_1, ...\} \rightarrow \{i_{k-1}, i_k\}$ $conf_2$ ...
    $c_k = \{i_1\} \rightarrow \{..., i_{k-1}, i_k\}$ $conf_k$
    Es gilt dann: $conf_1 \geq conf_2 \geq ... \geq conf_k$
  - Elimination aller Kombinationen, deren Konfidenz Minimalwert unterschreitet



Regelgenerierung: Beispiel

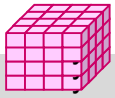
- Regeln für ({Drucker, Papier, Toner}, minimaler Support s_{min} 60%
- Bestimmung aller Regen mit minimaler Konfidenz $conf_{min}$ 75%

  - conf ({Drucker, Papier} → {Toner}) = supp(Dr.,Pap.,Toner)/supp(Dr.,Pap.)= 3/3=1
  - conf ({Drucker} → {Papier, Toner}) = 3/4
  - conf ({Drucker, Toner} → {Papier}) = 3/3 = 1
  - conf ({Papier, Toner} → {Drucker}) = 3/4
  - conf ({Papier} → {Drucker, Toner}) =
  - conf ({Toner} → {Drucker, Papier}) =



Frequent Pattern-Baum (FP-Baum)

- Probleme des A-Priori-Algorithmus
  - exponenziell wachsende Anzahl zu prüfender Kandidaten
  - Bsp.: 10^4 häufige Objekte;
    $> 10^7$ 2-Itemsets; ca. 10^{30} Kandidaten für 100-Itemsets
- FP-Tree: Berechnung von Assoziationsregeln ohne Kandidatengenerierung
  - komprimierte Repräsentation aller Transaktionen durch Frequent-Pattern Tree (FP-Baum)
  - effiziente Erkennung von Frequent Itemsets (Pattern Mining) mit Divide-and-Conquer-Suche auf Teilbäumen
  - oft eine Größenordnung schneller als A-Priori



FP-Baum: Generierung

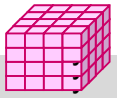
- Input: Transaktionsdatenbank D, Schwellwert min-support s_{min}
- Erstellung Objekttabelle / FP-Baum
  - Scan von D, Erstellen der Menge F häufiger Objekte und ihrer Häufigkeiten, Ordnen von F in absteigender Häufigkeit (Objekttabelle)
  - Wurzel des FP-Baums ist leere Menge
  - pro Transaktion in D: ordne Objekte gemäß F (absteigende Häufigkeit); füge Pfad in FP-Baum ein (Knotenformat: Objekt-Id, Zähler für Verwendungshäufigkeit in Transaktionen mit gleichem Präfix)
  - Knoten mit gleicher Objekt-ID werden untereinander verkettet (ausgehend von Objekttabelle F)

min_support = 0.5

TID	*Objekte*
10	Drucker, Papier, PC, Toner
20	PC, Scanner
30	Drucker, Papier, Toner
40	Drucker, PC
50	Drucker, Papier, PC,Scanner, Toner

Objekttabelle F

Objekt	*count*
Drucker	*4*
PC	*4*
Papier	*3*
Toner	*3*



FP-Baum: Generierung (2)

TID	*Objekte*
10	Drucker, Papier, PC, Toner
20	PC, Scanner
30	Drucker, Papier, Toner
40	Drucker, PC
50	Drucker, Papier, PC,Scanner, Toner

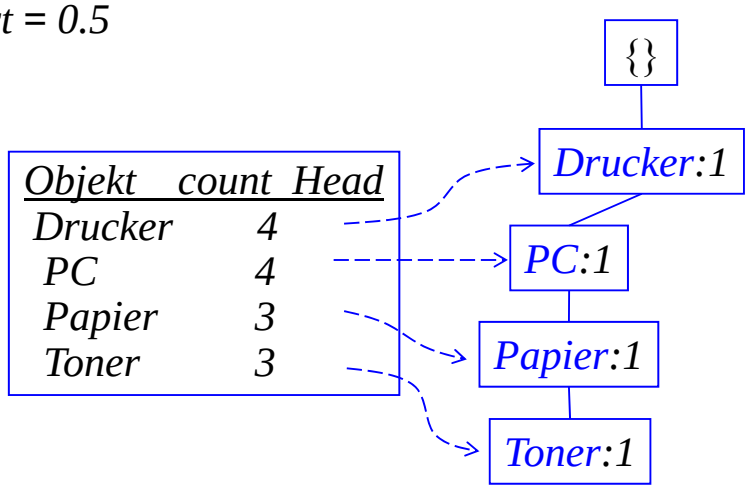
min_support = 0.5

gemäß F-Ordnung

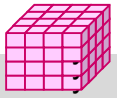
Drucker, PC, Papier, Toner
PC
Drucker, Papier, Toner
Drucker, PC
Drucker,

Objekt-Tabelle F

Objekt	*count*	*Head*
Drucker	*4*	
PC	*4*	
Papier	*3*	
Toner	*3*	

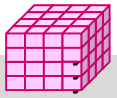


pro Transaktion gibt es Pfad, wobei gemeinsame Präfixe nur einmal repräsentiert werden (Komprimierungseffekt)



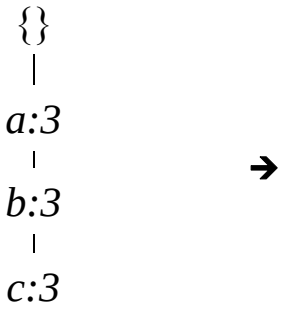
FP-Baum: Erkennung häufiger Mengen

- Erkennung von Frequent Itemsets durch rekursive Suche auf Teilbäumen (Divide and Conquer)
- für jeden Knoten im FP-Baum erzeuge Musterbasis (*conditional pattern base*)
  - gehe Objekt-Tabelle von unten (selten) nach oben durch. Die Verweise führen zu den Pfaden, in denen das Objekt vorkommt.
  - das Objekt wird als Suffix betrachtet und alle Präfixe davon als Bedingungen für dieses Suffix. Die Präfixpfade eines Suffixes bilden seine Musterbasis
- für jede Musterbasis erzeuge reduzierten FP-Baum *(conditional FP tree)*
  - Häufigkeiten der Präfixe (für das betrachtete Suffix) werden von unten nach oben propagiert. Gleiche Präfixpfade zu einem Suffix (vom Anfang bis zu einer bestimmten Stelle) werden zusammengelegt und die ursprünglichen Häufigkeiten addiert.
  - nur Präfixpfade, die *min_support* erfüllen, verbleiben im reduzierten FP-Baum
- rekursives Ableiten von Frequent Itemsets aus reduzierten FP-Trees
  - bei einzigem Pfad im Baum: Aufzählen aller Knoten-Kombinationen



Reduzierte FP-Bäume mit einem Pfad

- bei nur einem Pfad T kann weitere (recursive) Auswertung entfallen
- Bestimmung der Frequent Itemsets durch Aufzählung aller Kombinationen von Knotern / Teil-Pfaden



reduzierter FP-Baum
für Suffix d (d-reduzierter FP-Baum)

→

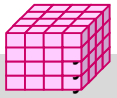
Frequent Itemsets bezüglich *d*

d,

ad, *bd*, *cd*,

abd, *acd*, *bcd*,

abcd



Algorithmus *FP-Growth (tree, I)*

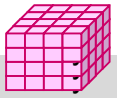
Finden häufiger Muster durch sukzessives Wachstum von Pattern-Fragmenten

initialer Aufruf mit *FP-Growth (FP-Baum, {})*

Input: FP-Baum *tree*, Frequent Itemsets *I*

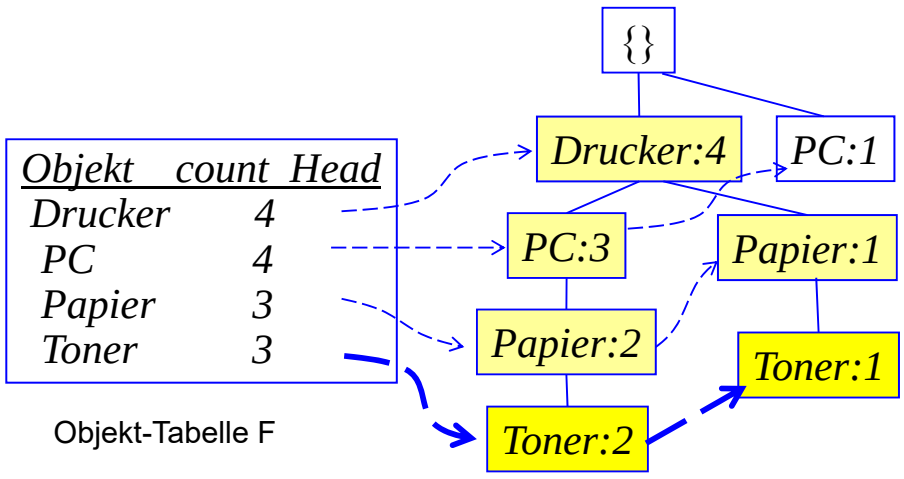
Output: vollständige Menge häufiger Itemsets

if *tree* hat nur einen Pfad *P* **then**
  foreach Kombination *K* von Knoten in *P* **do**
    return $I \cup K$ mit support = minimaler Support der Items in *K* **end**
else
  foreach Item *i* in Tabelle F (in umgekehrter Häufigkeitsreihenfolge) **do**
    $K = I \cup i$ mit support = Support von i;
    Erstelle Musterbasis von K und reduzierten FP-Baum FP_K ;
    if FP_K *nicht leer* **then** FP-Growth (FP_K ,K)
  end
end

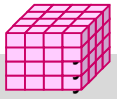


Schritt 1: Musterbasis-Bestimmung

- gehe Objekt-Tabelle von unten (selten) nach oben durch. Die Verweise führen zu den Pfaden, in denen das Objekt vorkommt.
- das Objekt wird als Suffix betrachtet und alle Präfixe davon als Bedingungen für dieses Suffix. Die transformierten Präfixpfade eines Suffixes bilden seine Musterbasis



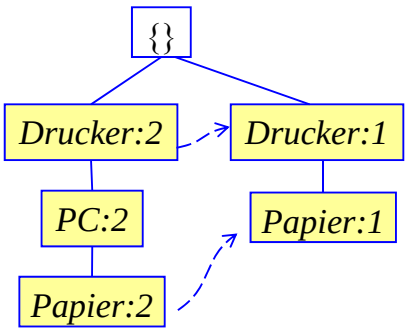
Objekt	Musterbasis
Toner	*Drucker,PC,Papier:2, Drucker, Papier:1*
Papier	*Drucker, PC: 2 Drucker: 1*
PC	
Drucker	



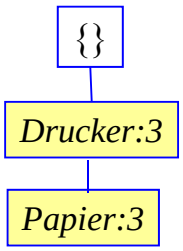
Schritt 2: Erzeuge reduzierte FP-Bäume

- propagiere Counts pro Objekt der Musterbasis von unten nach oben.
- nur Knoten/Präfix-Pfade, die min_support erfüllen, verbleiben im reduzierten FP-Baum

Musterbasis für Toner



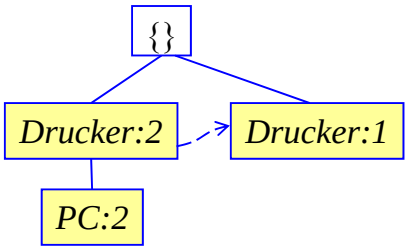
***reduzierter** FP-Baum für Toner*



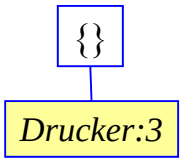
Frequent Itemsets:

Toner
Papier, Toner
Drucker, Toner
Drucker, Papier, Toner

Musterbasis für Papier

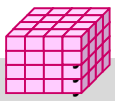


reduzierter FP-Baum für Papier



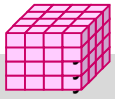
Frequent Itemsets:

Papier
Drucker, Papier



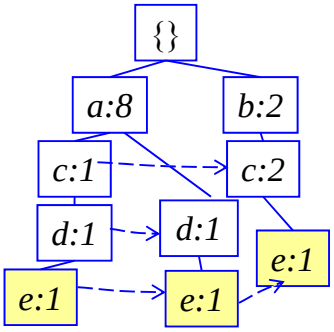
Ergebnisse im Beispiel

Objekt	Musterbasis	reduzierter FP-Baum	Frequent Itemsets
Toner	{(Drucker,PC,Papier:2, Drucker, Papier:1}	{ (Drucker:3, Papier:3)} | Toner	Toner Papier, Toner Drucker, Toner Drucker, Papier, Toner
Papier	{(Drucker,PC:2, Drucker:1}	{ (Drucker:3)} | Papier	Papier Drucker, Papier
PC	{(Drucker:3) }	{ (Drucker:3)} | PC	PC Drucker, PC
Drucker	{}	{ }	Drucker

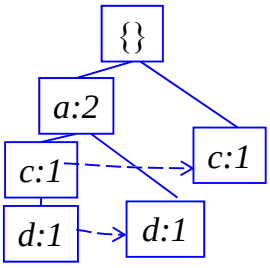


Alternativbeispiel zur rekursiven Auswertung

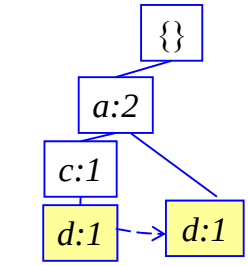
reduzierter FP-Baum bezüglich Suffixobjekt e, min-support=2



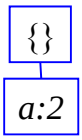
***e**-reduzierter FP-Baum*



Nutzung dieses Baums zur Bestimmung der Frequent Itemsets für Suffixe *de*, *ce* und *ae*



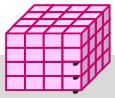
Pfade mit Suffix *de*



***de**-reduzierter FP-Baum*

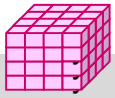
-> Frequent Itemsets: ***de***, ***ade***

Quelle: Han/Kamber



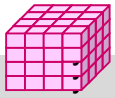
Assoziationsregeln: weitere Aspekte

- Nutzbarkeit u.a. für Cross-Selling, Produkt-Platzierung ...
  - Amazon: Kunden die dieses Buch gekauft haben, kauften auch ...
- Sonderfall: Sequenzanalyse (Erkennung sequenzieller Muster)
  - Berücksichtigung der Zeit-Dimension
  - Bsp. 1: in 30% der Fälle, wenn Produkt A gekauft wurde, wird bei einem späteren Besuch Produkt B gekauft
  - Bsp. 2: in 20% aller Fälle, in denen ein Nutzer über Werbung auf die Web-Site gelangt und die Site vorher schon besucht hat, kauft er einen Artikel (betrifft 10% der Sessions)
- Probleme
  - sehr viele Produkte / Web-Seiten / Werbeaktionen / Besucher etc. erfordern Bildung gröberer Bezugseinheiten
  - es können sinnlose Korrelationen ohne kausalen Zusammenhang ermittelt werden
    - z.B. Schmutzeffekte aufgrund transitiver Abhängigkeiten (Bsp.: Haarlänge korreliert negativ mit Körpergröße)



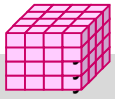
6. Überblick Data Mining/ML-Verfahren

- Einführung Data Mining / maschinelles Lernen
  - KDD-Prozess
  - Anwendungsbeispiele
- Assoziationsregeln / Warenkorbanalyse
  - Support und Konfidenz
  - A Priori-Algorithmus
  - Frequent Pattern (FP)-Trees
- Clusteranalyse
  - k-Means-Algorithmus
  - Canopy Clustering
- Klassifikation
  - Klassifikationsprozess
  - Entscheidungsbäume
  - Neuronale Netze



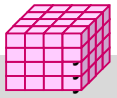
Clusteranalyse

- Ziele
  - automatische Identifikation einer endlichen Menge von Kategorien, Klassen oder Gruppen (Cluster) in den Daten
  - Objekte im gleichen Cluster sollen möglichst ähnlich sein
  - Objekte aus verschiedenen Clustern sollen möglichst unähnlich zueinander sein
- Ähnlichkeitsbestimmung
  - meist: Distanzfunktion dist(o1,o2) für Paare von Objekten o1 und o2
    - z.B. Euklidische Distanz für numerische Attribute: $dist(x,y) = \sqrt{\sum_{i=1}^{d}(x_i - y_i)^2}$
  - spezielle Funktionen für kategorische Attribute oder Textdokumente
- Clustering-Ansätze: hierarchisch, partitionierend, dichtebasiert, ...



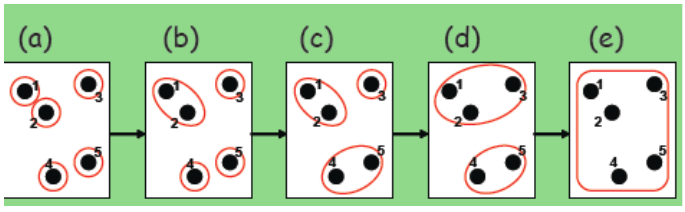
Clusteranalyse

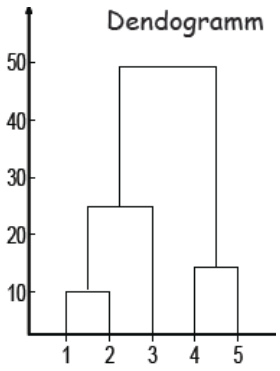
- oft nicht 2, sondern 10 oder 10.000 Dimensionen
  - fast alle Objektpaare sind ähnlich weit voneinander entfernt
  - Methoden zur Dimensionsreduzierung erforderlich
- Beispiel: ähnliche Musik-Alben
  - einige wenige Kategorien vs. käuferspezifische Präferenzen
  - jeder Musikkunde bildet potenziell eigene Dimension
  - ähnliche Alben haben ähnliche Kunden und umgekehrt
- ähnliche Text-Dokumente / News-Meldungen
  - ähnliche Mengen von Keywords



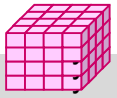
Hierarchisches Clustering

- **Top-Down** (aufteilend)
  - beginne mit 1 Cluster
  - rekursives Splitten in Teil-Cluster
- **Agglomerativ** (Bottom-Up-Ansatz)
  - zunächst ist jeder Punkt eigenes Cluster
  - wiederholte Vereinigung der "ähnlichsten" Cluster
  - Kernproblem: Bestimmung der Merge-Kandidaten
  - naiv: kubische Komplexität



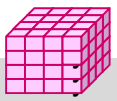


- Repräsentation durch Dendogramme
- Bestimmung von Cluster-Repräsentanten
  - z.B. Cendroid (bei Euklidischer Distanz)
  - „Clustroid": ex. Punkt, der am nächsten zu allen anderen im Cluster liegt



K-Means Algorithmus

- Ausgangssituation
  - Objekte besitzen Distanzfunktion (meist Euklidische Distanz)
  - für jedes Cluster wird damit Clusterzentrum bestimmt („Mittelwert“)
  - Anzahl k der Cluster wird vorgegeben
- Basis-Algorithmus
  - Schritt 1 (Initialisierung): k Clusterzentren werden (zufällig) gewählt
  - Schritt 2 (Zuordnung): Jedes Objekt wird dem nächst gelegenen Clusterzentrum zugeordnet
  - Schritt 3 (Clusterzentren): Für jedes Cluster wird Clusterzentrum neu berechnet
  - Schritt 4 (Wiederholung): Abbruch, wenn sich Zuordnung nicht mehr ändert, sonst zu Schritt 2
- Probleme
  - Konvergenz zu lokalem Minimum, d.h. Clustering muss nicht optimal sein
    - Work-around: Algorithmus mehrfach starten
  - relativ hoher Aufwand für Abstandsberechnungen, Neuberechnung der Clusterzentren



K-Means Algorithmus: Beispiel

- Clustering der Zahlen 1, 3, 6, 14, 17, 24, 26, 31 in 3 Cluster (k=3)

(1) Zentren: 10, 21, 29 (zufällig gewählt, müssen nicht existieren)

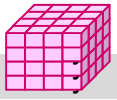
(2) Cluster: C1={1, 3, 6, 14}, C2={17, 24}, C3={26, 31}
(3) Zentren (arithmetisches Mittel): C1: 6 C2: 20,5 C3: 28,5

(2) Cluster: C1={1, 3, 6}, C2={14, 17, 24}, C3={26, 31}
(3) Zentren: C1: 3,3 C2: 18,3 C3: 28,5

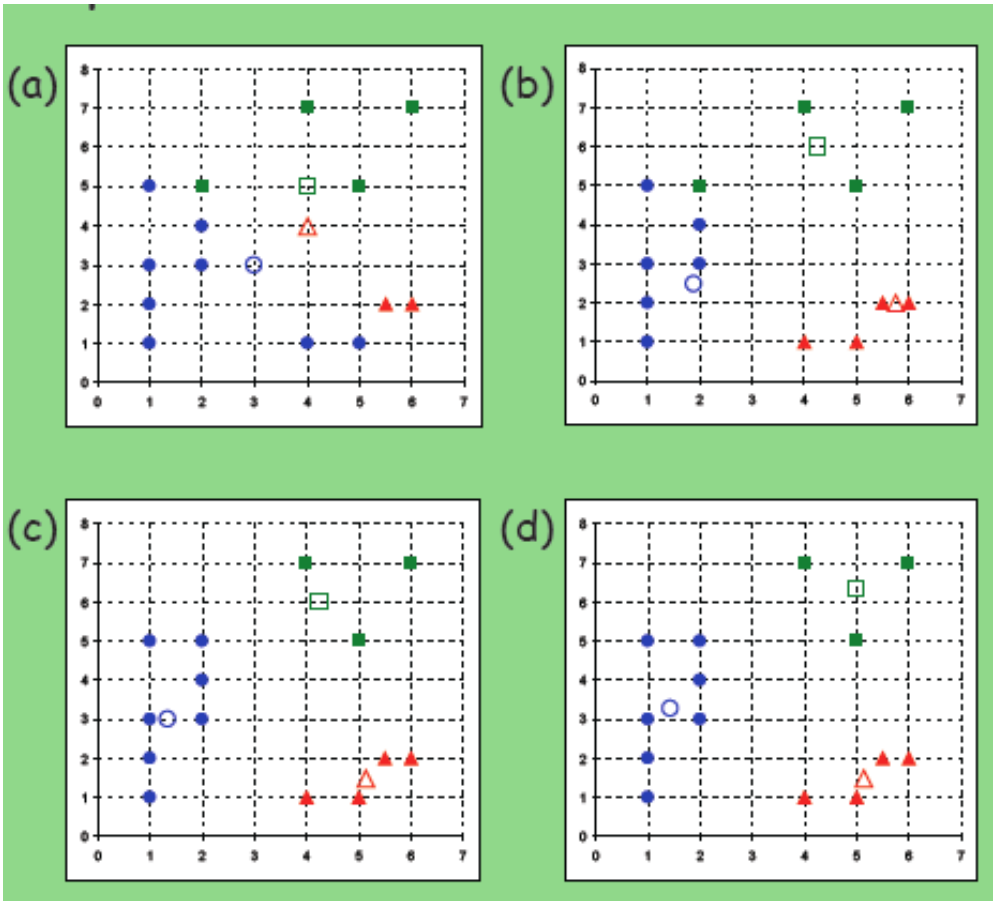
(2) Cluster: C1={1, 3, 6}, C2={14, 17}, C3={24, 26, 31}
(3) Zentren: C1: 3,3 C2: 15,5 C3: 27

(2) Cluster: C1={1, 3, 6}, C2={14, 17}, C3={24, 26, 31}

Abbruch, da sich das Clustering nicht mehr geändert hat.

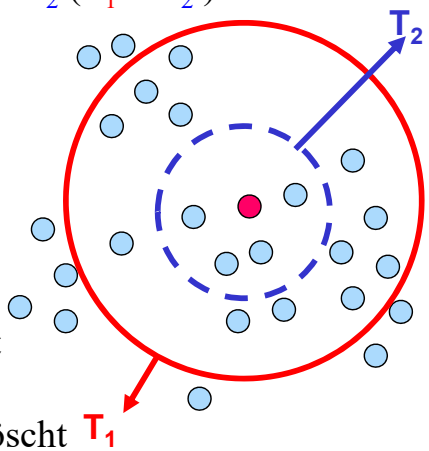


K-Means: 2-D-Beispiel (k=3)



Canopy Clustering*

- Bildung von überlappenden Clustern (Canopies)
  - oft Nutzung als erster Schritt in mehrstufigem Analyseverfahren (Pre-Clustering)
  - skalierbar auf sehr große Datenmengen
  - auf String-Daten einsetzbar (mit String-Ähnlichkeits/Distanzfunktionen)
- gegeben: Punktmenge, Distanzfunktion, 2 Schwellwerte T_1 und T_2 ($T_1 > T_2$)
- Algorithmus
  - Schritt 1 (Initialisierung): Kandidatenliste für Wahl der Canopy-Zentren wird mit allen Objekten initialisiert
  - Schritt 2 (Canopy-Zentrum): Zentrum Z wird (zufällig) aus Kandidatenliste gewählt
  - Schritt 3 (Zuordnung): alle Objekte, deren Abstand zu Z geringer ist als Schwellwert T_1, werden (Canopy) Z zugeordnet
  - Schritt 4 (Kandidatenliste): alle Objekte, die innerhalb des Schwellwertes T_2 zu Z liegen, werden aus Kandidatenliste gelöscht
  - Schritt 5 (Ende/Wiederholung): Abbruch, wenn Kandidatenliste leer ist, sonst zu Schritt 2



* *McCallum, A. et al.:**Efficient clustering of high-dimensional data sets with application to reference matching** Proc. ACM KDD, 2000*

Canopy Clustering Algorithmus: Beispiel

- Clustering der Zahlen 1, 3, 6, 14, 24, 26

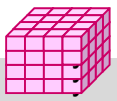
  Abstandsfunktion absolute Differenz, $T_1 = 8$, $T_2 = 4$
  (1) Kandidatenliste = {1, 3, 6, 11, 14, 24, 26}
  (2) Canopyzentrum sei 1
  (3) Canopy bilden
  (4) Entferne 1,3 aus Kandidatenliste

  (5) Kandidatenliste = {6, 11, 14, 24, 26}
  (2) Canopyzentrum: 26
  (3) Canopy bilden
  (4) Entferne 24, 26 aus Kandidatenliste

  (5) Kandidatenliste = {6, 11, 14}
  (2) Canopyzentrum: 11
  (3) Canopy bilden
  (4) Entferne 11,14 aus Kandidatenliste

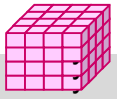
  (5) Kandidatenliste = {6}

  (5) Abbruch, da Kandidatenliste leer



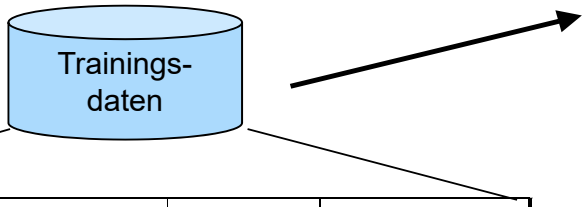
Klassifikation

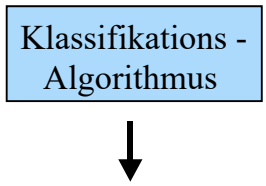
- Klassifikationsproblem
  - gegeben sei Stichprobe (Trainingsmenge) O von Objekten des Formats $(a_1, \ldots, a_d)$ mit *Attributen* A_i, $1 \le i \le d$, und Klassenzugehörigkeit c_i, $c_i \in C = \{c_1, \ldots, c_k\}$
  - gesucht: die Klassenzugehörigkeit für Objekte aus D \ O
    d.h. ein *Klassifikator* K : D → C
- weiteres Ziel:
  - Generierung (Lernen) des expliziten Klassifikationswissens (Klassifikationsmodell, z.B. Klassifikationsregeln oder Entscheidungsbaum)
- Abgrenzung zum Clustering
  - Klassifikation: Klassen vorab bekannt (überwachte Verfahren, „*supervised*“)
  - Clustering: Klassen werden erst gesucht („*unsupervised*“)
- Klassifikationsansätze
  - Entscheidungsbaum-Klassifikatoren
  - Bayes-Klassifikatoren (Auswertung der bedingten Wahrscheinlichkeiten von Attributwerten)
  - neuronale Netze



Klassifikationsprozess

1. Konstruktion des Klassifikationsmodells





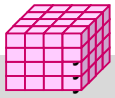
NAME	RANK	YEARS	TENURED
Mike	Assistant Prof	3	no
Mary	Assistant Prof	7	yes
Bill	Professor	2	yes
Jim	Associate Prof	7	yes
Dave	Assistant Prof	6	no
Anne	Associate Prof	3	no

if rank = 'professor'
or years > 6
then tenured = 'yes'

2. Anwendung des Modells zur Vorhersage (Prediction)

(Jeff, Professor, 4)

Tenured?

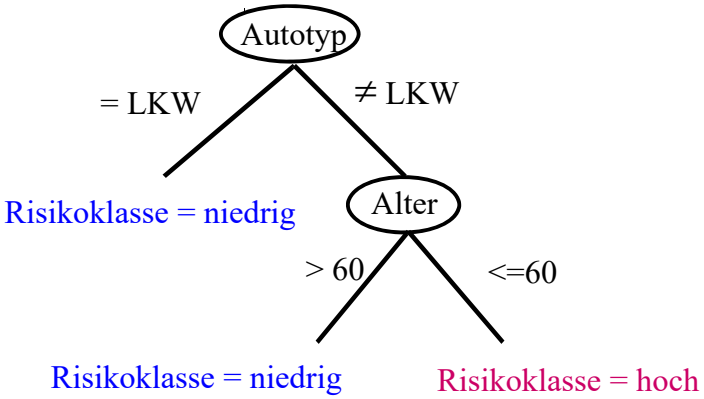


Entscheidungsbäume

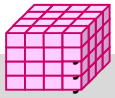
- explizite, leicht verständliche Repräsentation des Klassifikationswissens

ID	Alter	Autotyp	Risiko
1	23	Familie	hoch
2	17	Sport	hoch
3	43	Sport	hoch
4	68	Familie	niedrig
5	32	LKW	niedrig

40 Familie

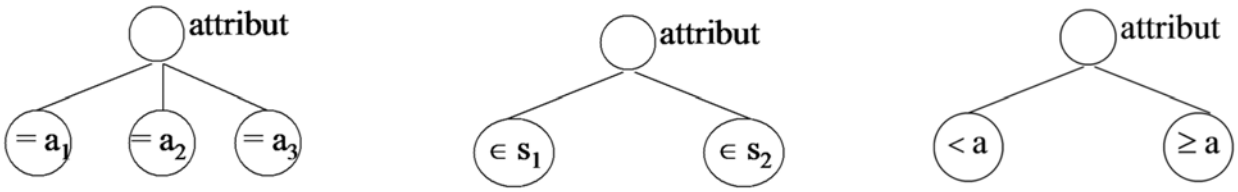


- Entscheidungsbaum ist Baum mit folgenden Eigenschaften:
  - ein innerer Knoten repräsentiert ein Attribut
  - eine Kante repräsentiert einen Test auf dem Attribut des Vorgängerknotens
  - ein Blatt repräsentiert eine der Klassen
- jeder Pfad von Wurzel zu Blatt entspricht einer Klassifikationsregel
  - Bsp: Autotyp ≠ LKW AND Alter > 60 -> Risiko=niedrig
- Anwendung zur Vorhersage:
  - Top-Down-Durchlauf des Entscheidungsbaums von der Wurzel zu einem der Blätter
  - eindeutige Zuordnung des Objekts zur Klasse des erreichten Blatts

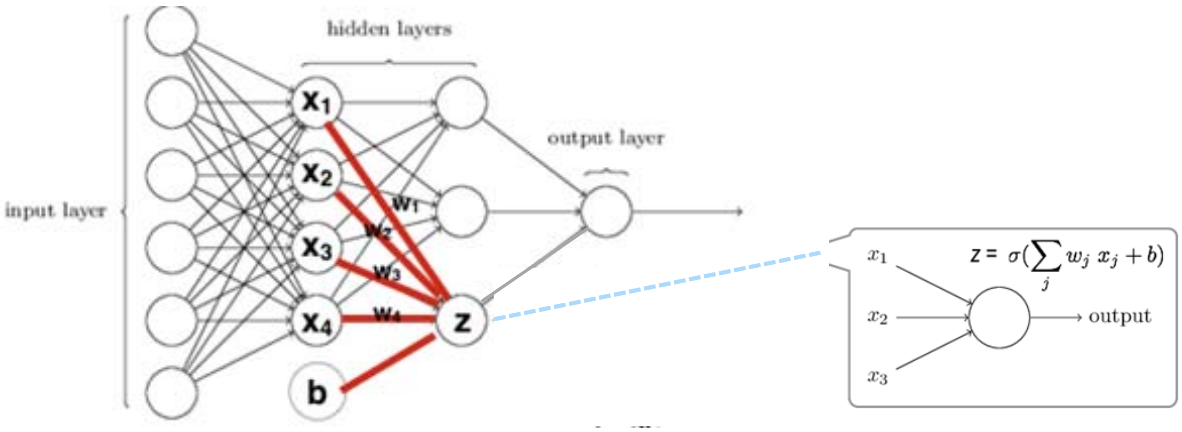


Konstruktion eines Entscheidungsbaums

- Basis-Algorithmus (divide and conquer)
  - Anfangs gehören alle Trainingsdatensätze zur Wurzel
  - Auswahl des nächsten Attributs (Split-Strategie): Maximierung des Informationsgewinns (meßbar über Entropie o.ä.)
  - Partitionierung der Trainingsdatensätze mit Split-Attribut
  - Verfahren wird rekursiv für die Partitionen fortgesetzt
- Abbruchbedingungen
  - keine weiteren Split-Attribute
  - alle Trainingsdatensätze eines Knotens gehören zur selben Klasse
- Typen von Splits
  - *kategorische Attribute*: Split-Bedingungen der Form „attribut = a“ oder „attribut ∈ set“ (viele mögliche Teilmengen)
  - *numerische Attribute*: Split-Bedingungen der Form „attribut < a“ (viele mögliche Split-Punkte)



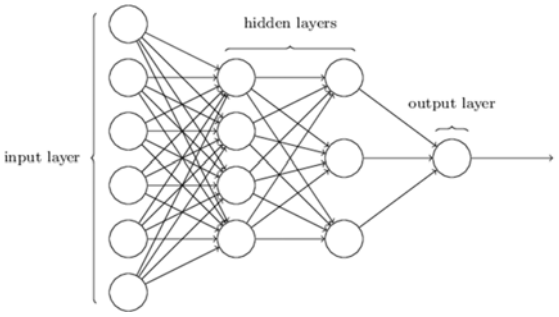
Neuronale Netze



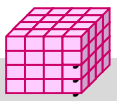
- Neuronales Netz (NN) besteht aus mehreren Schichten
  - Eingabe-/Ausgabeschicht
  - mind. einer verdeckten (hidden) Schicht
- jede Schicht besteht aus Neuronen, die mit anderen Neuronen verbunden sind
  - Verbindungen / Kanten verwenden Zahlen, z.B. Gewichte ($\boldsymbol{w}i \in \mathbb{R}$)
- Deep Learning: mehrere hidden layers

Deep Learning

- Nutzung tiefer neuronaler Netze zum Lernen einer Datenrepräsentation auf großen Mengen an Trainingsdaten
- Nutzen des gelernten Wissens für Klassifikation, Vorhersagen etc. vor allem für unstrukturierte Daten (Bilder, Sprache, Text) mit verborgener Struktur
- zahlreiche Anwendungsfälle
  - Erkennung von Bildern
  - Erkennung von Handschriften
  - Spracherkennung
  - Verarbeitung von Texten …

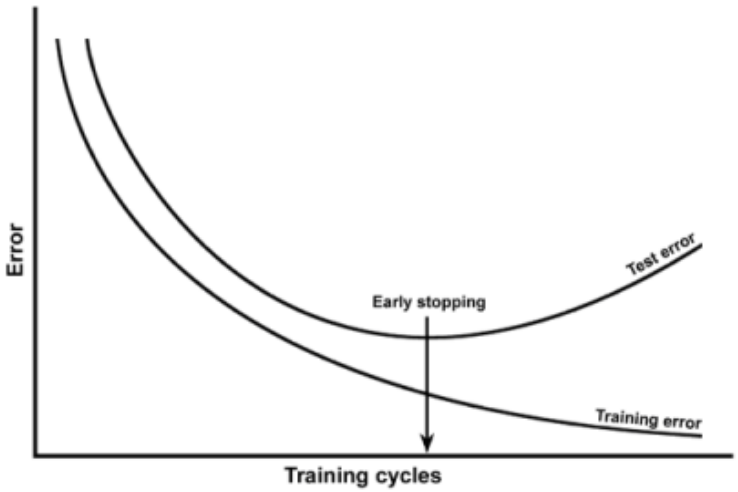


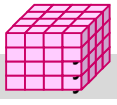
- verschiedene Varianten von Netzen
  - Convolutional deep neural networks (CNN), v.a. für Bildklassifizierung
  - Recurrent neural networks (RNN), u.a. LSTM (Long short-term memory),
    - u.a. für Text/Sprachverarbeitung oft unter Nutzung von Word Embeddings
  - Autoencoder networks (Erzeugung verbesserter Repräsentationen)



Bewertung von Klassifikatoren

- Klassifikator ist für die Trainingsdaten optimiert
  - liefert auf der Grundgesamtheit der Daten evtl. schlechtere Ergebnisse (-> Overfitting-Problem)
- Bewertung mit von Trainingsmengen unabhängigen Testmengen
- Klassifikationsgenauigkeit:
  - Anteil der korrekten Klassenzuordnungen in Testmenge
- Klassifikationsfehler:
  - Anteil der falschen Klassenzuordnungen





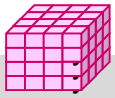
Bewertung (2)

- Klassifikationsgenauigkeit (*Accuracy*):
  - n Sätze/Objekte, n_r korrekt zugeordnet
  - Accuracy $a = n_r / n$
  - alle Kategorien gehen gleichberechtigt ein
  - bei 2 Kategorien (positive/negative) gilt
    Accuracy = true-positives+true-negatives / n
  - Accuracy problematisch, falls eine der Kategorien stark dominiert (zB non-Matches)

	real: class C	**real:** not class C
predicted: class C	True Positive	False Positive
predicted: not class C	False Negative	True Negative

- Maße *Recall* / *Precision* / *F-Measure* fokussieren auf eine der Kategorien C (z.B. Risiko, Krankheit, Match) in binären Entscheidungsproblemen
  - seien n_c der n Objekte von dieser Kategorie
  - Klassifikationsmodell ordne m_c Objekte dieser Klasse zu, davon m_{cr} (TP) richtig
  - Recall $r = m_{cr} / n_{c,}$ Precision $p = m_{cr} / m_{c,}$ F-Measure $f = 2\ r\ \ p\ /(r+p)$

- Beispiel binäres Entscheidungsproblem
  - $n=100$, $n_c = 20$, $m_c = 25$, $m_{cr} = 15$
  - Recall=
  - Precision= F-Measure=
  - Accuracy=

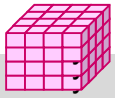


Bewertung (3)

- Konfusionsmatrix

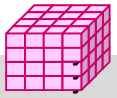
	A	B	C	*Summe*
a	**37**	12	4	*53*
b	5	**23**	11	*39*
c	12	8	**42**	*62*
Summe	*54*	*43*	*57*	*154*

- Accuracy: (37+23+42)/154=102/154 = 66,2%
- Kategoriebezogene Bewertungen
  - Recall für Kat. C: 42/57=0,74
  - Precision für Kat. C: 42/62=0,68



Zusammenfassung (1)

- Data Mining/ML-Verfahrensklassen: Assoziationsregeln, Clusteranalyse, Klassifikation,
- zahlreiche Nutzungsmöglichkeiten: Kundensegmentierung, Vorhersage des Kundenverhaltens, Warenkorbanalyse etc.
- Assoziationsregeln, u.a. zur Warenkorbanalyse
  - Berechnung der Frequent Itemsets mit minimalem Support
  - Ableitung der Regeln mit ausreichender Konfidenz
  - Nutzung der Anti-Monotonie: Itemset ist nur häufig, wenn es alle Teilmengen davon sind
  - A-Priori-Algorithmus: Bottom-Up-Auswertung mit Kandidatengenerierung für häufige Itemsets
  - FP-Baum: schnellere Alternative mit kompakter Repräsentation von Transaktionen und rekursivem Pattern Mining auf Teilbäumen (Divide-and-Conquer)



Zusammenfassung (2)

- Clusteranalyse: Segmentierung über Distanzmaß
  - K-Means: vorgegebene Anzahl von Clustern
  - Canopy Clustering: schnelle Berechnung überlappender Cluster; nützlich als Vorbereitung für K-Means
- Klassifikation, z.B. über Entscheidungsbäume
  - erfordert Trainingsdaten mit bekannter Klassenzuordnung
  - Bestimmung der Split-Attribute eines Entscheidungsbaums gemäß Informationsgewinn
- Bewertung von Klassifikationsergebnissen
  - Accuracy
  - für 2 Klassenprobleme: Precision/Recall/F-Measure
- neuronale Netze / Deep Learning
  - vielseitige Nutzungsmöglichkeiten, u.a. für Klassifikationsprobleme für unstrukturierte Daten (Bilder, Texte)
  - hoher Ressourcenbedarf