Ludwig-Maximilians-Universität München
Institut für Informatik
Lehr- und Forschungseinheit für Datenbanksysteme

Skript zur Vorlesung

Knowledge Discovery in Databases

im Sommersemester 2011

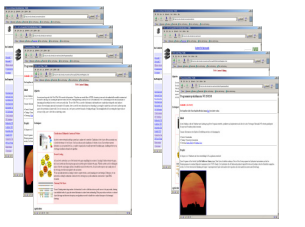
Kapitel 2: Merkmalsräume

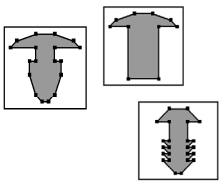
Vorlesung+Übungen:
PD Dr. Matthias Schubert, Dr. Arthur Zimek

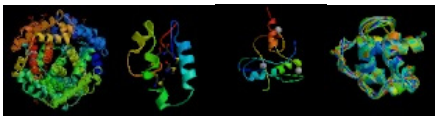
http://www.dbs.ifi.lmu.de/cms/Knowledge_Discovery_in_Databases_I_(KDD_I)

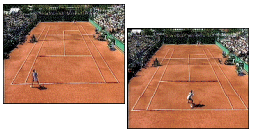
Merkmalsräume

- Motivation:
  - Zentrales Konzept beim Data Mining: Ähnlichkeit von Datenbankobjekten
    - Clustering: Zusammenfassen *ähnlicher* Objekte in Gruppen
    - Klassifikation: Zuordnung von Objekten zu einer Klasse *ähnlicher* Objekte
  - Definition einer geeigneten Distanzfunktion auf Datenbankobjekten nicht immer einfach (besonders in Nicht-Standard-Datenbanken)
    - Bilder
    - CAD-Objekte
    - Proteine
    - Textdokumente
    - Polygonzüge (GIS)
    - etc.





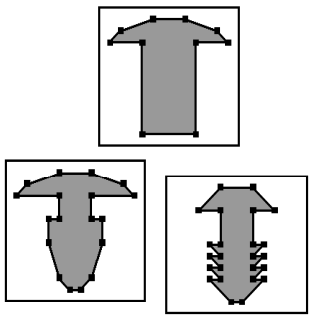


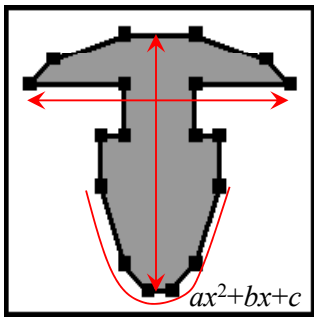


Merkmale („Features“ von Objekten)

- 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:

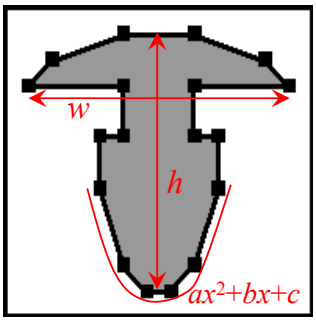




Mögliche Merkmale:

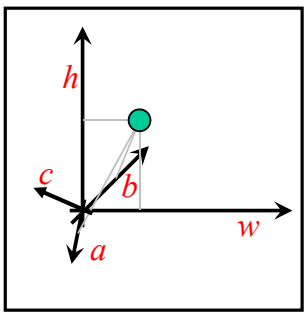
Beispiel: CAD-Zeichnungen (cont.)

Objekt-Raum



(h, w, a, b, c)

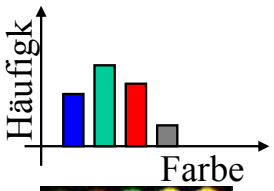
Merkmals-Raum



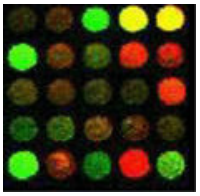
- Im Kontext von statistischen Betrachtungen werden die Merkmale häufig auch als *Variablen* bezeichnet
- Die ausgewählten Merkmale werden zu Merkmals-Vektoren (*Feature Vector*) zusammengefasst
- Der Merkmalsraum ist häufig hochdimensional (im Beispiel 5-dim.)

Merkmale

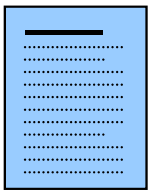
Bilddatenbanken:
Farbhistogramme



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

DATABASE SYSTEMS GROUP

Merkmale

LMU

Skalen-Niveaus von Merkmalen

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.

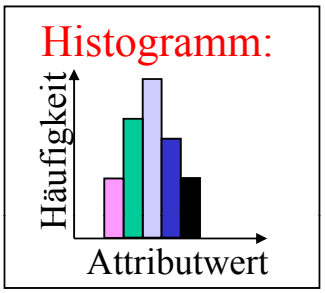
Beispiele:

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

Univariate Deskription von Merkmalen

Sei $x_1,\ldots,x_n$ eine Stichprobe eines Merkmals X.

- Absolute Häufigkeit: Für jeden Wert *a* ist h(*a*) die Anzahl des Auftretens in der Stichprobe
- Relative Häufigkeit: f(*a*) = h(*a*) / *n*



Die folgenden Maße sind nur für metrische Merkmale sinnvoll:

- Arithmetisches Mittel: $\mu = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i$
- Median: *Das mittlere Element bei aufst. Sortierung*
- Varianz: $VAR(X) = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2$
- Standardabweichung: $\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}$

Multivariate Deskription von Merkmalen

Kontingenztabelle

- für kategorische Merkmale *X* und *Y*
- repräsentiert für zwei Merkmale *X* und *Y* die absolute Häufigkeit h_{ik} jeder Kombination (x_i, y_k) und alle Randhäufigkeiten $h_{.k}$ und $h_{i.}$ von *X* und *Y*

	MittelfristigeArbeitslosigkeit	Langfristige Arbeitslosigkeit	
Keine Ausbildung	19	18	37
Lehre	43	20	63
	62	38	100

- Wie sollten die relativen Häufigkeiten verteilt sein, wenn die beiden Merkmale keinerlei Abhängigkeit besitzen? $\frac{h_{ik}}{n} = \frac{h_{i.}}{n} \cdot \frac{h_{.k}}{n}$
- χ^2-*Koeffizient*
  Differenz zwischen dem bei Unabhängigkeit erwarteten und dem tatsächlich beobachteten Wert von h_{ij} (Maß für die Stärke der Abhängigkeit)

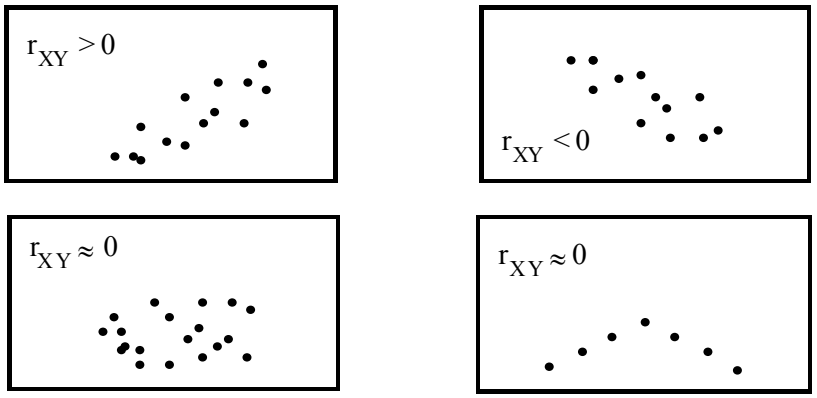
Multivariate Deskription von Merkmalen

Korrelationskoeffizient

- für numerische Merkmale *X* und *Y*
- wie stark sind die Abweichungen vom jeweiligen Mittelwert korreliert?

$$r_{XY} = \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i - \bar{x}) \cdot (y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 \cdot \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2}}$$

- Beispiele



Räume und Distanzfunktionen

Merkmalsraum (Featureraum)

- Intuitiv: ein Wertebereich/Domain mit Distanzfunktion
- Formal: Featureraum **F** = (*Dom*, *dist*)
- *Dom* ist eine (geordnete) Menge von Merkmalen (Features)
- $dist : Dom \times Dom \rightarrow \mathbb{R}_0^+$ ist eine totale (Distanz)-Funktion mit den folgenden Eigenschaften
  - $\forall p,q \in Dom,\ p \neq q : dist(p,q) > 0$ Striktheit
  - $\forall o \in Dom : dist(o,o) = 0$ Reflexivität
  - $\forall p,q \in Dom : dist(p,q) = dist(q,p)$ Symmetrie

Räume und Distanzfunktionen

- Metrischer Raum
  - Formal: Metrischer Raum **M** = (*Dom*, *dist*) mit den folgenden Eigenschaften
    - **M** ist ein Featureraum
    - $\forall o,p,q \in Dom : dist(o,p) \leq dist(o,q) + dist(q,p)$ Dreiecksungleichung

- Wichtigstes Beispiel: Euklidischer Vektorraum
  - Formal: Euklidischer Vektorraum **E** = (*Dom*, *dist*) mit
    - (*Dom*, *dist*) ist ein metrischer Raum
    - $Dom = \mathbb{R}^d$

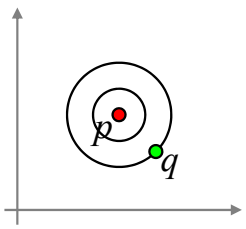
- Sprechweise:
  - Euklidischer Vektorraum = „Featureraum“
  - Vektoren (Objekte im Eulidischen Featureraum) = „Featurevektoren“
  - Die *d* Dimensionen des Vektorraums = „Features“

Räume und Distanzfunktionen

- Ähnlichkeit von Feature Vektoren (Euklidische Vektoren)

Euklidische Norm (L_2):

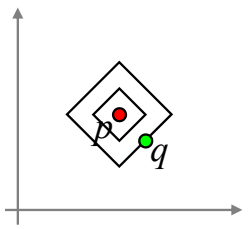
$dist_1 = ((p_1-q_1)^2+(p_2-q_2)^2+...)^{1/2}$



Natürlichstes Distanzmaß

Manhattan-Norm (L_1):

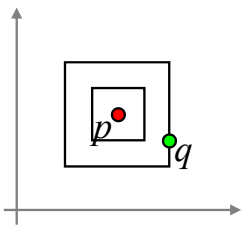
$dist_2 = |p_1-q_1|+|p_2-q_2|+...$



Die Unähnlichkeiten der einzelnen Merkmale werden direkt addiert

Maximums-Norm (L_∞):

$dist_\infty = \max\{|p_1-q_1|, |p_2-q_2|,...\}$



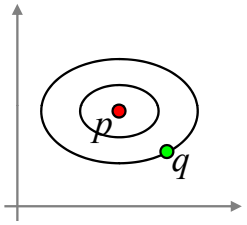
Die Unähnlichkeit des am wenigsten ähnlichen Merkmals zählt

Verallgemeinerung L_p-Abstandsmaß: $dist_p = (|p_1-q_1|^p + |p_2-q_2|^p + ...)^{1/p}$

Räume und Distanzfunktionen

Gewichtete Euklidische Norm:

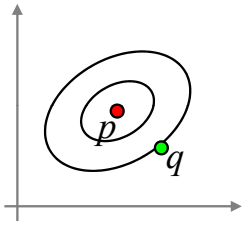
$dist = (w_1(p_1\text{-}q_1)^2 + w_2(p_2\text{-}q_2)^2 + \ldots)^{1/2}$



Häufig sind die Wertebereiche der Merkmale deutlich unterschiedlich.
Beispiel: Merkmal $M_1 \in [0.01 .. 0.05]$
Merkmal $M_2 \in [3.1 .. 22.2]$
Damit M_1 überhaupt berücksichtigt wird, muss es höher gewichtet werden

Quadratische Form:

$dist = ((p - q)\ \mathbf{M}\ (p - q)^{\mathbf{T}})^{1/2}$



Bei den bisherigen Ähnlichkeitsmaßen werden die Merkmale nur getrennt gewichtet.
Besonders bei Farbhistogrammen müssen auch *verschiedene* Merkmale gemeinsam gewichtet werden.

Statt mit Distanzmaßen, die die Unähnlichkeit zweier Objekte messen, arbeitet man manchmal auch mit positiven Ähnlichkeitsmaßen

DATABASE SYSTEMS GROUP

Räume und Distanzfunktionen

LMU

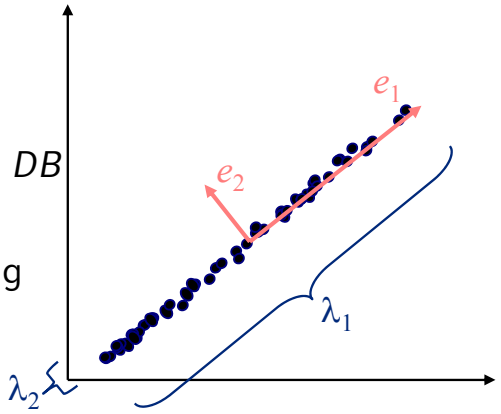
Deskription von Featurevektoren

- Gegeben: Menge *DB* von Featurevektoren
- Zentroid (Centroid, vgl. Arithmetisches Mittel): $\mu_{DB} = \frac{1}{DB} \cdot \sum_{o \in DB} o$
  - Achtung: bei allgem. Metrischen Räumen muss Centroid nicht notwendigerweise existieren!!!
- Medoid m_{DB}:
  - Der Featurevektor, der am nächsten zum Centroiden gelegen ist (die kleinste Distanz zum Zentroiden hat)
  - Bei allgem. Metrischen Räumen: Objekt mit dem kleinsten durschnittlichen Abstand zu allen anderen Objekten aus *DB*
- Varianz (der Distanzen): $Var_{DB} = \frac{1}{DB} \cdot \sum_{o \in DB} dist(o, \mu_{DB})$
- Standardabweichung analog

Räume und Distanzfunktionen

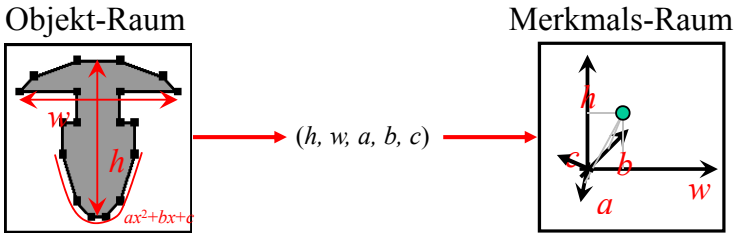
Hauptachsenanalyse eine Menge *DB* von *Euklidischen Vektoren*

- Kovarianz-Matrix: $\Sigma_{DB} = \frac{1}{|DB|} \sum_{o \in D} (o - \mu_{DB})(o - \mu_{DB})^T$
- Die Matrix wird zerlegt in
  - eine Orthonormalmatrix V = [e_1,...,e_d] (Eigenvektoren)
  - und eine Diagonalmatrix Λ = diag (λ_1,..., λ_d) (Eigenwerte)
  - so dass gilt: $\Sigma_{DB} = V \Lambda V^T$
- Interpretation:
  - Eigenvektoren:
    Hauptausrichtung der Datenpunkte in *DB*
  - Eigenwerte:
    Varianz der Datenpunkte in *DB* entlang der entspr. Eigenvektoren

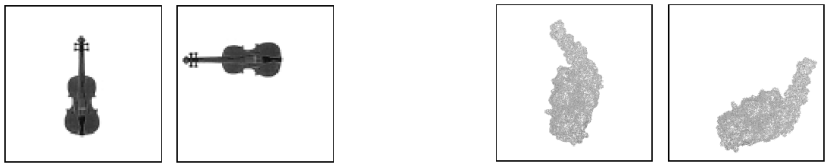


Feature-Transformationen für räumliche Objekte

Feature Transformation
für räumliche Objekte
(CAD-Daten, Proteine, ...)



- Invarianzen
  - Gleichheit (oder Ähnlichkeit) von Formen unabhängig von Lage und Orientierung im Raum
  - Beispiele gleicher Formen im 2D und im 3D:

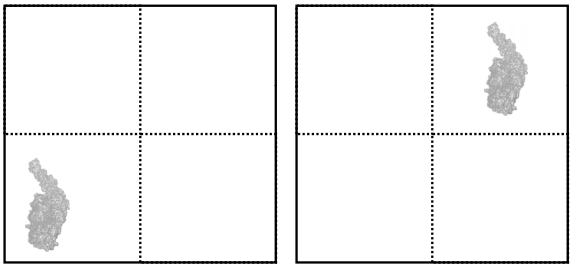


  - Erwünscht:
    - Kanonische Darstellung, d.h. ohne Lage- und Orientierungsinformation
    - Verallgemeinerung auf andere Objekteigenschaften

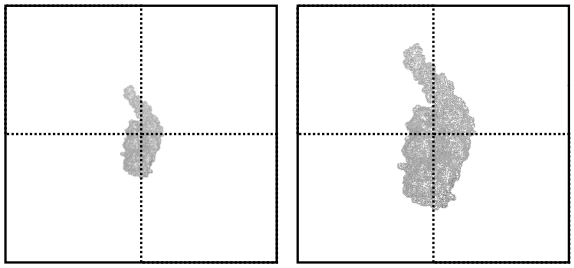
Feature-Transformationen für räumliche Objekte

Die wichtigsten Invarianzen

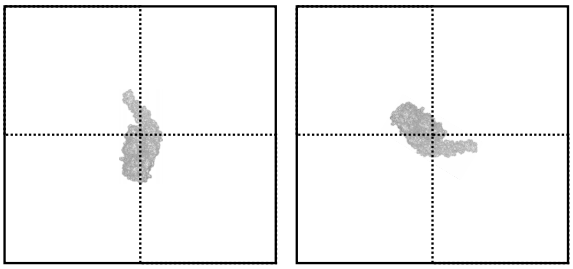
Translation



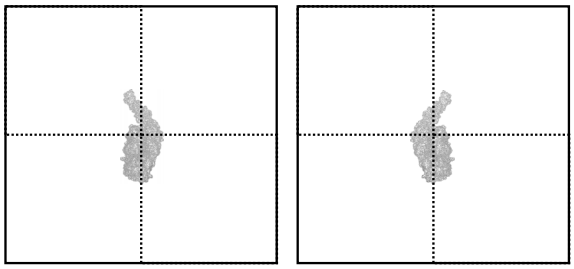
Skalierung



Rotation



Spiegelung

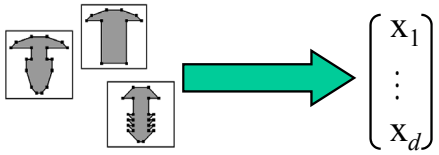


DATABASE SYSTEMS GROUP

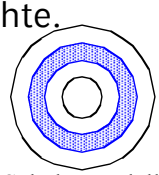
Feature-Transformationen für räumliche Objekte

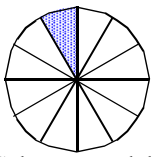
LMU

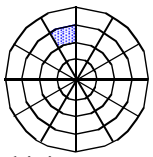
Volume Model [Ankerst, Kastenmüller, Kriegel, Seidl 99]



- Applikationen: CAD, Protein 3D-Strukturen
- Idee: *Formhistogramme* für 3D Objekte
  - Partitioniere den 3D-Raum in Zellen (Histogramm-Bins).
  - Bestimme den Anteil an Punkten des Objektes pro Zelle (normiertes Histogramm).
  - Durch die Normierung werden die Histogramme unabhängig von der Punktedichte.
- Partitionierungen

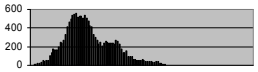

Schalenmodell


Sektorenmodell

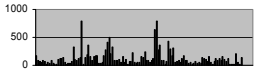

kombiniertes Modell

- Beispiel

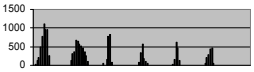

Seryl-tRNA Synthetase



Schalenmodell (120 Schalen)



Sektorenmodell (122 Sektoren)



kombiniertes Modell (20 Schalen, 6 Sektoren)

Feature-Transformationen für räumliche Objekte

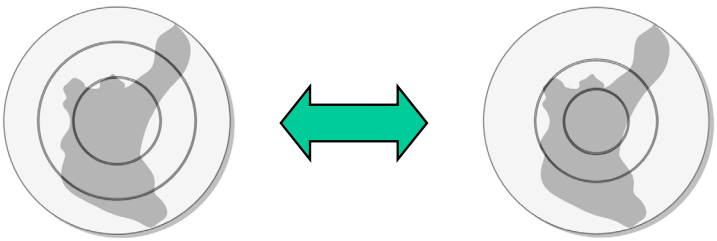
- Formale Definition der Histogramme
  - *Schalenmodell*: Definiere die Bins über den Abstand zum Mittelpunkt, d.h. Anzahl der Punkte auf der jeweiligen Schale.
  - *Sektorenmodell*: Anzahl der Punkte im jeweiligen Sektor.
  - *Kombiniertes Modell*: Synthese aus Schalen- und Sektorenmodell.
- Invarianzen
  - Translationsinvarianz durch Lagenormierung: Verschiebung des Schwerpunkts eines Objektes in den Ursprung.
  - Rotationsinvarianz durch Hauptachsentransformation:
    - Drehung der Objekte, so dass die Hauptachsen auf den Koordinatenachsen liegen.
    - unnötig beim Schalenmodell, dieses ist inhärent rotationsinvariant.

DATABASE SYSTEMS GROUP

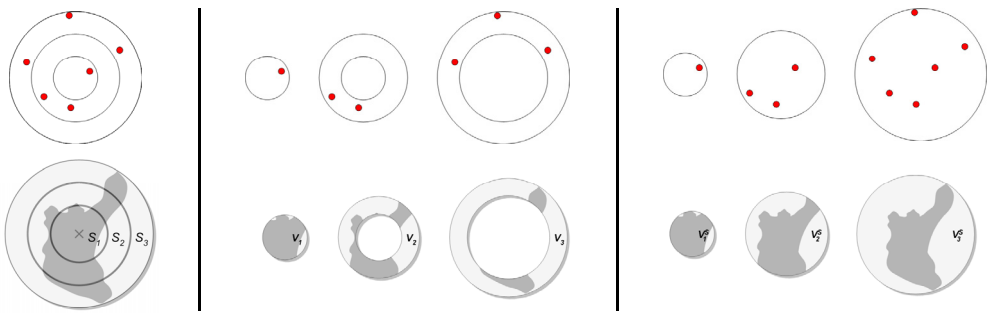
Feature-Transformationen für räumliche Objekte

LMU

- Verbesserung der Formhistogramme [Aßfalg, Kriegel, Kröger, Pötke 05]
  - Proportionale Aufteilung

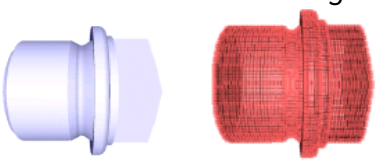


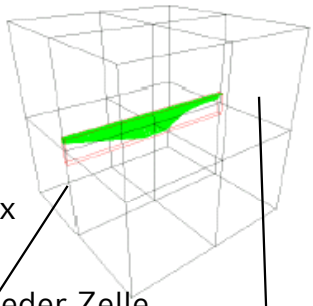
  - Redundante Zuordnung zu den Bins



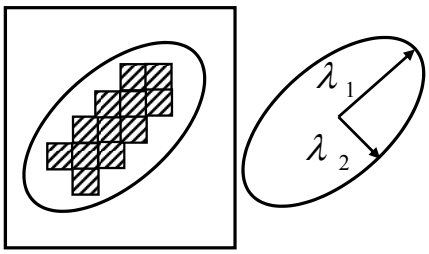
Eigenvalue Model [Kriegel, Kröger, Mashael, Pfeifle, Pötke , Seidl 03]

- Volumen-Diskretisierung durch Voxel (3dimensionale Pixel)





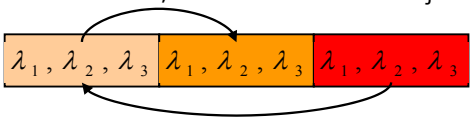
- Würfelförmige Partitionierung der Bounding Box
- Bestimmung der Eigenwerte des Voxelinhaltes jeder Zelle



$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ ..... $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$

Invarianzen

- Translationsinvarianz durch Lagenormierung: Verschiebung des Schwerpunkts eines Objektes in den Ursprung.
- Skalierungsinvarianz durch Voxelisierung der Bounding Box/Bounding Cube des Objekts mit immer gleicher Voxelauflösung
- Rotationsinvarianz
  - Hauptachsentransformation (völlig rotationsinvariant, aber bei manchen Objekten sensitiv gegenüber kleinen Änderungen)
  - CAD Objekte oft in „vernünftiger" Lage durch Konstrukteur abgespeichert, dann besser 90-Grad-Rotationsinvarianz: Zur Laufzeit werden die 24 Würfelpositionen durch Permutation der Merkmalsvektor-Elemente simuliert, die Distanz zweier Objekte ist das Minimum über 24 Distanzen



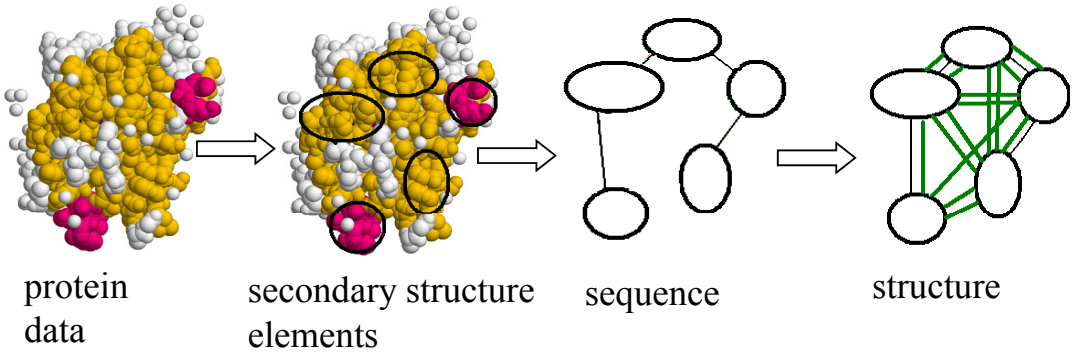
- Reflektionsinvarianz
  - Betrachte 48 statt 24 Permutationen zur Laufzeit (incl. Spiegelung des Würfels)

Feature-Transformationen für räumliche Objekte

Protein Datenbanken [Borgwardt, Ong, Schönauer, Vishwanathan, Smola, Kriegel 05]

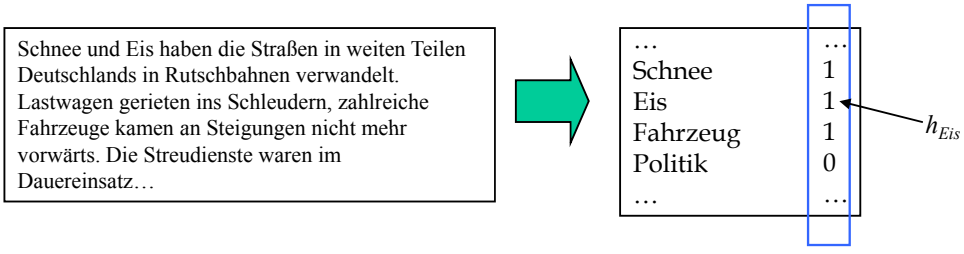
Idee:

- Graphmodel für Protein 3D-Strukturen
- Knoten: Untereinheiten von Proteinen (secondary structure elements)
- Kanten: Nachbarschaft von Untereinheiten innerhalb der 3D-Struktur und entlang der Aminosäure Sequenz.



Feature-Transformationen für Texte

- *Text als Mengen/Vektoren von Termen: („Bag-Of-Words“)*
  - Term:
    - einzelnes Wort („Schnee“, „Eis“..)
      oder
    - zusammenhängendes Satzfragment („nicht mehr vorwärts“..)
  - Transformation eines Dokuments D in Vektor $r(D) = (h_1, ..., h_d)$
    $h_i \geq 0$: die Häufigkeit des Terms t_i in D



Feature-Transformationen für Texte

- Probleme im Textmining
  1. Viele Wörter nutzlos (z.B. er, sie, es, und, als, der, dies, das..)
  2. Wörter haben gleichen Wortstamm („gehen“ „ging“)
  3. Sehr hochdimensionale Featureräume (häufig $d > 10.000$)
  4. Nicht alle Terme sind gleich wertvoll
  5. Die meisten Termhäufigkeiten $h_i = 0$ („sparse feature space“)
- weitere Probleme aus der Linguistik:
  - unterschiedliche Wörter haben gleiche Bedeutung
    „laufen“ ⇔ „rennen“
  - Wörter haben mehrere Bedeutungen
    „Maus“: Computermaus, Nagetier…

Feature-Transformationen für Texte

- Problem 1: Viele Wörter nutzlos (z.B. er, sie, es, und, als, der, dies, das..)
  - Lösung: Streichen solcher Terme (Stopwords)
    Für alle Sprachen werden Stopwordlisten im WWW publiziert.
- Problem 2: Wörter haben gleichen Wortstamm („gehen“ „ging“)
  - Lösung: Stemming
    Worte auf Wortstamm rückführen (z.B. lief, läuft, lauft => laufen)
    Im Englischen algorithmisches Stemming möglich.
    (Porters Stemming Algorithms: http://tartarus.org/~martin/PorterStemmer/index.html)
    In anderen Sprachen werden Dictionaries benötigt, die die Wortstämme zu den Vokabeln enthalten.

Feature-Transformationen für Texte

- Problem 3: Sehr viele Terme müssen betrachtet werden.
  - Lösung: Auswahl der wichtigsten Features („Feature Selection“)
  - Beispiel: Mittlere Dokumentenhäufigkeit
    - Sehr häufige Terme kommen scheinbar in allen Dokumenten vor
      => Vorkommen unterscheidet kaum Dokumente
    - Sehr seltene Terme kommen nur in Bruchteil der Dokumente vor
      => Nichtvorkommen unterscheidet kaum Dokumente

  Vorgehen:

  1. Berechne Dokumenthäufigkeit für alle Terme t_i : $DF(t_i) = \frac{|Dok\_t_i|}{|ALL\_Doks|}$
  2. Sortiere Terme nach DF(t_i) und Vergebe Rang rank(t_i)
  3. Sortiere Terme nach score(t_i)= DF(t_i) · rank(t_i)
     z.B. score(t_{23}) = 0.82 · 1 = 0.82
     score(t_{17}) = 0.75 · 2 = 1.5
  4. Wähle die k Terme mit dem größten Wert für score(t_i)

Rank	Term	DF
1.	t_{23}	0.82
2.	t_{17}	0.65
3.	t_{14}	0.52
4.	…	…

DATABASE SYSTEMS GROUP

Feature-Transformationen für Texte

LMU

- Problem 4: Nicht alle Terme sind gleich wertvoll.
  - Idee:
    1. Gewichte seltene Terme höher als häufige.
    2. Gewichte häufig in einem Dokument auftretende Terme höher als solche die nur einmal vorkommen.
  - Lösung: TF-IDF (Term Frequency · Inverse Document Frequency)

    Berücksichtige sowohl die relative Anzahl der Vorkommen im Dokument als auch die Seltenheit des Terms.

$$TF(t,d) = \frac{n(t,d)}{\sum_{w \in d} n(w,d)}$$ relative Häufigkeit von t in d

$$IDF(t) = \frac{|DB|}{|\{d \mid d \in DB \wedge t \in d\}|}$$ inverse Häufigkeit von t bzgl. aller Dokumente

Featurevektor mit TF IDF : $r(d) = (TF(t_1,d) \cdot IDF(t_1), \ldots, TF(t_n,d) \cdot IDF(t_n))$

Feature-Transformationen für Texte

- Problem 5: die meisten Termhäufigkeiten $h_i = 0$

  => Euklidische Abstände sehr ähnlich

  – Lösung: Verwendung anderer Abstandsmaße

  Idee: Verwende Terme, die beide Dokumente (D_1, D_2) gemeinsam haben.

  Jaccard Coefficient: Dokumente als Termmengen

$$d_{Jaccard}(D_1, D_2) = 1 - \frac{|D_1 \cap D_2|}{|D_1 \cup D_2|}$$

  Cosinus Coefficient: Abstand für Wortvektoren (evtl. TF IDF)

$$d_{cosinus}(D_1, D_2) = 1 - \frac{\langle D_1, D_2 \rangle}{\|D_1\| \cdot \|D_2\|} = 1 - \frac{\sum_{i=0}^{n} (d_{1,i} \cdot d_{2,i})}{\sqrt{\sum_{i=0}^{n} d_{1,i}^{\ 2}} \cdot \sqrt{\sum_{i=0}^{n} d_{2,i}^{\ 2}}}$$