KDD 2 : TEIL 2
Data Mining in strukturierten Objekten

Skript zur Vorlesung

Knowledge Discovery in Databases II

im Sommersemester 2010

Data Mining in Strukturierten Objekten

Bis jetzt:

Datenobjekte werden durch Feature-Vektoren repräsentiert:

Aber:

- reelle Objekte können durch viele unterschiedliche Informationen charakterisiert werden.

  => Nicht alle Objekte lassen sich gut als Vektor von Grunddatentypen darstellen
- unterschiedliche Bedeutung der Features
- Strukturierung der Objekte durch Teilobjekte integriert zusätzlich Information.
- Integration von Domain-Knowledge durch Ausnutzen der gegebenen Modellierung

Arten von Strukturierten Objekten

1. Multirepräsentierte Objekte:
   Tupel aus Objekten unterschiedlicher Objekträume.
   Bsp.: Farbverteilung und Texturbeschreibung eines Pixelbilds

2. Multi-Instanz Objekte:
   Mengen aus Objekten. Alle Objekte sind Element des gleichen Objektraums
   Bsp.: Konfigurationen eines Moleküls, Warenangebot eines Händlers,..

3. Sequenzen
   Abfolge von Objekten i.d.R. des gleichen Objektraums
   Bsp.: Videos, Audio-Daten, Aminosäureketten, Zeitreihen...

4. Bäume
   Bäume aus Objekten, wobei Knoten und Kanten durch andere Objekte beschrieben sein können.
   Bsp.: Stammbäume, XML-Dateien...

5. Graphen
   gerichtete/ungerichtete Graphen aus Objekten, wobei Knoten und Kanten durch andere Objekte beschrieben sein können.
   Bsp.:Proteine, Bildsegmente, ...

Auswahlkriterium für Grad der Strukturierung

Jede Struktur kann als Spezialfall von Graphen aufgefasst werden.

Aber:

- häufig haben Teilobjekte keine bekannte Beziehung zueinander
- Beziehung zwischen Objekten ist oft vernachlässigbar
- Verwendung von graphstrukturierten Daten sehr aufwendig
  - Graph-Isomorphie ist nicht polynomiell berechenbar
  - Subgraph-Isomorphie ist NP-hart

Fazit: Die verwendete Strukturierung der Daten sollte so einfach wie möglich sein, aber die wesentlichen Merkmale erhalten.

Bsp: Zum Vergleich 2er Videos ist die zeitliche Abfolge von Szenen häufig nicht relevant. 2 Videos können schon als ähnlich betrachtet werden, wenn sie ähnliche Szenen in unterschiedlicher Reihenfolge enthalten.
(Sequenz von Szenen => Menge von Szenen)

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

Skript zur Vorlesung

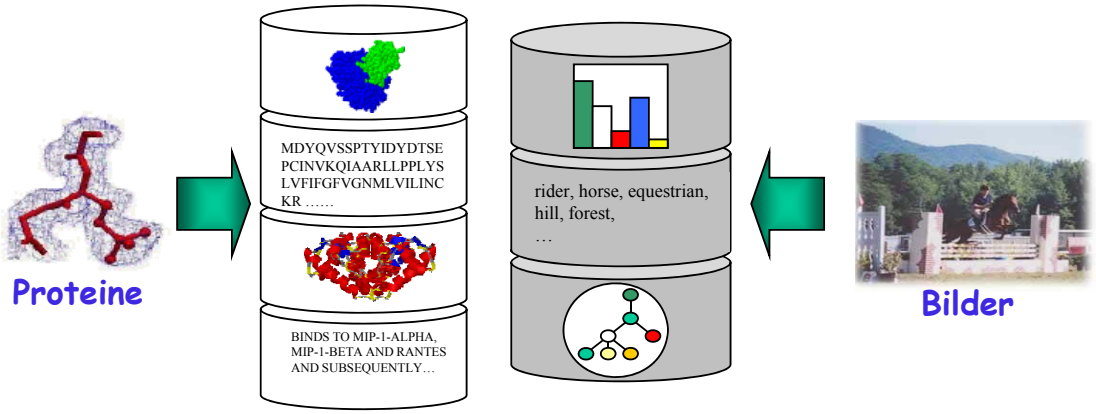
Knowledge Discovery in Databases II

im Sommersemester 2009

Kapitel 6: Multirepräsentiertes Data Mining

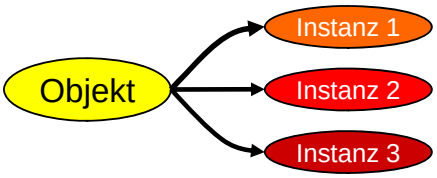
http://www.dbs.ifi.lmu.de/Lehre/KDD

Grundsituation



Gründe für Multirepräsentierte Objekte:

- unterschiedliche Featuretransformationen
- unterschiedliche Messtechniken
- unterschiedliche Aspekte desselben Objekts



⇨ Multirepräsentierte Objekte

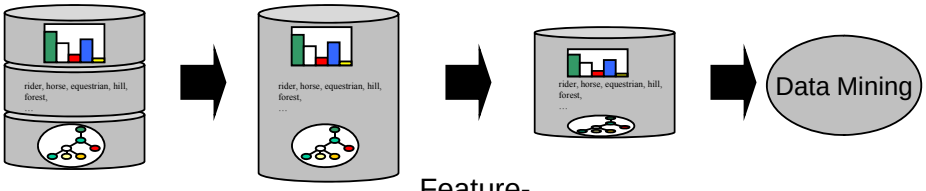
Probleme mehreren Repräsentationen

Grundproblem:

- alle notwendigen Informationen sollen dem Algorithmus zur Verfügung stehen => Verwende alle verfügbaren Informationen
- zu viele unnötige Features können das Ergebnis negativ beeinflussen => Verwende nur notwendige Features

Standard Lösungsansatz:

1. Bilde einen gemeinsamen Feature-Space aus allen Features jeder Repräsentation.
2. Benutze Feature-Reduktion oder Feature-Selektion.
3. Wende Data Mining auf reduzierten Feature-Raum an.

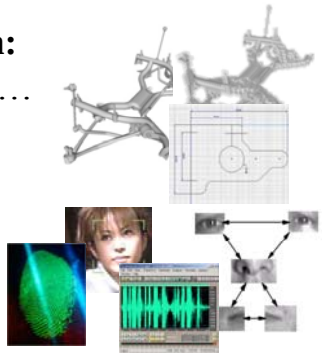


Was sind Multirepräsentierte Objekte ?

Weitere Anwendungen mit multirepräsentierten Daten:

• CAD-Bauteile: Voxel, Polygonzüge, Formhistogramme …

• Biometrische Daten: Sprachmuster, Gesichtszüge, Fingerabdrücke…



Formal:

- Objektrepräsentation $o = (r_1,..,r_n) \in R_1 \times .. \times R_n$, wobei R_i ein Darstellungsraum für die i-te Komponente mit $1 \leq i \leq n$.

- $R_i = O_i \cup \{-\}$, wobei O is a Featureraum und "-" ein Symbol für fehlende Instanzen.

Probleme bei mehreren Repräsentationen

Probleme des Standard-Ansatzes :

- nicht alle Features sind vergleichbar.
  - Worthäufigkeit und Farbhäufigkeit bei Bildern
  - Aminosäurehäufigkeit und Zellmilieu bei Proteinen
- bei Nebeneinanderstellen unterschiedlicher Arten von Features, entsteht Informationsverlust bzgl. Vergleichbarkeit der Features

Lösungsansatz:

⇒ Data Mining Algorithmus erhält Tupel aus Feature-Vektoren oder anderen Objektdarstellungen.

⇒ Relevanz für Problem ist häufig auf Ebene der Repräsentationen zu entscheiden.
Beispiel: Spielen Farben ein Rolle bei Bildähnlichkeit?

⇒ hochdimensionale Daten können besser verarbeitet werden, indem Features nach Bedeutung gruppiert betrachtet werden.
=>Wissen über Zusammengehörigkeit der Features bleibt erhalten.

⇒ Verwendung von Ensemble Techniken

Multirepräsentierte Algorithmen

Möglichkeit zur Kombination mehrerer Repräsentationen:

1. **Kombination auf Feature-Ebene:**
   - unterschiedliche Merkmale werden aus verschiedenen Repräsentationen in einen Feature-Vektor vereint.
   - Feature-Selektion oder Selektion der Repräsentation sollen irrelevante Information ausschließen. Bereits behandelt in Kap.2

2. **Kombination der Distanzen und Ähnlichkeiten**:
   Bestimme Objektähnlichkeit in jeder Repräsentation
   und kombiniere Ähnlichkeitsaussagen.

3. **Kombination auf Muster-Ebene:**
   Bestimme Muster in jeder Repräsentation und kombiniere die Muster zu allgemeinen Mustern.
   Bsp: Kombination der Klassenwahrscheinlichkeiten aus mehreren Repräsentationen.

Basiert auf Kap.5

Kapitelübersicht

6.1 Einleitung
Grundproblematik und Motivation

6.2 Multirepräsentierte Ähnlichkeits- und Distanzfunktionen
Lernen von Kombinationsregeln, Normalisierungen

6.3 Klassifikation mit Multirepräsentierten Objekten
Kombination von Klassifikatoren

6.4 Co-Training
Verwendung mehrerer Repräsentation zum Labeln neuer Trainingsobjekte

6.5 Multirepräsentiertes Clustering
dichtebasiertes Clustering, partitionierendes Clustering

6.2 Multirepräsentierte Ähnlichkeits- und Distanzfunktionen

Integration der verschiedenen Repräsentationen über Kombination von Ähnlichkeitsmaßen oder Distanzen.

Idee: Erhalte die Trennung der einzelnen Repräsentationen bei und kombiniere auf Ebene der Ähnlichkeitsaussagen.

Beispiel: gewichtete Linear-Kombination
$d_i(o_1,o_2)$: lokale Metrik oder lokaler Kernel in R_i.

$$D_{kombi}(o_1,o_2) = \sum_{R_i \in R} w_i \cdot d_i(o_1,o_2)$$

Normalisierung

Der Wertebereich von Distanzen in unterschiedlichen Repräsentationen kann sich stark unterscheiden.
⇒Normalisierung der Ähnlichkeits- und Distanzwerte ist essentiell

Normalisierung mit Erwartungswert: Sei μ_i^{orig} der Erwartungswert aller Distanzen, die in Repräsentation R_i beobachtet wurden.

$$d_i(o,q) = \frac{d_i^{orig}(o,q)}{\mu_i^{orig}}$$

Bereichs-Normalisierung:

$$d_i(o,q) = \frac{d_i^{orig}(o,q) - \min_{r,s \in D}\left\{d_i^{orig}(r,s)\right\}}{\max_{r,s \in D}\left\{d_i^{orig}(r,s)\right\} - \min_{r,s \in D}\left\{d_i^{orig}(r,s)\right\}}$$

Gewichtung der Repräsentationen

- Normalisierung erzeugt Vergleichbarkeit bzgl. der Wertebereiche.
- Semantische Aussage der Repräsentationen ist nicht so einfach bestimmbar. Z.B.: Ist ein sehr ähnliches Farbhistogramm weniger aussagekräftig als eine sehr ähnliche Textbeschreibung?

⇒ Gewichtung der Repräsentationen ist essentiell für Nutzen
Annahme gewichtete Linearkombination: $D_{kombi}(o_1,o_2) = \sum_{R_i \in R} w_i \cdot d_i(o_1,o_2)$

- Auswahl durch Domain-Experten
- Integration in das Optimierungsproblem des Klassifikators (Hyper-Kernels und SVMs)
- explizites Lernen von Gewichten

Lernen von Gewichten

Formuliere Ähnlichkeit als lineares Klassifikationsproblem:

Normalenvektor der trennenden Hyperebene setzt sich aus Gewichten zusammen:

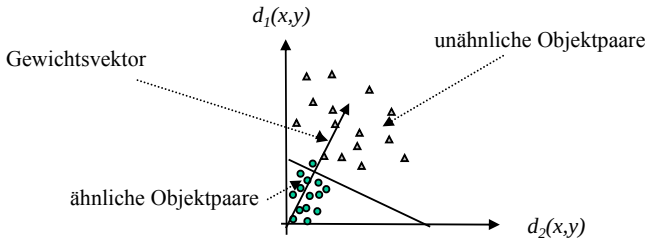
Trainingsobjekte: Paare von ähnlichen und unähnlichen Objekten

Klassen: {„ähnlich“,“unähnlich“}

Feature-Space: Abstandsvektor, $v_i = d_i(x,y)$ für alle Represenation R_i $1 \leq i \leq n$

Vorgehen:

- Bestimme Abstandsvektoren auf DB-Sample
  (Vorsicht: Es gibt quadratisch viele Abstandsvektoren! => Sample)
- Trainiere linearen Klassifikator
- Bestimme Gewichtungsvektor aus Normalenvektor der Trennebene (MMH).



Kombination von Distanzen/Ähnlichkeiten

Bemerkungen:

- Vorsicht: lineare Klassifikatoren garantieren keine positiven Gewichte für alle Repräsentationen!

- Alternativ kann auch der gelernte Klassifikator direkt zur Kombination der Ähnlichkeiten bzw. Distanzen verwendet werden. In diesem Fall ersetzt die Wahrscheinlichkeit für die Klasse „unähnlich“ die Distanz.

- Bei komplexeren Kombinationsregeln müssen die Metrik- bzw. Kernel-Eigenschaften erneut geprüft werden, falls das anschließende Data-Mining-Verfahren diese Eigenschaften benötigt.

Multi-Repräsentierte Ähnlichkeitsschätzer

Bisher:

- Distanzmetrik/Skalarprodukt = (Un-)ähnlichkeitsmaß
- Ähnlichkeit ist linear und kann beliebig groß werden (Kernel) oder Unähnlichkeit ist linear und kann unendlich ansteigen.
- Kombinationen von Gewichtungsfunktionen brauchen Trainingsbeispiele

Aber:

- Ähnlichkeit und Unähnlichkeit sind beschränkt:
  - ab einer gewissen Ähnlichkeit werden Objekte als gleich wahrgenommen
  - man unterscheidet ab einer gewissen Unähnlichkeit nicht weiter
- Trainingsbeispiele, die die Ähnlichkeit 2er Objekte beschreiben sind schwer zu erzeugen. (Selbst Menschen labeln häufig inkonsitent!)
- Ein und derselbe Distanzwert kann bei unterschiedlicher Objektähnlichkeit beobachtet werden.

Multi-Repräsentierte Ähnlichkeitsschätzer

Lösungsansatz:

Beschreibe Ähnlichkeit, als Wahrscheinlichkeit, dass ein Benutzer beide Objekte als ähnlich betrachtet.

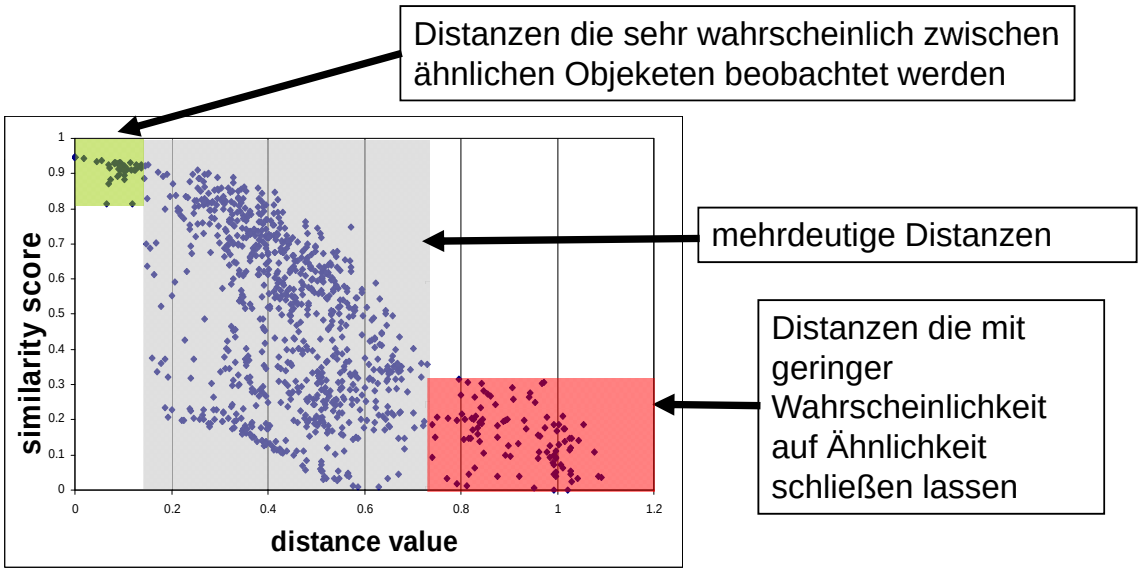
$\Rightarrow$ Abstand in einer Repräsentation wird zu einem Feature das statistisch mit der Ähnlichkeitsaussage korreliert ist.

$\Rightarrow$ Ähnlichkeit wird also als bedingte Wahrscheinlichkeit angesehen.

$\Rightarrow$ Die Unähnlichkeitswahrscheinlichkeit kann dann als Ranking-Kriterium für Ähnlichkeitsanfragen, kNN-Klassifikatoren und distanzbasierte Algorithmen verwendet werden.

Multi-Repräsentierte Ähnlichkeitsschätzer

Beobachtung: Betrachte Distanzen und Ähnlichkeitsaussagen.



$\Rightarrow$ Distanzen sind nur für große und kleine Werte mit Ähnlichkeit korreliert.

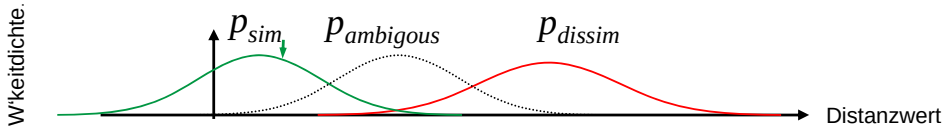
$\Rightarrow$ mittlere Distanzen können alles bedeuten.

Multi-Repräsentierte Ähnlichkeitsschätzer

Idee:

- Modelliere die Unsicherheit der Aussage als Wahrscheinlichkeitsdichte.
- zur Bestimmung der Ähnlichkeit werden zunächst 2 Verteilungen über die Distanzen von ähnlichen und unähnlichen Objekten betrachtet.
- die Verteilung der Unsicherheit kann dann als kombinierte Wahrscheinlichkeit betrachtet werden, dass beide Verteilungen den gleichen Distanzwert liefern.
- Die Unsicherheit in einem Interval von Distanzen wird dann wie folgt berechnet:

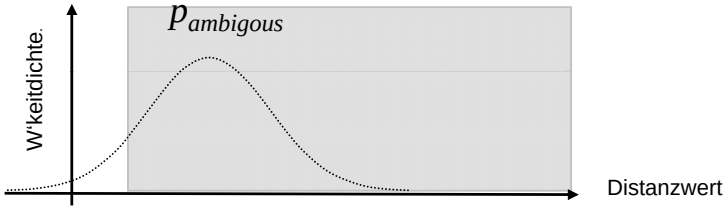
$$P_{ambiguous}(a,b) = \frac{\int_{a}^{b} p_s(x)p_d(x)dx}{\int_{-\infty}^{\infty} p_s(x)p_d(x)dx}$$



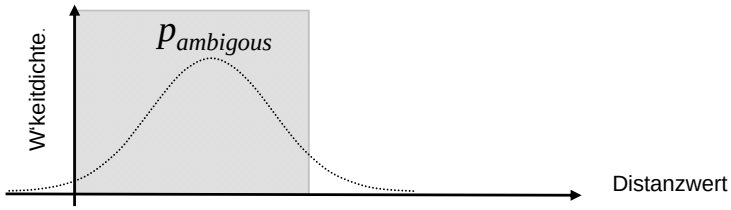
Multi-Repräsentierte Ähnlichkeitsschätzer

Ein Distanz hat eine sichere Aussage, wenn sie nicht zweideutig ist:

- eine sichere Aussage bei der die Distanz kleiner ist als die Mehrzahl der unsicheren Aussagen deutet auf Ähnlichkeit hin.



- eine sichere Aussage bei der die Distanz größer ist als die Mehrzahl der unsicheren Aussagen deutet auf Unähnlichkeit hin.



Multi-Repräsentierte Ähnlichkeitsschätzer

Die Wahrscheinlichkeit, dass 2 Objekte bzgl. einer Repräsentation ähnlich sind kann man also folgendermaßen bestimmen:

$$L^i_{sim}(o_1,o_2) = P^i_{definite}\left(d_i(o_1,o_2) < \delta\right) = P^i_{ambiguous}\left(d_i(o_1,o_2) \geq \delta\right)$$

Kombiniert man diese Wahrscheinlichkeiten für alle Repräsentationen ergibt sich folgendens Ähnlichkeitsmaß:

$$P_{SIM}(o_1,o_2) = \prod_{i=1}^{R} L^i_{sim}(o_1,o_2) \cong \sum_{i=1}^{R} \ln\left(L^i_{sim}(o_1,o_2)\right)$$

Wird eine Distanz benötigt wird das Komplement verwenden:

$$P_{DISSIM}(o_1,o_2) = \prod_{i=1}^{R} L^i_{dissim}(o_1,o_2) \cong \sum_{i=1}^{R} \ln\left(L^i_{dissim}(o_1,o_2)\right)$$

Multi-Repräsentierte Ähnlichkeitsschätzer

Wie bestimmt man die Dichtefunktionen für $p_{sim}(x)$ und $p_{dissim}(x)$?

- benutze ein ausreichendes Sample von Objektpaaren
- Label können als graduelle Ähnlichkeit oder binär vorliegen (Bei Einteilung in Klassen sind alle Objekte einer Klasse ähnlich.)
- bestimme eine Normalverteilung bei der Ähnlichkeits- bzw. Unähnlichkeitswert eines Objektvergleichs das Gewicht in der Berechnung darstellt.

$$\mu_r^{sim} = \frac{\sum_{o_1,o_2 \in S} sim(o_1,o_2) \cdot d_r(o_1,o_2)}{\sum_{o_1,o_2 \in S} sim(o_1,o_2)}$$

$$Var_r^{sim} = \frac{\sum_{o_1,o_2 \in S} sim(o_1,o_2) \cdot \left(d_r(o_1,o_2) - \mu_r^{sim}\right)^2}{\sum_{o_1,o_2 \in S} sim(o_1,o_2)}$$

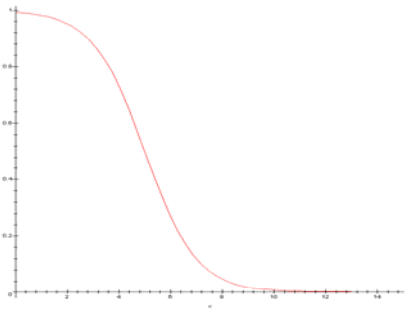
$$\mu_r^{dissim} = \frac{\sum_{o_1,o_2 \in S} dissim(o_1,o_2) \cdot d_r(o_1,o_2)}{\sum_{o_1,o_2 \in S} dissim(o_1,o_2)}$$

$$Var_r^{dissim} = \frac{\sum_{o_1,o_2 \in S} dissim(o_1,o_2) \cdot \left(d_r(o_1,o_2) - \mu_r^{dissim}\right)^2}{\sum_{o_1,o_2 \in S} dissim(o_1,o_2)}$$

Multi-Repräsentierte Ähnlichkeitsschätzer

- Nach der Bestimmung der Verteilung muss noch das Integral über den Dichtefunktionen berechnet werden.
- Da die Stammfunktion der Normalverteilung unbekannt ist, muß die kumulierte Dichtefunktion approximiert werden.
- Dies kann mit Hilfe einer Sigmoidfunktion erreicht werden:
  - a: regelt Verschiebung
  - b: regelt Steigung

$$sigmoid_{a,b}(x) = \frac{1}{1 + e^{a+b \cdot x}}$$



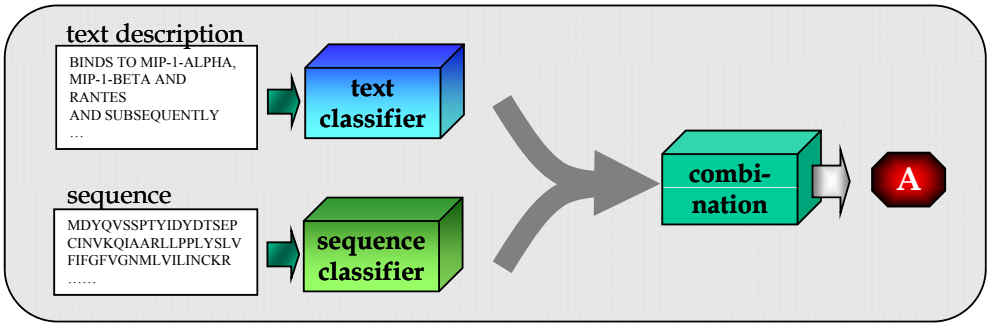
- Anpassen des Sigmoiden über numerische Methoden (Regression)

6.3 Multirepräsentierte Klassifikation

Eingabe : $o \in R_1 \times .. \times R_n$,
wobei R_i der Darstellungsraum für die i-te Repräsentation ist.

Kombination mehrerer Klassifikatoren (Classifier Combination):

1. Trainiere Klassifikator für jede Repräsentation getrennt.
2. Klassifiziere neues Objekte mit jedem Klassifikator
3. Kombiniere die Resultate der Klassifikatoren zur einer globalen Klassenvorhersage.



Kombination der Klassifikatoren

Der Nutzen der Multirepräsentierten Klassifikation hängt von 2 Faktoren ab:

1. Unterscheidet sich die Vorhersage der einzelnen Klassifikatoren hinreichend genug, um genug potentiellen Nutzen zuzulassen.
   => Wie kann man entscheiden, ob Repräsentationen widersprüchliche Aussagen erzeugen ?

2. In Falle widersprüchlicher Vorhersagen, sollte die Aussage gewählt werden die richtig ist.
   => Wie kann man die Konfidenz der Aussagen bestimmen ?

Zusammenhang mit Ensemble Methoden

Klassifier Combination ist sehr verwandt zu Ensemble Methoden:

- Ensemble Methoden kombinieren generell mehrere Klassifikatoren, die aber normalerweise auf dem gleichen Featureraum trainiert werden
  => Ergebnisse aller Klassifikatoren vergleichbar
  => Komplexität von Training und vorhersage ist ebenfalls vergleichbarer
  => Aussage einzelner Klassifikatoren apriori vergleichbar

- Multirepräsentierte Klassifikation: Modelle auf unterschiedlichen Domänen
  => Vorteil:
  - Modelle basieren idR. auf grundlegend unterschiedlichen Domänen und sind daher eher unabhängig.

  => Nachteile:
  - Vergleichbarkeit der Ergebnisse muss erst hergestellt werden
  - Vorhersagequalität ist meist heterogener
    (z.B. Texte sagen mehr aus als Farbverteilungen)

Kombination mehrerer Klassifikatoren

Wie kombiniert man Klassenvorhersagen so, dass die richtige Vorhersage bevorzugt wird?

1. Jeder Klassifikator gibt für jede Klasse *A* und ein Objekt *x* eine Vorhersagewahrscheinlichkeit c_A zurück.
   Für Konfidenzvektor $c^r(x)$ gilt: $\sum_{A \in C} c_A^r(x) = 1$

2. Klassifikation durch Kombintion der Konfidenzevektoren $c^r(x)$:

$$pred(X) = \underset{A \in C}{\mathbf{argmax}} \left(\Theta_{r \in R} \left(c_A^r \right) \right) \text{ mit } \Theta \in \left\{ \min, \max, \sum, \prod \right\}$$

Kombination mehrerer Klassifikatoren

Beispiel:

Gegeben: 2 Repräsentation für Bildobjekte: Farbhistogramme(R1) und Texturvektoren(R2).

Klassen = {„enthält Wasseroberfläche“=A, „keine Wasseroberfläche“=B}

Bayes Klassifikatoren K1 (für R1) und K2 (für R2)

Kombination mit Summe.

Klassifikation von Bild b:

K1(b)=c1 =(0.45, 0.55); K2(b) = c2 = (0.6, 0.4)

Kombination mit Durchschnitt (Summe):

c_{global} = (1.05, 0.95) * ½ = (0.525 , 0.475) und argmax(c_{global}) = A

Kombination mit Produkt:

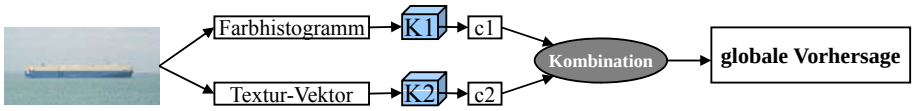
c_{global} = (0.27, 0.22) und argmax(c_{global}) = A

Kombination mit Maximum:

c_{global} = (0.6, 0.55) und argmax(c_{global}) = A

Kombination mit Mininum:

c_{global} = (0.45, 0.4) und argmax(c_{global}) = A



Kombination mehrerer Klassifikatoren

Probleme:

- Performanz der kombinierten Klassenvorhersage ist stark von der Aussagekraft des Konfidenzvektor abhängig.

  Ist die Konfidenz der Aussage nicht stark mit der Richtigkeit korreliert, wir häufig die falsche Aussage bevorzugt.

- Bestimmte Klassifikatoren erzeugen keinen Konfidenzvektor sondern nur eine Klassenvorhersage.

  => Verfahren zum Abschätzen der Klassenkonfidenz für allgemeine Klassifikatoren

⇒ Ableitung von zuverlässigen Konfidenzwerten für unterschiedliche Arten von Klassifikatoren.

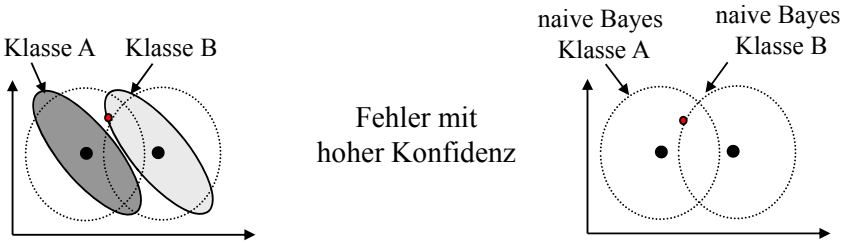
Ableiten von Konfidenzvektoren

Bayes Klassifikatoren

Bayes-Klassifikatoren berechnen ohnehin eine Wahrscheinlichkeit pro Klasse.

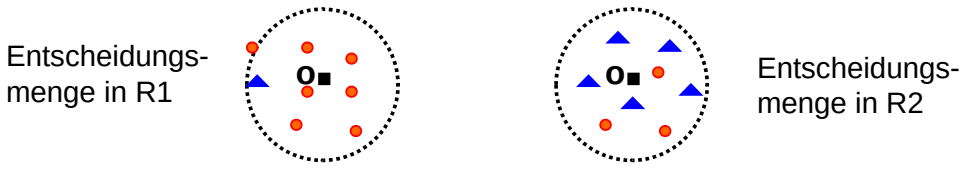
Vorsicht: Konfidenzwerte häufig unzuverlässig, weil sie ausdrücken inwieweit ein Objekt zum gelernten Prozess passt.

Aber: Wenn Daten schlecht durch zugrunde liegenden statistischen Prozess beschrieben werden, entstehen leicht falsche Klassifikationsergebnisse mit hoher Konfidenz.



Multirepräsentierte *k*NN-Klassifikation

Idee: Um die Konfidenz für einen kNN-Klassifikator zu bestimmen betrachte die Eindeutigkeit (≡Entropie) in der Entscheidungsmenge (kNN-Sphäre).



Intuition: In R_1 scheint der Bereich um das Objekt eindeutig zu Klasse ● zu gehören. In R_2 ist der Bereich um das Objekt durch beide Klassen ▲ und ● gegeben.

=> Vorhersage in R_1 scheint zuverlässiger zu sein als die in R_2

Multirepräsentierte *k*NN-Klassifikation

[Kriegel, Pryakhin, Schubert 2005]

Klassifikator K:O $\rightarrow$ C bildet $o \in O$ auf eine Klasse c $\in$ C
O besteht aus den Repräsentationen $R_1 \times \ldots \times R_n$

Klassifikation des Objekts $o = (r_1,\ldots,r_n)$:
Bestimmme Entscheidungsmenge $sphere_i(o,k)$ in jeder Repräsentation R_i,
wobei $r_i \neq$ "-" (= die Repräsentation ist vorhanden)

$$sphere_i(o,k) = \{o_1,\ldots,o_k \mid o_1,\ldots,o_k \in DB_i \wedge \neg\exists o' \in DB_i \setminus \{o_1,\ldots,o_k\}$$
$$\wedge \neg\exists \lambda, 1 \leq \lambda \leq k : dist_i(o', r_i) \leq dist_i(o_\lambda, r_i)\}$$

Bestimme Konfidenzvektor $cv_i(o)$ auf folgende Art und Weise:

$$I \quad d_i^{norm}(o,u) = \frac{dist_i(o,u)}{\max_{v \in sphere_i(o,k)} dist_i(o,v)}$$

$$II \quad \hat{c}(o)_{i,j} = \sum_{u \in sphere_i(o,k) \wedge c(u)=c_j} \frac{1}{d_i^{norm}(o,u)^2}$$

$$III \quad \forall j, 1 \leq j \leq |C| : cv_{i,j}(o) = \frac{\hat{c}(o)_{i,j}}{\sum_{k=1}^{|C|} \hat{c}(o)_{i,k}}$$

$$IV \quad cv_i(o) = (cv_{i,1}(o),\ldots,cv_{i,|C|}(o))$$

Multirepräsentierte *k*NN-Klassifikation

Kombination der cv_i in jeder Repräsentation mit Gewichten:

$$Cl_{mr}(o) = \max_{j=1,\ldots,|C|} \sum_{i=1}^{m} w_i \cdot cv_{i,j}(o)$$

Gewicht $w_{o,i}$ der Objekts o in Repräsentation i :

$$w_{o,i} = \begin{cases} 0 & \text{, falls } r_i = \text{„-“} \\ \dfrac{1 + \sum_{j=1}^{|C|} (cv_{i,j}(o) * \log_{|C|} cv_{i,j}(o)}{\sum_{k=1}^{m} (1 + \sum_{j=1}^{|C|} (cv_{k,j}(o) * \log_{|C|} cv_{k,j}(o)))} & \text{, sonst} \end{cases}$$

Idee: Je „reiner“ die Nachbarschaft eines Objekts o *ist*,
desto zuverlässiger ist die Aussage des kNN Klassifikators in Rep. R_i.

6.4 Co-Training

Multiple Repräsentationen können auch dazu verwendet werden eine Trainingsmenge zu erweitern.

Gegeben: 2 Repräsentationen für die sowohl gelabelte als auch nicht gelabelte Objekte vorhanden sind.

Idee:

Benutze Klassifikator um neue Trainingsobjekte aus ungelabelten Datenobjekten zu erzeugen.

Aber: Wiso braucht man dazu mehrere Repräsentationen ?

Generieren von Trainingsobjekte mit nur 1 Repräsentation

Versuch:

- Trainiere Klassifikator ***CL*** auf allen gelabelten Objekten
- klassifiziere k ungelabete Objekte und füge sie in die Trainingsmenge ein.
- Trainiere nächsten Klassifikator auf der neuen Trainingsmenge

Problem:

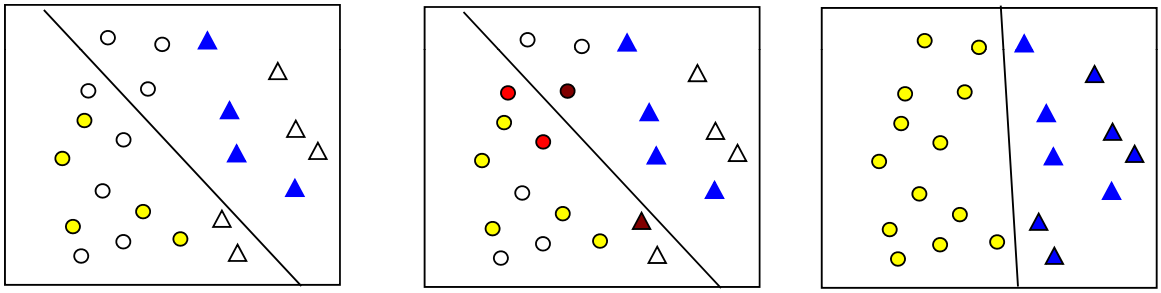
- neue Daten werden mit dem Modell von ***CL*** gelabelt
- damit neue Trainingsobjekte CL verändern können, müssten sie aber Widersprüche zum bisherigen Modell enthalten

=> Generieren von Trainingsobjekten mit einer Repräsentation verstärkt nur die Schwächen des Klassifikators

Generieren von Trainingsobjekte mit nur 1 Repräsentation

Beispiel:

- blau = gelabelte Objekte Dreieck-Klasse
- gelb = gelabelte Objekte Kreis Klasse
- rot = relabelte Objekte mit CL_1



Training auf originalen Daten | Training mit relabelten Daten | optimale Lösung

Fazit:

- Die roten Objekte bestätigen nur die Annahmen des Klassifikators, können diese aber nicht verbessern.
- Zur Verbesserung wären von CL unabhängig Informationen notwendig.

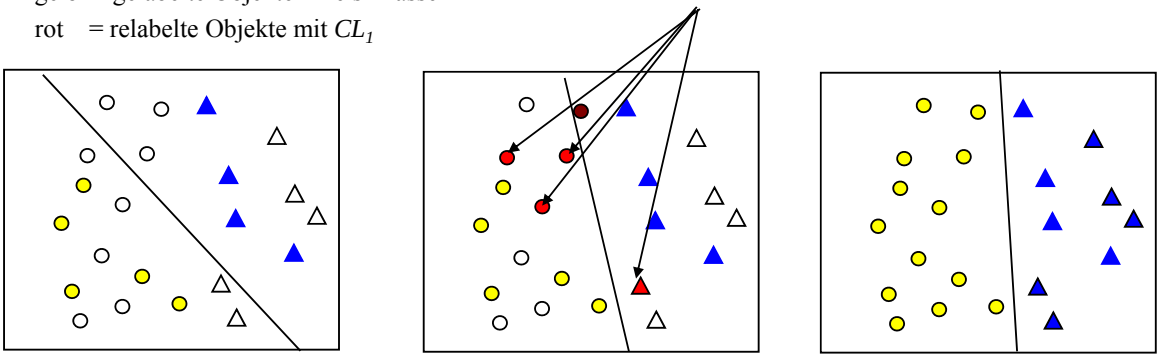
Co-Training

Idee: Klassifikatoren aus anderen Repräsentationen labeln Objekte, mit für diese Repräsentation neuen Informationen.

Beispiel:

- blau = gelabelte Objekte Dreieck-Klasse
- gelb = gelabelte Objekte Kreis Klasse
- rot = relabelte Objekte mit CL_1

Objekte die durch Cl_2 in R_2 gelabelt wurden



originaler Klassifikator | Klassifikator nach unabhängigen Relabeling | optimale Lösung

=> Durch neue unabhängig gelabelte Objekte kann sich ein Klassifikator verbessern.

Der Co-Training Algorithmus

Gegeben: 2 Mengen aus multirepräsentierten Objekten

TR = gelabelte Trainingsmenge, *U* = Menge ungelabelter Objekte.

Co-Training Algorithmus

For *k* times do

For each R_i Do

Trainiere CL_i für Repräsentation *i*.

Ziehe Sample aus *U*.

generiere neue Label mit CL_i.

füge neu gelabelte Objekte zu *TR* hinzu

Bemerkungen zum Co-Training

Ansatz ist von 2 Aspekten abhängig:

1. Jeder beteiligte Basisklassifikator muss für sich selbst ausreichend genau sein:

   Bei schlechter Vorhersagequalität einzelner Klassifikatoren sind neue Label nicht zuverlässig genug.

2. Basisklassifikatoren müssen hinreichend unabhängig voneinander sein.
   Sind sich die Klassifikatoren einig entsteht kein Nutzenpotential .

6.5 Clustering Multirepräsentierter Objekte

Anforderungen an Clustering-Algorithmen für Multirepräsentierte Objekte:

- Integration aller Informationsquellen.
- Eigenschaften in unterschiedlichen Repräsentationen müssen unterschiedlich behandelt werden.
- spezialisierte Techniken für unterschiedliche Arten von Repräsentationen sollten verwendet werden.
  (Zugriffsmethoden, Indexstrukturen, Distanzmaße …).
- Der Aufwand sollte möglichst nur linear mit jeder Repräsentation ansteigen.

Vereinigungs-Methode

Idee: Ein Objekt ist in einem dichten Bereich, wenn k Nachbarn in allen Repräsentationen in der ε-Umgebung liegen.

Geeignet für : "sparse" Daten mit viel Rauschen.

Vereinigungs-Kernobjekt:
Sei $\varepsilon_1, \varepsilon_2, .., \varepsilon_m \in \Re^+$, $MinPts \in N$, $o \in O$ ist ein **Vereinigungs-Kernobjekt**, falls

$$\left| \bigcup_{R_i(o) \in o} N_{\varepsilon_i}^{R_i}(o) \right| \geq MinPts$$

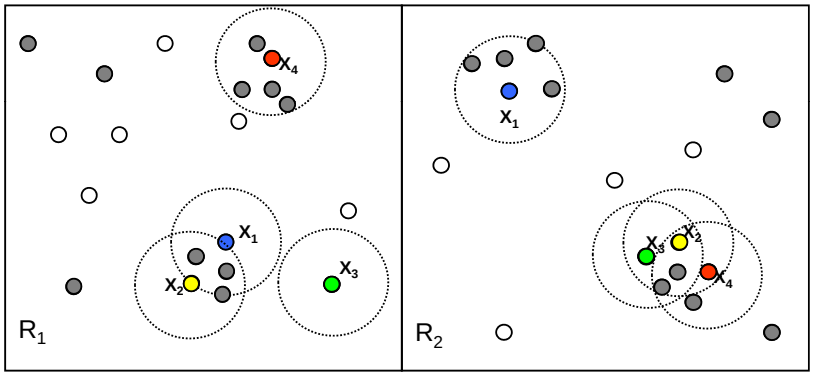
, wobei $N_{\varepsilon_i}^{R_i}(o)$ die lokale ε-Nachbarschaft in Repr. i ist.

Direkte Vereinigungserreichbarkeit:
Objekt $p \in O$ ist **direkt vereinigungserreichbar** von $q \in O$ bzgl. $\varepsilon_1, \varepsilon_2, .., \varepsilon_m$ und $MinPts$, falls q ein Vereinigungs-Kernobjekt in O ist und es gilt:

$$\exists\ i \in \{1, \ldots, m\} : R_i(p) \in N_{\varepsilon_i}^{R_i}(q)$$

Vereiniguns-Methode

Clusterexpansion bei der Vereinigungsmethode



MinPts = 3

Schnitt-Methode

Idee: Ein Objekt ist in einem dichten Bereich, falls es *k* Objekte in den ε-Nachbarschaften aller Repräsentationen gibt.

Geeignet für: dichte Repräsentationen and unzuverlässige lokale Feature-Vektoren.

Schnitt-Kernobjekt:
Sei $\varepsilon_1, \varepsilon_2, .., \varepsilon_m \in \Re^+$, $MinPts \in N$. o ∈ O ist ein **Schnitt-Kernobjekt**, falls

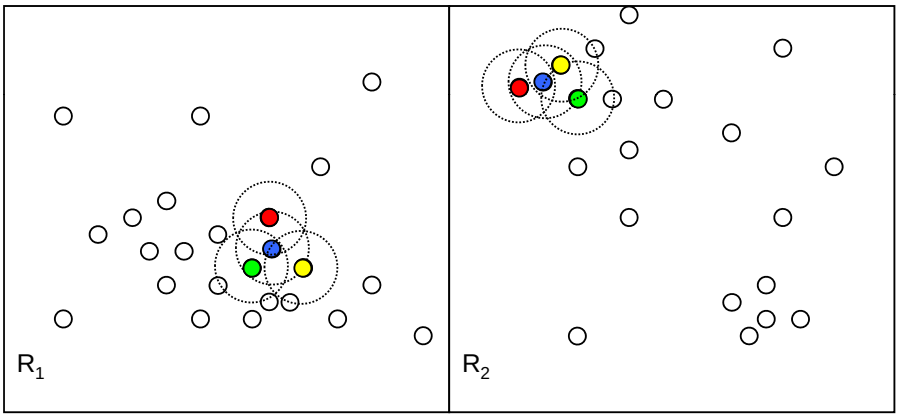
$\left| \bigcap_{R_i(o) \in o} N_{\varepsilon_i}^{R_i}(o) \right| \geq MinPts$, wobei $N_{\varepsilon_i}^{R_i}(o)$ die lokale ε-Nachbarschaft in Repr. i ist.

Direkt schnitterreichbar:
Objekt $p \in O$ ist **direkt schnitterreichbar** von $q \in O$ bzgl.
$\varepsilon_1, \varepsilon_2, .., \varepsilon_m$ und *MinPts*, falls q ein Schnitt-Kernobjekt in O ist und es gilt:

$$\forall \quad i \in \{1, \ldots, m\} : R_i(p) \in N_{\varepsilon_i}^{R_i}(q)$$

Schnitt-Methode

Clusterexpansion mit Schnitt-Methode



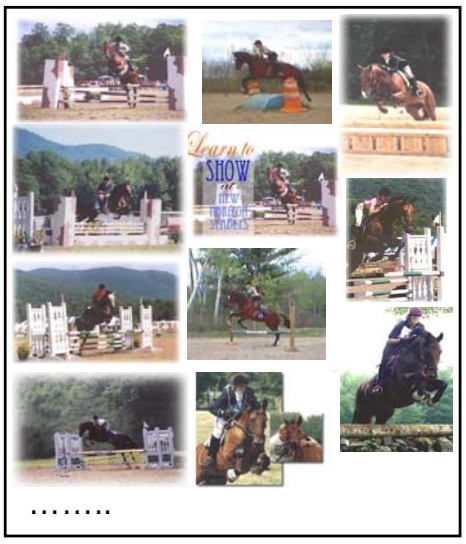
MinPts = 3

Beispiel-Ergebnisse auf Bilddaten

Cluster in den einzelnen Repr.

Beispiele für Bilder im Cluster IC 5
(nur Farbhistogramme)

Beispiele für Bilder im Cluster IC 5
(nur Segmentbäume)

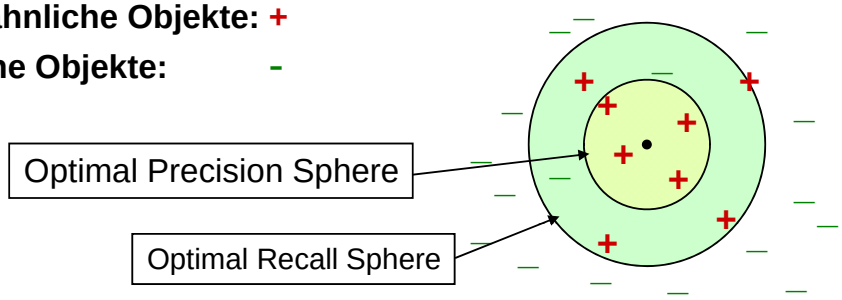


Cluster IC5 der auf beiden Repräsentationen
mit der Intersectionmethode gebildet wurde.

Bedeutung der Repräsentationen

wirklich ähnliche Objekte: +

unähnliche Objekte: -



Möglichen Interpretationen der ε-Nachbarschaft:

hohe Precision- und Recall-Werte
=>1 Rep. lässt gutes Clustering zu

niedrige Precision- und Recall-Werte
=> alle Rep. lassen kein gutes Clustering zu

hohe Precision- aber niedrige Recall-Werte
$\Rightarrow$ benutze Vereinigungs-Methode

niedrige Precision- aber hohe Recall-Werte
$\Rightarrow$ verwende Schnitt-Methode

Multirepräsentiertes Partitionierendes Clustering

[Bickel,Scheffer 2004]

Auch partitionierende Clustering-Verfahren wie, k-Means, k-medoid oder EM, können auf multiple Repräsentationen angepasst werden.

Grundannahme: Cluster entstehen durch einen statistischen Prozeß je Repräsentation.

- $\Rightarrow$ jedes Objekt gehört zu genau einem Cluster in jeder Repräsentation
- $\Rightarrow$ multirepräsentierte Cluster bestehen 1 Cluster in jeder Repräsentation der exakt die gleichen Objekte enthält.

Idee: Korrektes Clustering in einer Repräsentation impliziert ein korrektes multirepräsentiertes Clustering.

Aber: Partitionieredes Clustering Algorithmen terminieren in lokalen Minima

=> benutze mehrere Repräsentation, um nicht in lokalen Minima zu terminieren

Multirepräsentiertes Partitionierendes Clustering

Zur Anwendung von partitionierenden Clustering Algorithmen wird eine Zielfunktion und ein Modellbildungsschritt benötigt:

- Zielfunktion: $$MRTD^2 = \sum_{R_i \in R} \sum_{C_{ik} \in C_i} \sum_{x \in C_{ik}} d(x, c_{ik})^2$$

  $R=\{R1,..Rn\}$ Repräsentationen,

  C_{ik}: k-ter Cluster in R_i, c_{ik}: Centroid des k-ten Cluster in R_i.

- Modelbildung: Gruppierung der Objekte bzgl. R_j

  Berechnung neuer Centroide c_{ik} in R_i bzgl. Aufteilung aus R_j

- Consensus-Clustering bei Nicht-Terminieren:

  MR-partitionierendes Clustering garantiert kein globales Maximum

  => Algorithmus kann $MRTD^2$ nicht mehr verbessern und es gibt kein einheitliches Clustering

  => Bilde globales Cluster-Modell aus allen Punkten, die in allen Repräsentationen richtig eingeordnet wurden.

$$c_k = \frac{\sum_{x \in \bigcap_{R_j \in R} C_{jk}} x}{\left| \bigcap_{R_j \in R} C_{jk} \right|}$$

Multirepräsentiertes k-Means

Gegeben: Suche k Cluster in DB aus multirep. Objekten aus n Repräsentation R_i.

Algorithmus: *MR-k-Means*

aktR:=1

$MRTD^2_{old} = \infty$

Initialisiere Clustering in R_{aktR}

Berechne Objektaufteilung pro Cluster

Bestimme $MRTD^2_{neu}$

Wiederhole bis $(MRTD^2_{old} - MRTD^2_{neu}) \leq \varepsilon$

  oldR:=aktR

  aktR:=(aktR+1)MOD n

  Bestimme Centroide in R_{aktR} mit der Aufteilung aus R_{oldR};

  $MRTD^2_{old}$:=$MRTD^2_{neu;}$

  uosdate($MRTD^2_{neu}$)

Ende der Wiederholung

Berechne Consenses Clustering

Multirepräsentiertes Partitionierendes Clustering

Bemerkungen:

- Ansatz ist auch auf EM und k-Medoid Verfahren anwendbar.
- Algorithmus terminiert nicht zwangsläufig
- Verbesserung der lokalen Clusterings durch Verwendung der anderen Repräsentationen.
- Ansatz nimmt keine Wertung der Repräsentationen vor.
  => alle Repräsentationen beeinflussen das Ergebnis gleich stark.

Literatur

- Kriegel H.-P., Kunath P., Pryakhin A., Schubert M.: ***MUSE: Mulit-Represented Similarity Estimates***, in proc. 24th International Conference on Data Engineering **(ICDE 2008)**, Cancún, México, 2008
- Aßfalg J., Kriegel H.-P., Pryakhin A., Schubert M.: ***Multi-Represented Classification based on Confidence Estimation***
  in proc. 11th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining **(PAKDD 2007)**, Nanjing, China
- Achtert E., Kriegel H.-P, Pryakhin A., Schubert M.:
  Clustering Multi-Represented Objects Using Combination Trees
  in proc. 10th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining **(PAKDD 2006)**, Singapore
- Kriegel H.-P., Pryakhin A., Schubert M,:
  Multi-represented kNN-Classification for Large Class Sets
  10th International Conference on Database Systems for Advanced Applications **(DASFAA 2005)**, Beijing, China.
- Kailing K., Kriegel H.-P.,Pryakhin A., Schubert M.:
  Clustering Multi-Represented Objects with Noise
  Proc. 8th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining **(PAKDD'04)**, Sydney, Australia, 2004.
- Bickel S. ,Scheffer T.: ***Multi-View Clustering***, 4h IEEE International Conference on Data Mining **(ICDM 2004)**.
- Blum. A, Mitchell T.: ***Combining Labeled and Unlabeled Data with Co-Training***, Workshop on Computational Learning Theory (COLT 98)