Skript zur Vorlesung

Knowledge Discovery in Databases

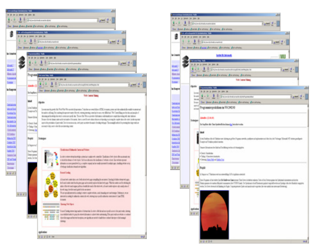
im Wintersemester 2007/2008

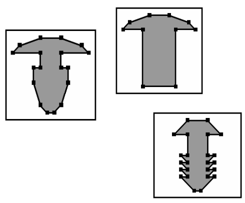
Kapitel 2: Merkmalsräume

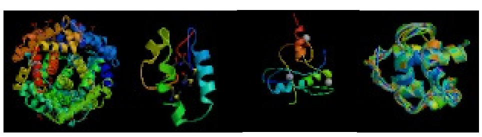
http://www.dbs.ifi.lmu.de/Lehre/KDD

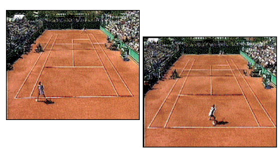
Merkmalsräume

- 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.







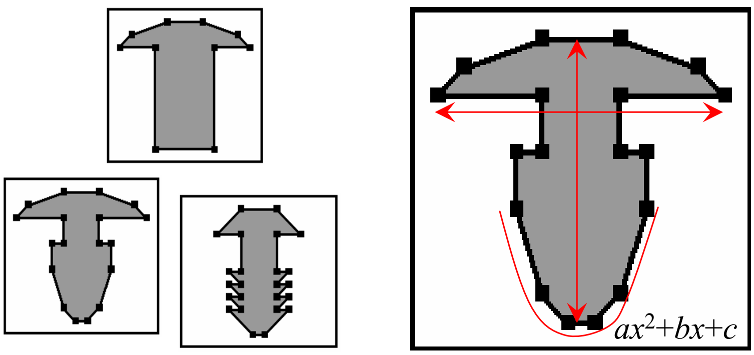


Merkmale

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:



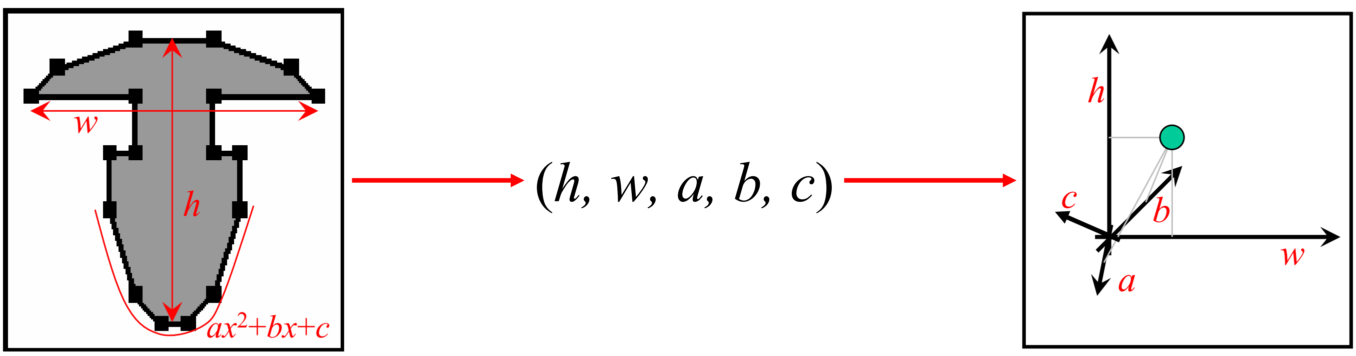
Mögliche Merkmale:

Merkmale

Beispiel: CAD-Zeichnungen (cont.)

Objekt-Raum

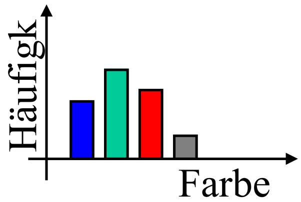
Merkmals-Raum



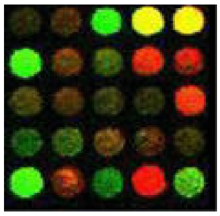
- Im Kontext von statistischen Betrachtungen werden die Merkmale häufig auch als *Variablen* bezeichnet
- Die ausgewählten Merkmale werden zu Merkmals-Vektoren (*Feature Vector*) zusammengefasst
- Der Merkmalsraum ist häufig hochdimensional (im Beispiel 5-dim.)

Merkmale

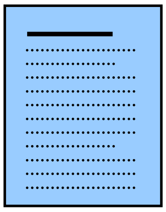
Bilddatenbanken:
Farbhistogramme



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

Merkmale

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.

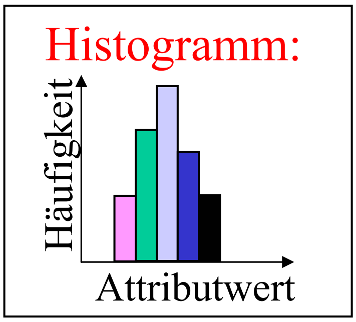
Beispiele:

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

DATABASE SYSTEMS GROUP

Univariate Deskription von Merkmalen

LMU



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: $$VAR(X) = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{x})^2$$
- Standardabweichung: $$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{x})^2}$$

DATABASE SYSTEMS GROUP

Multivariate Deskription von Merkmalen

LMU

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)

DATABASE SYSTEMS GROUP

Multivariate Deskription von Merkmalen

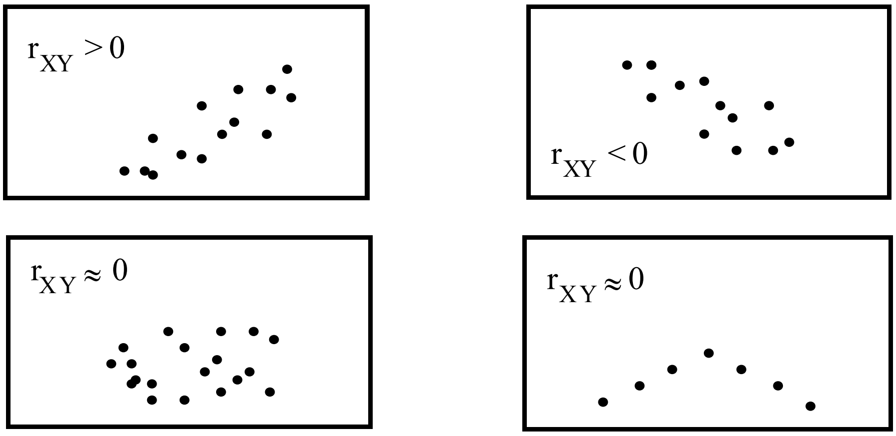
LMU

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



DATABASE SYSTEMS GROUP

Räume und Distanzfunktionen

LMU

Merkmalsraum (Featureraum)

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

  Reflexivität
  - $\forall p,q \in Dom : dist(p,q) = dist(q,p)$ Symmetrie

DATABASE SYSTEMS GROUP

Räume und Distanzfunktionen

LMU

- 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“

DATABASE SYSTEMS GROUP

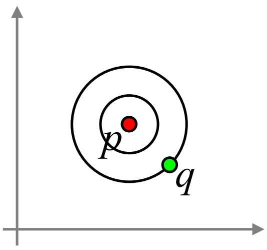
Räume und Distanzfunktionen

LMU

- Ähnlichkeit von Feature Vektoren (Euklidische Vektoren)

Euklidische Norm (L_2):

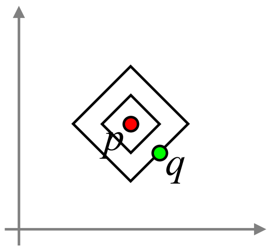
$dist_1 = ((p_1-q_1)^2+(p_2-q_2)^2+\ldots)^{1/2}$



Natürlichstes Distanzmaß

Manhattan-Norm (L_1):

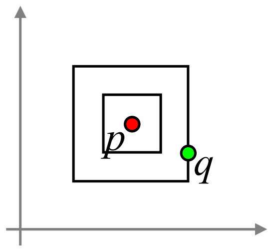
$dist_2 = |p_1-q_1|+|p_2-q_2|+\ldots$



Die Unähnlichkeiten der einzelnen Merkmale werden direkt addiert

Maximums-Norm (L_∞):

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



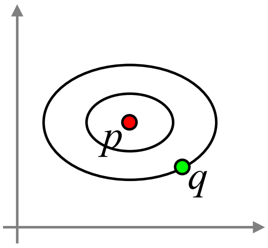
Die Unähnlichkeit des am wenigsten ähnlichen Merkmals zählt

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

Räume und Distanzfunktionen

Gewichtete Euklidische Norm:

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



Häufig sind die Wertebereiche der Merkmale deutlich unterschiedlich.

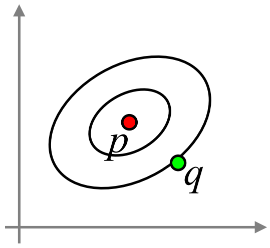
Beispiel: Merkmal $M_1 \in [0.01 .. 0.05]$

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

Räume und Distanzfunktionen

Spezifiziere Anfrage-Objekt $q \in DB$ und…

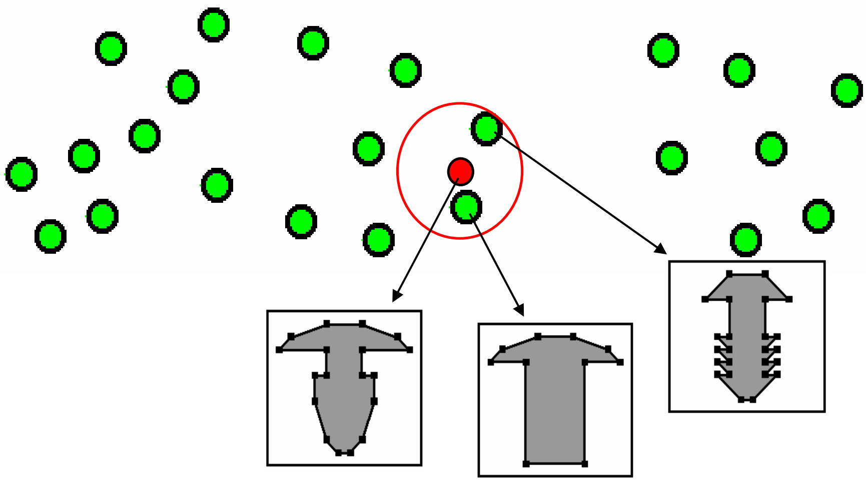
- … suche ähnliche Objekte – Range-Query (Radius ε)

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

- … suche die k ähnlichsten Objekte – Nearest Neighbor

  $\mathrm{NN}(q,k) \subseteq DB$ mit mind. k Objekten, sodass

  $\forall o \in \mathrm{NN}(q,k),\ p \in DB\text{-}\mathrm{NN}(q,k) : dist(q,o) < dist(q,p)$



Räume und Distanzfunktionen

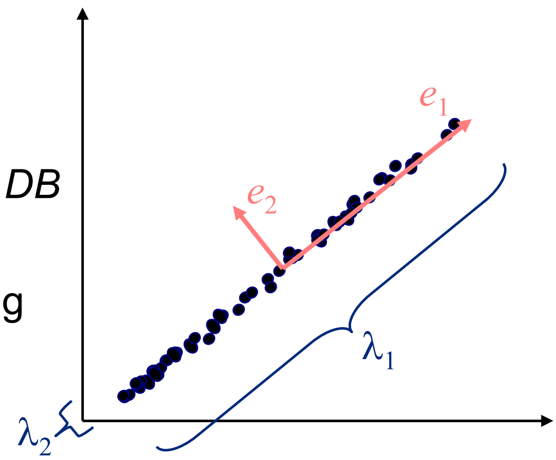
Deskription von Featurevektoren

- 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

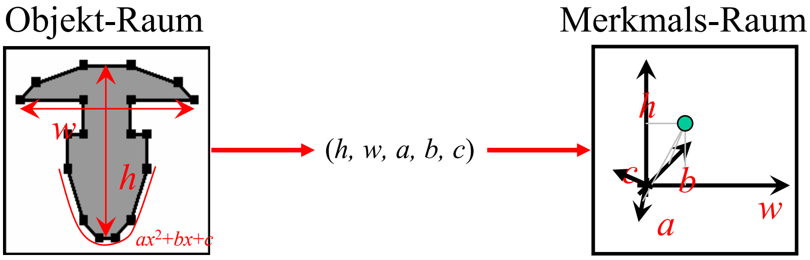
Hauptachsenanalyse eine Menge *DB* von *Euklidischen Vektoren*

- Kovarianz-Matrix: $\Sigma_{DB} = \frac{1}{|DB|} \sum_{o \in D} (o - \mu_{DB})(o - \mu_{DB})^{\mathrm{T}}$
- Die Matrix wird zerlegt in
    - eine Orthonormalmatrix V = [$e_1,\ldots,e_d$] (Eigenvektoren)
    - und eine Diagonalmatrix Λ = diag ($\lambda_1,\ldots,\lambda_d$) (Eigenwerte)
    - so dass gilt: Σ_{DB} = V Λ V^{T}
- Interpretation:
    - Eigenvektoren: Hauptausrichtung der Datenpunkte in *DB*
    - Eigenwerte: Varianz der Datenpunkte in *DB* entlang der entspr. Eigenvektoren

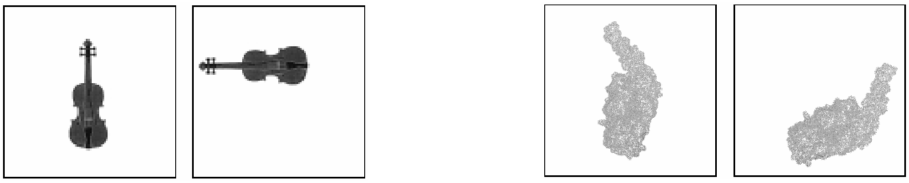


Feature-Transformationen für räumliche Objekte

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:



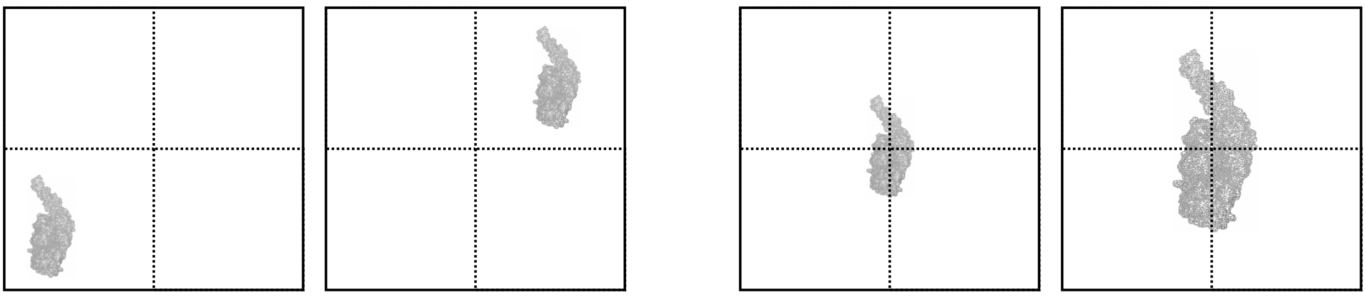
  - Erwünscht:
    - Kanonische Darstellung, d.h. ohne Lage- und Orientierungsinformation
    - Verallgemeinerung auf andere Objekteigenschaften

Feature-Transformationen für räumliche Objekte

Die wichtigsten Invarianzen

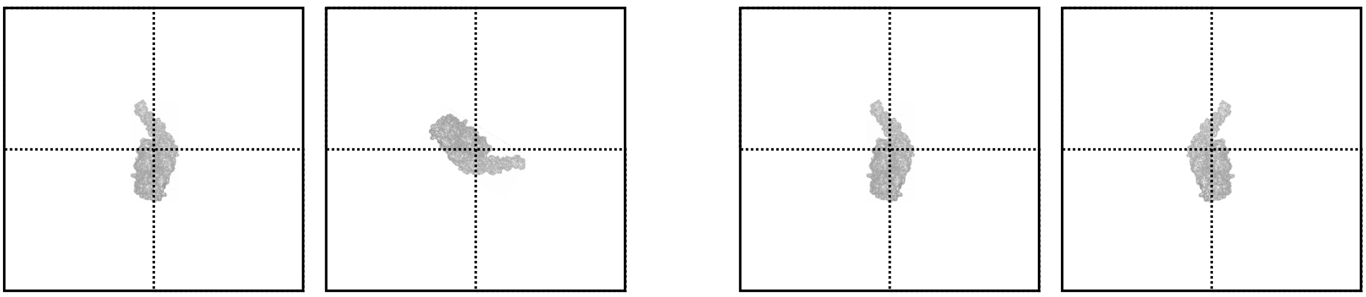
Translation

Skalierung



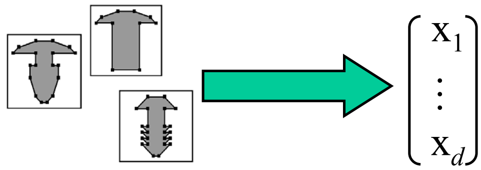
Rotation

Spiegelung

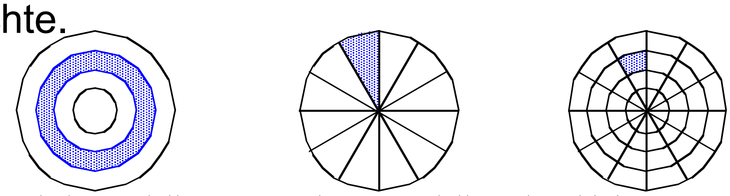


Feature-Transformationen für räumliche Objekte

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

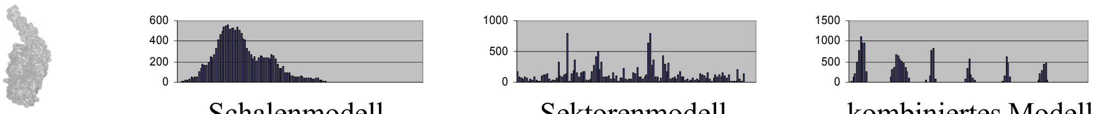


- Applikationen: CAD, Protein 3D-Strukturen
- Idee: *Formhistogramme* für 3D Objekte
  - Partitioniere den 3D-Raum in Zellen (Histogramm-Bins).
  - Bestimme den Anteil an Punkten des Objektes pro Zelle (normiertes Histogramm).
  - Durch die Normierung werden die Histogramme unabhängig von der Punktedichte.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



Schalenmodell Sektorenmodell kombiniertes Modell

- Beispiel



Seryl-tRNA Synthetase

Schalenmodell (120 Schalen)

Sektorenmodell (122 Sektoren)

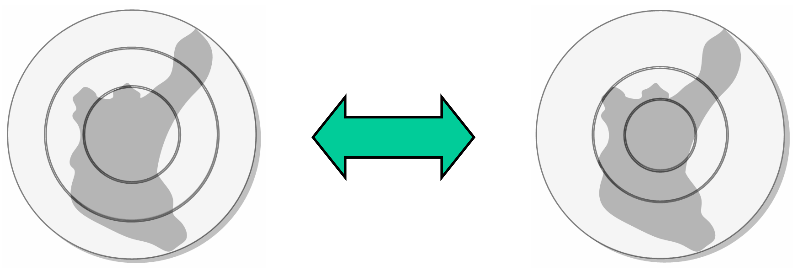
kombiniertes Modell (20 Schalen, 6 Sektoren)

Feature-Transformationen für räumliche Objekte

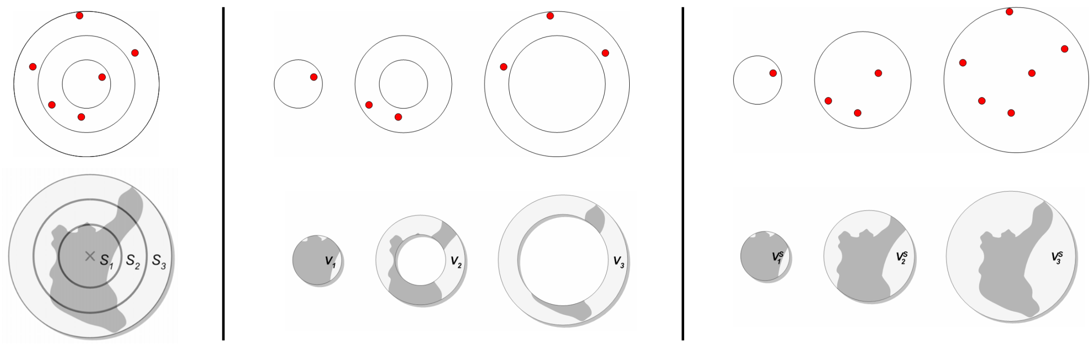
- Formale Definition der Histogramme
  - *Schalenmodell*: Definiere die Bins über den Abstand zum Mittelpunkt, d.h. Anzahl der Punkte auf der jeweiligen Schale.
  - *Sektorenmodell*: Anzahl der Punkte im jeweiligen Sektor.
  - *Kombiniertes Modell*: Synthese aus Schalen- und Sektorenmodell.
- Invarianzen
  - 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.

Feature-Transformationen für räumliche Objekte

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



  - Redundante Zuordnung zu den Bins

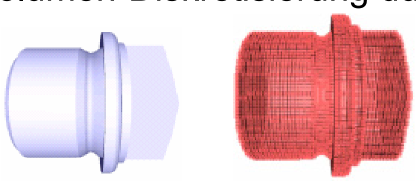


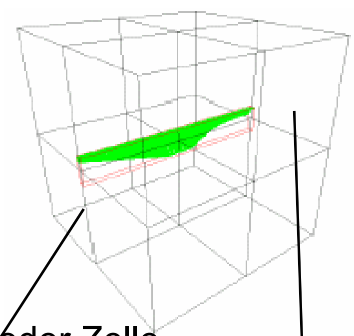
Objekt — Bisheriger Ansatz — Redundante Zuordnung

Feature-Transformationen für räumliche Objekte

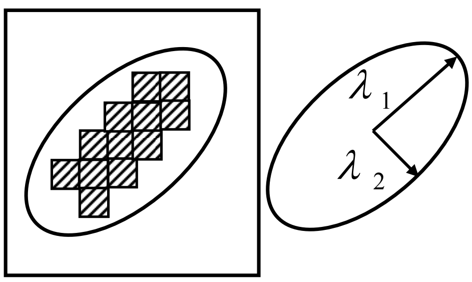
Eigenvalue Model [Kriegel, Kröger, Mashael, Pfeifle, Pötke , Seidl 03]

- Volumen-Diskretisierung durch Voxel (3dimensionale Pixel)





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

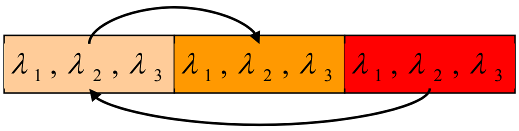


$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$	…………	$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$

Feature-Transformationen für räumliche Objekte

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.