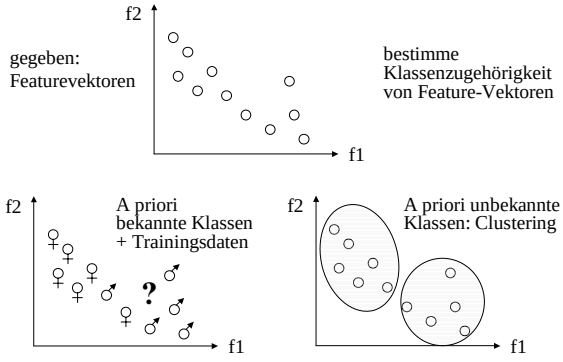
9 Automatische Klassifikation

Ziel:
Organisation von Dokumenten in (hierarchischen) Ontologien mit möglichst geringem intellektuellem Aufwand

9.1 Klassifikationsverfahren mit Training
9.2 Clustering: Klassifikation ohne Training
9.3 Hypertext-Klassifikation
9.4 Hierarchische Klassifikation

Klassifikationsproblem (Kategorisierung)



Anwendung von Klassifikationsverfahren im IR

- *Filtern:* teste eintreffende Dokumente (z.B. Mail, News), ob sie in eine interessante Klasse fallen
- *Übersicht:* organisiere Query-/Crawler-Resultate, Verzeichnisse, Feeds, etc.
- *Query-Expansion:* ordne Query einer Klasse zu und ergänze dementsprechende Suchterme
- *Relevanz-Feedback:* klassifiziere Treffer und lasse Benutzer relevante Klassen identifizieren, um bessere Query zu generieren
- *Query-Effizienz:* beschränke (Index-)Suche auf relevante Klasse(n)

Klassifikationsvarianten:
- mit Termen, Termhäufigkeiten, Linkstruktur als Features
- binär: Gehört ein Dokument zu einer Klasse c oder nicht?
- mehrstellig: In welche von k Klassen passt ein Dokument am besten?
- hierarchisch: Iteration der Klassifikation über ontologischen Baum

Bewertung der Klassifikationsgüte

empirisch durch automatische Klassifikation von Dokumenten, die nicht zu den Trainingsdaten gehören

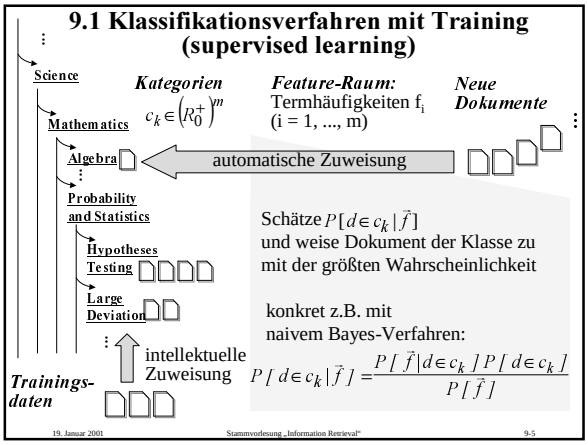
Für binäre Klassifikation bzgl. Klasse C:
a = #Dok., die zu C klassifiziert wurden und zu C gehören
b = #Dok., die zu C klassifiziert wurden, aber nicht zu C gehören
c = #Dok., die nicht zu C klassifiziert wurden, aber zu C gehören
d = #Dok., die nicht zu C klassifiziert wurden und nicht zu C gehören

Genauigkeit (acccuracy) = $\frac{a+d}{a+b+c+d}$

Präzision (precision) = $\frac{a}{a+b}$ Ausbeute (recall) = $\frac{a}{a+c}$

Für mehrstellige Klassifikation bzgl. Klassen C1, ..., Ck:
- Makrodurchschnitt über k Klassen oder
- Mikrodurchschnitt über k Klassen

9.1 Klassifikationsverfahren mit Training (supervised learning)



Schätze $P[d \in c_k \mid \vec{f}]$
und weise Dokument der Klasse zu mit der größten Wahrscheinlichkeit

konkret z.B. mit naivem Bayes-Verfahren:

$$P[d \in c_k \mid \vec{f}] = \frac{P[\vec{f} \mid d \in c_k]\, P[d \in c_k]}{P[\vec{f}]}$$

k-Nearest-Neighbor-Verfahren (kNN)

Schritt 1:
Finde unter den Trainingsdokumenten aller Klassen die k (z.B. 10-100) bzgl. der (Cosinus-) Ähnlichkeit nächsten Nachbarn eines neuen Dokuments $\vec{d}$

Schritt 2:
Ordne $\vec{d}$ derjenigen Klasse Cj zu, für die die Funktion

$$f(\vec{d}, C_j) = \sum_{\vec{v} \in kNN(\vec{d})} sim(\vec{d}, \vec{v}) * \begin{cases} 1 & falls\ \vec{v} \in C_j \\ 0 & sonst \end{cases}$$

maximal wird

Bei binärer Klassifikation ordne $\vec{d}$ der Klasse C zu, falls $f(\vec{d}, C)$ über einem Schwellwert δ (δ >0.5) liegt.

Klassifikationsverfahren von Rocchio

Schritt 1:
Repräsentiere die Trainingsdokumente einer Klasse Cj
- mit tf*idf-Vektorkomponenten – durch den **Prototypvektor**:

$$\vec{c}_j := \alpha \frac{1}{|C_j|} \sum_{\vec{d} \in C_j} \frac{\vec{d}}{\|\vec{d}\|} - \beta \frac{1}{|D - C_j|} \sum_{\vec{d} \in D - C_j} \frac{\vec{d}}{\|\vec{d}\|}$$

mit geeigneten Koeffizienten α und β (z.B. α=16, β=4)

Schritt 2:
Ordne ein neues Dokument $\vec{d}$ derjenigen Klasse Cj zu, für die Cosinus-Ähnlichkeit $cos(\vec{c}_j, \vec{d})$ maximal ist.

Satz:
Für α=β=1 maximiert $\vec{c}_j$ die Funktion:

$$f(\vec{c}_j) = \alpha \frac{1}{|C_j|} \sum_{\vec{d} \in C_j} cos(\vec{c}_j, \vec{d}) - \frac{1}{|D - C_j|} \sum_{\vec{d} \in D - C_j} cos(\vec{c}_j, \vec{d})$$

Naives Bayes-Verfahren mit binären Features Xi

Schätze: $P[\, d \in c_k \,|\, d \text{ hat } \vec{X}\,] = \frac{P[\, d \text{ hat } \vec{X} \,|\, d \in c_k\,]\, P[\, d \in c_k\,]}{P[\, d \text{ hat } \vec{X}\,]}$

$$\sim P[\, X \,|\, d \in c_k\,]\, P[\, d \in c_k\,]$$

$$= \Pi_{i=1}^{m} P[\, X_i \,|\, d \in c_k\,]\, P[\, d \in c_k\,]$$

bei Featureunabhängigkeit bzw. Linked Dependence:

$$\frac{P[\, X \,|\, d \in c_k\,]}{P[\, X \,|\, d \notin c_k\,]} = \Pi_i \frac{P[\, X_i \,|\, d \in c_k\,]}{P[\, X_i \,|\, d \notin c_k\,]}$$

$$= \Pi_{i=1}^{m} p_{ik}^{Xi} (1 - p_{ik})^{1 - Xi}\, p_k$$

mit empirisch zu schätzenden $p_{ik}=P[X_i=1|c_k]$, $p_k=P[c_k]$

$$\Rightarrow \log P[c_k \mid d] \sim \sum_{i=1}^{m} X_i \log \frac{p_{ik}}{(1 - p_{ik})} + \sum_{i=1}^{m} \log(1 - p_{ik}) + \log p_k$$

für binäre Klassifikation mit Quote statt P[...] weitere Vereinfachung

Naives Bayes-Verfahren mit Bag-of-Words-Modell

Schätze: $P[\, d \in c_k \,|\, d \text{ hat } \vec{f}\,] \sim P[\, \vec{f} \,|\, d \in c_k\,]\, P[\, d \in c_k\,]$

mit Termhäufigkeitsvektor $\vec{f}$

$$= \Pi_{i=1}^{m} P[\, f_i \,|\, d \in c_k\,]\, P[\, d \in c_k\,]$$ bei Featureunabhängigkeit

$$= \Pi_{i=1}^{m} \binom{length(d)}{f_i} p_{ik}^{f_i} (1 - p_{ik})^{length(d) - f_i}\, p_k$$

mit Binomialverteilung für jedes Feature

bzw. besser:

$$= \binom{length(d)}{f_1 f_2 \ldots f_m} p_{1k}^{f_1}\, p_{2k}^{f_2} \ldots p_{mk}^{f_m}\, p_k$$

mit Multinomialverteilung der Featurevektoren und $\sum_{i=1}^{m} f_i = length(d)$

mit $\binom{n}{k_1 k_2 \ldots k_m} := \frac{n!}{k_1! k_2! \ldots k_m!}$

Beispiel für das naive Bayes-Verfahren (1)

3 Klassen: c1 – Algebra, c2 – Analysis, c3 – Stochastik
8 Terme, 6 Trainingsdokumente d1, ..., d6: je 2 in jeder Klasse
⇒ p1=2/6, p2=2/6, p3=2/6

	Gruppe	Homomorphismus	Vektor	Integral	Limes	Varianz	Wahrscheinlichkeit	Würfel
	f1	f2	f3	f4	f5	f6	f7	f8
d1:	3	2	0	0	0	0	0	1
d2:	1	2	3	0	0	0	0	0
d3:	0	0	0	3	3	0	0	0
d4:	0	0	1	2	2	0	1	0
d5:	0	0	0	1	1	2	2	0
d6:	1	0	1	0	0	0	2	2

	Algebra	Analysis	Stochastik
	k=1	k=2	k=3
p1k	4/12	0	1/12
p2k	4/12	0	0
p3k	3/12	1/12	1/12
p4k	0	5/12	1/12
p5k	0	5/12	1/12
p6k	0	0	2/12
p7k	0	1/12	4/12
p8k	1/12	0	2/12

Beispiel für das naive Bayes-Verfahren (2)

Klassifikation von d7: (0 0 1 2 0 0 3 0)

$$P[\, \vec{f} \,|\, d \in c_k\,]\, P[\, d \in c_k\,] = \binom{length(d)}{f_1 f_2 \ldots f_m} p_{1k}^{f_1}\, p_{2k}^{f_2} \ldots p_{mk}^{f_m}\, p_k$$

für k=1 (Algebra): $= \binom{6}{1\ 2\ 3} \left(\frac{3}{12}\right)^1 0^2\, 0^3\, \frac{2}{6} = 0$

für k=2 (Analysis): $= \binom{6}{1\ 2\ 3} \left(\frac{1}{12}\right)^1 \left(\frac{5}{12}\right)^2 \left(\frac{1}{12}\right)^3 \frac{2}{6} = 20 * \frac{25}{12^6}$

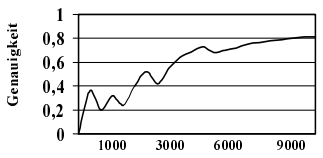
für k=3 (Stochastik): $= \binom{6}{1\ 2\ 3} \left(\frac{1}{12}\right)^1 \left(\frac{1}{12}\right)^2 \left(\frac{4}{12}\right)^3 \frac{2}{6} = 20 * \frac{64}{12^6}$

Resultat: Ordne d7 der Klasse C3 (Stochastik) zu

Typisches Verhalten des naiven Bayes-Verfahrens

Reuters Benchmark (siehe trec.nist.gov):
12902 kurze Artikel (Wirtschaftsnachrichten)
aus 90 Kategorien (acq, corn, earn, grain, interest, money-fx, ship, ...)

- Verwende die (bzw. einen Teil der) ältesten 9603 Artikel zum Trainieren des Klassifikators
- Verwende die neuesten 3299 Artikel zur Evaluation der Klassifikationsgenauigkeit



Typisches Verhalten

max. Genauigkeit liegt je nach Kategorie zwischen 50 und 90 Prozent

Verbesserung des naiven Bayes-Verfahrens

1) geglättete Schätzung der pik (Laplace smoothing):

$\sum_{d \in C_k} length(d)$ statt 0 für in den Trainingsdokumenten einer Klasse überhaupt nicht auftretende Features

2) Anreicherung des Trainingsmaterials durch unbenannte, automatisch klassifizierte Dokumente zur besseren Schätzung der pik

mit unterschiedlicher Gewichtung der intellektuell und der automatisch klassifizierten „Trainingsdokumente“

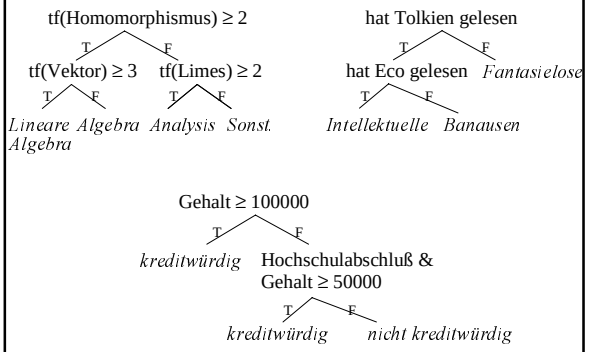
3) Berücksichtigung von Abhängigkeiten zwischen Features durch Verallgemeinerung auf Bayessche Netze

Entscheidungsbäume

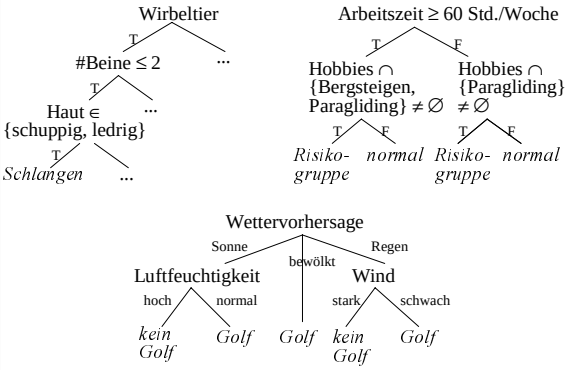
gegeben: eine Anzahl m-dimensionaler Trainingsdatensätze
$\subseteq dom(A1) \times ... \times dom(Am)$ mit
numerischen, ordinalen oder kategorialen Attributen Ai
(z.B. Termhäufigkeitsvektoren $\subseteq N_0 \times ... \times N_0$)

gesucht: ein Baum mit
- Attributwertebedingungen der Form
  - Ai ≤ Wert für numerische und ordinale Attribute
    oder
  - Ai ∈ Wertemenge bzw. Ai ∩Wertemenge = ∅
    für kategoriale Attribute
    oder
  - Linearkombinationen der Form $\sum k_i A_i \leq Wert$
    über mehrere numerische Attribute
  als inneren Knoten und
- benannten Klassen als Blättern

Beispiele für Entscheidungsbäume (1)



Beispiele für Entscheidungsbäume (2)



Top-Down-Aufbau eines Entscheidungsbaums

Input: Entscheidungsbaumknoten k, der eine
Partition D von $dom(A1) \times ... \times dom(Am)$ beschreibt
Output: Entscheidungsbaum mit k als Wurzel

1) BuildTree (root, $dom(A1) \times ... \times dom(Am)$)
2) PruneTree: Stutze Baum auf günstigste Größe

mit:
procedure BuildTree (k, D):
Falls k nur Trainingsdaten derselben Klasse enthält, terminiere
Bestimme Splitdimension Ai
Bestimme Splitwert x, um D möglichst günstig in
$D1 = D \cap \{d \mid d.Ai \leq x\}$ und $D2 = D \cap \{d \mid d.Ai > x\}$ aufzuteilen
Erzeuge Kinder k1 und k2 von k
BuildTree (k1, D1); BuildTree (k2, D2)

Splitkriterium Informationsgewinn

Ziel ist es, so zu splitten, daß bzgl. der Klassen der Trainingsdaten möglichst reine Partitionen entstehen, daß also die Unreinheit (impurity) der Partitionierung minimiert wird.

Eine Art, Reinheit zu definieren, ist durch den mittels **Entropie** definierten (statistischen) **Informationsgewinn** (information gain):

G (k, k1, k2) = H(k) – (p1*H(k1) + p2*H(k2))

Dabei sind:

n_k: Anzahl der Trainingsdatensätze in k

$n_{k,j}$: Anzahl der Trainingsdatensätze in k, die zur Klasse j gehören

$p1 = n_{k1} / n_k$ und $p2 = n_{k2} / n_k$

$$H(k) = -\sum_j \frac{n_{k,j}}{n_k} log_2 \frac{n_{k,j}}{n_k}$$

Alternative Splitkriterien

1) Split, so daß Entropie von k1 und k2 minimiert wird:

p1*H(k1) + p2*H(k2)

2) Split, so daß GI(k1)+GI(k2) minimiert wird mit dem „Gini-Index“:

$$GI(k) = 1 - \sum_j \left(\frac{n_{k,j}}{n_k} \right)^2$$

3) Verzweigungen nach Attributen mit vielen Werten werden vom Kriterium des Informationsgewinns bevorzugt
Abhilfe:
Splitkriterium Informationsgewinnverhältnis (gain ratio)

$$G(k,k1,k2) / H(k)$$

Kriterien für das Stutzen des Baums

Problem: Zu vollständige Entscheidungsbäume tendieren zum **„Overfitting“** – Verzweigungen trotz wenig aussagekräftiger („verrauschter“) Daten:
Minimierung des Klassifikationsfehlers auf Trainingsdaten, aber Verschlechterung gegenüber kleinerem Baum auf Testdaten

Lösung: Entferne Blätter, bis nur noch aussagekräftige Knoten übrig sind, z.B. nach dem Prinzip der
Minimum Description Length (MDL):
beschreibe die Klassenzugehörigkeit aller Trainingsdaten mit minimaler Länge (in Bits)
- K Bits pro Knoten des Baums (Attribut, Attributwert, Zeiger)
- n_k*H(k) Bits für die explizite Klassenzuordnung aller n_k Datensätze eines Blattknotens k mit

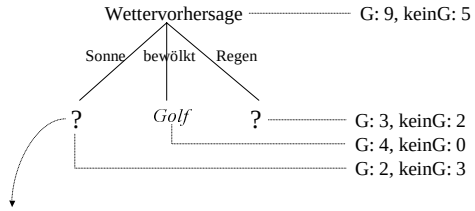
$$H(k) = -\sum_j \frac{n_{k,j}}{n_k} log_2 \frac{n_{k,j}}{n_k}$$

Beispiel für Entscheidungsbaumverfahren (1)

Trainingsdaten:

	Wetter-vorhersage	Temperatur	Luft-feuchtigkeit	Wind	Golf
1)	Sonne	heiß	hoch	schwach	nein
2)	Sonne	heiß	hoch	stark	nein
3)	bewölkt	heiß	hoch	schwach	ja
4)	Regen	mild	hoch	schwach	ja
5)	Regen	kalt	normal	schwach	ja
6)	Regen	kalt	normal	stark	nein
7)	bewölkt	kalt	normal	stark	ja
8)	Sonne	mild	hoch	schwach	nein
9)	Sonne	kalt	normal	schwach	ja
10)	Regen	mild	normal	schwach	ja
11)	Sonne	mild	normal	stark	ja
12)	bewölkt	mild	hoch	stark	ja
13)	bewölkt	heiß	normal	schwach	ja
14)	Regen	mild	hoch	stark	nein

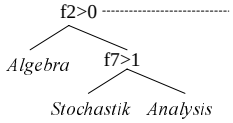
Beispiel für Entscheidungsbaumverfahren (2)



Datensätze: 1, 2, 8, 9, 11
Entropie H(k): $2/5*\log_2 5/2 + 3/5*\log_2 5/3 \approx 2/5*1.32 + 3/5*0.73 \approx 0.970$
Wahl des Splitattributs:
G(Luftfeuchtigkeit): 0.970 – 3/5*0 – 2/5*0 = 0.970
G(Temperatur): 0.970 – 2/5*0 – 2/5*1 – 1/5*0 = 0.570
G(Wind): 0.970 – 2/5*1 –3/5*0.918 = 0.019

Beispiel für Entscheidungsbaumverfahren zur Textklassifikation

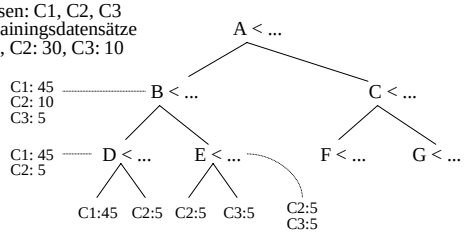
		Gruppe	Homom.	Vektor	Integral	Limes	Varianz	Wahrsch.	Würfel
		f1	f2	f3	f4	f5	f6	f7	f8
C1: Algebra	d1:	3	2	0	0	0	0	0	1
	d2:	1	2	3	0	0	0	0	0
C2: Analysis	d3:	0	0	0	3	3	0	0	0
	d4:	0	0	1	2	2	0	1	0
C3: Stochastik	d5:	0	0	0	1	1	2	2	0
	d6:	1	0	1	0	0	0	2	2



G = H(k) – (2/6*H(k1) + 4/6*H(k2))
H(k) = 1/3 log 3 + 1/3 log 3 + 1/3 log 3
H(k1) = 1 log 1 + 0 + 0
H(k2) = 0 + 1/2 log 2 + 1/2 log 2
G = log 3 – 0 – 2/3*1 ≈ 1,6 – 0,66 = 0,94

Beispiel für das Stutzen eines Entscheidungsbaums

3 Klassen: C1, C2, C3
100 Trainingsdatensätze
C1: 60, C2: 30, C3: 10



Annahme: Codierungskosten eines Baumknotens K=30 Bits
Codierung D-Teilbaum: $47*(0.9 \log_2 10/9 + 0.1 \log_2 10) \approx$
$47*(0.9*0.15 + 0.1*3.3)$ $47*0.465 < 30$
Codierung E-Teilbaum: $10*(0.5*\log_2 2 + 0.5*\log_2 2) = 10 < 30$
Codierung B-Teilbaum: $60*(9/12*\log_2 12/9 + 1/6*\log_2 6 + 1/12*\log_2 12) \approx$
$60*(0.75*0.4 + 0.166*2.6 + 0.083*3.6) > 30$

Probleme von Entscheidungsbaumverfahren für die Klassifikation von Textdokumenten

- Der Trainingsaufwand ist sehr hoch.
- Bei hochdimensionalen, dünnbesetzten Featurevektoren führen Trainingsdaten leicht zu „Overfitting“.

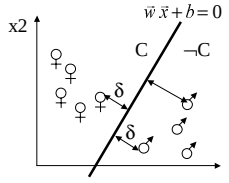
Entropiemaximierungsverfahren (Maximum Entropy Classifier)

Idee zur Schätzung von $P[d \in c_k \; und \; d \; hat \; \vec{f}]$:
Bestimme die Parameter einer parametrisierten W.verteilung, die
- bzgl. der Erwartungswerte Eik für alle Features fi und Klassen Ck mit den empirischen Mittelwerten Mik (aufgrund von n Trainingsvektoren) übereinstimmen und
- maximale Entropie haben (d.h. Gleichverteilung postulieren, wenn die Trainingsdaten nichts Anderes aussagen)

→ Verteilung hat die loglineare Form $P[C_k, \vec{f}] = \frac{1}{Z} \Pi_i \alpha_i^{f_{ik}}$ mit einer Normalisierungskonstanten Z

Berechnung der Parameter αi durch Iterationsverfahren (generalized iterative scaling),
das unter bestimmten Voraussetzungen garantiert konvergiert

Stützvektorverfahren zur binären Klassifikation (Support Vector Machine = SVM)



n Trainingsvektoren (x1, ..., xm, C) mit C = +1 oder -1

Bestimme Hyperebene $\vec{w}\,\vec{x}+b=0$, die Trainingsvektoren aus C von denen, die nicht aus C sind, optimal separiert, so daß der (Euklidische) Mindestabstand δ zu allen Trainingsvektoren maximiert wird. (Vektoren mit Abstand δ heißen Stützvektoren.)

Klassifiziere neuen Vektor $\vec{y}$ in C durch Test: $(\vec{w}\,\vec{y}+b) = \sum_{i=1}^{m} w_i y_i + b > 0$

Berechnung der optimalen Hyperebene

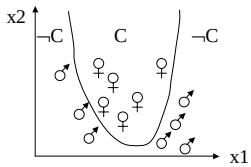
Finde $\vec{w} \in R^m$ und b ∈ R, so daß
1. $\delta \in R$ maximal ist und
2. $C_i \frac{1}{\|\vec{w}\|}(\vec{w}\vec{x}_i + b) \geq \delta$ für alle i=1, ..., n

Dies ist (o.B.d.A. mit der Wahl von $\|\vec{w}\|=1/\delta$) äquivalent zu (V. Vapnik: Statistical Learning Theory, 1998):

Finde $\alpha_1, \ldots, \alpha_n \in R_0^+$, so daß
1. $-\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} C_i C_j \alpha_i \alpha_j (\vec{x}_i \vec{x}_j)$ minimal ist (Problem der quadratischen Programmierung)
2. und $\sum_{i=1}^{n} C_i \alpha_i = 0$

Optimaler Gewichtsvektor $\vec{w}$ ist Linearkombination $\vec{w} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i C_i \vec{x}_i$
(wobei nur für Stützvektoren $\alpha_i > 0$)
b ergibt sich aus beliebigem Stützvektor $\vec{x}_j$ durch: $b = C_j - \vec{w}\,\vec{x}_j$

Erweiterte SVMs zur nichtlinearen Klassifikation



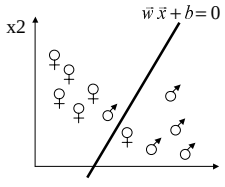
Transformiere Vektoren $\vec{x} \in R^m$ auf $\Phi(\vec{x}) \in R^{m'}$ mit m‘ > m
z.B.: $\Phi((x_1, x_2)) = (ax_1^2, bx_2^2, cx_1x_2, dx_1, ex_2, f)$
C und ¬C sind dann u.U. im m‘-dimensionalen Raum linear separabel

Für bestimmte Φ mit einer Kernfunktion $K(\vec{x}_i, \vec{x}_j) := \Phi(\vec{x}_i)\Phi(\vec{x}_j)$ bleiben Trainings- und Klassifikationsphase effizient,
z.B. für die Polynom-Familie $K(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = (\vec{x}_i \vec{x}_j + 1)^d$

→ Klassifikationstest für neuen Vektor $\vec{y}$: $b + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i C_i K(\vec{x}_i, \vec{y}) > 0$

Erweiterte SVMs mit “weicher” Trennung

Falls Trainingsdaten nicht vollständig separabel,
erlaube „Ausreißer“ auf der falschen Seite der Hyperebene



Finde $\vec{w} \in R^m$ und b ∈ R, so daß
1. $\|\vec{w}\| + \lambda \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i$ minimal ist und
2. $C_i \frac{1}{\|\vec{w}\|}(\vec{w}\vec{x}_i + b) \geq 1 - \varepsilon_i$
für alle i=1, ..., n

mit Kontrollparameter λ zum Abwägen zwischen
Separationsweite $\delta = 1/\|\vec{w}\|$
und Fehlersumme $\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i$

9.2 Clustering: Klassifikation ohne Training (unsupervised classification)

gegeben:

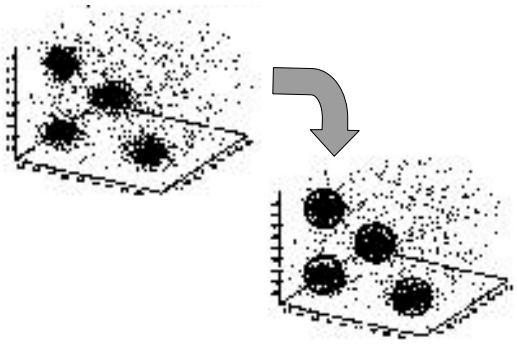
n m-dimensionale Datensätze dj ∈ D ⊆dom(A1) × ... × dom(Am) mit Attributen Ai (z.B. Termhäufigkeitsvektoren ⊆ $N_0 \times ... \times N_0$)

gesucht:

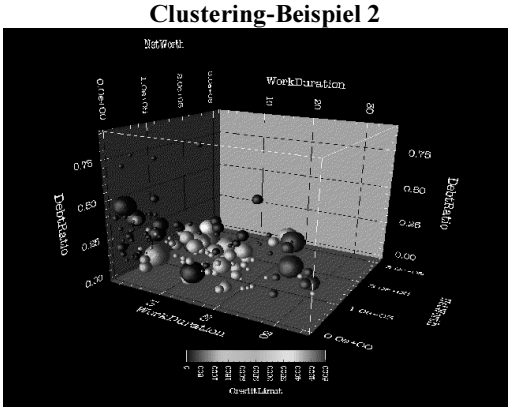
k **Cluster** c1, ..., ck und eine Zuordnung D → {c1, ..., ck}, so daß die mittlere **Intra-Cluster-Ähnlichkeit** $\frac{1}{k}\sum_k \left(\frac{1}{|c_k|} \sum_{\vec{d} \in c_k} sim(\vec{d}, \vec{c}_k) \right)$ möglichst groß und die mittlere **Inter-Cluster-Ähnlichkeit** $\frac{1}{k(k-1)} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} sim(\vec{c}_i, \vec{c}_j)$ möglichst klein wird mit dem **Zentroid** („Gravitationszentrum") $\vec{c}_k$ von ck:

$$\vec{c}_k = \frac{1}{|c_k|} \sum_{\vec{d} \in c_k} \vec{d}$$

Clustering-Beispiel 1



Clustering-Beispiel 2

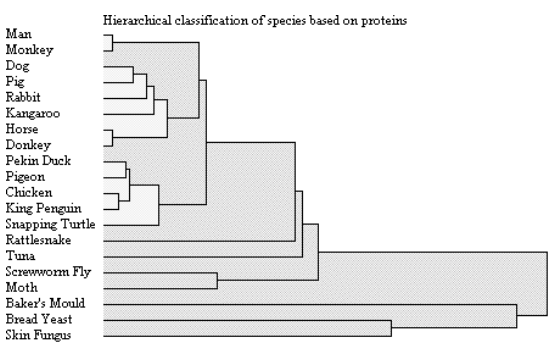


Hierarchisches vs. Flaches Clustering

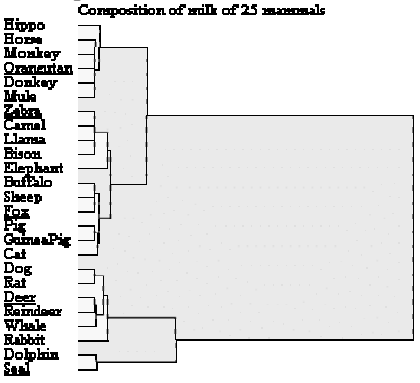
Hierarchisches Clustering:
- detaillierter und u.U. aufschlußreicher
- Hierarchie entsteht in natürlicher Weise aus relativ simplen Algorithmen
- relativ aufwendig
- kein bevorzugter Algorithmus

Flaches Clustering:
- tendenziell gröbere Datenanalyse
- Detaillierungsgrad abhängig von der Wahl für die Anzahl der Cluster
- relativ effizient
- K-Means und EM sind simple Standardalgorithmen

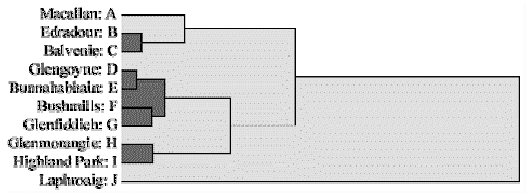
Beispiel für hierarchisches Clustering



Beispiel 2 für hierarchisches Clustering



Beispiel 3 für hierarchisches Clustering



Agglomeratives Bottom-Up-Clustering

Prinzip:
- Beginne mit jedem Datensatz di als singulärem Cluster ci
- Fasse pro Iteration die jeweils ähnlichsten Cluster ci, cj zu einem Cluster zusammen

for i:=1 to n do ci := {di} od;
C := {c1, ..., cn}; /* Menge aller Cluster */
while |C| > 1 do
  Bestimme ci, cj ∈ C mit maximaler Inter-Cluster-Ähnlichkeit;
  C := C – {ci, cj} ∪ {ci ∪ cj};
od;

Divisives Top-Down-Clustering

Prinzip:
- Beginne mit einem einzigen Cluster, der alle Datensätze enthält
- Identifiziere pro Iteration den am wenigsten „kohärenten" Cluster und teile ihn in zwei Cluster

c1 := {d1, ..., dn};
C := {c1}; /* Menge aller Cluster */
while es gibt ein cj ∈ C mit |cj|>1 do
  Bestimme ci mit der kleinsten Intra-Cluster-Ähnlichkeit;
  Partitioniere ci in ci' und ci'' (d.h. ci = ci'∪ ci'' und ci'∩ ci'' = ∅) so daß die Inter-Cluster-Ähnlichkeit zwischen ci' und ci'' minimal wird;
od;

Für die Partitionierung eines Clusters verwendet man selbst Wiederum ein Clustering-Verfahren (z.B. ein Bottom-Up-Verfahren)

Alternative Ähnlichkeitsmetriken für Cluster

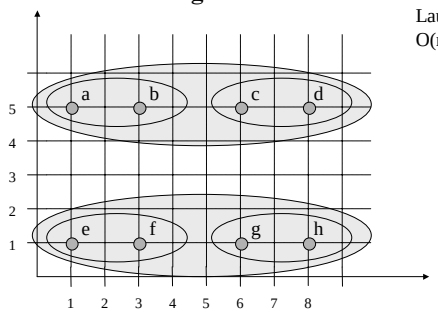
Gegeben: Ähnlichkeit auf Datensätzen - sim: D×D→R oder [0,1]
Definiere: Ähnlichkeit zwischen Clustern – sim: $2^D \times 2^D \rightarrow R$ oder [0,1]

Alternativen:
- **Zentroid-Methode**: sim (c,c') = sim(d, d') mit Zentroid d von c und Zentroid d' von c'
- **Single-Link-Methode**: sim(c,c') = sim(d, d') mit d ∈ c, d'∈ c', so daß d und d' die größte Ähnlichkeit haben
- **Complete-Link-Methode**: sim(c,c') = sim(d, d') mit d ∈ c, d'∈ c', so daß d und d' die kleinste Ähnlichkeit haben
- **Group-Average-Methode**: $\frac{1}{|c| \cdot |c'|} \sum_{d \in c, d' \in c'} sim(d, d')$

Für hierarchisches Clustering muß gelten:
max {sim(c,c'), sim(c,c'')} ≥ sim(c, c'∪ c'') für alle c, c', c'' ∈ 2^D

Beispiel für Bottom-Up-Clustering mit der Single-Link-Metrik

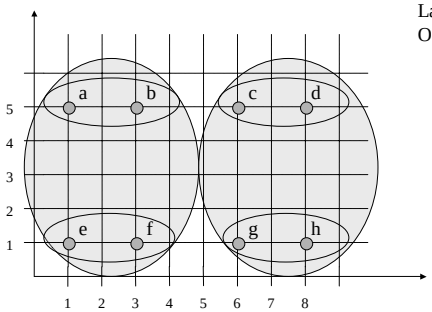
Laufzeit: $O(n^2)$



Betonung lokaler Cluster-Kohärenz → Tendenz zu länglichen Clustern

Beispiel für Bottom-Up-Clustering mit der Complete-Link-Metrik

Laufzeit: $O(n^3)$



Betonung globaler Cluster-Kohärenz → Tendenz zu runderen Clustern

Bezug zu Graphalgorithmen

Single-Link-Clustering:
- entspricht der Konstruktion eines maximalen Spannbaums für den gewichteten Graphen G = (V,E) mit V=D, E=D×D und Kantengewicht sim(d,d‘) für (d,d‘)∈ E
- Aus dem maximalen Spannbaum kann die Cluster-Hierarchie durch rekursives Entfernen der kürzesten Kante konstruiert werden.

Single-Link-Clustering ist auch eng mit dem Problem verwandt, maximale Zusammenhangskomponenten in einem Graph zu finden. (und zwar auf einem Graph, der nur Kanten (d,d‘) enthält, so daß sim(d,d‘) über einem Schwellwert liegt)

Complete-Link-Clustering ist eng mit dem Problem verwandt, maximale Cliquen in einem Graph zu finden.

Bottom-Up-Clustering mit der Group-Average-Metrik (1)

Merge-Schritt vereinigt diejenigen beiden Cluster ci und cj, so daß die Intra-Cluster-Ähnlichkeit von c: = ci ∪ cj

$$S(c) := \frac{1}{|c|\cdot(|c|-1)} \sum_{\substack{d,d' \in c \\ d \neq d'}} sim(d,d') \quad \text{maximal wird}$$

Naive Implementierung hat Laufzeit $O(n^3)$:
n-1 Merge-Schritte mit jeweils $O(n^2)$ Berechnungsschritten

Bottom-Up-Clustering mit der Group-Average-Metrik (2)

Effiziente Implementierung – mit Gesamtlaufzeit $O(n^2)$ – möglich für Cosinus-Ähnlichkeit mit normierten Vektoren der Länge 1, also Skalarprodukt-Ähnlichkeit:

Einmalige Berechnung der Ähnlichkeit aller Dokumentpaare
Berechnung von $\vec{s}(c) := \sum_{d \in c} \vec{d}$
für jeden Cluster nach einem Merge-Schritt

Dann gilt:

$$S(ci \cup cj) = \frac{(\vec{s}(ci)+\vec{s}(cj))\cdot(\vec{s}(ci)+\vec{s}(cj)) - (|ci|+|cj|)}{(|ci|+|cj|)(|ci|+|cj|-1)}$$

Jeder Merge-Schritt kommt also mit konstantem Rechenaufwand aus

Single-Pass-Verfahren für flaches Clustering

Gegeben: Datensätze d1, ..., dn
Gesucht: max. k Cluster C:={c1, ..., ck}

```
C := {{d1}}; /* willkürliche Wahl für den ersten Cluster */
for i:=2 to n do
  Bestimme denjenigen Cluster cj aus C mit dem größten
  Wert von sim(di, cj) (z.B. sim(di, c_j ) mit Zentroid c_j );
   if sim(di, cj) ≥ Schwellwert
   then Ordne di dem Cluster cj zu
   else if |C| < k
        then C := C ∪ {{di}}; /* eröffne neuen Cluster */
        else Ordne di dem Cluster cj zu
        fi
   fi
od
```


K-Means-Methode für flaches Clustering (1)

Idee:
- Bestimme k Prototypvektoren, je einen pro Cluster
- Weise Datensätze dem jeweils ähnlichsten Prototypvektor zu und berechne neue Prototypvektoren (durch Mittelung über die zugewiesenen Vektoren)
- Iteriere, bis Cluster hinreichend stabil

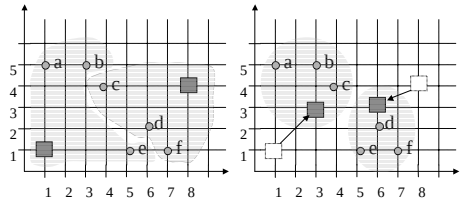
Wähle zufällig k Prototypvektoren $\vec{c}_1,...,\vec{c}_k$
while kein Iterationsabbruch do
  for i:=1 to n do
    Teile di demjenigen Cluster cj zu, für das $sim(\vec{d}_i, \vec{c}_j)$ minimal ist
  od;
  for j:=1 to k do $\vec{c}_j := \frac{1}{|c_j|} \sum_{d \in c_j} \vec{d}$ od;
od;

K-Means-Methode für flaches Clustering (2)

- Laufzeit ist O(n) (bei konstanter Anzahl von Iterationen)
- Eine sinnvolle Anzahl k von Clustern könnte experimentell oder aufgrund des MDL-Prinzips bestimmt werden.
- Die initialen Prototypvektoren könnten auch mit einem anderen – effizienten – Clustering-Verfahren bestimmt werden (z.B. Bottom-up-Clustering auf einer zufälligen Stichprobe der Datensätze).
- Für sim können beliebige Metriken verwendet werden.

Beispiel für K-Means-Clustering

K=2 ○ Datensätze ■ Prototypvektoren



nach 1. Iteration nach 2. Iteration

EM-Methode für flaches Clustering (Expectation Maximization)

Ansatz:

- Verallgemeinere K-Means-Verfahren, so daß jeder Datensatz bzgl. der k Cluster Zugehörigkeitswahrscheinlichkeiten hat gemäß einer parametrisierten (mehrdim.) Wahrscheinlichkeitsverteilung f
  → Zufallsvariable Z_{ij} = 1, falls di zu cj gehört, 0 sonst
- Schätze die Parameter θ der postulierten W.verteilung f(θ,x), so daß die Wahrscheinlichkeit, daß die Datensätze eine Stichprobe dieser Verteilung sind, maximal wird
  → **Maximum-Likelihood-Schätzung:**
  Maximiere L(d1,...,dn, θ) = P[d1, ..., dn stammen aus f(θ,x)]
  bzw. maximiere log L
  falls analytisch zu schwer → wende **EM-Iterationsverfahren** an

Postulierte W.verteilung z.B.
Mixtur von k multivariaten Normalverteilungen

Simples Beispiel für Maximum-Likelihood-Schätzer

gegeben:

- Münze mit Bernoulli-Wahrscheinlichkeitsverteilung mit unbekanntem Parameter p für Zahl, 1-p für Kopf
- Stichprobe (Daten): k-mal Zahl bei n Würfen

gesucht: Maximum-Likelihood-Schätzung für p

Sei L(k, n, p) = P[Stichprobe stammt aus Verteilung mit Param. p]

$$= \binom{n}{k} p^k \ (1-p)^{n-k}$$

Maximiere Log-Likelihood-Funktion log L (k, n, p):

$$\frac{\partial \log L}{\partial p} = \log\binom{n}{k} + k \log p + (n-k)\log(1-p) \ = 0$$

$$\Rightarrow p = \frac{k}{n}$$

Komplexeres Beispiel für Maximum-Likelihood-Schätzer

gegeben:

- Poisson-Verteilung mit Parameter λ (Erwartungwert)
- Stichprobe (Daten): Zahlen x1, ..., xn ∈ N_0
  Sei r die größte unter diesen Zahlen,
  und seien f0, ..., fr die absoluten Häufigkeiten der Zahlen 0, ..., r.

gesucht: Maximum-Likelihood-Schätzung für λ

$$L(x_1,...,x_n,\lambda) = \prod_{i=0}^{r}\left(e^{-\lambda}\frac{\lambda^i}{i!}\right)^{f_i}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \ln L}{\partial \lambda} = \sum_{i=0}^{r} f_i\left(\frac{i}{\lambda} - 1\right) = 0 \qquad \Rightarrow \hat{\lambda} = \frac{\sum_{i=0}^{r} i\, f_i}{\sum_{i=0}^{r} f_i} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i = \bar{x}$$

EM-Clustering-Methode mit Mixtur von k multivariaten Normalverteilungen

Annahme: Datensätze sind Stichprobe aus Mixtur von k multivariaten Normalverteilungen, also aus:

$$f(\vec{x},\pi_1,...,\pi_k,\vec{\mu}_1,...,\vec{\mu}_k,\Sigma_1,...,\Sigma_k)$$

$$= \sum_{j=1}^{k} \pi_j \ n(\vec{x},\vec{\mu}_j,\Sigma_j) = \sum_{j=1}^{k} \pi_j \ \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^m |\Sigma_j|}} e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_j)^T \Sigma_j^{-1}(x-\mu_j)}$$

mit Erwartungswerten $\vec{\mu}_j$
und invertierbaren, positiv definiten, symmetrischen m×m-Covarianz-Matrizen Σ_j

→ Maximiere die Log-Likelihood-Funktion:

$$\log L(\vec{x}_1,...,\vec{x}_n,\theta) := \log \prod_{i=1}^{n} P[\vec{x}_i \mid \theta] = \sum_{i=1}^{n}\left(\log \sum_{j=1}^{k} \pi_j \ n(\vec{x}_i,\vec{\mu}_j,\Sigma_j)\right)$$

EM-Iterationsverfahren (1)

Initialisierung des EM-Verfahrens z.B. durch:
π_1=...= π_k=1/k, Wahl der k-Means-Cluster-Zentroide für $\vec{\mu}_1,...,\vec{\mu}_k$
und einer Einheitsmatrix (1 auf der Diagonalen) für Σ_1, ..., Σ_k

Iteriere, bis sich Parameterschätzungen nur noch wenig ändern:

1) **Expectation-Schritt**:
   Berechne E[Z_{ij}] auf der Basis der letzten Schätzung für θ, d.h. π_1, ..., π_k, $\vec{\mu}_1,...,\vec{\mu}_k$ und Σ_1, ..., Σ_k
2) **Minimization-Schritt**:
   Verbessere die Parameterschätzung für θ auf der Basis der letzten Werte von E[Z_{ij}]

Konvergenz ist garantiert, aber u.U. nur
gegen lokales Maximum der Log-Likelihood-Funktion

EM-Iterationsverfahren (2)

Expectation-Schritt:

$$h_{ij} := E[Z_{ij} \mid \vec{x}_i, \theta] = \frac{P[\vec{x}_i \mid n_j(\theta)]}{\sum_{l=1}^{k} P[\vec{x}_i \mid n_l(\theta)]}$$

Maximization-Schritt:

$$\vec{\mu}_j := \frac{\sum_{i=1}^{n} h_{ij}\vec{x}_i}{\sum_{i=1}^{n} h_{ij}} \qquad \Sigma_j := \frac{\sum_{i=1}^{n} h_{ij}(\vec{x}_i - \mu_j)(\vec{x}_i - \mu_j)^T}{\sum_{i=1}^{n} h_{ij}}$$

$$\pi_j := \frac{\sum_{i=1}^{n} h_{ij}}{\sum_{j=1}^{k}\sum_{i=1}^{n} h_{ij}} = \frac{\sum_{i=1}^{n} h_{ij}}{n}$$

EM-Clustering-Methode: Beispiel

Gegeben:
n=20 Terme aus Artikeln der New York Times:
ballot, polls, Gov, seats, profit, finance, payments, NFL, Reds, Sox, inning, quarterback, score, scored, researchers, science, Scott, Mary, Barbara, Edward
mit m=20-dimensionalen Feature-Vektoren $\vec{d}_j$
mit d_{ij} = Anzahl der Artikel, in denen Term i und Term j auftreten

Ergebnis der EM-Iteration für die Schätzung der h_{ij} für k=5:

	1	2	3	4	5		1	2	3	4	5
ballot	0.63	0.12	0.04	0.09	0.11	inning	0.03	0.01	0.93	0.01	0.02
polls	0.58	0.11	0.06	0.10	0.14	quarterback	0.06	0.02	0.82	0.03	0.07
Gov	0.58	0.12	0.03	0.10	0.17	score	0.12	0.04	0.65	0.06	0.13
seats	0.55	0.14	0.08	0.08	0.15	scored	0.08	0.03	0.79	0.03	0.07
profit	0.11	0.59	0.02	0.14	0.15	researchers	0.08	0.12	0.02	0.68	0.10
finance	0.15	0.55	0.01	0.13	0.16	science	0.12	0.12	0.03	0.54	0.19
payments	0.12	0.66	0.01	0.09	0.11	Scott	0.12	0.12	0.11	0.11	0.54
NFL	0.13	0.05	0.58	0.09	0.16	Mary	0.10	0.10	0.05	0.15	0.59
Reds	0.05	0.01	0.86	0.02	0.06	Barbara	0.15	0.11	0.04	0.12	0.57
Sox	0.05	0.01	0.86	0.02	0.06	Edward	0.16	0.18	0.02	0.12	0.51

Clustering mit Dichteschätzer

Einflußfunktion (influence function) $g_y(x): \left(R_0^+\right)^m \to R$
Einfluß eines Datensatzes y
auf einen Punkt x in seiner lokalen Umgebung

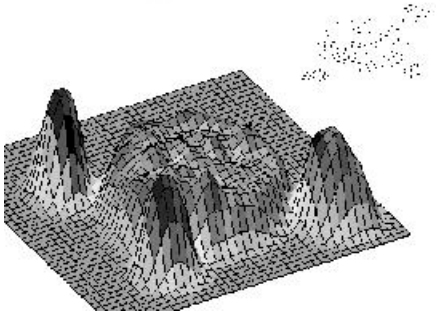
z.B. $g_y(x) = e^{\frac{dist(x,y)^2}{2\sigma^2}}$ mit $dist(x,y) := \frac{1}{1+sim(x,y)}$

Dichtefunktion (density function) $f(x): \left(R_0^+\right)^m \to R$
Dichte an Punkt x: Summe der Einflüsse aller y auf x

$$f(x) = \sum_{y \in D} g_y(x)$$

Cluster entsprechen lokalen Maxima der Dichtefunktion

Clustering mit Dichteschätzer: Beispiel



Quelle: D. Keim and A. Hinneburg, Clustering Techniques for Large Data Sets, Tutorial, KDD Conf. 1999

Automatische Bestimmung von Cluster-Labels

- Variante 1:
  Klassifikation des Cluster-Zentroiden $\vec{c}_k$
  mit einem separaten supervised classifier
- Variante 2:
  Wahl des Terms bzw. der Terme mit dem höchsten
  (tf*idf-) Gewicht im Cluster-Zentroiden $\vec{c}_k$
- Variante 2‘:
  Berechnung eines approximativen Cluster-Zentroiden $\vec{c}_k$’ aufgrund der m‘ (m‘ << m) wichtigsten Terme in den Dokumenten des Clusters und Wahl des wichtigsten Terms bzw. der wichtigsten Terme von $\vec{c}_k$’

Cluster-basiertes Information Retrieval

Für eine Benutzer-Anfrage q:

- Bestimme Ranking der Cluster-Zentroiden bzgl. Q
- Initiiere Anfrage q auf dem Cluster bzw. den Clustern
  mit dem bzw. den ähnlichsten Zentroiden
  (ggf. mit Feedback des Benutzers)

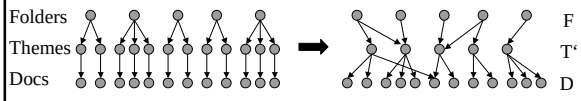
Cluster-Browsing:

Benutzer kann durch Cluster-Hierarchie navigieren

Jeder Cluster ck ist durch seinen *Medoiden* repräsentiert:
das Dokument d‘ ∈ ck, für das die Summe $\sum_{d \in Ck - \{d'\}} sim(d', d)$
maximal wird (oder die Ähnlichkeit zum Zentroiden)

Anwendung von Clustering auf Bookmark-Themen-Mining (1)

Gegeben: Benannte Bookmark-Folder einer Benutzer-Community
Gesucht: Themen des Benutzerinteressensprofil



Formalisierung:
Transformiere tripartiten Graph G=(V,E) mit V=F∪T∪D und
E={(i,j)∈ F×T | Folder i enthält Dok. j} ∪ ={(j,j)∈ T×D}
in bzgl. der Folder-Doc-Zuordnung möglichst „ähnlichen“
tripartiten Graph G‘ = (V‘,E‘) mit V=F ∪T‘∪D
mit möglichst geringen Kosten der Kantencodierung (MDL-Prinzip)

Anwendung von Clustering auf Bookmark-Themen-Mining (2): Codierungskosten

Ziel (*MDL-Prinzip*):
Minimiere Summe der Codierungskosten für
1) Kantencodierung von G‘ (*Mapping-Cost*) und
2) Kompensation der „Verzerrung“ von G‘ gegenüber G (*Distortion-Cost*)

Zu 1): basierend auf Entropie

$$H(G') = \sum_{v \in T'} \frac{outdegree(v)}{|D|} log_2 \frac{|D|}{outdegree(v)} + \sum_{v \in T'} \frac{outdegree(v)}{|F|} log_2 \frac{|F|}{outdegree(v)}$$

Zu 2): basierend auf Kullback-Leibler-Distanz (Cross Entropy: Divergenz von zwei Wahrscheinlichkeitsverteilungen) oder ähnlichen Maßen (z.B. Jensen-Shannon-Divergenz)

Anwendung von Clustering auf Bookmark-Themen-Mining (3): Heuristischer Algorithmus

Schritt 1: Konstruiere mittels agglomerativem Clustering einen Cluster-Baum auf D mit Dokumenten als Blättern

Schritt 2: Bestimme für jeden Folder f∈ F den bzgl. der Termverteilung „ähnlichsten“ Knoten des Cluster-Baums
z.B. (mit binären Feature-Vektoren $\vec{X}_i$) denjenigen Knoten c mit der kleinsten Kullback-Leibler-Distanz:

$$KL(f \| c) = \sum_{\vec{X} \in 2^m} P_f[\vec{X}] * log_2 \frac{P_f[\vec{X}]}{P_c[\vec{X}]}$$

Schritt 3: Verbinde in G‘ f mit c und c mit allen Doks. in c

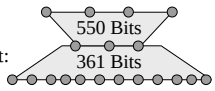
Schritt 4: Bestimmte den bzgl. KL „verzerrtesten“ Folder f und Dokumente d aus f, die in G‘ nicht mehr mit f verbunden sind. Verbinde d mit c∈T‘, wenn dadurch Mapping-Cost reduziert wird.

Anwendung von Clustering auf Bookmark-Themen-Mining (4): Experimente

Experiment mit 272 URLs aus 93 Folders
mit Namen „Linux“, „Radio“, „Books“ usw. und einigen 1000 Termen

Resultat:

Mapping-Cost:
550 + 361 Bits
Distortion-Cost:
395 Bits



93 Folders
36 Cluster = Themes
272 URLs

nützlich u.a. zur Generierung von Cluster-Labels
mittels Bookmark-Namen, zum „Austausch“ von Bookmarks usw.

aus: S. Chakrabarti, Y. Batterywala.
Mining Themes from Bookmarks.
ACM SIGKDD Workshop on Text Mining, Boston, 2000.

9.3 Hypertext-Klassifikation

Idee: Berücksichtige Terme und ggf. Klassenzugehörigkeit
der via Hyperlink-Nachbardokumente
bei der Klassifikation eines Dokuments

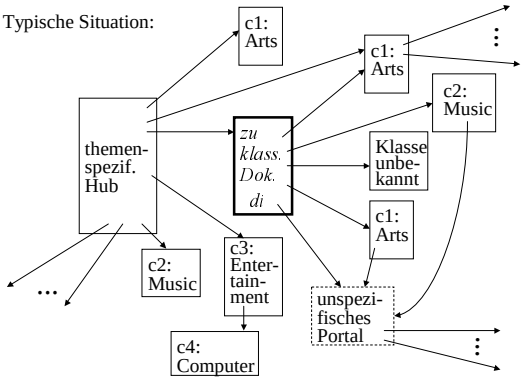
Ansatz 1:
Erweitere jedes Dokumente um die Terme seiner Nachbarn
(ggf. nur im Hyperlink-Radius ≤ R
oder mit Gewicht ~ 1/r für Hyperlink-Distanz r)

Problem: „Verrauschen“ des Dokumententhemas
Beispiel: Link von IR-Vorlesungs-Seite auf www.yahoo.com

Ansatz 2:
Berücksichtige bei einem zu klassifizierenden Dokument die Klassenzugehörigkeit seiner Nachbarn

Berücksichtigung der Klassen von Nachbarn

Typische Situation:



Naive-Bayes-Klassifikator mit Berücksichtigung der Klassen von Nachbarn

Analysiere $P[d_i \in c_k \mid d_i \text{ hat } \vec{d}_i, \text{Graph } G=(V,E) \text{ auf Korpus } D]$

bzw. $P[d_i \in c_k \mid d_i \text{ hat } \vec{d}_i \text{ und Nachbarn } N_i \text{ aus spezif. Klassen}]$

$$= \frac{P[\vec{d}_i, N_i \mid c_k] P[c_k]}{P[\vec{d}_i, N_i]} \sim P[\vec{d}_i, N_i \mid c_k] P[c_k]$$

$f(c_k, d_i, N_i) = P[\vec{d}_i, N_i \mid c_k] = P[\vec{d}_i \mid c_k] P[N_i \mid c_k]$ Unabhängigkeitsannahmen

$$= P[\vec{d}_i \mid c_k] \prod_{d_j \in pred(d_i)} P[d_j \in c(d_j) \mid d_i \in c_k] \prod_{d_j \in succ(d_i)} P[d_j \in c(d_j) \mid d_i \in c_k]$$

mit pred(di) := {dj | (j, i)∈E} und succ(di) := {dj | (i, j)∈E}

$$= P[\vec{d}_i \mid c_k] * \prod_{\nu=1}^{\#Klassen} P[d_j \in c_\nu \mid d_i \in c_k, (j,i) \in E]^{|pred(d_i) \cap c_\nu|} * \prod_{\nu=1}^{\#Klassen} P[d_j \in c_\nu \mid d_i \in c_k, (i,j) \in E]^{|succ(d_i) \cap c_\nu|}$$

Naive-Bayes-Klassifikator mit unbekannten Klassen von Nachbarn (1)

bei *bekannten* Klassen aller Nachbarn:
ordne d_i derjenigen Klasse c_k zu, für die $f(c_k, d_i, N_i)$ maximal ist

bei (z.T.) *unbekannten* Klassen der Nachbarn:
Iterationsverfahren (*Iterative Relaxation Labeling*):
Konstruiere Nachbarschaftsgraph Gi=(Ni,Ei) mit Radius R um di
Klassifiziere alle Dokumente in Ni aufgrund von Textfeatures
Wiederhole bis hinreichende Konvergenz erreicht
Für alle dj in Ni (inkl. di)
Berechne die Klassenzugehörigkeit von dj aufgrund der Textfeatures von dj und der Klassen seiner Nachbarn mittels Naive-Bayes

Naive-Bayes-Klassifikator mit unbekannten Klassen von Nachbarn (2)

Einteilung der Nachbardokumente in
Ni^K – Dok. mit bekannter Klasse und
Ni^U – Dok. mit a priori unbekannter Klasse.
Sei Δ^K die Gesamtheit der Nj^K für alle dj im betrachteten Radius.
Dann ist:

$P[d_i \in c_k \mid \Delta^K] = \sum_{N_i^U \in \Omega_i} \left(P[di \in c_k \mid N_i^U, \Delta^K] \; P[N_i^U \mid \Delta^K] \right)$

mit der Menge Ωi aller möglichen Klassenzuordnungen c von Ni

$$\rightarrow Iteration\ P[d_i \in c_k \mid \Delta^K]^{(p+1)} := \sum_{N_i^U \in \Omega_i} \left(P[di \in c_k \mid N_i^U, N_i^K] * \prod_{d_j \in N_i^U} \left(P[d_j \in c(d_j) \mid \Delta^K]^{(p)} \right) \right)$$

zur Konvergenz des Iterative Relaxation Labeling
siehe Theorie der Markov Random Fields

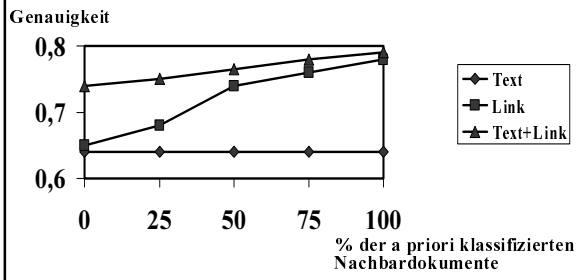
Experimentelle Resultate zur Hypertext-Klassifikation (1)

ca. 1000 Patente aus 12 Klassen:
Antenna, Modulator, Demodulator, Telephony, Transmission, Motive, Regulator, Heating, Oscillator, Amplifier, Resistor, System.
Klassifikationsgenauigkeit mit reinen Textfeatures: 64%
Klassifikationsgenauigkeit mit Hyperlink-Klassifikation: 79%

ca. 20000 Web-Dokumente aus 13 Yahoo-Klassen:
Arts, Business&Economy, Computers&Internet, Education, Entertainment, Government, Health, Recreation, Reference, Regional, Science, Social Science, Society&Culture.
Klassifikationsgenauigkeit mit reinen Textfeatures: 32%
Klassifikationsgenauigkeit mit Hyperlink-Klassifikation: 79%

aus: S. Chakrabarti, B. Dom, P. Indyk.
Enhanced Hypertext Categorization Using Hyperlinks.
ACM SIGMOD International Conference on Management of Data, Seattle, 1998.

Experimentelle Resultate zur Hypertext-Klassifikation (2)



aus: S. Chakrabarti, B. Dom, P. Indyk.
Enhanced Hypertext Categorization Using Hyperlinks.
ACM SIGMOD International Conference on Management of Data, Seattle, 1998.

9.4 Hierarchische Textklassifikation mit Trainingsdaten

gegeben: Baum von Klassen mit Trainingsdokumenten
zu jedem Blatt oder jedem Knoten
gesucht: Zuordnung neuer Dokumente zu einer oder mehreren Blättern oder Knoten

Top-Down-Ansatz 1 (zur Zuordnung zu genau einem Blatt):
Bestimme – von der Wurzel bis zu den Blättern –
auf jedem Baumniveau jeweils die Klasse,
zu der ein neues Dokument am besten passt.

Top-Down-Ansatz 2 (zur Zuordnung zu einem oder mehreren Knoten):
Bestimme – von der Wurzel bis zu den Blättern –
auf jedem Baumniveau alle Klassen, so daß die Wahrscheinlichkeit,
daß ein neues Dokument dazu passt, über einem Schwellwert liegt.

Kernproblem: Feature-Selektion

Bei der Entscheidung zwischen den Klassen einer Baumstufe ist – aus Effizienz- und vor allem auch Genauigkeitsgründen – eine Teilmenge geeigneter Features (Terme) auszuwählen. Diese Features sollen gute *Diskriminatoren* zwischen den den Klassen derselben Baumstufe sein.

Beispiel:
Terme wie „Definition“, „Theorem“, „Lemma“ sind gute Diskriminatoren zwischen Arts, Entertainment, Science, etc. oder auch zwischen Biology, Mathematics, Social Sciences, etc.; sie sind schlechte Diskriminatoren zwischen den Unterklassen von Mathematics wie z.B. Algebra, Stochastics, etc.

Lösung: Betrachtung statistischer bzw. informationstheoretischer Maße zur Selektion geeigneter Features

Simple (klassenunabhängige) Kriterien zur Feature-Selektion

Häufigkeit (Document Frequency Thresholding):
Betrachte zum Test bzgl. Klasse cj nur Terme ti, die in mindestens df Trainingsdokumenten von cj vorkommen.

Termstärke (Term Strength):
Zur Entscheidung zwischen Klassen c1, ..., ck wähle diejenigen binären Features Xi (Termvorkommen) mit dem größten Wert von

$$s(X_i) := P[X_i \text{ kommt in Dok. } d \text{ vor} \mid X_i \text{ kommt in ähnl. Dok. } d' \text{ vor}]$$

Dabei wird die Menge der ähnlichen Dokumentpaare (d, d‘) durch einen Schwellwert bzgl. sim oder durch Clustering oder durch klassifizierte Trainingsdaten bestimmt.

+ weitere Kriterien dieser Bauart

Feature-Selektion auf der Basis des Informationsgewinns

Informationsgewinn (Information Gain):
Zur Entscheidung zwischen Klassen c1, ..., ck wähle diejenigen binären Features Xi (Termvorkommen) mit dem größten Informationsgewinn

$$G(Xi) = \sum_{j=1}^{k} P[c_j] \log_2 \frac{1}{P[c_j]}$$

$$- P[X_i] \sum_{j=1}^{k} P[c_j \mid X_i] \log_2 \frac{1}{P[c_j \mid X_i]}$$

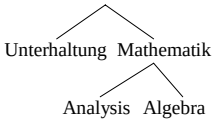
$$- P[\overline{X}_i] \sum_{j=1}^{k} P[c_j \mid \overline{X}_i] \log_2 \frac{1}{P[c_j \mid \overline{X}_i]}$$

Berechnung in Zeit O(n)+O(mk)
für n Trainingsdokumente, m Terme und k Klassen

Beispiel für Feature-Selektion auf der Basis des Informationsgewinns

	Film	Hit	Chart	Theorem	Lines	Integral	Gruppe	Vektor
	f1	f2	f3	f4	f5	f6	f7	f8
d1:	1	1	0	0	0	0	0	0
d2:	0	1	1	0	0	0	1	0
d3:	1	0	1	0	0	0	0	0
d4:	0	1	1	0	0	0	0	0
d5:	0	0	0	1	1	1	0	0
d6:	0	0	0	1	0	1	0	0
d7:	0	0	0	0	1	0	0	0
d8:	0	0	0	1	0	1	0	0
d9:	0	0	0	0	0	0	1	1
d10:	0	0	0	1	0	0	1	1
d11:	0	0	0	1	0	1	0	1
d12:	0	0	1	1	1	0	1	0

Klassenbaum:



Trainingsdokumente:
d1, d2, d3, d4
→ Unterhaltung
d5, d6, d7, d8
→ Analysis
d9, d10, d11, d12
→ Algebra

Beispielrechnung für Feature-Selektion auf der Basis des Informationsgewinns

Unterhaltung (d1-d4) vs. Mathematik (d5-d12):

G(Film) = 1/3 log3 + 2/3 log3/2 – 2/12 (1 log1 + 0 log∞) – 10/12 (2/10 log 10/2 + 8/10 log 10/8)

G(Chart) = 1/3 log3 + 2/3 log3/2 – 4/12 (3/4 log4/3 + 1/4 log4) – 8/12 (1/8 log 8 + 7/8 log 8/7)

G(Theorem) = 1/3 log3 + 2/3 log3/2 – 6/12 (0 log ∞ + 1 log1) – 6/12 (2/6 log 3 + 4/6 log 6/4)

G(Vektor) = 1/3 log3 + 2/3 log3/2 – 3/12 (0 log ∞ + 1 log1) – 9/12 (4/9 log 9/4 + 5/9 log 9/5)

⋮

Analysis (d5-d8) vs. Algebra (d9-d12):

G(Film) = 1/2 log2 + 1/2 log2 – 0 (1/2 log2 + 1/2 log2) – 1 (1/2 log2 + 1/2 log2)

G(Theorem) = 1/2 log2 + 1/2 log2 – 6/8 (1/2 log2 + 1/2 log2) – 2/8 (1/2 log2 + 1/2 log2)

G(Integral) = 1/2 log2 + 1/2 log2 – 4/8 (3/4 log 4/3 + 1/4 log4) – 4/8 (1/4 log4 + 3/4 log 4/3)

G(Vektor) = 1/2 log2 + 1/2 log2 – 3/8 (0 log ∞ + 1 log1) – 5/8 (4/5 log 5/4 + 1/5 log 5)

⋮

Feature-Selektion auf der Basis der Kullback-Leibler-Distanz

Kullback-Leibler-Distanz (Mutual Information, Cross Entropy):
Zur Entscheidung für Klasse cj wähle diejenigen binären Features Xi (Termvorkommen) mit dem größten Wert von

$$MI(X_i, c_j) = P[X_i \wedge c_j] \log \frac{P[X_i \wedge c_j]}{P[X_i] P[c_j]}$$

oder

$$MI(X_i, c_j) = \sum_{X \in \{X_i, \overline{X}_i\}} \sum_{C \in \{c_j, \overline{c}_j\}} P[X \wedge C] \log \frac{P[X \wedge C]}{P[X] P[C]}$$

und für die Entscheidung bzgl. Klassen c1, ..., ck:

$$MI(X_i) = \sum_{j=1}^{k} P[c_j] MI(X_i, c_j)$$

Berechnung in Zeit O(n)+O(mk)
für n Trainingsdokumente,
m Terme und k Klassen

Beispielrechnung für Feature-Selektion auf der Basis der Kullback-Leibler-Distanz

Unterhaltung (d1-d4) vs. Mathematik (d5-d12):

MI(Film) = 2/12 log [2/12 / (2/12 * 1/3)] + 0 log 0 +
2/12 log [2/12 / (2/12 * 1/3)] + 8/12 log[8/12 / (10/12 * 2/3)]

MI(Chart) = 3/12 log [3/12 / (4/12 * 1/3)] + 1/12 log [1/12 / (4/12 * 2/3)] +
1/12 log [1/12 / (8/12 * 1/3)] + 7/12 log[7/12 / (8/12 * 2/3)]

MI(Theorem) = 0 log 0 + 6/12 log [6/12 / (6/12 * 2/3)] +
4/12 log [4/12 / (6/12 * 1/3)] + 2/12 log[2/12 / (6/12 * 2/3)]

Analysis (d5-d8) vs. Algebra (d9-d12):

MI(Film) = 0 log 0 + 0 log 0 +
4/8 log [4/8 / (8/8 * 1/2)] + 4/8 log[4/8 / (8/8 * 1/2)]

MI(Theorem) = 3/8 log [3/8 / (6/8 * 1/2)] + 3/8 log [3/8 / (6/8 * 1/2)] +
1/8 log [1/8 / (2/8 * 1/2)] + 1/8 log[1/8 / (2/8 * 1/2)]

MI(Vektor) = 0 log 0 + 3/8 log [3/8 / (3/8 * 1/2)] +
4/8 log [4/8 / (5/8 * 1/2)] + 1/8 log[1/8 / (5/8 * 1/2)]

Experimentelle Resultate zur hierarchischen Textklassifikation (1)

ca. 400 000 Dokumente (von www.looksmart.com)
aus ca. 17000 Klassen in 7 Stufen:
13 Klassen auf Stufe 1 (Automotive, Business&Finance, Computers&Internet, Entertainment&Media, Health&Fitness, etc.),
150 Klassen auf Stufe 2

ca. 50 000 zufällig gewählte Dokumente als Trainingsdaten;
für jede der 13+150 Klassen Auswahl der 1000 Terme mit dem höchsten Mutual-Information-Wert MI(X,C)

Automatische Klassifikation von 10 000 Dokumenten mit SVM (mit Kontrollparameter λ=0.01):
Top-down-Zuordnung eines Dokuments zu allen Klassen, für die Zuordnung über einem bestimmten Schwellwert δ lag
(mit einer Wahl von δ so daß auf Trainingsdaten maximiert wurde $F = \frac{2 * Präzision * Ausbeute}{(Präzision + Ausbeute)}$)

aus: S. Dumais, H. Chen. Hierarchical Classification of Web Content. ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval, Athens, 2000

Experimentelle Resultate zur Hypertext-Klassifikation (2)

Durchschnittliche (micro-averaged) Klassifikationsgüte auf
Stufe 1 (13 Klassen): F≈ 0.572
Stufe 2 (150 Klassen): F≈ 0.476

Beste und schlechteste Klassen:

F ≈ 0.841 Health & Fitness / Drugs & Medicine
F ≈ 0.797 Home & Family / Real Estate
F ≈ 0.841 Reference & Education / K-12 Education
F ≈ 0.841 Sports & Recreation / Fishing

F ≈ 0.034 Society & Politics / World Culture
F ≈ 0.088 Home & Family / For Kids
F ≈ 0.122 Computers & Internet / News & Magazines
F ≈ 0.131 Computers & Internet / Internet & the Web

aus: S. Dumais, H. Chen. Hierarchical Classification of Web Content. ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval, Athens, 2000