Algoritmos de minería de datos en la industria sanitaria

Marta Li Wang Wufong University, China

Abstract-En este estudio se examinan varios enfoques de la minería de datos (DM) en la industria de la salud procedentes de muchos grupos de investigación de todo el mundo. La atención se centra en los modernos procesadores multinúcleo incorporados a los ordenadores básicos actuales, que suelen encontrarse en los institutos universitarios tanto en forma de pequeños servidores como de estaciones de trabajo. Por tanto, no son deliberadamente ordenadores de alto rendimiento. Los procesadores multinúcleo modernos constan de varios (de 2 a más de 100) núcleos informáticos, que funcionan de forma independiente entre sí según el principio de "instrucciones múltiples, datos múltiples" (MIMD). Tienen una memoria principal común (memoria compartida). Cada uno de estos núcleos informáticos dispone de varias (2-16) unidades aritméticas-lógicas, que pueden realizar simultáneamente la misma operación aritmética sobre varios datos de forma vectorial (single instruction multiple data, SIMD). Los algoritmos de DM deben utilizar ambos tipos de paralelismo (SIMD y MIMD), siendo el acceso a la memoria principal (componente centralizado) la principal barrera para aumentar la eficiencia. Esto es importante para la DM en aplicaciones de la industria de la salud como ECG, EEG, CT, SPECT, fMRI, DTI, ultrasonido, microscopía, dermascopía, etc.

Abstract (ingles)—In this paper, we review data mining approaches for health applications. Our focus is on hardware-centric approaches. Modern computers consist of multiple processors, each equipped with multiple cores, each with a set of arithmetic/logical units. Thus, a modern computer may be composed of several thousand units capable of doing arithmetic operations like addition and multiplication. Graphic processors, in addition may offer some thousand such units. In both cases, single instruction multiple data and multiple instruction multiple data parallelism must be exploited. We review the principles of algorithms which exploit this parallelism and focus also on the memory issues when multiple processing units access main memory through caches. This is important for many applications of health, such as ECG, EEG, CT, SPECT, fMRI, DTI, ultrasound, microscopy, dermascopy, etc.

Index Terms—DM, healthindustry.

I. Introducción

Las aplicaciones de la industria de la salud, como ECG, EEG, CT, SPECT, fMRI, DTI, ultrasonido, microscopía, dermascopía, etc., plantean elevados requisitos en cuanto al rendimiento en tiempo de ejecución de la minería de datos (DM). El hardware informático moderno permite el desarrollo de aplicaciones de alto rendimiento para el análisis de datos en muchos niveles diferentes. La atención se centra en los modernos procesadores multinúcleo incorporados a los ordenadores básicos actuales, que suelen encontrarse en los institutos universitarios tanto en forma de pequeños servidores como de estaciones de trabajo. Por tanto, no son deliberadamente ordenadores de alto rendimiento. Los procesadores multinúcleo

modernos constan de varios (de 2 a más de 100) núcleos informáticos, que funcionan de forma independiente entre sí según el principio de "instrucciones múltiples, datos múltiples" (MIMD). Tienen una memoria principal común (memoria compartida). Cada uno de estos núcleos informáticos dispone de varias (2-16) unidades aritméticas-lógicas, que pueden realizar simultáneamente la misma operación aritmética sobre varios datos de forma vectorial (single instruction multiple data, SIMD). Los algoritmos de DM deben utilizar ambos tipos de paralelismo (SIMD y MIMD), siendo el acceso a la memoria principal (componente centralizado) la principal barrera para aumentar la eficiencia. En principio, las cachés rápidas permiten resolver este problema. Sin embargo, los algoritmos de alto rendimiento deben diseñarse de forma que estas cachés puedan funcionar de forma eficaz (con conciencia de caché o sin ella).

Para las tareas estándar, como el álgebra lineal, la optimización o el entrenamiento de redes neuronales, ya se utilizan ampliamente algoritmos de alto rendimiento con paralelismo SIMD y MIMD (en parte con un uso eficiente de la caché). Los métodos más especializados, como el análisis de clústeres, requieren un nuevo desarrollo específico de los algoritmos, como se ha publicado en numerosos artículos sobre los métodos de clúster k-Means, EM y DBSCAN y otros algoritmos para la GPU y las arquitecturas multinúcleo. Se trata sobre todo del desarrollo de principios algorítmicos generales que pueden aplicarse a muchos problemas, por ejemplo, propuestas de bucles oblicuos a la caché. La idea de los bucles olvidados por la caché es reemplazar los bucles anidados (que desempeñan un papel central en muchos algoritmos de aplicación) de manera que (1) puedan distribuirse a las unidades paralelas de forma que se preserve la localidad y (2) los propios accesos se diseñen de forma que se consiga un alto grado de localidad y, por tanto, un uso eficiente de la caché. Esto se consigue utilizando una variante especial de la curva de Hilbert (una curva que llena el espacio llamada FUR-Hilbert). En comparación con la versión básica de los algoritmos (sin paralelismo SIMD y MIMD), a menudo es posible tener factores de aceleración de dos o más órdenes de magnitud (es decir, más de 100).

El objetivo general de esta área de investigación es seguir desarrollando estas técnicas de paralelización para algoritmos de análisis de datos, así como su uso ejemplar en las aplicaciones punteras de la sanidad y las ciencias de la vida.

Un objetivo interesante sería seguir desarrollando el paradigma algorítmico básico de definición de algoritmos de

alto rendimiento para el análisis de datos utilizando el concepto de bucles oblicuos de caché con los siguientes objetivos

- El rendimiento se incrementará aún más en comparación con el enfoque anterior, por ejemplo, mediante el equilibrio de carga dinámico.
- Se mejorará la usabilidad para varios algoritmos de aplicación nuevos, por ejemplo, mediante el desarrollo de algoritmos especializados para detectar dependencias de datos y desarrollar criterios de convergencia para dichos algoritmos
- El concepto de bucles sin caché se desarrollará para otras arquitecturas, por ejemplo, GPU o sistemas distribuidos (por ejemplo, entornos de red y nube).

II. LOS BUCLES SIN CACHÉ CON EQUILIBRIO DE CARGA DINÁMICO

Un enfoque de paralelización basado en SIMD y MIMD para diseñar pares de bucles de manera que soporten de forma flexible cachés de cualquier tamaño divide la carga de trabajo total de un algoritmo mediante las llamadas curvas de llenado de espacio en paquetes que se asignan a los núcleos individuales y hacen un uso eficiente de la memoria caché en ellos. Aunque la carga de trabajo puede distribuirse inicialmente de forma óptima entre los núcleos del ordenador de esta manera tan sencilla, todavía no es posible reequilibrar dinámicamente la carga si, por ejemplo, los núcleos están sometidos a una carga básica desigual debido a influencias externas. En este paquete de trabajo, los procedimientos para la redistribución dinámica de la carga deben diseñarse de forma que no entren en colisión con el objetivo general de un uso eficiente de la caché.

III. MODELACIÓN DE ESTRUCTURAS DE BUCLE

El enfoque actual se limita a atravesar dos bucles anidados con límites de bucle fijos de forma que se utilicen cachés de cualquier tamaño y también se permita el paralelismo MIMD. Para ello se ha utilizado una variante de la curva de Hilbert recientemente desarrollada. En este paquete de trabajo, este concepto se ampliará a cualquier número de bucles y se podrán modelar las dependencias de los bucles entre sí. Esto debería permitir procesar eficazmente, por ejemplo, matrices triangulares o de banda, así como tensores de orden superior. Para el procesamiento de tres o más bucles anidados, ya existen básicamente las extensiones matemáticas de la curva de Hilbert y otras curvas de llenado de espacio en espacios de mayor dimensión. Sin embargo, estos métodos todavía tienen que ser ampliados y adaptados de tal manera que el cálculo se pueda realizar de forma muy eficiente (en tiempo constante por cada paso de bucle), lo que se consiguió en el caso bidimensional con la ayuda de diferentes conceptos. La extensión de estos conceptos para espacios de dimensionalidad arbitraria nos parece una tarea de investigación exigente pero también factible. Para la modelización de las dependencias es posible definir estructuras de datos adecuadas que se orienten y apoyen el carácter jerárquico-recursivo de las curvas de llenado del espacio.

IV. MODELACIÓN DE LOS REQUISITOS DE MONOTONÍA

Este enfoque, basado en una variante especial de la curva de Hilbert, ofrece la ventaja de que en la mayoría de las aplicaciones el efecto sobre la ubicación de la caché es más fuerte en comparación con las curvas de llenado de espacio comparables. Sin embargo, algunos algoritmos de aplicación requieren una secuencia de pases de bucle que cumpla ciertas propiedades de monotonía, es decir, que ciertos índices de bucle se procesen antes que otros. La idea es combinar las curvas de llenado de espacio existentes, como la de Hilbert o la de orden Z, de manera que incluso los requisitos de monotonía parcial puedan representarse en dimensiones individuales. En este paquete de trabajo, se ampliará el concepto de bucles con memoria caché para especificar las propiedades de monotonicidad y aplicar automáticamente las curvas de llenado de espacio adecuadas.

V. GPU Y SISTEMAS DISTRIBUIDOS

El problema de que los algoritmos trabajen distribuidos sobre los datos de forma que cada unidad de procesamiento alcance la mayor localidad de acceso posible no sólo se plantea en los sistemas de CPU multinúcleo, sino también en otras arquitecturas distribuidas y paralelas. El escenario es muy similar para las unidades de procesamiento gráfico (GPU), pero el problema básico es similar para sistemas distribuidos sin memoria física compartida (grids, cloud computing). En este paquete de trabajo se investigará la extensión a dichas arquitecturas. Aunque el problema básico de la preservación de la localidad sigue siendo el mismo, en escenarios de hardware alternativos las consideraciones sobre el equilibrio entre los diferentes factores de coste de los algoritmos, es decir, especialmente el equilibrio entre los costes de transmisión de los datos a través de la red o de las conexiones de bus internas y el tiempo de computación (que también incluye la gestión de las curvas de llenado de espacio y otras técnicas para la preservación de la localidad) pueden variar en detalle.

VI. DERIVACIÓN DE LOS CRITERIOS DE APLICABILIDAD

No todos los algoritmos de análisis de datos son igualmente aptos para su paralelización mediante bucles con memoria caché, aunque sigan el patrón básico de bucles anidados. Por lo tanto, en este paquete de trabajo se desarrolla un conjunto de criterios para encontrar dependencias de datos y requisitos de monotonía en los algoritmos de aplicación de forma manual o (semi)automática. Además, se van a desarrollar criterios para determinar cuándo los algoritmos no pueden transformarse de forma equivalente de manera demostrable, pero después de una transformación, resultan algoritmos que también son convergentes y posiblemente alcanzan un óptimo local que se desvía del algoritmo original. Desde el punto de vista científico, este último es el mayor reto, porque ya se han propuesto técnicas automáticas para el reconocimiento de las dependencias de datos, que se utilizan con mucho éxito y de forma generalizada en otras subáreas de la informática (por ejemplo, la construcción de compiladores). En cambio, las

técnicas de transformación en algoritmos meramente equivalentes a los resultados son mucho menos conocidas.

VII. TRABAJO RELACIONADO

Hay varios enfoques para **diferentes tipos de datos**. Los datos pueden ser de cualquier tipo, siempre que exista una función de distancia. Los datos de texto de longitud fija suelen utilizar la distancia de Hamming [HOK18] y la similitud entre textos de longitud variable suele medirse mediante la distancia de edición [XWL08]. Una medida común para los datos de conjuntos es la distancia Jaccard [DTL18], [XWL+11], mientras que la similitud de los documentos se procesa con medidas de similitud tipo coseno [AB13], [SLLF17].

Las técnicas de búsqueda del vecino más cercano también pueden aplicarse al problema de la unión de similitudes, pero sin garantías de integridad y exactitud del resultado. Puede haber falsos positivos, así como falsos negativos. Recientemente se ha utilizado una aproximación [YNL+17] al Locality Sensitive Hashing (LSH) en una muestra de puntos representativa, para reducir el número de operaciones de búsqueda. El LSH es de interés en el trabajo teórico fundacional, donde se propuso un enfoque de LSH recursivo y sin caché [PPSS17]. El tema de las soluciones aproximadas para la unión de similitudes es también un campo emergente en el aprendizaje profundo [PM18]. Hay enfoques aproximados que se dirigen a casos de baja dimensión (uniones espaciales en 2–3 dimensiones [BEF08]) o a casos de mayor dimensión (10-20) [AI06]. Los casos de muy alta dimensión, con dimensiones de 128 y superiores, han sido objeto de técnicas de aproximación simbólica (SAX) [MJZ17]) para generar candidatos aproximados. Las técnicas SAX se basan en varios parámetros indirectos como el tamaño del PAA o el tamaño del alfabeto

Existen técnicas de indexación preconstruidas, que se basan en **curvas de llenado de espacio** y se aplican al problema de unión por similitud. En concreto, donde los datos se ordenan de forma eficiente con respecto a una o más curvas de orden Z [DS01], [KS00], [LSS08] para comprobar la intersección de los hipercubos en las estructuras de datos. Otros proponen curvas de llenado de espacio, para reducir el coste de almacenamiento del índice [CGL⁺17]. GESS [DS01] y LESS [LSS08] se dirigen a las GPU y no a los entornos multinúcleo. ZC y MSJ [KS00] así como el índice SPB-tree [CGL⁺17], aunque son sencillos, requieren transformaciones espaciales y preprocesamiento, lo que dificulta su paralelización.

familiaEGO de algoritmos ϵ -join. El algoritmo EGO-join es el primer algoritmo de esta familia introducido por Böhm et al. en [BBKK01]. El Epsilon Grid Order (EGO) fue introducido como un orden estricto (es decir, un orden que es irreflexivo, asimétrico y transitivo). Se demostró que todos los socios de unión de algún punto \mathbf{x} se encuentran dentro de un intervalo ϵ , del Orden de Rejilla Epsilon. Los algoritmos de la familia EGO explotan este conocimiento para la operación de unión. El EGO-join ha sido reimplementado como una variante recursiva con heurística adicional, para decidir rápidamente si dos secuencias son no unibles [KP03]. Otras

mejoras propusieron dos nuevos miembros de esta familia, el algoritmo EGO* [KP07] y su versión extendida llamada Super-EGO [Kal13], que se dirige a entornos multinúcleo utilizando un modelo de programación multiproceso/multihilo. Super-EGO propone una reordenación dimensional [Kal13]. En los experimentos, Super-EGO encuentra algunas dificultades con los datos distribuidos uniformemente, especialmente cuando el número de objetos de datos supera los millones de puntos o la dimensionalidad es superior a 32.

Si la unión por similitud se ejecuta varias veces en las mismas instancias de los datos, se podría considerar enfoques basados en índices [BK01], [PR09], [CGL+17], como R-tree [BKS93] o M-tree [CPZ97]. Los enfoques basados en índices tienen el potencial de reducir el tiempo de ejecución, ya que el índice almacena información precomputada que reduce significativamente el tiempo de ejecución de la consulta. Este paso precomputacional podría ser costoso, especialmente en el caso de la Lista de Clusters Gemelos (LTC) [PR09], donde el algoritmo necesita construir índices conjuntos o combinados para cada par de puntos del conjunto de datos. El D-Index [DGSZ03] y sus extensiones (es decir, el eD-Index [DGZ03] o el índice i-Sim [PS14]) construyen una estructura jerárquica de niveles de índice, donde cada nivel se organiza en cubos separables y un conjunto de exclusión. El inconveniente más importante de D-Index, eD-Index e i-Sim es que pueden requerir la reconstrucción de la estructura del índice para diferentes ϵ . Sin embargo, los enfoques de indexación espacial no funcionan bien en espacios de alta dimensión, debido a la "maldición de la dimensionalidad".

La partición de datos en múltiples máquinas no es el objetivo principal de este trabajo, en el que asumimos que los datos caben en la memoria principal. El caso de los algoritmos de unión relacional se ha estudiado ampliamente en el pasado [SD89], [WMP13], [FAB+18]. La unión por similitud se ha aplicado con éxito en el entorno distribuido con diferentes variantes de MapReduce [LWU16], [MS18], [FAB+18]. Otra versión distribuida se propone en [ZRDW16]. Allí se utiliza una solución multinodo con balanceo de carga, que no requiere re-partición en los datos de entrada. Esta variante se centra en la minimización de la transferencia de datos, la congestión de la red y el equilibrio de carga entre múltiples nodos.

La unión por similitud ya ha sido implementada para **Graphics Processing Units (GPUs)**. En [BNPZ09] los autores utilizan una estructura de directorios para generar puntos candidatos. En conjuntos de datos con 8 millones de puntos, el algoritmo propuesto para la GPU es más rápido que su variante para la CPU, cuando el ϵ -región tiene al menos 1 o 2 vecinos medios. LSS [LSS08] es otra variante de similaridad para la GPU, que es adecuada para datos de alta dimensión. Lamentablemente, tanto [LSS08] como [BNPZ09] están dirigidos a las GPUs NVIDIA y han sido optimizados para una versión antigua de CUDA.

A. Algoritmos de olvido de caché

Los algoritmos sin caché [FLPR99] han atraído una atención considerable, ya que son portables a casi todos los entornos y

arquitecturas. Se han propuesto algoritmos y estructuras de datos para tareas básicas como la ordenación, la búsqueda o el procesamiento de consultas [HLLY07] y para tareas especializadas como la reordenación de rayos [MBK⁺10] o la búsqueda de homología en bioinformática [FRR14]. Dos conceptos algorítmicos importantes de los algoritmos que no dependen de la caché son el acceso localizado a la memoria y el divide y vencerás. La curva de Hilbert integra ambas ideas. La curva de Hilbert define un ordenamiento 1D de los puntos de un espacio bidimensional de tal manera que cada punto es visitado una vez. Bader et al. propusieron utilizar la curva de Peano para la multiplicación de matrices y la descomposición LU [BM06], [Bad08]. Los algoritmos procesan las matrices de entrada de forma recursiva y por bloques, donde la curva de Peano guía el orden de procesamiento y, por tanto, el patrón de acceso a la memoria. En [BPP18], se han aplicado bucles con memoria caché a la agrupación de K-means y a la multiplicación de matrices.

B. Técnicas optimizadas para tareas específicas o hardware La biblioteca BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms) [DCHD90] proporciona operaciones básicas de álgebra lineal junto con interfaces de programación para C y Fortran. BLAS está altamente optimizado para el hardware: existen implementaciones específicas para diversas infraestructuras, por ejemplo, ACML para procesadores AMD Opteron o CUBLAS para GPUs NVIDIA. La Math Kernel Library (MKL) contiene rutinas de procesamiento matemático altamente vectorizadas para los procesadores Intel. Estas implementaciones son muy específicas del hardware y, en su mayoría, están optimizadas por el proveedor. Además, están diseñadas para soportar eficazmente operaciones específicas de álgebra lineal. Los experimentos demuestran que el enfoque sin caché alcanza un rendimiento mejor que BLAS en la tarea de la unión por similitud para puntos de dimensiones en el rango de $\{2, ..., 64\}.$

VIII. APLICACIONES

Estas técnicas se investigan para los algoritmos de DM en las siguientes aplicaciones:

- Electrocardiografía (ECG, 1D),
- Electroencefalografía (EEG, 1D),
- Tomografía computarizada (CT, 3D, 4D),
- SPECT (4D),
- Resonancia Magnética Estructural (MRI, 3D),
- Resonancia Magnética Funcional (fMRI, 4D),
- Imagen de Tensor de Difusión (DTI, 6D),
- Ultrasonido (US, 2D),
- Microscopía, Dermascopía (2D),
- , etc.

IX. CONCLUSIÓN

Este estudio revisa varios enfoques de DM de muchos grupos de investigación en todo el mundo. El hardware informático moderno permite el desarrollo de aplicaciones de alto rendimiento para el análisis de datos en muchos niveles

diferentes. La atención se centra en los modernos procesadores multinúcleo incorporados a los ordenadores básicos actuales, que suelen encontrarse en los institutos universitarios como pequeños servidores y ordenadores de estación de trabajo. Por tanto, no son deliberadamente ordenadores de alto rendimiento. Los procesadores multinúcleo modernos constan de varios (de 2 a más de 100) núcleos informáticos, que funcionan de forma independiente entre sí según el principio de "instrucciones múltiples, datos múltiples" (MIMD). Tienen una memoria principal común (memoria compartida). Cada uno de estos núcleos informáticos dispone de varias (2-16) unidades aritméticas-lógicas, que pueden realizar simultáneamente la misma operación aritmética sobre varios datos de forma vectorial (single instruction multiple data, SIMD). Los algoritmos de DM deben utilizar ambos tipos de paralelismo (SIMD y MIMD), siendo el acceso a la memoria principal (componente centralizado) la principal barrera para aumentar la eficiencia. Investigamos estos problemas de rendimiento en el contexto de aplicaciones de la industria sanitaria como ECG, EEG, CT, SPECT, fMRI, DTI, ultrasonidos, microscopía, dermascopía,

REFERENCES

[AB13] Nikolaus Augsten and Michael H. Böhlen. Similarity Joins in Relational Database Systems. Synthesis Lectures on Data Management. Morgan & Claypool Publishers, 2013.

[ABD+08a] Elke Achtert, Christian Böhm, Jörn David, Peer Kröger, and Arthur Zimek. Global correlation clustering based on the hough transform. Statistical Analysis and Data Mining, 1(3):111-127, 2008.

[ABD⁺08b] Elke Achtert, Christian Böhm, Jörn David, Peer Kröger, and Arthur Zimek. Robust clustering in arbitrarily oriented subspaces. In *Proceedings of the SIAM International Conference on Data Mining, SDM 2008, April 24-26, 2008, Atlanta, Georgia, USA*, pages 763–774. SIAM, 2008.

[ABK+06a] Elke Achtert, Christian Böhm, Hans-Peter Kriegel, Peer Kröger, Ina Müller-Gorman, and Arthur Zimek. Finding hierarchies of subspace clusters. In Knowledge Discovery in Databases: PKDD 2006, 10th European Conference on Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases, Berlin, Germany, September 18-22, 2006, Proceedings, pages 446–453, 2006

[ABK+06b] Elke Achtert, Christian Böhm, Hans-Peter Kriegel, Peer Kröger, and Arthur Zimek. Deriving quantitative models for correlation clusters. In Tina Eliassi-Rad, Lyle H. Ungar, Mark Craven, and Dimitrios Gunopulos, editors, Proceedings of the Twelfth ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, Philadelphia, PA, USA, August 20-23, 2006, pages 4–13. ACM, 2006.

[ABK+07] Elke Achtert, Christian Böhm, Hans-Peter Kriegel, Peer Kröger, and Arthur Zimek. On exploring complex relationships of correlation clusters. In 19th International Conference on Scientific and Statistical Database Management, SSDBM 2007, 9-11 July 2007, Banff, Canada, Proceedings, page 7, 2007.

[ABKZ06] Elke Achtert, Christian Böhm, Peer Kröger, and Arthur Zimek. Mining hierarchies of correlation clusters. In 18th International Conference on Scientific and Statistical Database Management, SSDBM 2006, 3-5 July 2006, Vienna, Austria, Proceedings, pages 119–128, 2006.

[AI06] Alexandr Andoni and Piotr Indyk. Near-optimal hashing algorithms for approximate nearest neighbor in high dimensions. In FOCS 2006, pages 459–468, 2006.

[APB13] Muzaffer Can Altinigneli, Claudia Plant, and Christian Böhm. Massively parallel expectation maximization using graphics processing units. In Inderjit S. Dhillon, Yehuda Koren, Rayid Ghani, Ted E. Senator, Paul Bradley, Rajesh Parekh, Jingrui He, Robert L. Grossman, and Ramasamy Uthurusamy, editors, *The*

- 19th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, KDD 2013, Chicago, IL, USA, August 11-14, 2013, pages 838–846. ACM, 2013.
- [Bad08] Michael Bader. Exploiting the locality properties of peano curves for parallel matrix multiplication. In Euro-Par Conference, pages 801–810, 2008.
- [BBB+04] Christian Baumgartner, Christian Böhm, Daniela Baumgartner, G. Marini, Klaus Weinberger, B. Olgemöller, B. Liebl, and A. A. Roscher. Supervised machine learning techniques for the classification of metabolic disorders in newborns. *Bioinform.*, 20(17):2985–2996, 2004.
- [BBB05] Christian Baumgartner, Christian Böhm, and Daniela Baumgartner. Modelling of classification rules on metabolic patterns including machine learning and expert knowledge. J. Biomed. Informatics, 38(2):89–98, 2005.
- [BBBK00] Christian Böhm, Bernhard Braunmüller, Markus M. Breunig, and Hans-Peter Kriegel. High performance clustering based on the similarity join. In Proceedings of the 2000 ACM CIKM International Conference on Information and Knowledge Management, McLean, VA, USA, November 6-11, 2000, pages 298–305. ACM, 2000.
- [BBK+00] Stefan Berchtold, Christian Böhm, Daniel A. Keim, Hans-Peter Kriegel, and Xiaowei Xu. Optimal multidimensional query processing using tree striping. In Yahiko Kambayashi, Mukesh K. Mohania, and A Min Tjoa, editors, Data Warehousing and Knowledge Discovery, Second International Conference, DaWaK 2000, London, UK, September 4-6, 2000, Proceedings, volume 1874 of Lecture Notes in Computer Science, pages 244–257. Springer, 2000.
- [BBK+01] Stefan Berchtold, Christian Böhm, Daniel A. Keim, Florian Krebs, and Hans-Peter Kriegel. On optimizing nearest neighbor queries in high-dimensional data spaces. In Jan Van den Bussche and Victor Vianu, editors, Database Theory - ICDT 2001, 8th International Conference, London, UK, January 4-6, 2001, Proceedings, volume 1973 of Lecture Notes in Computer Science, pages 435–449. Springer, 2001.
- [BBKK01] Christian Böhm, Bernhard Braunmüller, Florian Krebs, and Hans-Peter Kriegel. Epsilon grid order: An algorithm for the similarity join on massive high-dimensional data. In SIGMOD Conf. 2001, pages 379–388, 2001.
- [BBKM00] Christian Böhm, Stefan Berchtold, Hans-Peter Kriegel, and Urs Michel. Multidimensional index structures in relational databases. J. Intell. Inf. Syst., 15(1):51–70, 2000.
- [BBKS00] Christian Böhm, Bernhard Braunmüller, Hans-Peter Kriegel, and Matthias Schubert. Efficient similarity search in digital libraries. In Proceedings of IEEE Advances in Digital Libraries 2000 (ADL 2000), Washington, DC, USA, May 22-24, 2000, pages 193–199. IEEE Computer Society, 2000.
- [BEF08] Brent Bryan, Frederick Eberhardt, and Christos Faloutsos. Compact similarity joins. In *ICDE*, pages 346–355, 2008.
- [BFO+09] Christian Böhm, Frank Fiedler, Annahita Oswald, Claudia Plant, and Bianca Wackersreuther. Probabilistic skyline queries. In David Wai-Lok Cheung, Il-Yeol Song, Wesley W. Chu, Xiaohua Hu, and Jimmy J. Lin, editors, Proceedings of the 18th ACM Conference on Information and Knowledge Management, CIKM 2009, Hong Kong, China, November 2-6, 2009, pages 651–660. ACM, 2009.
- [BFP08] Christian Böhm, Christos Faloutsos, and Claudia Plant. Outlier-robust clustering using independent components. In Jason Tsong-Li Wang, editor, Proceedings of the ACM SIGMOD International Conference on Management of Data, SIGMOD 2008, Vancouver, BC, Canada, June 10-12, 2008, pages 185–198. ACM, 2008.
- [BFPP07] Christian Böhm, Christos Faloutsos, Jia-Yu Pan, and Claudia Plant. RIC: parameter-free noise-robust clustering. ACM Trans. Knowl. Discov. Data, 1(3):10, 2007.
- [BGBF05] Christian Baumgartner, Kurt Gautsch, Christian Böhm, and Stephan Felber. Functional cluster analysis of CT perfusion maps: A new tool for diagnosis of acute stroke? J. Digital Imaging, 18(3):219–226, 2005.
- [BGK+07] Christian Böhm, Michael Gruber, Peter Kunath, Alexey Pryakhin, and Matthias Schubert. Prover: Probabilistic video retrieval using the gauss-tree. In Rada Chirkova, Asuman Dogac, M. Tamer Özsu, and Timos K. Sellis, editors, *Proceedings of*

- the 23rd International Conference on Data Engineering, ICDE 2007, The Marmara Hotel, Istanbul, Turkey, April 15-20, 2007, pages 1521–1522. IEEE Computer Society, 2007.
- [BGO+10] Christian Böhm, Sebastian Goebl, Annahita Oswald, Claudia Plant, Michael Plavinski, and Bianca Wackersreuther. Integrative parameter-free clustering of data with mixed type attributes. In Mohammed Javeed Zaki, Jeffrey Xu Yu, Balaraman Ravindran, and Vikram Pudi, editors, Advances in Knowledge Discovery and Data Mining, 14th Pacific-Asia Conference, PAKDD 2010, Hyderabad, India, June 21-24, 2010. Proceedings. Part I, volume 6118 of Lecture Notes in Computer Science, pages 38-47. Springer, 2010.
- [BHMP09] Christian Böhm, Katrin Haegler, Nikola S. Müller, and Claudia Plant. Coco: coding cost for parameter-free outlier detection. In John F. Elder IV, Françoise Fogelman-Soulié, Peter A. Flach, and Mohammed Javeed Zaki, editors, Proceedings of the 15th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, Paris, France, June 28 July 1, 2009, pages 149–158. ACM, 2009.
- [Bia69] Theodore Bially. Space-filling curves: Their generation and their application to bandwidth reduction. *IEEE Trans. Information Theory*, 15:658–664, 1969.
- [BK00] Christian Böhm and Hans-Peter Kriegel. Dynamically optimizing high-dimensional index structures. In Carlo Zaniolo, Peter C. Lockemann, Marc H. Scholl, and Torsten Grust, editors, Advances in Database Technology EDBT 2000, 7th International Conference on Extending Database Technology, Konstanz, Germany, March 27-31, 2000, Proceedings, volume 1777 of Lecture Notes in Computer Science, pages 36–50. Springer, 2000.
- [BK01] Christian Böhm and Hans-Peter Kriegel. A cost model and index architecture for the similarity join. In *ICDE*, pages 411–420, 2001
- [BK02] Christian Böhm and Florian Krebs. High performance data mining using the nearest neighbor join. In Proceedings of the 2002 IEEE International Conference on Data Mining (ICDM 2002), 9-12 December 2002, Maebashi City, Japan, pages 43– 50. IEEE Computer Society, 2002.
- [BK03] Christian Böhm and Florian Krebs. Supporting KDD applications by the k-nearest neighbor join. In Vladimír Marík, Werner Retschitzegger, and Olga Stepánková, editors, Database and Expert Systems Applications, 14th International Conference, DEXA 2003, Prague, Czech Republic, September 1-5, 2003, Proceedings, volume 2736 of Lecture Notes in Computer Science, pages 504–516. Springer, 2003.
- [BK04] Christian Böhm and Florian Krebs. The k-nearest neighbour join: Turbo charging the KDD process. Knowl. Inf. Syst., 6(6):728–749, 2004.
- [BKS93] Thomas Brinkhoff, Hans-Peter Kriegel, and Bernhard Seeger. Efficient processing of spatial joins using r-trees. In SIGMOD Conf. 1993, pages 237–246, 1993.
- [BM06] Michael Bader and Christian E. Mayer. Cache oblivious matrix operations using peano curves. In *PARA Workshop*, pages 521– 530, 2006.
- [BNP+09] Christian Böhm, Robert Noll, Claudia Plant, Bianca Wackersreuther, and Andrew Zherdin. Data mining using graphics processing units. Trans. Large Scale Data Knowl. Centered Syst., 1:63–90, 2009.
- [BNPZ09] Christian Böhm, Robert Noll, Claudia Plant, and Andrew Zherdin. Indexsupported similarity join on graphics processors. In Johann Christoph Freytag, Thomas Ruf, Wolfgang Lehner, and Gottfried Vossen, editors, Datenbanksysteme in Business, Technologie und Web (BTW 2009), 13. Fachtagung des GI-Fachbereichs "Datenbanken und Informationssysteme" (DBIS), Proceedings, 2.-6. März 2009, Münster, Germany, volume P-144 of LNI, pages 57–66. GI, 2009.
- [BOPY07] Christian Böhm, Beng Chin Ooi, Claudia Plant, and Ying Yan. Efficiently processing continuous k-nn queries on data streams. In Rada Chirkova, Asuman Dogac, M. Tamer Özsu, and Timos K. Sellis, editors, Proceedings of the 23rd International Conference on Data Engineering, ICDE 2007, The Marmara Hotel, Istanbul, Turkey, April 15-20, 2007, pages 156–165. IEEE Computer Society, 2007.

- [BP08] Christian Böhm and Claudia Plant. HISSCLU: a hierarchical density-based method for semi-supervised clustering. In Alfons Kemper, Patrick Valduriez, Noureddine Mouaddib, Jens Teubner, Mokrane Bouzeghoub, Volker Markl, Laurent Amsaleg, and Ioana Manolescu, editors, EDBT 2008, 11th International Conference on Extending Database Technology, Nantes, France, March 25-29, 2008, Proceedings, volume 261 of ACM International Conference Proceeding Series, pages 440–451. ACM,
- [BPP18] Christian Böhm, Martin Perdacher, and Claudia Plant. A novel hilbert curve for cache-locality preserving loops. IEEE Transactions on Big Data, 2018.
- [BPS06] Christian Böhm, Alexey Pryakhin, and Matthias Schubert. Probabilistic ranking queries on gaussians. In 18th International Conference on Scientific and Statistical Database Management, SSDBM 2006, 3-5 July 2006, Vienna, Austria, Proceedings, pages 169–178. IEEE Computer Society, 2006.
- [CGL+17] Lu Chen, Yunjun Gao, Xinhan Li, Christian S. Jensen, and Gang Chen. Efficient metric indexing for similarity search and similarity joins. *IEEE Trans. Knowl. Data Eng.*, 29(3):556–571, 2017.
- [CPZ97] Paolo Ciaccia, Marco Patella, and Pavel Zezula. M-tree: An efficient access method for similarity search in metric spaces. In VLDB'97, pages 426–435, 1997.
- [DCHD90] Jack Dongarra, Jeremy Du Croz, Sven Hammarling, and Iain S. Duff. A set of level 3 basic linear algebra subprograms. ACM Trans. Math. Softw., 16(1):1–17, 1990.
- [DEW+12] Martin Dyrba, Michael Ewers, Martin Wegrzyn, Ingo Kilimann, Claudia Plant, Annahita Oswald, Thomas Meindl, Michela Pievani, Arun L. W. Bokde, Andreas Fellgiebel, Massimo Filippi, Harald Hampel, Stefan Klöppel, Karlheinz Hauenstein, Thomas Kirste, and Stefan J. Teipel. Combining DTI and MRI for the automated detection of alzheimer's disease using a large european multicenter dataset. In Pew-Thian Yap, Tianming Liu, Dinggang Shen, Carl-Fredrik Westin, and Li Shen, editors, Multimodal Brain Image Analysis Second International Workshop, MBIA 2012, Held in Conjunction with MICCAI 2012, Nice, France, October 1-5, 2012. Proceedings, volume 7509 of Lecture Notes in Computer Science, pages 18–28. Springer, 2012.
- [DGSZ03] Vlastislav Dohnal, Claudio Gennaro, Pasquale Savino, and Pavel Zezula. D-index: Distance searching index for metric data sets. Multimedia Tools Appl., 21(1):9–33, 2003.
- [DGZ03] Vlastislav Dohnal, Claudio Gennaro, and Pavel Zezula. Similarity join in metric spaces using ed-index. In DEXA 2003, pages 484–493, 2003.
- [DS01] Jens-Peter Dittrich and Bernhard Seeger. GESS: a scalable similarity-join algorithm for mining large data sets in high dimensional spaces. In *SIGKDD*, pages 47–56, 2001.
- [DTL18] Dong Deng, Yufei Tao, and Guoliang Li. Overlap set similarity joins with theoretical guarantees. In *SIGMOD Conf. 2018*, pages 905–920, 2018.
- [FAB+18] Fabian Fier, Nikolaus Augsten, Panagiotis Bouros, Ulf Leser, and Johann-Christoph Freytag. Set similarity joins on mapreduce: An experimental survey. PVLDB, 11(10):1110–1122, 2018.
- [FHK+12] Jing Feng, Xiao He, Bettina Konte, Christian Böhm, and Claudia Plant. Summarization-based mining bipartite graphs. In Qiang Yang, Deepak Agarwal, and Jian Pei, editors, The 18th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, KDD '12, Beijing, China, August 12-16, 2012, pages 1249–1257. ACM, 2012.
- [FLPR99] Matteo Frigo, Charles E. Leiserson, Harald Prokop, and Sridhar Ramachandran. Cache-oblivious algorithms. In FOCS 1999, pages 285–298, 1999.
- [FRR14] Miguel Ferreira, Nuno Roma, and Luís M. S. Russo. Cacheoblivious parallel SIMD viterbi decoding for sequence search in HMMER. BMC Bioinformatics, 15:165, 2014.
- [GHPB14] Sebastian Goebl, Xiao He, Claudia Plant, and Christian Böhm. Finding the optimal subspace for clustering. In Ravi Kumar, Hannu Toivonen, Jian Pei, Joshua Zhexue Huang, and Xindong Wu, editors, 2014 IEEE International Conference on Data Mining, ICDM 2014, Shenzhen, China, December 14-17, 2014, pages 130–139. IEEE Computer Society, 2014.

- [HLLY07] Bingsheng He, Yinan Li, Qiong Luo, and Dongqing Yang. Easedb: a cache-oblivious in-memory query processor. In SIGMOD Conf. 2007, pages 1064–1066, 2007.
- [HOK18] ThienLuan Ho, Seungrohk Oh, and Hyunjin Kim. New algorithms for fixed-length approximate string matching and approximate circular string matching under the hamming distance. The Journal of Supercomputing, 74(5):1815–1834, 2018.
- [Kal13] Dmitri V. Kalashnikov. Super-ego: fast multi-dimensional similarity join. VLDB J., 22(4):561–585, 2013.
- [KP03] Dmitri V. Kalashnikov and Sunil Prabhakar. Similarity join for low-and high-dimensional data. In (DASFAA '03), pages 7–16, 2003.
- [KP07] Dmitri V. Kalashnikov and Sunil Prabhakar. Fast similarity join for multi-dimensional data. *Inf. Syst.*, 32(1):160–177, 2007.
- [KS00] Nick Koudas and Kenneth C. Sevcik. High dimensional similarity joins: Algorithms and performance evaluation. *IEEE Trans. Knowl. Data Eng.*, 12(1):3–18, 2000.
- [LSS08] Michael D. Lieberman, Jagan Sankaranarayanan, and Hanan Samet. A fast similarity join algorithm using graphics processing units. In *ICDE*, pages 1111–1120, 2008.
- [LWU16] Ye Li, Jian Wang, and Leong Hou U. Multidimensional similarity join using mapreduce. In Web-Age Information Management, pages 457–468, 2016.
- [MBK+10] Bochang Moon, Yongyoung Byun, Tae-Joon Kim, Pio Claudio, Hye-Sun Kim, Yun-Ji Ban, Seung Woo Nam, and Sung-Eui Yoon. Cache-oblivious ray reordering. ACM Trans. Graph., 29(3), 2010.
- [MGP12] Son T. Mai, Sebastian Goebl, and Claudia Plant. A similarity model and segmentation algorithm for white matter fiber tracts. In Mohammed Javeed Zaki, Arno Siebes, Jeffrey Xu Yu, Bart Goethals, Geoffrey I. Webb, and Xindong Wu, editors, 12th IEEE International Conference on Data Mining, ICDM 2012, Brussels, Belgium, December 10-13, 2012, pages 1014–1019. IEEE Computer Society, 2012.
- [MHF+15] Son T. Mai, Xiao He, Jing Feng, Claudia Plant, and Christian Böhm. Anytime density-based clustering of complex data. Knowl. Inf. Syst., 45(2):319–355, 2015.
- [MJZ17] Youzhong Ma, Shijie Jia, and Yongxin Zhang. A novel approach for high-dimensional vector similarity join query. Concurrency and Computation: Practice and Experience, 29(5), 2017.
- [MS18] Samuel McCauley and Francesco Silvestri. Adaptive mapreduce similarity joins. In SIGMOD Workshop on Algorithms and Systems for MapReduce and Beyond, pages 4:1–4:4, 2018.
- [PB11] Claudia Plant and Christian Böhm. INCONCO: interpretable clustering of numerical and categorical objects. In Chid Apté, Joydeep Ghosh, and Padhraic Smyth, editors, Proceedings of the 17th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, San Diego, CA, USA, August 21-24, 2011, pages 1127–1135. ACM, 2011.
- [PBTB06] Claudia Plant, Christian Böhm, Bernhard Tilg, and Christian Baumgartner. Enhancing instance-based classification with local density: a new algorithm for classifying unbalanced biomedical data. *Bioinform.*, 22(8):981–988, 2006.
- [Pla12] Claudia Plant. Dependency clustering across measurement scales. In Qiang Yang, Deepak Agarwal, and Jian Pei, editors, The 18th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, KDD '12, Beijing, China, August 12-16, 2012, pages 361–369. ACM, 2012.
- [PM18] Nicolas Papernot and Patrick D. McDaniel. Deep k-nearest neighbors: Towards confident, interpretable and robust deep learning. CoRR, abs/1803.04765, 2018.
- [PPSS17] Rasmus Pagh, Ninh Pham, Francesco Silvestri, and Morten Stöckel. I/o-efficient similarity join. Algorithmica, 78(4):1263– 1283, 2017.
- [PR09] Rodrigo Paredes and Nora Reyes. Solving similarity joins and range queries in metric spaces with the list of twin clusters. *J. Discrete Algorithms*, 7(1):18–35, 2009.
- [Pru86] P Prusinkiewicz. Graphical applications of 1-systems. In Proceedings on Graphics Interface '86/Vision Interface '86, pages 247–253, 1986.
- [PS14] Spencer S. Pearson and Yasin N. Silva. Index-based R-S similarity joins. In SISAP, pages 106–112, 2014.
- [PWZ09] Claudia Plant, Afra M. Wohlschläger, and Andrew Zherdin. Interaction-based clustering of multivariate time series. In

- Wei Wang, Hillol Kargupta, Sanjay Ranka, Philip S. Yu, and Xindong Wu, editors, *ICDM 2009, The Ninth IEEE International Conference on Data Mining, Miami, Florida, USA, 6-9 December 2009*, pages 914–919. IEEE Computer Society, 2009.
- [SD89] Donovan A. Schneider and David J. DeWitt. A performance evaluation of four parallel join algorithms in a shared-nothing multiprocessor environment. In SIGMOD Conf. 1989, pages 110–121, 1989.
- [SHB+13] Junming Shao, Xiao He, Christian Böhm, Qinli Yang, and Claudia Plant. Synchronization-inspired partitioning and hierarchical clustering. IEEE Trans. Knowl. Data Eng., 25(4):893–905, 2013.
- [SLLF17] Zeyuan Shang, Yaxiao Liu, Guoliang Li, and Jianhua Feng. Kjoin: Knowledge-aware similarity join. In *ICDE*, pages 23–24, 2017
- [SMY+12] Junming Shao, Nicholas Myers, Qinli Yang, Jing Feng, Claudia Plant, Christian Böhm, Hans Förstl, Alexander Kurz, Claus Zimmer, Chun Meng, Valentin Riedl, Afra Wohlschläger, and Christian Sorg. Prediction of alzheimer's disease using individual structural connectivity networks. *Neurobiology of Aging*, 33(12):2756–2765, 2012.
- [SPYB11] Junming Shao, Claudia Plant, Qinli Yang, and Christian Böhm. Detection of arbitrarily oriented synchronized clusters in high-dimensional data. In Diane J. Cook, Jian Pei, Wei Wang, Osmar R. Zaïane, and Xindong Wu, editors, 11th IEEE International Conference on Data Mining, ICDM 2011, Vancouver, BC, Canada, December 11-14, 2011, pages 607-616. IEEE Computer Society, 2011.
- [SS83] Rani Siromoney and K. G. Subramanian. Space-filling curves and infinite graphs. In Hartmut Ehrig, Manfred Nagl, and Grzegorz Rozenberg, editors, *Graph-Grammars and Their Applica*tion to Computer Science, pages 380–391, Berlin, Heidelberg, 1983. Springer Berlin Heidelberg.
- [SWY+17] Junming Shao, Xinzuo Wang, Qinli Yang, Claudia Plant, and Christian Böhm. Synchronization-based scalable subspace clustering of high-dimensional data. *Knowl. Inf. Syst.*, 52(1):83–111, 2017.
- [WMP13] Ye Wang, Ahmed Metwally, and Srinivasan Parthasarathy. Scalable all-pairs similarity search in metric spaces. In SIGKDD, pages 829–837, 2013.
- [XWL08] Chuan Xiao, Wei Wang, and Xuemin Lin. Ed-join: an efficient algorithm for similarity joins with edit distance constraints. *PVLDB*, 1(1):933–944, 2008.
- [XWL+11] Chuan Xiao, Wei Wang, Xuemin Lin, Jeffrey Xu Yu, and Guoren Wang. Efficient similarity joins for near-duplicate detection. ACM Trans. Database Syst., 36(3):15:1–15:41, 2011.
- [YGPB16] Wei Ye, Sebastian Goebl, Claudia Plant, and Christian Böhm. FUSE: full spectral clustering. In Balaji Krishnapuram, Mohak Shah, Alexander J. Smola, Charu C. Aggarwal, Dou Shen, and Rajeev Rastogi, editors, Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, San Francisco, CA, USA, August 13-17, 2016, pages 1985–1994. ACM, 2016.
- [YMHP16] Wei Ye, Samuel Maurus, Nina Hubig, and Claudia Plant. Generalized independent subspace clustering. In Francesco Bonchi, Josep Domingo-Ferrer, Ricardo Baeza-Yates, Zhi-Hua Zhou, and Xindong Wu, editors, IEEE 16th International Conference on Data Mining, ICDM 2016, December 12-15, 2016, Barcelona, Spain, pages 569–578. IEEE Computer Society, 2016
- [YNL+17] Chenyun Yu, Sarana Nutanong, Hangyu Li, Cong Wang, and Xingliang Yuan. A generic method for accelerating lsh-based similarity join processing. *IEEE Trans. Knowl. Data Eng.*, 29(4):712–726, 2017.
- [YSS+12] Qinli Yang, Junming Shao, Miklas Scholz, Christian Böhm, and Claudia Plant. Multi-label classification models for sustainable flood retention basins. *Environ. Model. Softw.*, 32:27–36, 2012.
- [ZRDW16] Weijie Zhao, Florin Rusu, Bin Dong, and Kesheng Wu. Similarity join over array data. In SIGMOD Conf. 2016, pages 2007–2022, 2016.