

Normalisoitu pakkausetäisyys: sovelluksia ja variaatioita

Timo Sand

Kandidaatintutkielma
HELSINGIN YLIOPISTO
Tietojenkäsittelytieteen laitos

Helsinki, 8. joulukuuta 2013

Tiedekunta — Fakultet — Faculty		Laitos — Institution — Department	
Matemaattis-luonnontieteellinen		Tietojenkäsittelytieteen laitos	
Tekijä — Författare — Author			
Timo Sand			
Työn nimi — Arbetets titel — Title			
Normalisoitu pakkausetäisyys:sovelluksia ja variaatioita			
Oppiaine — Läroämne — Subject			
Tietojenkäsittelytiede			
Työn laji — Arbetets art — Level		Aika — Datum — Month and year	Sivumäärä — Sidoantal — Number of pages
Kandidaatintutkielma		8. joulukuuta 2013	22
Tiivistelmä — Referat — Abstract			
<p>Tähän tulee tutkielman tiivistelmä</p> <ul style="list-style-type: none">NCD:n esittelyKlusteroinnin esittelyOngelma ja OminaisuudetGSD <p>ACM Computing Classification System (CCS):</p> <p>Information systems - Similarity measures</p> <p><i>Theory of computation - Unsupervised learning and clustering</i></p> <p>Data mining - Clustering</p>			
Avainsanat — Nyckelord — Keywords			
Samankaltaisuus, Klusterointi, Valvoton oppiminen, Tiedonlouhinta			
Säilytyspaikka — Förvaringsställe — Where deposited			
Muita tietoja — Övriga uppgifter — Additional information			

Sisältö

1	Johdanto	1
2	Normalisoitu pakkausetäisyys	3
2.1	Kolmogorov-kompleksisuus	3
2.2	Normalisoitu informaatioetäisyys	3
2.3	Normaali pakkaaja	4
2.4	Normalisoitu Pakkausetäisyys	5
3	Klusterointi	6
3.1	Nelikkomenetelmä	6
4	Algoritmin ongelmat ja ominaisuudet	9
4.1	Kohinansietokyky	9
4.2	Pakkaajan valinta	10
5	Google-samankaltaisuusetäisyys	13
5.1	Käytännön esimerkki	14
5.2	Hakukoneet samankaltaisuuden mittaamisessa	15
5.3	Google-jakauma	16
5.4	Google-samankaltaisuusetäisyys	17
5.5	Hierarkkinen klusterointi	18
6	Yhteenveto	19
	Lähteet	21

1 Johdanto

Kaikki data on luotu samanveroiseksi, mutta jotkut datat ovat samankaltaisempia kuin toiset. Esitämme tavan, jolla ilmaista tämä samankaltaisuus, käyttäen Cilibrasin ja Vitányin esittelemää samankaltaisuuden metriikkaa (*engl. similarity metric*), joka perustuu tiedoston pakkaamiseen. [CV05] Metriikka on parametriton, eli se ei käytä datan ominaisuuksia tai taustatietoja, ja sitä voi soveltaa eri aloihin ilman muunnoksia. Metriikka on universaali, joten se kykenee approksimoimaan objektiparin hallitsevan piirteen (*engl. dominant feature*), jonka perusteella parin samankaltaisuus arvioidaan. Se on vakaa siinä mielessä, että sen tulokset ovat riippumattomia käytetystä pakkaajasta [CV05]. Pakkaajalla tarkoitetaan pakkausohjelmaa kuten *gzip*, *ppmz*, *bzip2*.

Pakkaukseen perustuva samankaltaisuus (*engl. Compression-Based Similarity*) on universaali metriikka, jonka kehittivät Cilibrasi ja Vitányi [CV05]. Yksinkertaistettuna tämä tarkoittaa, että kaksi objektia ovat lähellä toisiaan, jos voimme ‘pakata’ yhden objektin huomattavasti tiiviimmin toisen objektin datalla. Abstraktina ideana toimii se, että voimme kuvailla ytimekkäämmin yhden objektin toisen avulla, mikäli objektit ovat samankaltaisia. Tämän esittelemme luvussa 2 ja samalla käymme läpi mihin teoriaan algoritmi perustuu sekä miten se toimii. Edellä mainitun vakauden esittämiseen voimme käyttää useaa tosielämän pakkausalgoritmia: tilastollista (PPMZ), Lempel-Ziv-algoritmiin pohjautuvaa hakemistollista (*gzip*), lohkoperusteista (*bzip2*) tai erityistarkoitusta varten suunniteltua (Gencompress).

Käytetyt yhtälöt pätevät aina lähes täsmälleen, sillä siirrytään Kolmogorov-kompleksisuudesta laskettavaan approksimaatioon. Approksimaation virhe on hyvin pieni: $O(\log n)$ (n on esim. tiedoston pituus).

Tarkoituksemme on koota yhteen samankaltaisuuden metriikkaan kaikki tehokkaat etäisyydet (*engl. effective distances*): tehokkaat versiot Hammingin etäisyydestä, Euklidisesta etäisyydestä, Lempel-Ziv etäisyydestä ja niin edelleen. Tämän metriikan tulee olla niin yleinen, että se toimii yhtäläisesti ja samanaikaisesti kaikilla aloilla: musiikilla, tekstillä, kirjallisuudella, ohjelmilla,

genomeilla, luonnollisen kielen määrittelyksillä. Sen pitäisi pystyä samanaikaisesti havaitsemaan kaikki samankaltaisuudet objektien välillä, joita muut etäisyydet havaitsevat erikseen.

Kun määrittelemme ryhmän sallittavia etäisyyksiä (*engl. admissible distances*) haluamme sulkea pois epärealistiset, kuten $f(x, y) = \frac{1}{2}$ jokaiselle parille $x \neq y$. Saavutamme tämän rajoittamalla objektien lukumäärän annetussa etäisyydessä objektiin. Teemme tämän huomioimalla vain todellisia etäisyyksiä seuraavasti: oletamme kiinnitetyn ohjelmointikielen, joka toimii tutkielman ajan viitekielenä. Tämä ohjelmointikieli voi olla yleinen kieli kuten LISP tai Ruby, mutta se voi myös olla määrätty universaali Turingin kone. [CV05, CV07] Valinnalla ei kuitenkaan ole merkitystä, sillä teoria on invariantti ohjelmointikielin muutoksille kunhan pysytään tehdyssä valinnassa.

Jotta voimme soveltaa tätä ideaalia ja tarkkaa matemaattista teoriaa käytäntöön, pitää meidän korvata ei laskettavissa oleva Kolmogorov-kompleksisuus approksimaatiolla käyttäen standardia pakkaajaa.

Luvussa 3 esittelemme algoritmin käyttöä klusteroinnissa. Aloitamme siitä, miten yleisesti *Normalisoidun pakkausetäisyyden* (*NCD*) avulla pystymme klusteroimaan tuloksia eri kategorioihin; miten musiikkikappaleet klusteroituvat saman artistin alle, miten kuvantunnistuksessa saamme ryhmitettyä samankaltaiset kuvat ja miten sienten genomeista saamme tarkan lajiryhmityksen.

Tämän luvun lopussa syvennymme musiikin, kuvantunnistuksen ja dokumenttien kategorisoinnin tuloksiin.

Luvussa 4 esitellään NCD:n ominaisuuksia ja ongelmia. Ensiksi esitellään NCD:n kohinansietokykyä, eli katsotaan mitä tapahtuu kun lisätään vähitellen kohinaa toiseen tiedostoista, jota pakataan, ja mittaamalla samankaltaisuutta tämän jälkeen [CAO07]. Saamme nähdä miten paljon kohina vaikuttaa NCD:n laskemiin etäisyyksiin ja huonontaako se klusteroinnin tuloksia.

Mikään algoritmi ei ole täydellinen, ja NCD-algoritmillakin on ongelmansa. Algoritmissa itsessään ei ole selvää heikkoutta, mutta sen käytössä on otettava pakkaajan valinta huomioon, koska monet suosituista pakkausalgoritmeista

ovat optimoituja tietyn kokoisille tiedostoille. Näissä algortimeissa on niin kutsuttu ikkunakoko (*engl. window size*), joka määrittelee mikä tiedostokoko on sopiva [CAO05]. Jos tiedostokoko on pienempi kuin ikkunakoko, niin pakkaus on tehokasta, mutta kun mennään siitä yli, pakkauksesta tulee huomattavasti tehottomampaa. Esittelemme tuloksia eri pakkausalgoritmien vertailuista ja mikä näistä algoritmeista on parhaimmaksi havaittu NCD:n kanssa käytettäväksi.

NCD ei ole ainut metriikka, jolla voidaan mitata samankaltaisuutta. Internetiä hyödyntäen on tehty metriikka, joka käyttää hakukoneita samankaltaisuuden tutkimiseen; tämä on nimetty Google-samankaltaisuusetäisyydeksi (*engl. Google Similarity Distance*) [CV07]. Tämä toimii myös muilla hakukoneilla kuten Bingillä. Luvussa 5 esittelemme tämän.

2 Normalisoitu pakkausetäisyys

2.1 Kolmogorov-kompleksisuus

Merkkijonon x *Kolmogorov-kompleksisuus* on pituus bitteinä, lyhimmästä tietokoneohjelmasta joka ilman syötettä palauttaa merkkijonon x ; tämä merkitään $K(x) = K(x|\lambda)$, λ esittää tyhjää syötettä. Lyhimmän tietokoneohjelman pituus, joka palauttaa x syötteellä y , on Kolmogorov-kompleksisuus x :stä syötteellä y ; tämä merkitään $K(x|y)$. Yksi tapa hahmottaa Kolmogorov-kompleksisuutta $K(x)$ on ajatella se pituutena bitteinä x :n tiiviimmin pakatussa muodossa, josta voidaan purkaa x pakkauksenpurkuohjelmalla.

2.2 Normalisoitu informaatioetäisyys

Artikkelissa [CV05] on esitelty *informaatioetäisyys* $E(x, y)$, joka on määritelty lyhimpänä binääriohjelman pituutena, joka syötteellä x laskee y :n ja syötteellä y laskee x :n. Tämä lasketaan seuraavasti:

$$E(x, y) = \max\{K(x|y), K(y|x)\}. \quad (1)$$

Normalisoitu versio informaatioetäisyydestä $E(x, y)$, jota kutsutaan *normalisoiduksi informaatioetäisyydeksi*, on määritelty seuraavasti

$$NID(x, y) = \frac{\max\{K(x|y), K(y|x)\}}{\max\{K(x), K(y)\}}. \quad (2)$$

Tämä on paras mahdollinen *samankaltaisuuden metriikka*, ja sen on osoitettu [CV05] täyttävän vaatimukset etäisyyden metriikaksi. *NID* ei kuitenkaan ole laskettava tai edes semi-laskettava, koska Turingin määritelmän mukaan Kolmogorov-kompleksisuus ei ole laskettava [CV05]. Nimittäjän approksimointi annetulla pakkaajalla C on $\max\{C(x), C(y)\}$. Osoittajan paras approksimaatio on $\max\{C(xy), C(yx)\} - \min\{C(x), C(y)\}$ [CV05]. Kun *NID* approksimoidaan oikealla pakkaajalla, saadaan tulos jota kutsutaan *normalisoiduksi pakkausetäisyydeksi*. Tämä esitellään formaalisti myöhemmin.

2.3 Normaali pakkaaja

Seuraavaksi esitämme aksioomia, jotka määrittelevät laajan joukon pakkaajia ja samalla varmistavat *normalisoidussa pakkausetäisyydessä* halutut ominaisuudet. Näihin pakkaajiin kuuluvat monet tosielämän pakkaajat.

Pakkaaja C on *normaali* jos se täyttää seuraavat aksioomat:

1. *Idempotenssi*: $C(xx) = C(x)$ ja $C(\lambda) = 0$, jossa λ on tyhjä merkkijono,
2. *Monotonisuus*: $C(xy) \geq C(x)$,
3. *Symmetrisyys*: $C(xy) = C(yx)$ ja
4. *Distributiivisuus*: $C(xy) + C(z) \leq C(xz) + C(yz)$.

2.4 Normalisoitu Pakkausetäisyys

Jotta voimme soveltaa tätä ideaalia ja tarkkaa matemaattista teoriaa käytännössä, pitää meidän korvata ei laskettavissa oleva Kolmogorov-kompleksisuus approksimaatiolla käyttäen standardia pakkaajaa.

Normalisoitua versiota *hyväksyttävästä etäisyydestä* $E_c(x, y)$, joka on pakkaajaan C pohjautuva approksimaatio normalisoidusta informaatioetäisyydestä, kutsutaan nimellä *Normalisoitu Pakkausetäisyys (NCD)* [CV05]. Tämä lasketaan seuraavasti

$$NCD(x, y) = \frac{C(xy) - \min\{C(x), C(y)\}}{\max\{C(x), C(y)\}}. \quad (3)$$

NCD on funktioiden joukko, joka ottaa argumenteiksi kaksi objektia (esim. tiedostoja tai Googlen hakusanoja) ja tiivistää nämä, erillisinä ja yhdistettyinä. Tämä funktioiden joukko on parametrisoitu käytetyn pakkaajan C mukaan.

Käytännössä NCD :n tulos on välillä $0 \leq r \leq 1 + \epsilon$, mikä vastaa kahden tiedoston eroa toisistaan; mitä pienempi luku, sitä enemmän tiedostot ovat samankaltaisia. Tosielämässä pakkausalgoritmit eivät ole yhtä tehokkaita kuin teoreettiset mallit, joten virhemarginaali ϵ on lisätty ylärajaan. Suurimmalle osalle näistä algoritmeista on epätodennäköistä että $\epsilon > 0.1$.

Luonnollinen tulkinta NCD :stä, jos oletetaan $C(y) \geq C(x)$, on

$$NCD(x, y) = \frac{C(xy) - C(x)}{C(y)}. \quad (4)$$

Eli etäisyys x :n ja y :n välillä on suhde y :n parannuksesta, kun y pakataan käyttäen x :ää, ja y :n pakkauksesta yksinään; suhde ilmaistaan etäisyytenä bittien lukumääränä kummankin pakatun version välillä.

Kun pakkaaja on normaali, niin NCD on normalisoitu hyväksyttävä etäisyys, joka täyttää metriikan yhtälöt, eli se on samankaltaisuuden metriikka.

Arvot	Laskutoimitus	NCD:n arvo
$C(xx) = 26, C(x) = 17$	$\frac{26-17}{17}$	0.529
$C(xx) = 33, C(x) = 22$	$\frac{33-22}{22}$	0.5
$C(xx) = 30, C(x) = 17$	$\frac{30-17}{17}$	0.765
$C(xx) = 20, C(x) = 14$	$\frac{20-14}{14}$	0.428
$C(xx) = 16, C(x) = 14$	$\frac{16-14}{14}$	0.143
$C(xx) = 28, C(x) = 14$	$\frac{28-14}{14}$	1
$C(xy) = 37, C(x) = 28, C(y) = 30$	$\frac{37-28}{30}$	0.3

Taulukko 1: *Normalisoituja pakkausetäisyyksiä eri syötteille.*

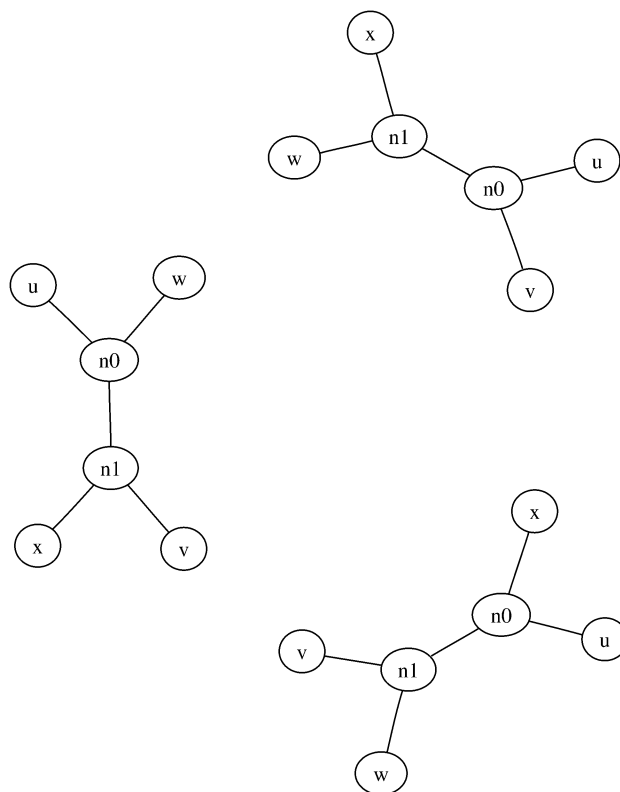
Taulukossa 1 esitellään muutama arvo joilla NCD lasketaan ja mikä tulos näistä saadaan. Taulukon arvot saatu artikkelista [CAO05].

3 Klusterointi

Yksi NCD:n käyttötarkoituksista on objektien klusterointi ilman, että datasta tarvitsee etukäteen kerätä ominaisuuksia. Täten samaan menetelmää voidaan hyödyntää klusteroimaan täysin eri tyyppisiä datajoukkoja. Klusterit ovat ryhmä objekteja, jotka ovat samankaltaisia valitun metriikan mukaan. Tässä tarkoitus on analysoida dataa, joka on tunnistetun ja siitä ei tiedetä etukäteen klustereitten lukumäärää. NCD:n kanssa käytetään yleisesti hierarkkista klusterointia, koska sitä pidetään yhtenä parhaista valvomattoman oppimisen (*engl. unsupervised learning*) metodeina. Yksi luonnollisimmista tavoista esittää objektien suhteet on dendrogrammi, joka on yleensä suunnattu binääripuu tai suuntaamaton ternääripuu [CVDW04]. Rakentaaksemme tällainen puu etäisyymatriisista käytämme nelikkomenetelmää.

3.1 Nelikkomenetelmä

Meillä on määrätty joukko objekteja ja näiden pareittaisista NCD:n arvoista muodostuvat etäisyysmatriisin alkiot, jotka edustavat etäisyyksiä kaikkien objektiparien välillä. Tässä matriisissa pareittaiset suhteet ovat raa'assa muodossa ja täten tietoa on vaikea hahmottaa. Jotta voimme klusteroida objektit



Kuva 1: Kolme mahdollista nelikkotopologiaa [CV05]

hierarkkisesti määritämme ternääripuun (*engl. ternary tree*), joka vastaa etäisyysmatriisin tietosisältöä jonkin valitun kustannusmittarin mukaan.

Käsitlemme jokaista neljän objektin ryhmää n kokoisesta joukosta. Näiden ryhmien lukumäärä on $\binom{n}{4}$. Jokaisesta ryhmästä $\{u, v, w, x\}$ rakennamme puun, jossa jokaisella sisäsolmulla on 3 naapuria, eli puu koostuu kahdesta alipuusta, joissa on kummassakin kaksi lapsisolmua. Tällaista puuta kutsutaan *nelikkotopologiaksi* (*engl. quartet topology*) [CV05] tai *nelikoksi* (*engl. quartet*) [CVdW04]. On olemassa kolme vaihtoehtoa miten tämä puu rakentuu: a) $uv|wx$, b) $uw|vx$, c) $ux|vw$, joissa pystyviiva erottelee lapsisolmuparit eri alipuihin (kts. kuva 1).

Jokaista määrättyä puuta T ja jokaista lapsisolmumerkin ryhmää $\{u, v, w, x\}$ kohden sanomme, että T on konsistentti $uv|wx$:n kanssa, jos ja vain jos polku u :sta v :hen ei risteä polun w :stä x :än kanssa.

Voimme kuvitella isomman puun rakentuvan monesta pienemmästä nelikosta. Yleisesti nelikkomenetelmän tarkoitus on löytää tai approksimoida mahdollisimman lähelle puu, joka sisältää maksimaalisen määrän nelikoita määrätystä joukosta Q . Puun T kustannus lasketaan seuraavasti:

$$C_T = \sum_{\{u,v,w,x\} \subseteq N} \{C_{uv|wx} : T \text{ on konsistentti } uv|wx \text{ kanssa}\}.$$

Jotta voimme vertailla puiden pisteitä C_T , niin nämä pitää normalisoida; nyt 0 vastaa huonointa ja 1 parasta pistearvoa. Tätä termiä kutsutaan *normalisoiduksi puun hyötytulokseksi* (engl. *normalized tree benefit score*) $S(T)$ [CV05]. Pyrkimys on löytää puu jonka $S(T)$:n arvo on maksimaalinen, eli pienin kokonaiskustannus. Tällaisen puun löytäminen tosin on NP-vaikea, eli se on erittäin epätodennäköistä, joskin välillä löytyy vastaus ja aina voidaan approksimoida se. Tämän laskeminen on erittäin intensiivistä ja vaatii paljon resursseja, ja siihen on sen takia kehitetty yksinkertainen heuristinen metodi, joka pohjautuu satunnaisuuteen ja vuorikiipeilijä-algoritmiin (engl. *hill-climbing*). Ensiksi luodaan satunnainen puu, johon luodaan $2n - 2$ solmua. Näistä n on lehtisolmuja, nimettynä objektien mukaan, ja $n - 2$ sisäsolmua jotka merkitään kirjaimella 'n' ja uniikilla numerolla. Jokaisella sisäsolmulla on tasan 3 kaarta. Tälle puulle lasketaan $S(T)$ ja se asetetaan nykyiseksi parhaaksi puuksi. Puulle on määritelty operaatioita mitä voidaan suorittaa [CV05]. Puulle suoritetaan mutaatio (yksi tai useampi operaatio) T :stä T' :hen ja sitten lasketaan $S(T')$, jos $S(T') > S(T)$, niin T' :stä tulee uusi paras puu. Mutaatioita suoritetaan kunnes $S(T')$ on 1 tai kunnes parempia puita ei löydy järkevässä ajassa. Suorituksen lopussa tulostetaan paras puu.

Klusteroinnista on usea esimerkki olemassa ja käsittelemmä tässä muutamana näistä. Ensimmäiseksi tarkastelemme musiikkigenrejen tunnistamista. Objekteiksi valittiin 12 klassista kappaletta, 12 jazz kappaletta ja 12 rock kappaletta. Tulokseksi saadun puun $S(T)$ on 0.858. Kappaleet ryhmittäytyivät suurimmaksi osaksi oikeisiin kategoriaihin, mutta poikkeuksiakin oli. Tämä nähdään jo alhaisesta $S(T)$:n arvosta.

Seuraavaksi on klusteroitu sama 12 klassisen kappaleen joukko. Puun kustan-

nukseksi saatiin $S(T) = 0.958$ ja kappaleet ryhmittyvät säveltäjän mukaan.

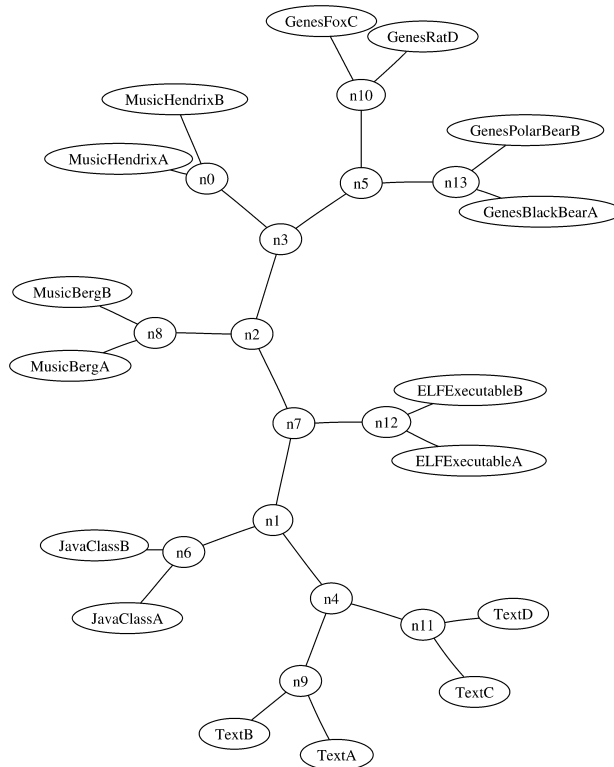
Empiirisesti on havaittu, että hierarkkinen klusterointi toimii parhaiten pienille joukoille (alle 25 objektia), ja sen toimivuus laskee huomattavasti isoille joukoille (yli 40 objektia). Yleinen ratkaisu isojen joukkojen hierarkkiseen klusterointiin on, että ensiksi klusteroidaan epähierarkkisesti, ja sitten klusteroimalla hierarkkisesti tästä saatavat klusterit.

Esimerkkinä NCD:n kyvystä erotella eri aihealueet tehokkaasti on kuva 2. Tässä on klusteroitu seuraavia tiedostotyyppejä: i) neljä mitokondrioitten geenisekvenssiä (jääkarhu, kettu, rotta, mustakarhu); ii) neljä kappaletta kirjasta ‘The Zeppelin’s Passenger’; iii) neljä MIDI tiedostoa, joita ei ole käsitelty (Jimi Hendrix, Debussy); iv) kaksi Linux x86 ELF ohjelmätiedostoa ja v) kaksi käännettyä Java luokkaa. Pakkaajana käytettiin bzip2 -ohjelmaa. Puun kustannus on $S(T) = 0.984$. Tämä koe näyttää miten tehokas ja universaali NCD:n käyttö klusteroinnissa on [CV05].

4 Algoritmin ongelmat ja ominaisuudet

4.1 Kohinansietokyky

Kun NCD:tä käytetään kahteen eri tiedostoon toista näistä voi pitää kohinalisena versiona ensimmäisestä. Kohinan lisääminen progressiivisesti tiedostoon voi tuottaa tietoa mittarista (*engl. measure*) itsestään. Kuvissa 3, 4, 5 on ternääripuut kirjojen klusteroinnista, kun objekteihin on lisätty kohinaa. Kuvissa on merkitty kohinan osuus. Tämän vastaavuuden perusteella voimme tehdä teoreettisen päätelmän odotetusta kohinan lisäämisen vaikutuksesta algoritmiin, mikä selittää miksi NCD voi saada suurempia arvoja kuin 1 joissain tapauksissa. [CAO07]

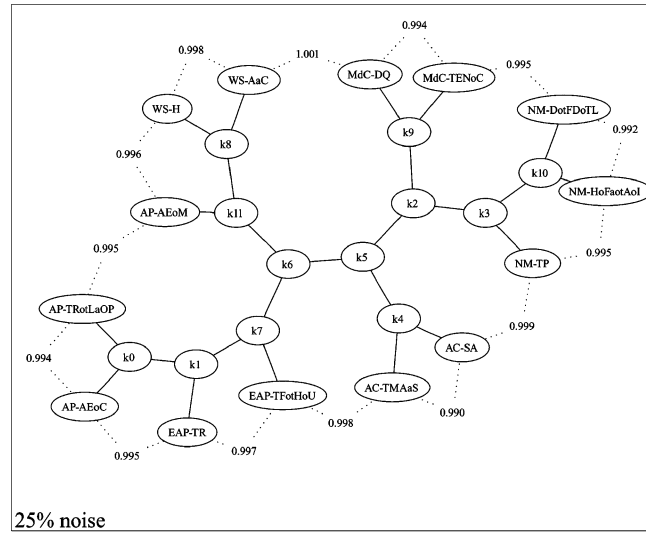


Kuva 2: Eri tiedostotyyppien ryhmittely. Puu vastaa hyvin NCD:n etäisyysmatriisia: $S(T) = 0.984$. [CV05]

4.2 Pakkaajan valinta

Artikkelissa [CAO05] on osoitettu, että pakkaaja, jota käytetään NCD:n laskemiseen, ei ole idempotentti (2.3) kaikissa tapauksissa, koska objektien koko ja pakkaajan ikkunakoko vääristävät etäisyyksiä ja täten aiheuttavat poikkeuksia samankaltaisuuksissa. Yhteyttä etäisyyden tarkkuudesta ja objektien koosta on analysoitu monella tunnetulla pakkaajalla ja erityisesti seuraavilla kolmella: *bzip2*, *gzip* ja *PPMZ*.

Vertailussa käytettiin Cilibrasin toteuttamaa CompLearn -työkalua [Cil], josta löytyy *bzip2* ja *gzip* pakkaajat. Aineistona käytettiin tunnettua Calgary Corpus -kokoelmaa [WBC], joka on 18 tiedoston kokoelma, jolla mitataan pakkausalgoritmien suorituskykyä. Kokoelmassa on 9 eri tyyppistä tiedostoa, jotta voidaan saada laaja näkemys pakkausalgoritmin toiminnasta. Mukana

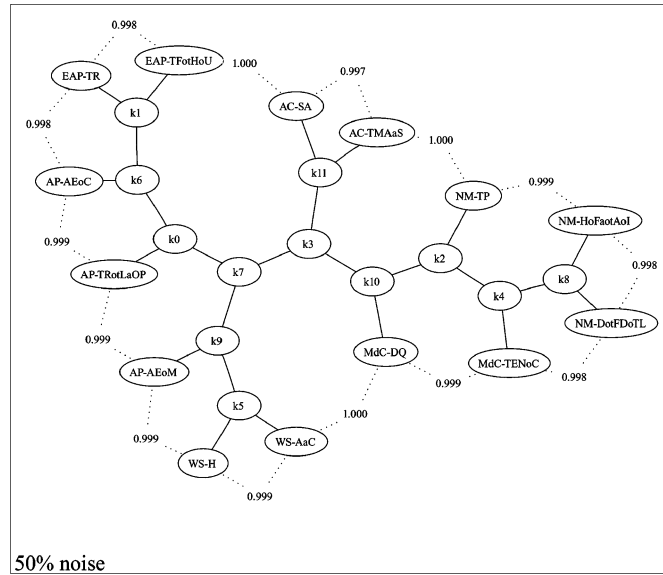


Kuva 3: Normalisoitujen pakkausetäisyyksien pohjalta klusteroituja kirjoja eri kirjoittajilta kun tiedostoihin on lisätty 25% kohinaa. Merkinnot ovat kirjailijan nimikirjaimet: AC = Agatha Christie, AP = Alexander Pope, EAP = Edgar Allan Poe, WS = William Shakespeare ja NM = Niccolo Machiavelli. [CAO07]

on muun muassa kuva, kirjoja, artikkeleita, lähdekoodia ja tietokoneohjelmia. Kaikkia vertailun objekteja käsitellään merkkijonoina, jotka koostuvat tavuista. Jotta voidaan todeta pakkaajan idempotenssin (2.3) pätevyys, kaikki objektit vertaillaan itsensä kanssa.

Kuvassa 6 huomataan, että $NCD(x, x)$ on väliltä 0.2 ja 0.3, kun tiedostojen koko on sopiva bzip2 pakkaajalle. Kun taas arvo on väliltä 0.25 ja 0.9, tiedostokokoko ei ole enää sopiva. Rajoittava tekijä bzip2 pakkaajassa on tälle määriteltävä lohkokoko (*engl. block size*), joka on oletusarvoisesti 900 kilotavua, eli jos pakattavan tiedoston koko on tätä suurempi niin se pilkotaan alle 900 kilotavun kokoisiksi palasiksi ennen pakkausta. Tällaisesta pilkkomisesta aiheutuu se, ettei eri osien välillä pysty enää pakkaamaan samankaltaisuuksia ja täten pakattu koko ei ole paras mahdollinen.

Kuva 7 osoittaa, että $NCD(x, x)$ on väliltä 0.0 ja 0.1, kun tiedostokokoko on sopiva gzip pakkaajalle, ja kun tiedostokokoko on liian suuri, niin arvot nousevat jopa yli yhden. Vastaavanlaisesti kuin bzip2 pakkaajassa on rajoittavana teki-

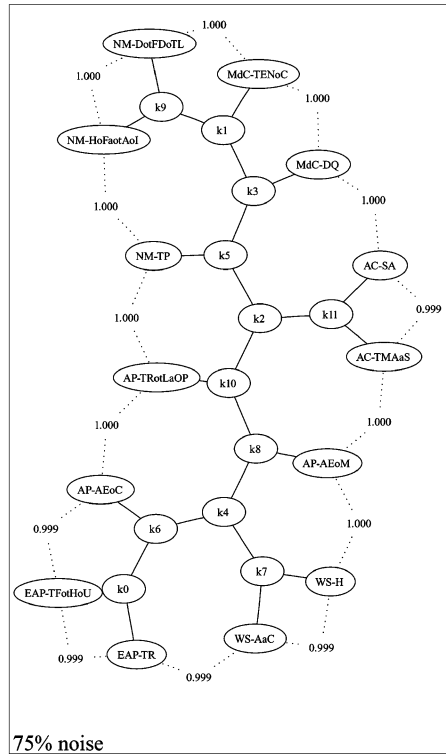


Kuva 4: Kuvan 3 tiedostoihin on lisätty 50% kohinaa. Merkinnot vastaavat kuvaa 3. [CAO07]

jänä lohkokoko, on gzip pakkaajassa liukuva ikkuna (*engl. sliding window*) ja eteenpäinkatseluikkuna (*engl. lookahead window*). Liukuva ikkuna on puskuri, jossa säilötään n viimeisintä merkkiä, missä n on liukuvin ikkunan koko. Eteenpäinkatseluikkuna taas on puskuri, jossa on m tulevaa merkkiä, missä m on eteenpäinkatseluikkunan koko.

Nämä ikkunakoot aiheuttavat sen, että parhaimmallakin asetuksella gzip kykenee pakkaamaan tehokkaasti vain enintään 64 kilotavua olevia tiedostoja.

Mikä tahansa samankaltaisuusetaisyys olisi pitänyt arvoltaan olla 0 tai hyvin lähellä sitä, kun vertaillaan identtisiä objekteja. Pakkaajien vertailussa kerätyt empiiriset havainnot osoittavat, että objektien koko vääristää NCD:n tulosta, riippumatta datan tyypistä (kirja, artikkeli, kuva, jne.) Siksi suositellaan PPMZ pakkaajan käyttöä kun halutaan klusteroida objekteja NCD:lla [CAO05]. Muitten pakkaajien käyttö on suositeltavaa ainoastaan, jos pyritään nopeuteen tai jos tiedostojen kokojen summa on pienempi kuin pakkaajan käyttämä rajoite (lohkokoko, ikkunakoko).

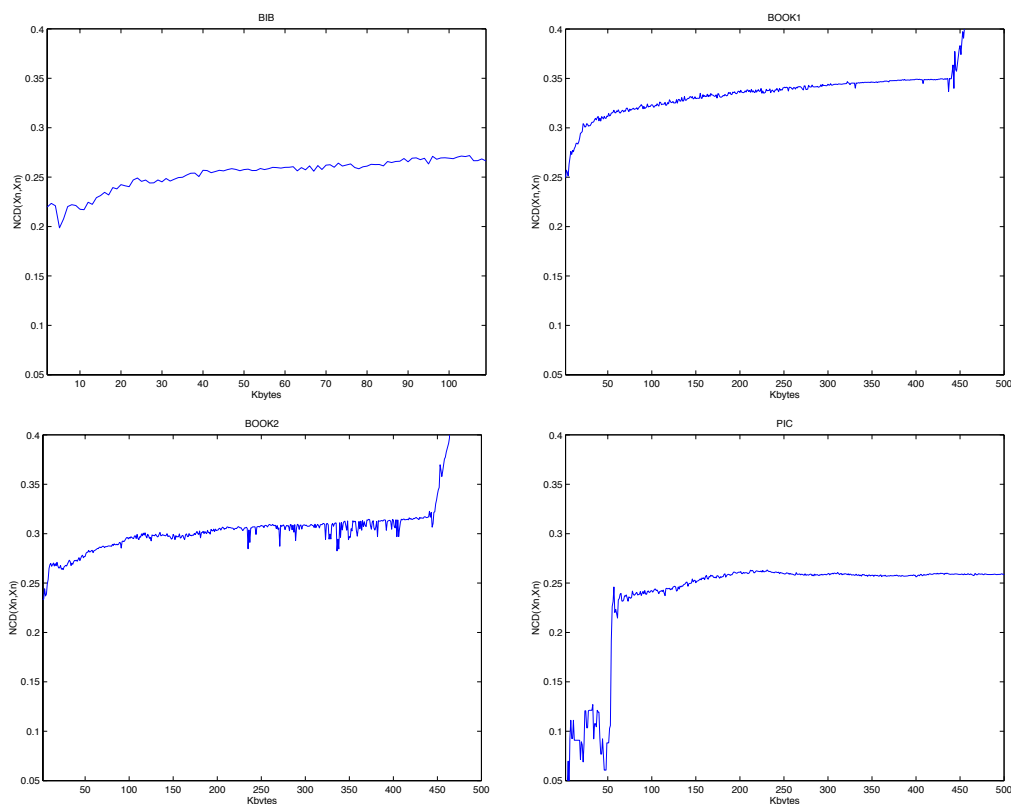


Kuva 5: Kuvan 3 tiedostoihin on lisätty 75% kohinaa. Merkinnät vastaavat kuvaa 3. [CAO07]

5 Google-samankaltaisuusetaisyys

Internetin kasvu on houkutellut miljoonia käyttäjiä luomaan miljardeja internetsivuja, jotka ovat sisällöltään ja piirteiltään hyvin vaihtelevia. Suunnaton tiedon määrä miltei mistä tahansa aiheesta tekee siitä mahdollisen, että ääripää kumoutuvat ja täten suurin osa tai keskiverto on merkittävä heikkolaisuusena approksimaationa. Täten on kehitetty yleinen metodi hyödyntämään tätä matalalaatuista tietoa, jota saa ilmaiseksi Internetistä. Tämä tietovarasto on kaikille käytettävissä käyttäen mitä tahansa hakukonetta, joka pystyy palauttamaan yhteenlasketun sivulukumääräarvion, kuten Google.

Google-samankaltaisuusetaisyys (GSD) on hyvin vahvasti verrattavissa Normalisoituun pakkausetaisyyteen (kts. 2.4,) sillä kummatkin algoritmit perustuvat samoihin tekniikoihin, kuten Kolmogorov-kompleksisuuteen (kts. 2.1)



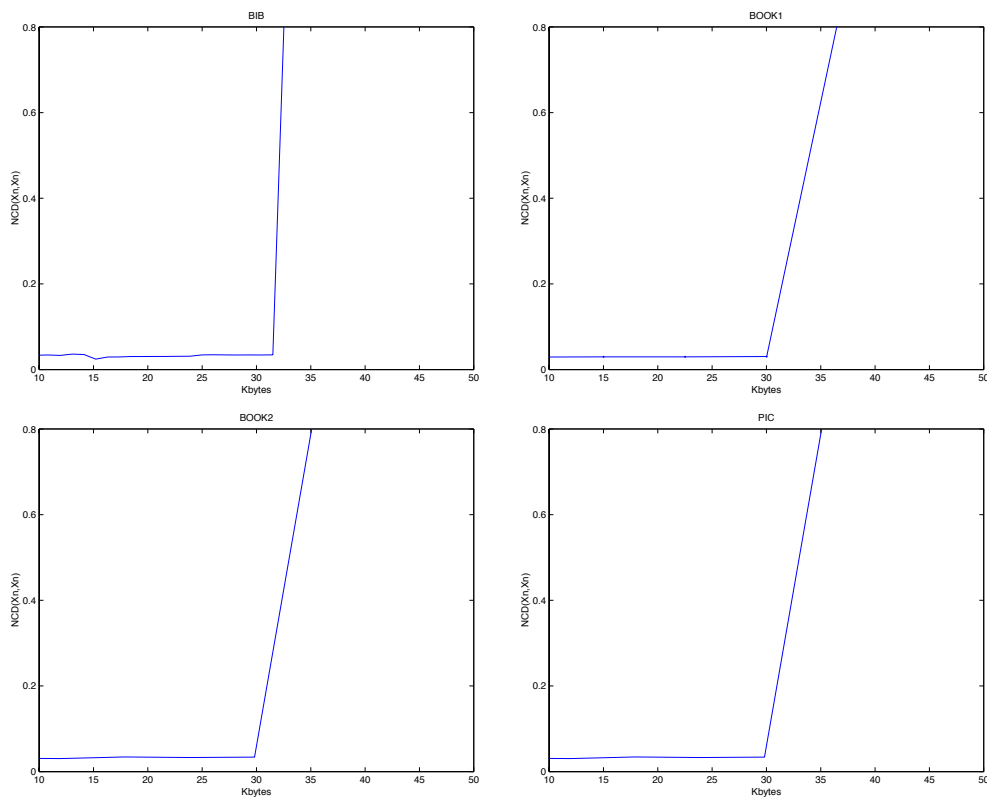
Kuva 6: Normalisoidut pakkausetäisyydet ensimmäisestä n tavusta, neljälle tiedostolle Calgary Corpus -kokoelmasta, käyttäen **bzip2** pakkaajaa asetuksella ‘-best’. Tiedostot vertailtiin itsensä kanssa. [CAO05]

ja Normalisoituun informaatioetäisyyteen (2.2). Eroavaisuuksia esiintyy siinä, mitä nämä kaksi algoritmia käyttävät samankaltaisuuden arvioimiseksi. Siinä missä NCD pakkaa ja vertaa sisältöä toisiinsa, niin GSD vertaa asioitten nimiä esiintymistiheyteen. [CV07]

5.1 Käytännön esimerkki

GSD muodostetaan siten, että haetaan ensiksi yhdellä hakutermillä, sitten toisella ja sen jälkeen kummallakin yhdessä. Hakujen lukumäärät vertaillaan keskenään ja normalisoidaan ja tästä saadaan samankaltaisuusetaisyys.

Artikkelissa [CV07] käytettiin hakusanoja ‘horse’ ja ‘rider’ esimerkkinä ja

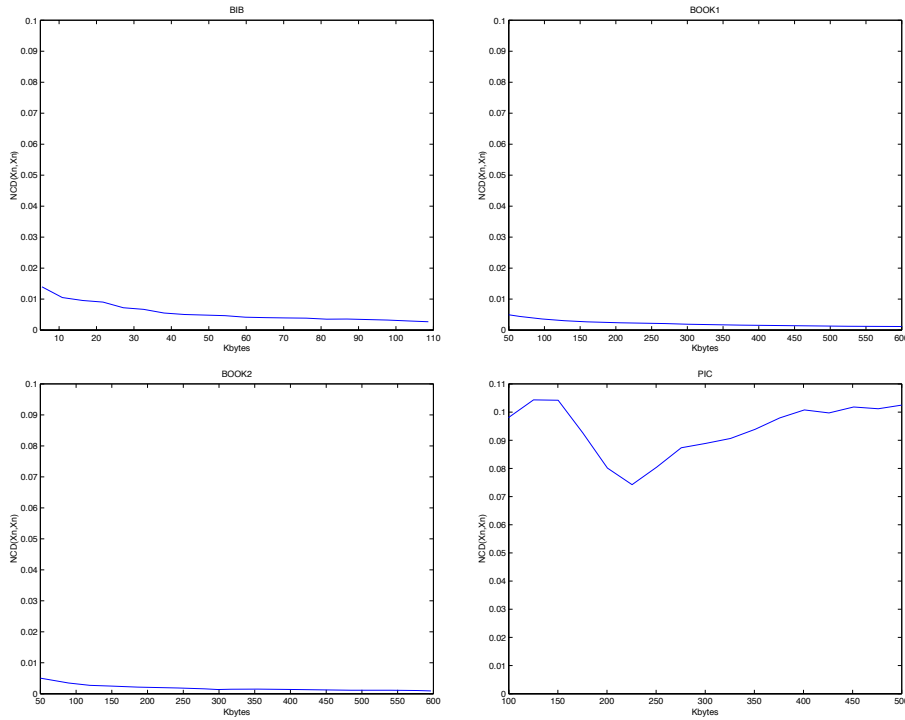


Kuva 7: Normalisoidut pakkausetäisyydet ensimmäisestä n tavusta, neljälle tiedostolle Calgary Corpus -kokoelmasta, käyttäen *gzip* pakkaajaa asetuksella ‘-best’. Tiedostot vertailtiin itsensä kanssa. [CAO05]

vuonna 2007 tuloksena oli $NGD(horse, rider) \approx 0.443$. Toistimme kyseisen haun 13.11.2013 ja tuloksena oli $NGD(horse, rider) \approx 0.233$. Arvojen suurta eroa on vaikea selvittää ilman laajempaa tutkimusta, mutta vaikuttavia tekoja voi olla epäselvyys tarkasta lukumäärästä Googlen indeksoimista sivuista.

5.2 Hakukoneet samankaltaisuuden mittaamisessa

Googlen indeksoitujen internetsivujen määrä on kasvanut suunnattomaksi ja mikä tahansa yleinen hakutermin esiintyy miljoonilla internetsivulla. Internetin sisällöntuottajienkin on suunnaton määrä ja voidaan olettaa näiden olevan erittäin kuvaava otanta isosta osasta ihmiskuntaa. Tämän perusteella voidaan argumentoida, että Google-haun frekvenssi on kuvaava approksimaatio



Kuva 8: Normalisoidut pakkausetäisyydet ensimmäisestä n tavusta, neljälle tiedostolle Calgary Corpus -kokoelmasta, käyttäen **PPMZ** pakkaajaa. Tiedostot vertailtiin itsensä kanssa. [CAO05]

todellisista relatiivisista frekvensseistä yhteiskunnassa. Frekvenssi on haun tuottamien osumien lukumäärän suhde kaikkien Googlen indeksoimien sivujen lukumäärään. [CV07]

5.3 Google-jakauma

Olkoon yksittäisten Google-hakujen joukko S . Jatkossa käytämme yksittäisten ja pareittaisten hakujen joukkoja $\{\{x, y\} : x, y \in S\}$. Olkoon joukko Googlen indeksoimia internetsivuja Ω . Joukon Ω koko merkitään $M = |\Omega|$. Oletamme, että jokaisella internetsivulla on yhtä todennäköistä palautua Google-hausta, eli todennäköisyys on $\frac{1}{\Omega}$. Ω :n osajoukkoa kutsutaan *tapahtumaksi*. Jokainen hakuehto x määrittelee yksittäisen haun tapahtuman $\mathbf{x} \subseteq \Omega$, tämä on joukko internetsivuja joista löytyy x kun suoritetaan Google-haku x :llä. Olkoon

$L : \Omega \rightarrow [0, 1]$ tasajakauman todennäköisyysfunktio. Tapahtuman \mathbf{x} todennäköisyys on $L(\mathbf{x}) = \frac{|\mathbf{x}|}{M}$. Samoin toimii pareittain haun tapahtuma $\mathbf{x} \cap \mathbf{y} \subseteq \Omega$, jossa haetaan pareittain hakuehdoilla x ja y .

Kaikkien tapahtumien todennäköisyydet yhteensä on suurempi kuin 1, koska tapahtumat menevät päällekkäin, joten tarvitaan normalisointia. $|S|$ on yksittäisten ja $\binom{|S|}{2}$ parittaisten hakujen tulosten lukumäärä. Määrittelemme

$$N = \sum_{\{x,y\} \subseteq S} |x \cap y|, \quad (5)$$

yksittäisten ja parittaisten hakujen tulosten lukumäärä yhteensä. $N \geq M$, koska jokainen Googlen indeksoima internetsivu sisältää vähintään yhden hakusanan esiintymän. Toisaalta internetsivuilla ei keskivertona ole enempää kuin α hakutermiä, täten $N \leq \alpha M$. Määrittelemme

$$g(x) = g(x, x), g(x, y) = L(\mathbf{x} \cap \mathbf{y}) \frac{M}{N} = \frac{|\mathbf{x} \cap \mathbf{y}|}{N}. \quad (6)$$

Ja siten looginen seuraus on $\sum_{\{x,y\} \subseteq S} g(x, y) = 1$, eli g määrittelee todennäköisyysjakauman.

5.4 Google-samankaltaisuusetäisyys

Normalisoitu Google-etäisyys (NGD) (engl. Normalized Google Distance) voidaan määritellä seuraavasti,

$$NGD(x, y) = \frac{\max\{\log f(x), \log f(y)\} - \log f(x, y)}{\log N - \min\{\log f(x), \log f(y)\}}, \quad (7)$$

jossa $f(x)$ merkitsee internetsivujen lukumäärää, jotka sisältävät hakutermiä x ja $f(x, y)$ merkitsee samaa mutta sivuille jotka sisältävät termit x ja y . Tämä normalisoitu Google-etäisyys on approksimaation normalisoidusta informaatioetäisyydestä 2.2. Käytännössä käytämme Googlen palauttamia sivujen lukumääriä frekvensseinä ja valitaan N . On huomattu, että mikä tahansa järkevä arvo voidaan käyttää normalisoinnin arvona N . NGD:llä on

seuraavat ominaisuudet, olettaen, että valitaan parametri $N \geq M$:

1. NGD:n arvo on väliltä 0 ja ∞ (mahdollisesti negatiivinen, jos Googlen lukumäärät ovat epäluotettavia ja täten $f(x, y) > \max\{f(x), f(y)\}$)

(a) Jos $x = y$ tai $x \neq y$, mutta frekvenssi on

$$f(x) = f(y) = f(x, y) > 0,$$

niin $NGD(x, y) = 0$. Eli x ja y ovat Googlen kannalta samat.

- (b) Jos frekvenssi $f(x) = 0$, sitten jokaiselle hakutermin y pätee $f(x, y) = 0$. Tämän lisäksi pätee

$$NGD(x, y) = \frac{\infty}{\infty}$$

jonka määrittelemme tarkoittavan 1.

2. NGD on aina epänegatiivinen ja $NGD(x, x) = 0$ kaikille x . Kaikille x, y pätee $NGD(x, y) = NGD(y, x)$, toisin sanoen se on symmetrinen. NGD ei kuitenkaan ole metriikka, koska se ei täytä ehtoa $NGD(x, y) > 0$ kaikille $x \neq y$, eikä se myöskään toteuta metriikan kolmioepäyhtälö-ominaisuutta $NGD(x, z) \leq NGD(x, y) + NGD(y, z)$. [CV07]
3. NGD on *invariantti skaalautuvuudessa* seuraavassa mielessä: Oletamme, että kun Googlen indeksoimien sivujen lukumäärä N kasvaa, niin sivujen, jotka sisältävät annetun hakusanan, lukumäärä lähestyy määrättyä murto-osaa N :stä, ja niin myös sivujen lukumäärä, jotka sisältävät hakusanojen parin.

5.5 Hierarkkinen klusterointi

Klusterointi normalisoidun Google-etäisyyden avulla onnistuu samanlailla kuin normalisoidulla pakkausetäisyydelläkin. Ensiksi koostetaan etäisyysmatrissi hakuehtojen pareittaisista NGD:n arvoista ja sitten nelikkomenetelmää 3.1 käyttäen rakennetaan *juureton ternääripuu* (engl. *unrooted ternary tree*).

Esimerkkinä klusteroitiin 15, 1600-luvun hollantilaisten maalareitten, teosta. Kuvassa 9 on Rembrandtin, Steenin ja Bolin maalauksia ternääripuurakenteessa. Hakusanoina käytettiin ainoastaan maalausten koko nimiä. Seuraavaksi lista maalauksista ja teoksista

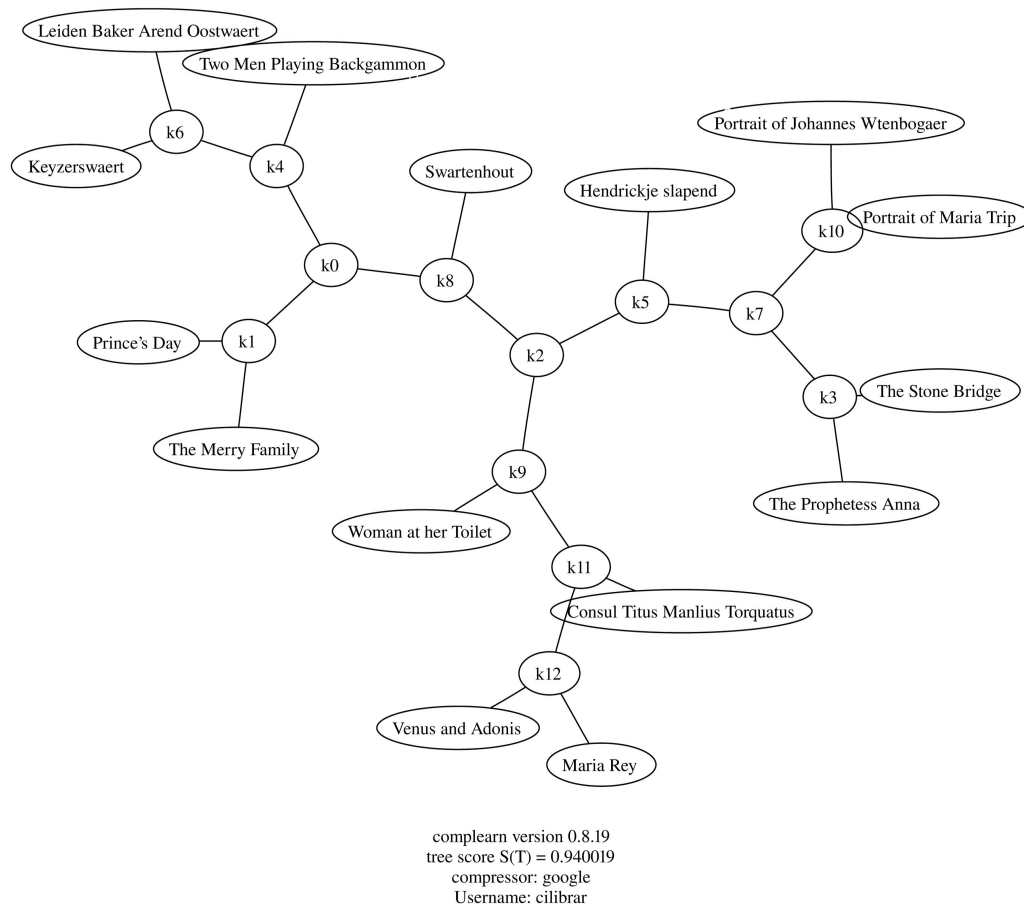
- **Rembrandt van Rijn:** *Hendrickje slapend, Portrait of Maria Trip, Portrait of Johannes Wtenbogaert, The Stone Bridge, and The Prophetess Anna.*
- **Jan Steen:** *Leiden Baker Arend Oostwaert, Keyzerswaert, Two Men Playing Backgammon, Woman at her Toilet, Prince's Day, and The Merry Family.*
- **Ferdinand Bol:** *Maria Rey, Consul Titus Manlius Torquatus, Swartenhout, and Venus and Adonis.*

Kuvassa 9 näemme, että suurin osa maalauksista ovat ryhmittyneet puun haaroihin taiteilijan mukaan. Rembrandtin maalaukset ovat oikealla, Steenin maalaukset vasemmalla ja Bolin maalaukset alhaalla. Muutama maalaus on hieman erillään taiteilijan ryhmittymästä ja nämä ovat Rembrandtin ‘Hendrickje slapend’, Steenin ‘Woman at her Toilet’ ja Bolin ‘Swartenhout’, joista viimeiset kaksi ovat luokiteltu väärän taiteilijan haaraan.

GSD on selkeästi [CV07] tehokas tapa klusteroida objekteja, joskin syntyvät klusterit perustuvat mielivaltaisesti internetin sisältöön, eikä objektien ominaisuuksiin.

6 Yhteenveto

Luvussa 3 näytettiin, että NCD toimii hyvin klusterointiin ja on helppo soveltaa mihin tahansa alaan, kuten esimerkiksi: musiikki, kirjallisuus ja genomit, koska algoritmin käyttö on täysin riippumaton datasta ja sen ominaisuuksista. Algoritmi kykenee aina löytämään merkittävimmät ominaisuudet datasta ja vertailemaan näin samankaltaisuuden etäisyyksiä datan eri objektien välillä.



Kuva 9: Hierarkkinen klusterointi hollantilaisista maalauksista [CV07]

NCD:n tehokkuutta parantaa huomattavasti, että algoritmi vaikuttaa olevan hyvin kohinansietokykyinen, eli kykenee edelleen yhdistämään samankaltaisten objektit vaikka toisessa olisikin kohinaa. Vaikka NCD:n kehittäjät luulivat osoittaneen, että algoritmi on riippumaton pakkaajan valinnasta [CV05], niin vertailujen tuloksena on pystytty todistamaan, että ainoastaan tiedostonkoko rajoittamaton pakkaaja toimii aidosti NCD:n kanssa 4.2. Kannattavin valinta pakkaajaksi on *PPMZ*, mikäli käyttää NCD:n tuloksia klusterointiin.

NCD ei tietenkään ole ainut menetelmä jota valvomattomassa oppimisessa voi käyttää datan klusteroimiseen. Hierarkkinen klusterointi on tapa jota NCD:n kanssa klusteroidessa käytetään, eli toisiaan lähemmät objektit liit-

tyvät enemmän toisiinsa kuin kauempana olevat. Vaihtoehtoisesti voidaan käyttää K-keskiö klusterointia (*engl. K-means clustering*), jossa pyritään klusteroimaan objektit k eri klusteriin, klusterin keskipisteen etäisyyden perusteella; taikka jakautumaan pohjautuvaa klusterointia, jossa klusteroidaan objektit jotka todennäköisesti kuuluvat samaan jakaumaan.

Normalisoidun pakkausetäisyyden aihealueesta on tehty paljon tutkimusta eri suuntautumishaaroihin ja tässä esitellään muutama alue, joita tämän tutkielman pohjalta voi lukea. Geeniekspressioanalyysi on tärkeä työkalu syövän tutkimisessa ja tutkimusta on suoritettu josko NCD:tä voidaan hydyntää siinä [NYHS05]. Tarkempaa tietoa normalisoidun informaatioetäisyyden ominaisuuksista ja sen epäapproksimoitavuudesta [TTV11]. Tutkimusta on myös tehty siitä, että miten NCD toimii kuvantunnistuksessa, asiasta lisää [Tra07]. NCD:n kohinan sietokykyä on tutkittu ja se on avannut tutkimuksen mahdollisuuksia tälle aiheelle, tämän lisäksi on myös tutkittu miten NCD:tä voi hyödyntää kohinan poistossa [Vit13] Nelikkomenetelmän tarkempaa kuvausta [CV11]

Lähteet

- [CAO05] Cebrian, M., Alfonseca, M. ja Ortega, A.: *Common pitfalls using the normalized compression distance: What to watch out for in a compressor*. Communications in Information & Systems, 5(4):367–384, 2005.
- [CAO07] Cebrian, M., Alfonseca, M. ja Ortega, A.: *The Normalized Compression Distance Is Resistant to Noise*. Information Theory, IEEE Transactions on, 53(5):1895–1900, 2007.
- [Cil] Cilibiasi, R.: *CompLearn Toolkit*. URL: <http://complearn.org/>. Luettu 26. marraskuuta 2013.

- [CV05] Cilibrasi, R. ja Vitányi, P.: *Clustering by Compression*. IEEE Transactions on Information Theory, 51(4):1523–1545, Huhtikuu 2005.
- [CV07] Cilibrasi, R. ja Vitányi, P.: *The Google Similarity Distance*. Knowledge and Data Engineering, IEEE Transactions on, 19(3):370–383, 2007.
- [CV11] Cilibrasi, R ja Vitányi, P: *A fast quartet tree heuristic for hierarchical clustering*. Pattern recognition, 44(3):662–677, 2011.
- [CVdW04] Cilibrasi, R., Vitányi, P. ja Wolf, R. de: *Algorithmic Clustering of Music*. Web Delivering of Music, International Conference on, 0:110–117, 2004.
- [NYHS05] Nykter, M., Yli-Harja, O. ja Shmulevich, I.: *Normalized compression distance for gene expression analysis*. Teoksessa *Workshop on Genomic Signal Processing and Statistics (GENSIPS)(May 2005)*. Citeseer, 2005.
- [Tra07] Tran, N.: *The Normalized Compression Distance and Image Distinguishability*, 2007. <http://dx.doi.org/10.1117/12.704334>.
- [TTV11] Terwijn, S., Torenvliet, L. ja Vitányi, P.: *Nonapproximability of the normalized information distance*. Journal of Computer and System Sciences, 77(4):738–742, 2011.
- [Vit13] Vitányi, P.: *Similarity and Denoising*. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 371(1984), 2013.
- [WBC] Witten, I., Bell, T. ja Cleary, J.: *Calgary Corpus*. URL: <http://corpus.canterbury.ac.nz/descriptions/#calgary>. Luettu 26. marraskuuta 2013.