Università degli Studi di Palermo

dipartimento di ingegneria unipa

Distanze e Similarità

CORSO DI BIG DATA

a.a. 2022/2023

Prof. Roberto Pirrone

LABORATORIO DI INTERAZIONE UOMO-MACCHINA
CHILAB

Sommario

- Distanza e similarità
- Misure di similarità per dati quantitativi
- Misure di similarità per dati categorici e testuali
- Similarità per serie temporali e sequenze discrete
- Similarità tra grafi

Distanza e similarità

- La *distanza* tra due oggetti O_i e O_j ,*dist*(O_i, O_j) è una funzione che ritorna un valore tanto più piccolo quanto O_i e O_j sono simili
- La *similarità* tra due oggetti O_i e O_j , *sim*(O_i, O_j) è una funzione che ritorna un valore tanto più grande quanto O_i e O_j sono simili
- Le funzioni di distanza o similarità sono in genere espresse
  - In forma chiusa
  - Tramite formulazione algoritmica

Dati multidimensionali quantitativi

- La distanza più comune è la norma L_p

$$\mathrm{Dist}(\bar{X}, \bar{Y}) = \left(\sum_{i=1}^{d} |x_i - y_i|^p \right)^{1/p}$$

  - p=1 → Manhattan distance
  - p=2 → norma euclidea che è invariante alla rotazione dello spazio dei dati

$$\mathrm{Dist}(\bar{X}, \bar{Y}) = \left(\sum_{i=1}^{d} a_i \cdot |x_i - y_i|^p \right)^{1/p}$$

Distanza di Minkowski

Dati multidimensionali quantitativi

- *Curse of dimensionality*: Le norme perdono di capacità discriminativa tra i dati al crescere della dimensionalità di questi ultimi

- Si consideri la variabile casuale generata calcolando la distanza di Manhattan di un punto $X_i = (Y_1,\ldots,Y_n)^T$ generato con distribuzione uniforme all'interno dell'ipercubo unitario d-dimensionale $[0,1]^d$:

$$\mathrm{Dist}(\bar{O}, \bar{X}) = \sum_{i=1}^{d} (Y_i - 0)$$

Dati multidimensionali quantitativi

- *Curse of dimensionality*: Le norme perdono di capacità discriminativa tra i dati al crescere della dimensionalità di questi ultimi

- Si consideri la variabile casuale generata calcolando la distanza di Manhattan di un punto $X_i = (Y_1,\ldots,Y_n)^T$ generato con distribuzione uniforme all'interno dell'ipercubo unitario d-dimensionale $[0,1]^d$:

$$\mathrm{Dist}(\bar{O},\bar{X}) = \sum_{i=1}^{d}(Y_i - 0)$$

$$\mu = d/2, \quad \sigma = \sqrt{d/12}$$

Dati multidimensionali quantitativi

- Curse of dimensionality
  - Per la legge dei grandi numeri, la stragrande maggioranza dei valori di distanza starà nell'intervallo $[D_{min}, D_{max}] = [\mu \pm 3\sigma] = 6\sigma = \text{sqrt}(3d)$

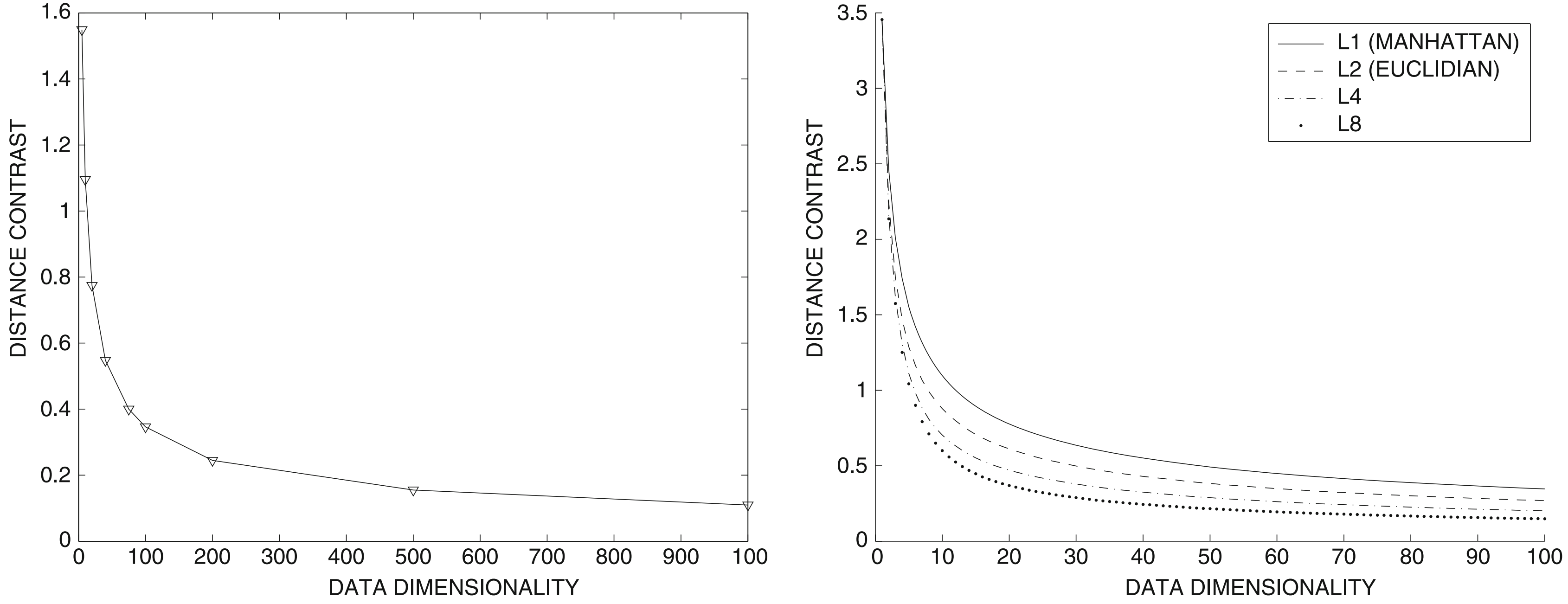
  - Il *contrasto* della distanza di Manhattan, cioè la dimensione relativa dei valori misurati di distanza rispetto al valor medio delle grandezze in gioco è dunque:

$$\text{Contrast }(d) = \frac{D_{\max} - D_{\min}}{\mu} = \sqrt{12/d}$$

  - All'aumentare di *p*, questo valore decresce ancora più velocemente con *d*

Dati multidimensionali quantitativi

- Curse of dimensionality



(a) Contrasts with dimensionality   (b) Contrasts with norms

Dati multidimensionali quantitativi

- Curse of dimensionality
  - È importante eliminare le feature irrilevanti
  - È importante ridurre il rumore sui dati perché piccole variazioni in alta dimensionalità possono mascherare l'effetto della similarità

Dati multidimensionali quantitativi

- Proximity thresholding
  - Si suddividono le dimensioni dei dati in k_d intervalli a profondità costante in modo da rendere costante la probabilità che due vettori condividano lo stesso intervallo in una data dimensione
  - $\mathcal{S}(X,Y,k_d)$ sia l'insieme delle dimensioni in cui le componenti di X e Y cadono nello stesso intervallo e siano n_i e m_i rispettivamente il minimo ed il massimo valore lungo la dimensione $i \in \mathcal{S}(X,Y,k_d)$

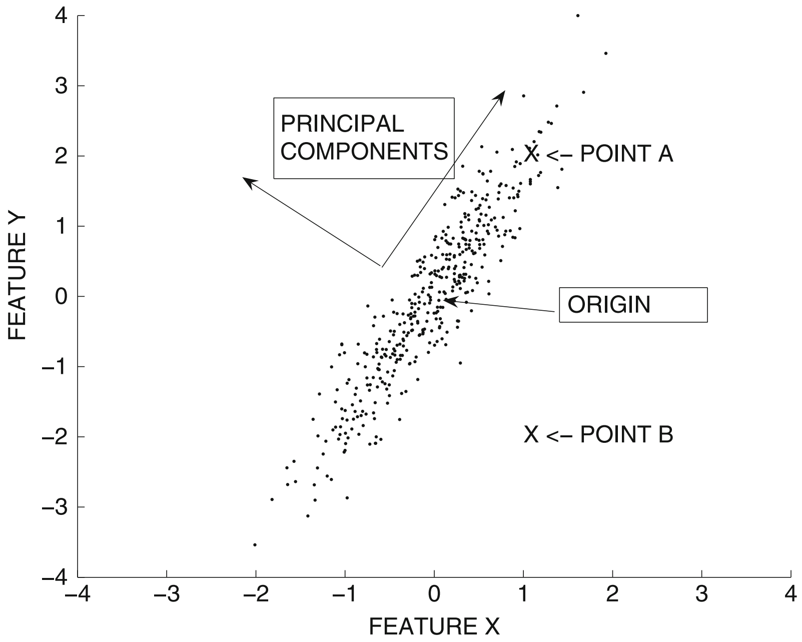
$$PSelect\left(\bar{X},\bar{Y},k_d\right) = \left[\sum_{i\in\mathcal{S}\left(\bar{X},\bar{Y},k_d\right)} \left(1 - \frac{|x_i - y_i|}{m_i - n_i}\right)^p\right]^{1/p}$$

Dati multidimensionali quantitativi

- Distanza di Mahalanobis

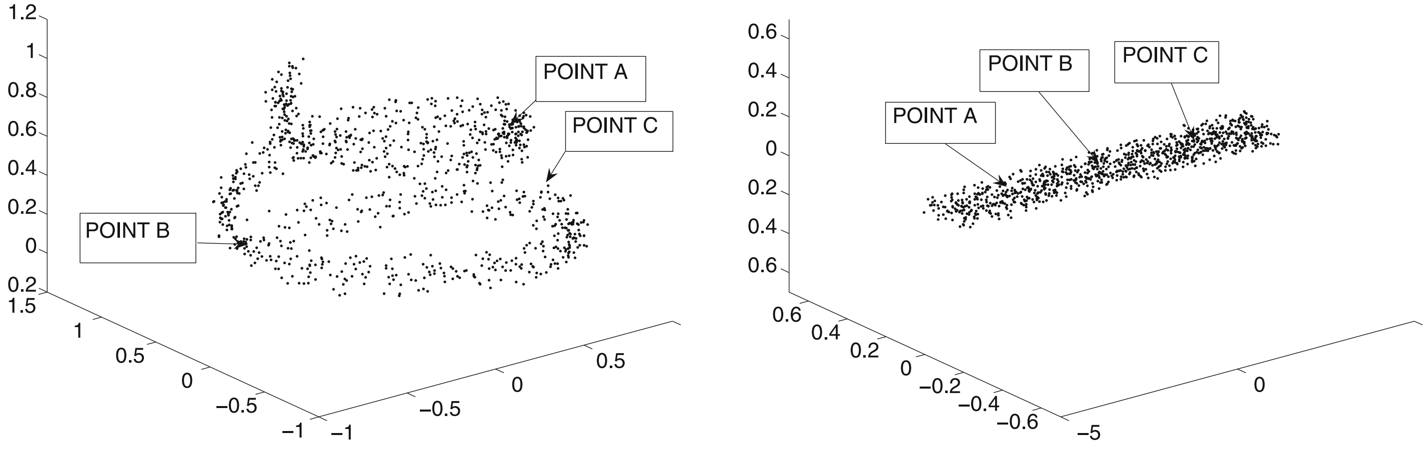
$$Maha(\bar{X},\bar{Y}) = \sqrt{(\bar{X}-\bar{Y})\Sigma^{-1}(\bar{X}-\bar{Y})^T}$$

  - Tiene esplicitamente conto della covarianza tra i dati che possono avere una particolare distribuzione nello spazio
  - Diviene banalmente la distanza euclidea dopo aver ruotato i dati lungo le loro componenti principali (Σ diviene diagonale)



Dati multidimensionali quantitativi

- ISOMAP embedding
  - Si calcolano i k vicini di ogni punto (i k punti *ad esso più vicini* di ogni altro ovvero «*k* nearest *neighbors*»

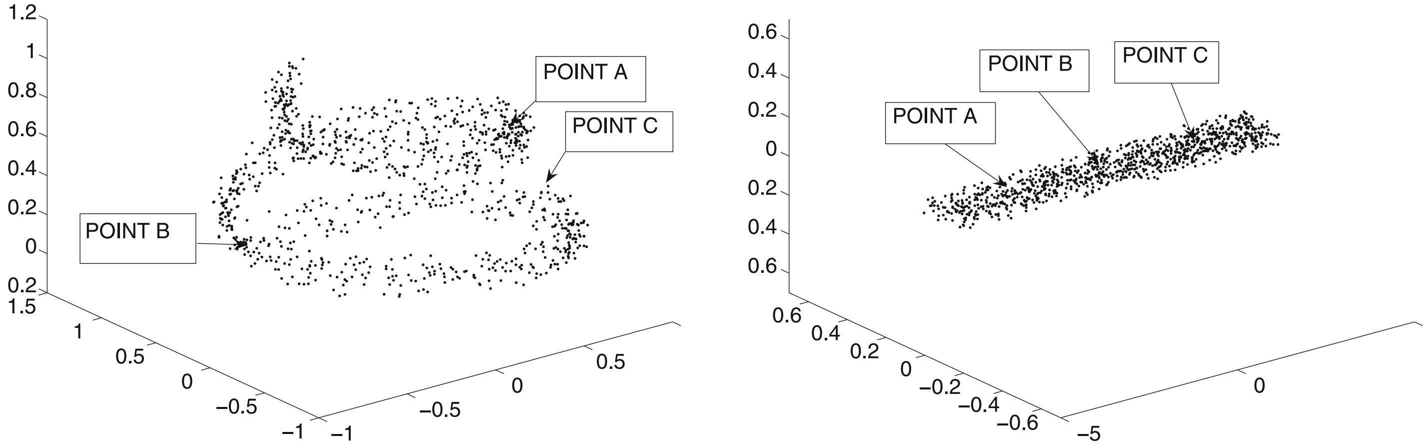


(a) A and C seem close (original data)

(b) A and C are actually far away (*ISOMAP* embedding)

Dati multidimensionali quantitativi

- ISOMAP embedding
  - Si crea un grafo pesato G in cui ogni punto è un nodo connesso con i k vicini con archi il cui peso è la distanza
  - Per ogni coppia di punti X, Y la distanza si ottiene come costo del cammino minimo lungo il grafo tra il nodo X ed il nodo Y



(a) A and C seem close (original data)

(b) A and C are actually far away (*ISOMAP* embedding)

Dati binari, categorici e testuali

- La similarità si calcola tra i singoli attributi, ognuno dei quali varia all'interno di un proprio insieme di valori discreti

$$Sim(\bar{X}, \bar{Y}) = \sum_{i=0}^{d} S(x_i, y_i)$$

- La scelta di $S(x_i, y_i)$ determina i vari tipi di similarità

Dati binari, categorici e testuali

- Inverse occurrence frequency
  - $p_k(x)$ è la frazione di record per cui il *k*-esimo attributo vale *x*

$$S(x_i, y_i) = \begin{cases} 1/p_k(x_i)^2 & x_i = y_i \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

- Goodall similarity

$$S(x_i, y_i) = \begin{cases} 1 - p_k(x_i)^2 & x_i = y_i \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

Dati binari, categorici e testuali

- Distanza coseno
  - Le norme L_p non gestiscono bene il problema di documenti aventi lunghezza differente e sono sensibili a lunghi documenti per cui tendono a riportare valori sempre più alti
  - Il coseno dell'angolo tra due vettori è invariante rispetto alla loro lunghezza
  - Sia *h*(.) la funzione TF-IDF di ogni termine nello spazio LSA

$$\cos(\bar{X}, \bar{Y}) = \frac{\sum_{i=1}^{d} h(x_i) \cdot h(y_i)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{d} h(x_i)^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^{d} h(y_i)^2}}$$

Dati binari, categorici e testuali

- Coefficiente di Jaccard
  - Usato per i dati binari che rappresentano insiemi: X è un vettore di bit che indica l'appartenenza o meno di un «lessico» di elementi dati ad un insieme S_X

$$J(\bar{X}, \bar{Y}) = \frac{\sum_{i=1}^{d} x_i \cdot y_i}{\sum_{i=1}^{d} x_i^2 + \sum_{i=1}^{d} y_i^2 - \sum_{i=1}^{d} x_i \cdot y_i} = \frac{|S_X \cap S_Y|}{|S_X \cup S_Y|}$$

Anche nota come Intersection over Union(IoU)

  - Può essere usato come similarità tra vettori multidimensionali

Similarità tra serie temporali

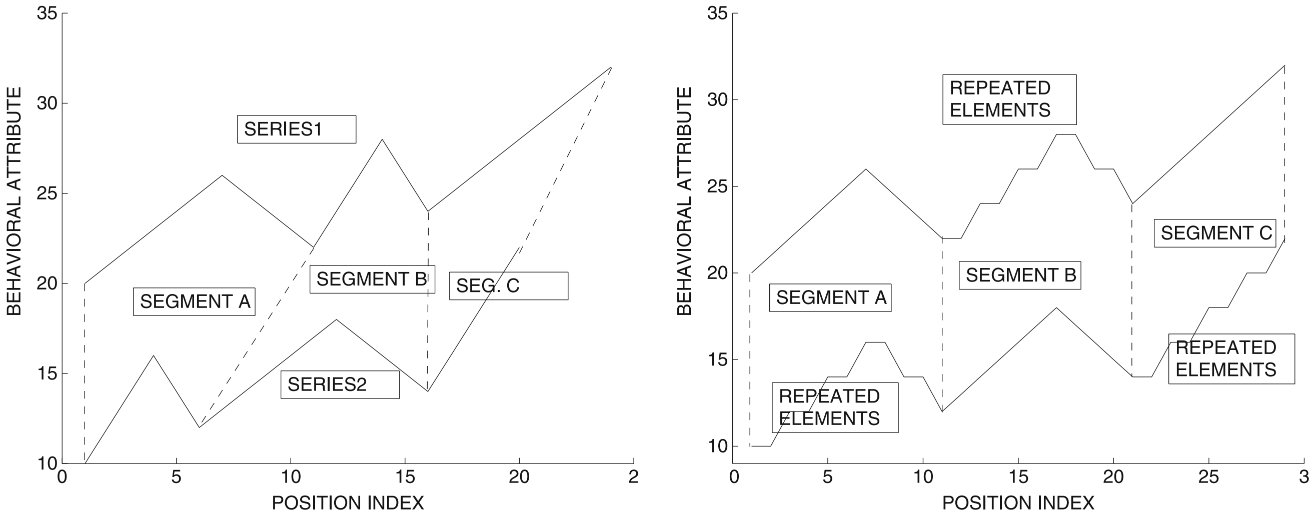
- Fattori da tenere in considerazione:
  - Normalizzazione degli attributi comportamentali in fase di pre-processing
  - Traslazione dell’attributo temporale per riferire due serie allo stesso intervallo di tempo
  - Scalatura dell’attributo temporale per serie che descrivono lo stesso fenomeno, ma a scale diverse (*time warping*)
  - Presenza di segmenti rumorosi che inducono il match tra due serie lungo intervalli non contigui

Similarità tra serie temporali

- Uso delle norme L_p:
  - Una norma funziona perfettamente su due sequenze trasformate con HWT
  - HWT normalizzata induce una rotazione degli assi rispetto ad un sistema di riferimento ortonormale che rappresenta diverse scale temporali
  - Necessitano di sequenze della stessa lunghezza

Similarità tra serie temporali

- Dynamic Time Warping (DTW):
  - Necessità di adattare due serie temporali alla stessa scala, ma con coefficiente variabile da segmento a segmento
    - Speech recognition: gestione delle diverse velocità del parlato
  - Consente di applicare una norma alle serie scalate che vengono riportate alla stessa lunghezza



(a) Original series (b) Warped series

Similarità tra serie temporali

- Dynamic Time Warping (DTW):
  - È definita in maniera ricorsiva ed è indipendente dalla lunghezza delle due serie
  - Parte dalla considerazione che una distanza tra due serie di n elementi può essere riscritta come $\text{dist}(X_n, Y_n) = \text{dist}(X_{n-1}, Y_{n-1}) + g(|x_n - y_n|)$

Similarità tra serie temporali

- Dynamic Time Warping (DTW):
  - $X = (x_1, \ldots, x_m)$ $Y = (y_1, \ldots, y_n)$

$$DTW(i,j) = \text{distance}\,(x_i, y_j) + \min \begin{cases} DTW(i, j-1) & \text{ripeti } x_i \\ DTW(i-1, j) & \text{ripeti } y_j \\ DTW(i-1, j-1) & \text{non ripetere} \end{cases}$$

$$DTW(0,0) = 0,\;\; DTW(j,0) = DTW(0,j) = \infty \forall i,j$$

  - Si calcola iterativamente con un doppio ciclo **for** su *i* e *j*
  - Può essere calcolata solo su una finestra per cui $|i-j| \leqslant w$ altrimenti → ∞
  - Si può estendere a serie temporali con attributi multidimensionali

Similarità tra serie temporali

- Window based matching:
  - Date due serie *X* e *Y*, si estraggono una serie di finestre non sovrapponibili escludendo gli eventuali intervalli rumorosi ($X_1, \ldots, X_r$) e ($Y_1, \ldots, Y_r$)
  - Uno schema generale per il calcolo della similarità è:

$$Sim(\bar{X}, \bar{Y}) = \sum_{i=1}^{r} Match(\bar{X}_i, \bar{Y}_i)$$

  - *Match*(.,.) può essere implementato in diversi modi

Similarità tra serie discrete

- Seguono lo stesso principio generale delle serie temporali
- Si può pensare di applicare le norme e la DTW è possibile
- Ci sono due approcci caratteristici
  - Edit distance (distanza di Levenshtein)
  - Longest common subsequence (LCSS)

Similarità tra serie discrete

- Edit distance (distanza di Levenshtein)
  - Date due sequenze $X = (x_1, \ldots, x_m)$ e $Y = (y_1, \ldots, y_n)$, la distanza $Edit(i,j)$ tra la sottosequenza X_i e la sottosequenza Y_j è lo *sforzo minimo* necessario a trasformare una sequenza in un'altra in termini di *operazioni di edit*
    - Cancellazione dell'ultimo elemento di X_i per fare il match con l'ultimo di Y_j
    - Inserimento di un elemento in coda a X_i per fare il match con l'ultimo di Y_j
    - Sostituzione dell'ultimo elemento di di X_i con l'ultimo di Y_j se sono diversi
  - È una distanza, ma è asimmetrica → $Edit(i,j) \neq Edit(j,i)$

Similarità tra serie discrete

- Edit distance (distanza di Levenshtein)

$$Edit(i,j) = \min \begin{cases} Edit(i-1,j) + \text{ Costo Cancellazione} \\ Edit(i,j-1) + \text{ Costo Inserzione} \\ Edit(i-1,j-1) + I_{ij} \cdot (\text{Costo Sostituzione }) \end{cases}$$

$$I_{ij} = \begin{cases} 0 & x_i = y_j \\ 1 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad ; \qquad \begin{aligned} Edit(i,0) &= i \text{ cancellazioni} \\ Edit(0,j) &= j \text{ inserzioni} \end{aligned}$$

  - La scelta dell'implementazione delle primitive di cancellazione, inserimento e sostituzione in termini numerici può consentire anche l'applicazione alle serie temporali

Similarità tra serie discrete

- Longest common subsequence (LCSS)
  - È una similarità → al crescere di LCSS la similarità tra le due sequenze aumenta

$$LCSS(i,j) = \max\begin{cases} LCSS(i-1,j-1)+1 & \text{se } x_i = y_j \\ LCSS(i-1,j) & \text{se } x_i \neq y_j \text{ e cancelliamo } x_i \\ LCSS(i,j-1) & \text{se } x_i \neq y_j \text{ e cancelliamo } y_j \end{cases}$$

$$LCSS(i,0) = LCSS(0,j) = 0 \ \forall i,j$$

Similarità nei grafi

- Similarità tra nodi in un grafo
  - Si usano distanze nei casi in cui si possono associare dei costi ai nodi o agli archi
  - Si usano similarità nei casi in cui il grafo è descritto in termini di pesi
  - Omofilia: due nodi sono tanto più simili quanto più sono connessi tra loro attraverso cammini che siano *quanti più possibile* o *quanto più brevi possibile*

Similarità nei grafi

- Cammino minimo (algoritmo di Dijkstra)
  - Si esplorano tutti i nodi a partire dal nodo sorgente *s*, a partire dal quale misuriamo la distanza, verso un certo nodo *d* di destinazione
  - Ad ogni arco (*i*,*j*) è associato un costo c_{ij}
  - Di volta in volta, scelto il nodo *i*-esimo con il costo minimo del cammino *SP*(*s*,*i*) tra i nodi ancora non visitati, i suoi vicini *j* ricevono un'etichetta con il costo del cammino minimo trovato sinora partendo dal nodo sorgente *s:*

$$SP(s,j) = \min\{SP(s,j), SP(s,i) + c_{ij}\}$$

Inizializzazione: $SP(s,s) = 0,\ SP(s,j) = \infty\ \forall j \neq s$

Similarità nei grafi

- Cammino minimo (algoritmo di Dijkstra)
  - L'approccio è lineare nel numero di archi del grafo
  - Ogni nodo viene visitato esattamente una volta e si ottiene il calcolo delle distanze di *s* da tutti gli altri nodi del grafo in una sola passata

$$SP(s,j) = \min\{SP(s,j), SP(s,i) + c_{ij}\}$$

Inizializzazione: $$SP(s,s) = 0,\ SP(s,j) = \infty\ \forall j \neq s$$

Similarità nei grafi

- Random Walk
  - Si utilizza in grafi in cui due nodi possono essere connessi da molti cammini contemporaneamente
  - Un nodo *A* potrebbe essere più simile a *B* cui è connesso da tre cammini piuttosto che a *C* cui è connesso da un cammino solo anche se più breve

Similarità nei grafi

- Random Walk
  - Da *s* si dipartono dei cammini casuali verso gli altri nodi
  - Ogni passo da un nodo all'altro è gestito da una probabilità legata al peso w_{ij} dell'arco tra i due
  - Ogni nodo *j* ha una *probabilità di restart* cioè di far ritornare indietro il cammino verso *s*
    - Dunque i cammini sono variabili casuali con una distribuzione polarizzata verso *s*
  - La similarità si ottiene *massimizzando* questa probabilità → cammini più probabili connettono *s* ai suoi nodi più simili

Similarità nei grafi

- Similarità tra grafi
  - Si ricerca un *isomorfismo* tra strutture a grafo
  - Il problema è complicato dal fatto che più nodi possono avere la stessa etichetta (ad es. molecole)
  - Ci sono diversi approcci

Similarità nei grafi

- Similarità tra grafi
  - Massimo sotto-grafo comune
  - Similarità basata sulla presenza di sotto-strutture
    - Si contano le sottostrutture più frequenti analogamente alle stringhe
      - fingerprint molecolari
  - Graph-edit distance
    - Analoga alla string-edit: le operazioni sono quelle di inserimento di nodi, inserimento e cancellazione di archi e sostituzione dalla label di un nodo