BI-ML1.21 přednáška 12

Daniel Vašata

FIT ČVUT

11. 12. 2024

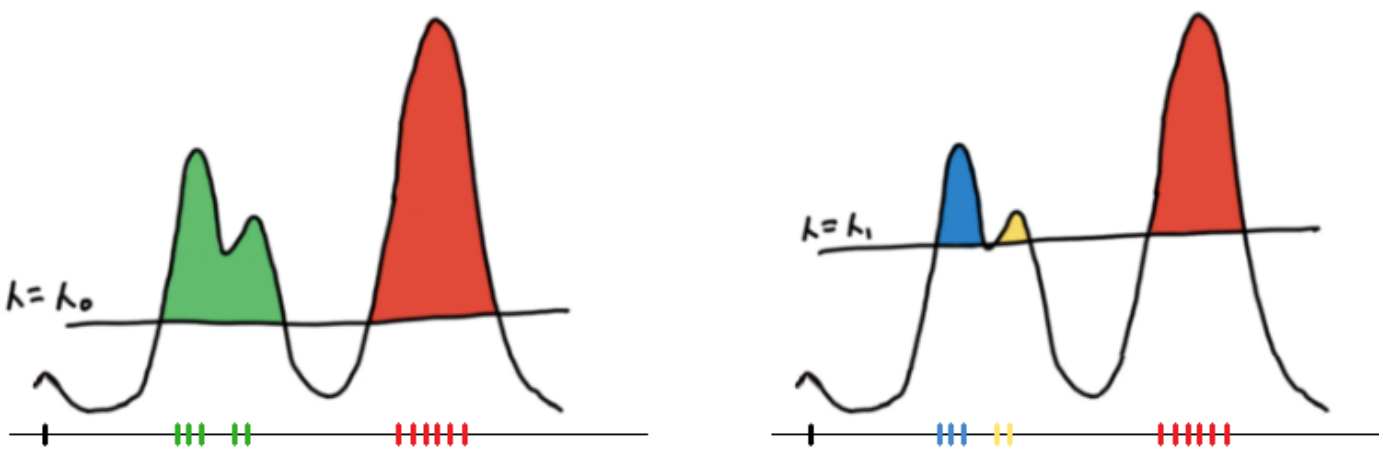
Autoři: Karel Klouda, Daniel Vašata.
Problémy, návrhy apod. hlaste v GitLabu.
Verze souboru: 18. prosince 2024 14:20.

Co bude v dnešní přednášce

- Shlukování pomocí hustoty
- DBSCAN
- Evaluace shlukování pomocí Silhouette skóre
- Asociační pravidla

Úvod do shlukování pomocí hustoty

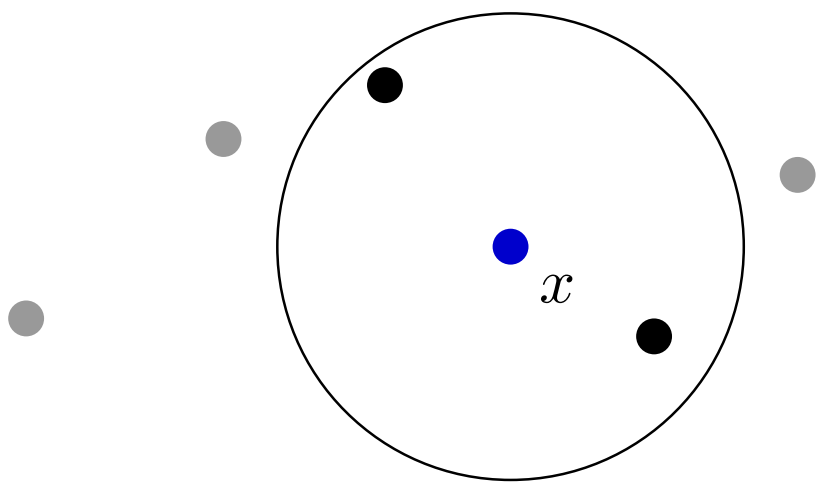
- V dnešní přednášce se zaměříme na shlukování, které využívá odhad hustoty rozdělení dat na prostoru $\mathcal{X}$ možných hodnot příznaků.
- Z pravděpodobnostního pohledu chápeme pozorovaná data jako realizace náhodného vektoru $\boldsymbol{X} = (X_1, \ldots, X_p)^T$.
- Pokud budeme mít nějakým způsobem odhadnutou hustotu pravděpodobnosti $f_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x}) \equiv f_{\boldsymbol{X}}(x_1, \ldots, x_p)$ (resp. něco, co jí je úměrné), můžeme ji využít k získání shlukování včetně identifikace bodů, které do žádných shluků nepatří.
- Shluky můžeme získat jako souvislé oblasti, ve kterých odhad hustoty překročí nějakou zvolenou hranici.
- Body mimo tyto oblasti pak označíme jako šum.



DBSCAN - úvodní pojmy

- Jedním s aktuálně nejpoužívanějších algoritmů shlukování, který je implicitně založen na principu odhadu hustoty, je algoritmus **DBSCAN**, což je zkratka angl. **density-based spatial clustering of applications with noise**, [Ester et al. (1996)].
- Připravme si nyní základní pojmy, na kterých DBSCAN stojí.
- Uvažujme metrický prostor $\mathcal{X}$ s metrikou $d(x, y)$ ze kterého pochází dataset $\mathcal{D}$ a parametry $\varepsilon > 0$ a MinPts $\in \mathbb{N}^+$.
- Definujme ε **okolí** bodu x v $\mathcal{D}$ (angl. ε-neighborhood) jako množinu

$$N_\varepsilon(x) = \{y \in \mathcal{D} | d(x, y) \leq \varepsilon\}.$$



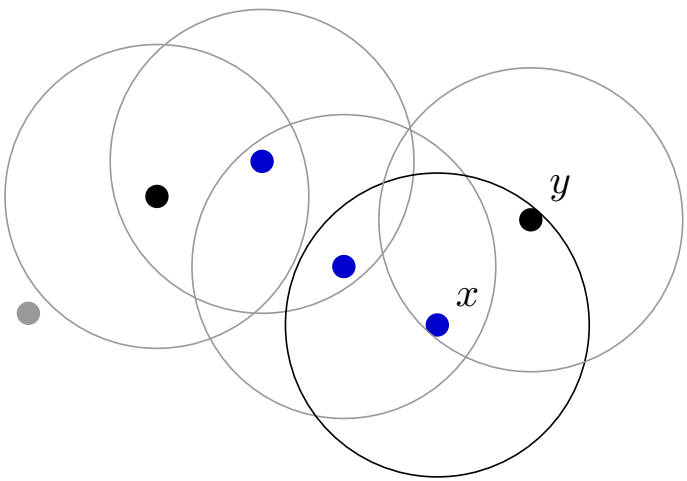
Znázornění ε okolí.

DBSCAN - klíčové body, přímá dosažitelnost

- Bod $x \in \mathcal{D}$ je **klíčový bod** (angl. **core point**), jestliže v jeho ε okolí v $\mathcal{D}$ je alespoň MinPts bodů,

$$|N_\varepsilon(x)| \geq \text{MinPts}.$$

- Bod $y \in \mathcal{D}$ je **přímo dosažitelný** (angl. **directly density-reachable**) z bodu $x \in \mathcal{D}$, jestliže x je klíčový bod a $y \in N_\varepsilon(x)$.
- Relace přímé dosažitelnosti je symetrická pro dvojici klíčových bodů, je ale nesymetrická pro tzv. **okrajový bod** (angl. **border point**), což je bod, který není klíčový, ale je přímo dosažitelný z klíčového bodu.

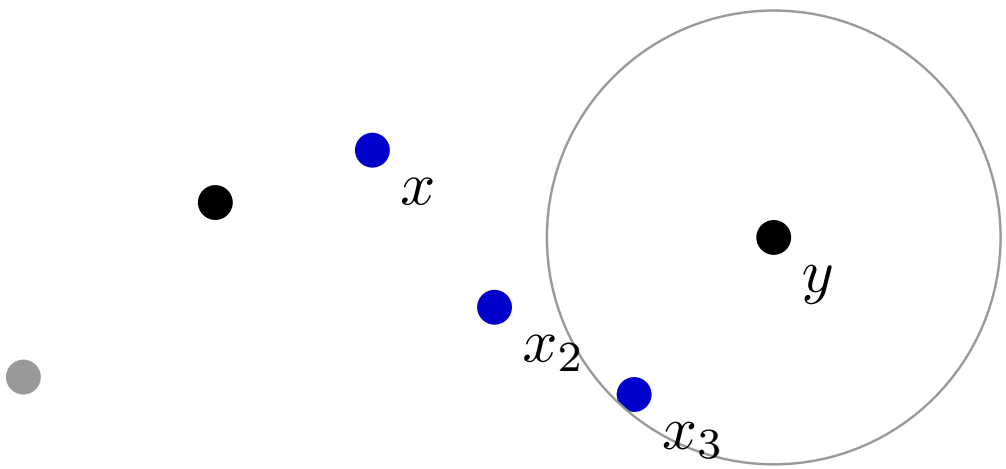


Pro MinPts $= 3$ je bod y přímo dosažitelný z x. Všechny klíčové body jsou modré, všechny okrajové body jsou černé.

DBSCAN - dosažitelnost

- Bod $y \in \mathcal{D}$ je **dosažitelný** (angl. **density-reachable**) z bodu $x \in \mathcal{D}$, pokud existuje posloupnost $x_1, x_2, \ldots, x_n \in \mathcal{D}$ bodů tak, že $x_1 = x$, $x_n = y$ a pro každé $i = 1, \ldots, n-1$ je x_{i+1} přímo dosažitelný z bodu x_i.

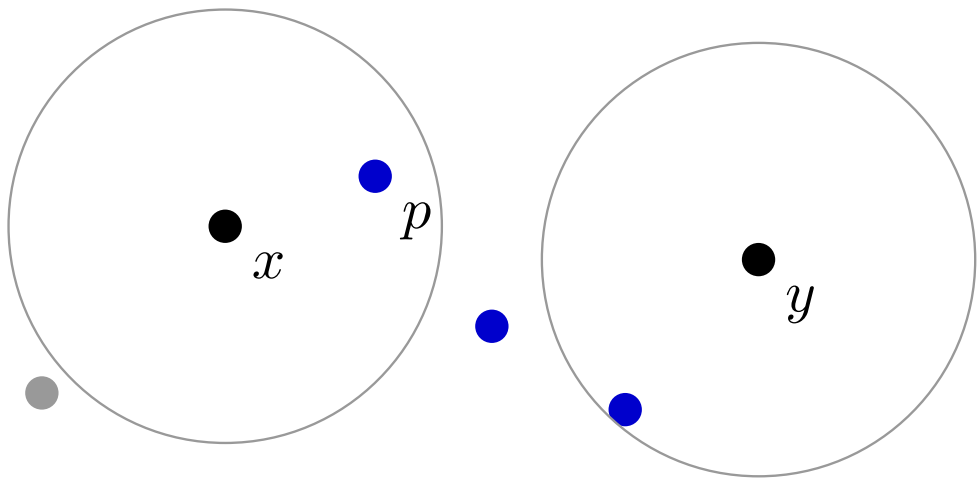
- Z toho plyne, že všechny body po cestě kromě posledního musí být klíčové body.



Pro MinPts $= 3$ je bod y dosažitelný z bodu x.

DBSCAN - spojenost

- Bod $y \in \mathcal{D}$ je **spojený** (angl. **density-connected**) s bodem $x \in \mathcal{D}$, jestliže existuje (klíčový bod) $p \in \mathcal{D}$, tak, že x i y jsou dosažitelné z bodu p.
- Relace spojenosti je zjevně symetrická. Pro klíčové body je také tranzitivní.
- Jestliže jsou dva body spojené a jeden z nich je klíčový bod, tak ten druhý je z toho prvního dosažitelný.



Pro MinPts $= 3$ je bod y spojený s bodem x.

DBSCAN - shluky, šum

Shluk nyní definujeme jako maximální množinu spojených bodů.

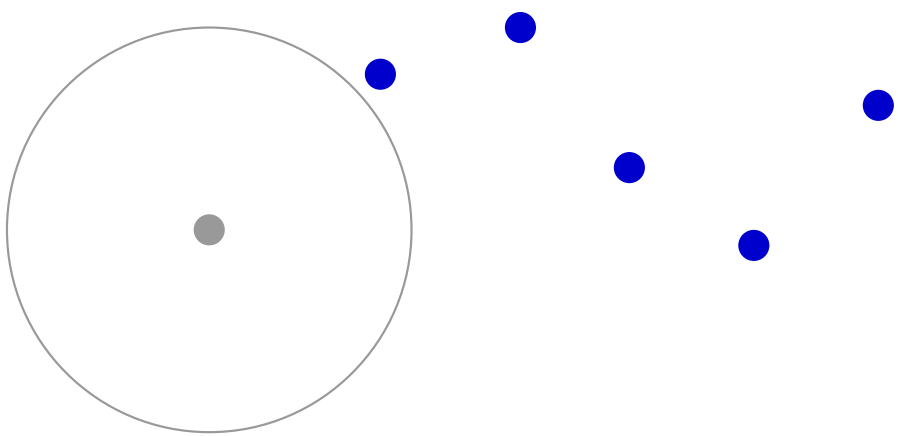
Definice

Shluk (angl. **cluster**) C je podmnožina $\mathcal{D}$ obsahující alespoň jeden klíčový bod tak, že:

- Pro každé $x, y \in \mathcal{D}$ platí, že když $x \in C$ a y je dosažitelný z x, pak $y \in C$ (maximalita).
- Pro každé $x, y \in C$ je x spojený s y (souvislost).

Označme $C_1, \ldots, C_k$ množinu všech shluků v $\mathcal{D}$ (vzhledem k ε a k). Množinu N bodů z $\mathcal{D}$, které nejsou v žádném ze shluků nazýváme **šumem** (angl. **noise**),

$$N = \mathcal{D} \setminus \bigcup_{i=1}^{k} C_i$$



Body ve shluku jsou modré, bod šumu je šedivý.

Poznámky k definici shluků

- Shluk C vždy obsahuje nějaký klíčový bod $p \in C$, ze kterého jsou dosažitelné všechny body v jeho ε okolí, kterých je alespoň MinPts.

  Právě jsme tedy ukázali, že každý shluk obsahuje alespoň MinPts bodů.

- Každý bod ve shluku C je spojený se všemi klíčovými body v C a tedy je z libovolného klíčového bodu dosažitelný. Shluk je tedy tvořen všemi body, které jsou dosažitelné z libovolného klíčového bodu v C.

- To nám dává návod, jak může algoritmus tvorby shluků fungovat. Najdeme klíčový bod a vytvoříme k němu shluk jako množinu všech z něho dosažitelných bodů (které ještě nejsou v jiném shluku).

Abstraktní popis algoritmu

Nyní si abstraktním způsobem popišme běh algoritmu DBSCAN.

Algoritmus DBSCAN

Nalezení klíčových bodů: Spočítáme ε okolí každého bodu a identifikujeme klíčové body.

Vytvoření zárodků shluků: Spojíme sousední (přímo dosažitelné) klíčové body do shluků.

Pro každý bod, který není klíčový:

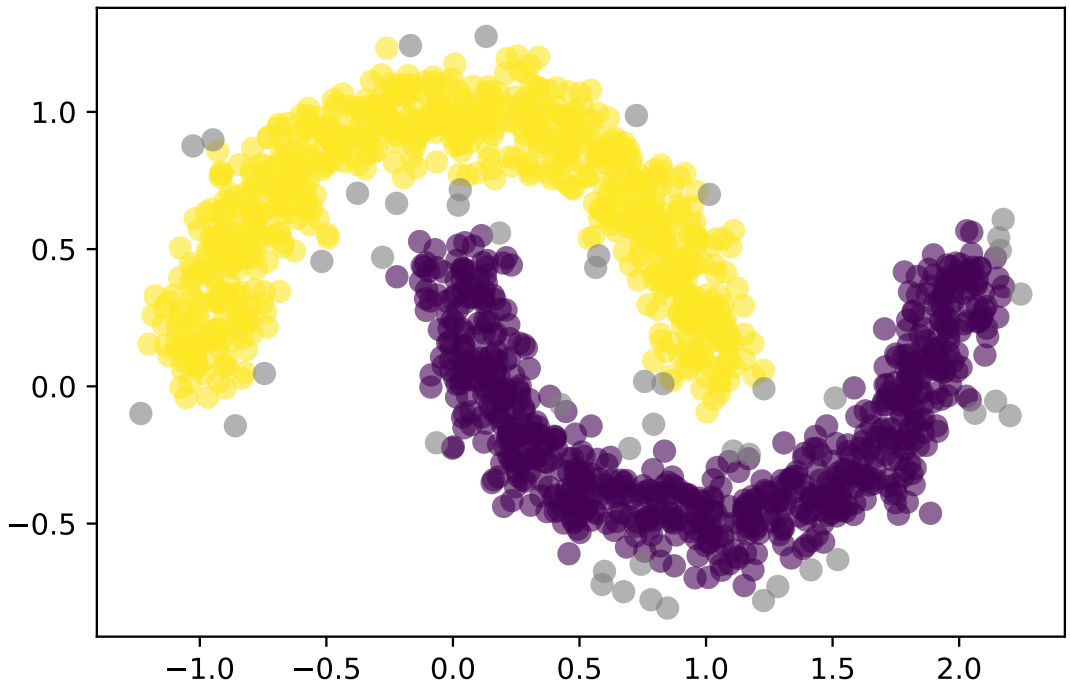
- Přidáme do shluku podle klíčového bodu v jeho okolí.
- Pokud takový neexistuje, přidáme mezi šum.

- Okrajový bod, který má ve svém ε okolí klíčové body z různých (zárodků) shluků spadne do prvního z těchto shluků, ke kterému se algoritmus dostane.
- Finálním výsledkem v takovém případě budou shluky, které nesplňují podmínku maximality v předchozí definici, protože okrajový bod bude pouze v jednom shluku a nikoliv ve všech, kde by dle maximality měl být.
- Lze ukázat ([Schubert et al. (2017)]), že složitost v nejhorším případě je $O(n^2)$. V mnoha reálných situacích se ale lze dostat na $O(n \log n)$.

DBSCAN - volba parametrů

- Zaměřme se nyní krátce na volbu parametrů algoritmu DBSCAN.
- Ukazuje se, že parametr MinPts je mnohem méně důležitý než parametr ε. Obvykle dobrou volbou jsou hodnoty okolo $4 - 6$ (někdy bývá doporučováno $2 \dots p$, kde p je počet příznaků).
- Pro parametr ε bývá doporučováno volit co nejmenší hodnotu s tím, že lze například brát průměrnou vzdálenost bodů k jejich nejbližšímu $(2 \cdot p - 1)$tému sousedovi.
- Také můžeme sledovat velikost šumu. Uvádí se, že obvykle by poměr šumu měl být mezi 1% a 30%.
- Dále je dobré sledovat velikost největšího shluku. Pokud jeho velikost překračuje 50% velikosti datasetu, bývá vhodné zmenšit ε, případně použít nějaký pokročilejší algoritmus (např. HDBSCAN).
- Více detailů k volbě parametrů najdete v [Schubert et al. (2017)] nebo v [Sander et al. (1998)].

DBSCAN - ukázka a poznámky



Znázornění shluků a šumu.

- Mezi hlavní výhody DBSCAN (a obecně metod založených na hustotě) patří možnost nalezení nekonvexních shluků.
- Další výhodou je snížená citlivost na odlehlé hodnoty - které jsou označeny jako šum.

Evaluace pomocí Silhouette skóre (1/3)

- Vraťme se nyní k obecné úloze shlukování a ukažme si jednoduchou a používanou metodu pro evaluaci shlukování pomocí metody **Silhouette** [Rousseeuw, P. (1987)], kterou lze využít i k určení optimálního počtu shluků.
- Uvažujme shlukování $\mathcal{D} = C_1 \cup \ldots C_k$ na metrickém prostoru $\mathcal{X}$ s metrikou $d(x, y)$ a pro libovolný bod $x \in \mathcal{D}$ označme $j(x)$ index shluku do kterého x patří, tj. $x \in C_{j(x)}$.
- Pro bod $x \in \mathcal{D}$ nyní:
  - Spočteme $a(x)$ jako průměrnou vzdálenost bodu x od všech ostatních bodů ve stejném shluku (vnitřní rozdílnost, angl. within dissimilarity)

$$a(x) = \frac{1}{|C_{j(x)}| - 1} \sum_{y \in C_{j(x)}, y \neq x} d(x, y).$$

  - Pro každý další shluk C_i, $i \neq j(x)$ spočteme průměrnou vzdálenost bodu x od všech bodů v tomto shluku

$$d(x, C_i) = \frac{1}{|C_i|} \sum_{y \in C_i} d(x, y)$$

  - Spočteme $b(x)$ jako minimum z těchto průměrných vzdáleností od ostatních shluků (sousední rozdílnost, angl. between dissimilarity)

$$b(x) = \min_{i \neq j(x)} d(x, C_i)$$

Evaluace pomocí Silhouette skóre (2/3)

Finální silhouette skóre bodu $x \in \mathcal{D}$ získáme vztahem

$$s(x) = \frac{b(x) - a(x)}{\max\{a(x), b(x)\}}.$$

- Jestliže máme pouze jeden shluk, položíme $s(x) = 0$.
- Z definice vidíme, že vždy platí

$$-1 \leq s(x) \leq 1.$$

- Hodnota $s(x)$ blízká 1 znamená, že vnitřní rozdílnost $a(x)$ je mnohem menší než sousední rozdílnost $b(x)$, což značí, že ten bod je dobře zatříděn.
- Hodnota $s(x)$ okolo 0 znamená, že $a(x)$ je podobně velké jako $b(x)$ a tedy bod x je někde na okraji svého shluku a sousední shluk je blízko. Čili by ten bod klidně mohl patřit i do toho druhého shluku.
- Hodnota $s(x)$ blízká -1 znamená, že vnitřní rozdílnost $a(x)$ je mnohem větší než sousední rozdílnost $b(x)$ a tedy bod x by měl spíše patřit do toho sousedního shluku než do toho svého. Je tedy špatně přiřazen.

Evaluace pomocí Silhouette skóre (3/3)

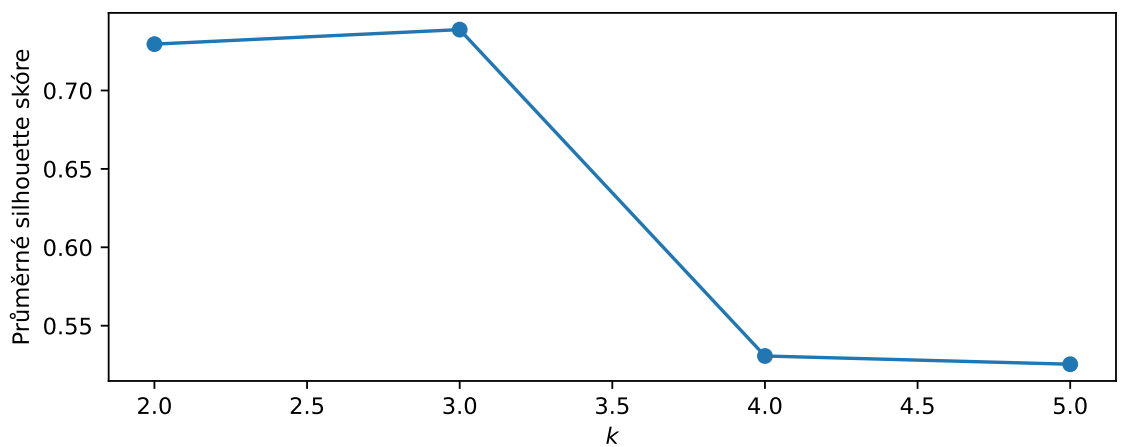
- Z ohodnocení $s(x)$ každého z bodů x můžeme získat jednak průměrné skóre s_i pro každý shluk C_i zvlášť

$$s_i = \frac{1}{|C_i|} \sum_{x \in C_i} s(x),$$

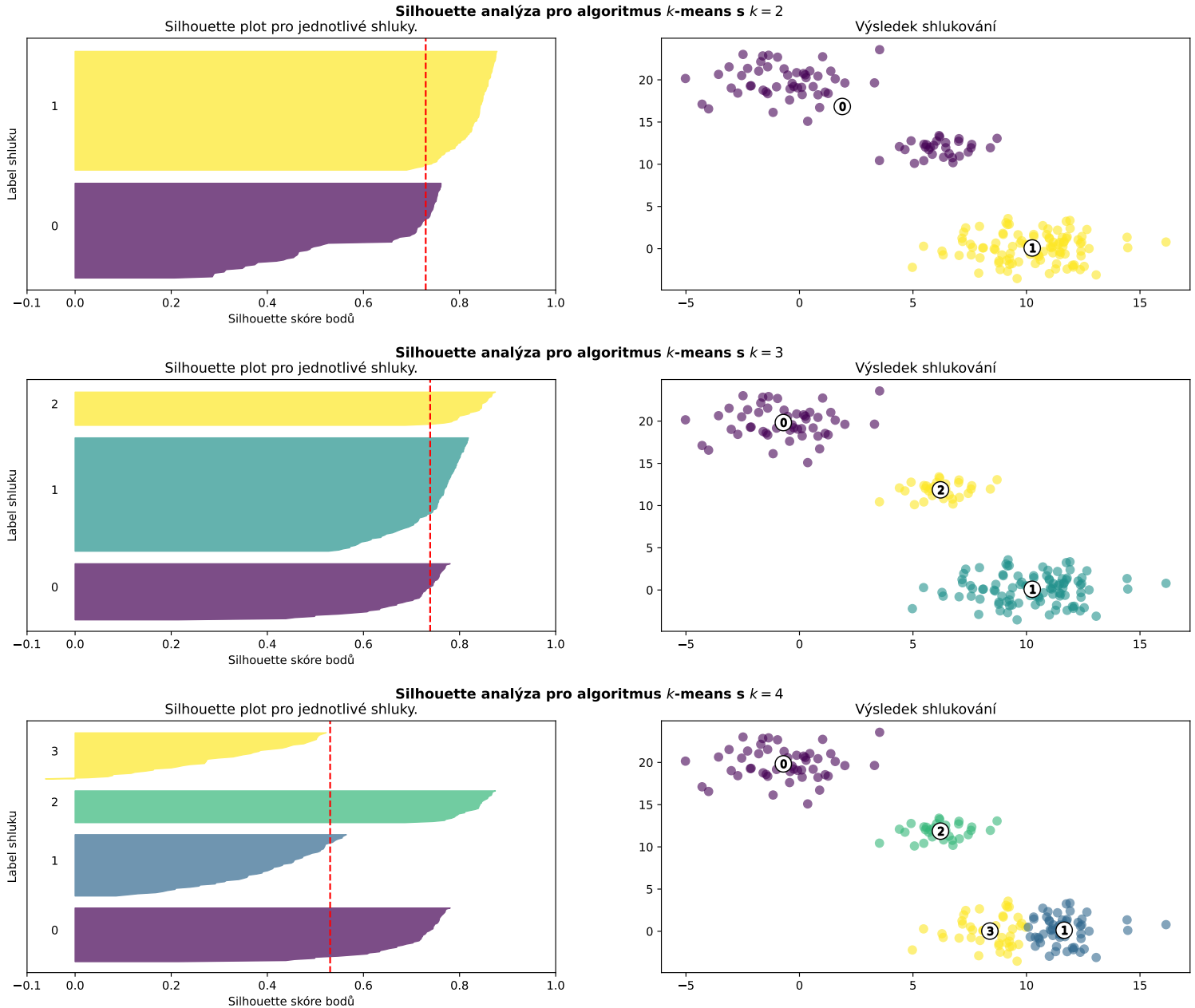
- a pak také průměrné skóre s pro celé shlukování

$$s = \frac{1}{|D|} \sum_{x \in \mathcal{D}} s(x).$$

- Čím vyšší dostaneme hodnotu, tím jsou body ve shlucích správněji umístěné a tedy je celé shlukování lepší.
- Porovnání skóre pro různé počty shluků můžeme použít k nalezení vhodného počtu shluků jako hodnoty, při které je skóre s maximální.



Znázornění silhouette skóre



Analýza asociačních pravidel

- **Analýza asociačních pravidel** je jedna ze standardních a oblíbených metod pro dobývání znalostí z komerčních databází.
- Obecným cílem je nalézt společné hodnoty příznaků $\boldsymbol{X} = (X_1, \ldots, X_p)^T$, které se v databázi nejčastěji vyskytují.
- V zásadě jde přesně o jeden z hlavních cílů nesupervizovaného učení, kdy chceme nalézt oblasti prostoru, kde se data vyskytují s velkou pravděpodobností.
- V nejčastěji používaném zjednodušení se zabýváme pouze oblastmi, které jsou ve tvaru kartézského součinu pro jednotlivé příznaky, tj. chceme, aby pravděpodobnost

$$\mathrm{P}\left(\cap_{j=1}^{p}(X_j \in s_j)\right),$$

kde s_j je podmnožina hodnot příznaku X_j, byla relativně velká.

- Průnik $\cap_{j=1}^{p}(X_j \in s_j)$ se v takovém případě nazývá **konjunktivní pravidlo** (angl. **conjunctive rule**).

Analýza nákupního košíku

- Analýza asociačních pravidel je nejčastěji aplikována v případě binárních příznaků, $X_j \in \{0, 1\}$, kdy se pak nazývá **analýza nákupního košíku** (angl. **market basket analysis**).
- Pro oblast, kterou hledáme ve tvaru kartézského součinu se v tomto případě používá ještě další omezení, a to, že s_j je buď jednoprvková množina $\{1\}$ nebo všechny možnosti daného příznaku X_j (v tu chvíli příznak vypadne).
- Ekvivalentně tedy hledáme množinu indexů $\mathcal{K} \subset \{1, \ldots, p\}$ tak, že

$$\mathrm{P}\left(\cap_{j\in\mathcal{K}}(X_j = 1)\right) = \mathrm{P}\left(\prod_{j\in\mathcal{K}} X_j = 1\right)$$

  je relativně velká.
- Množina $\mathcal{K}$ se pak nazývá **množina položek** (angl. **item set**).
- Relativní velikost položek v datasetu, které danou množinu položek obsahují se značí $T(\mathcal{K})$ a nazývá **podpora** (angl. **support**) množiny položek $\mathcal{K}$ a odpovídá odhadu výše uvedené pravděpodobnosti:

$$T(\mathcal{K}) = \hat{\mathrm{P}}\left(\cap_{j\in\mathcal{K}}(X_j = 1)\right) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\prod_{j\in\mathcal{K}} x_{i;j}.$$

Asociační pravidla (1/2)

- Při provádění analýzy nákupního košíku hledáme všechny množiny položek, pro které je podpora větší než nějaká zvolená mez t:

$$\{\mathcal{K}_\ell | T(\mathcal{K}_\ell) > t\}.$$

- K nalezení řešení se používá efektivní algoritmus (případně jeho novější vylepšení), který se nazývá Apriori algoritmus ([Agrawal, Srikant (1994)]).
- Pro každou množinu položek $\mathcal{K}$, kterou takto získáme, dále hledáme vhodné rozložení na dvě disjunktní podmnožiny A a B, $A \cup B = \mathcal{K}$, které budeme nazývat **asociační pravidlo** (angl. **association rule**) a značit

$$A \Rightarrow B.$$

- První položka A asociačního pravidla se nazývá **předpoklad** (angl. **antecedent**) a druhá položka B se nazývá **závěr** (angl. **consequent**).
- **Podpora** $T(A \Rightarrow B)$ pravidla $A \Rightarrow B$ je definována jako podpora sjednocení $\mathcal{K} = A \cup B$.
- **Spolehlivost** (angl. **confidence**) $C(A \Rightarrow B)$ pravidla $A \Rightarrow B$ je definována jako podpora pravidla podělená podporou předpokladu A:

$$C(A \Rightarrow B) = \frac{T(A \Rightarrow B)}{T(A)},$$

což odpovídá odhadu podmíněné pravděpodobnosti $\mathrm{P}(B|A)$.

Asociační pravidla (2/2)

- Asociační pravidla jsou volena tak, aby spolehlivost byla větší než nějaká zvolená mez c.
- Finálním výstupem asociační analýzy pravidel je množina asociačních pravidel, které splňují
$$T(A \Rightarrow B) > t \quad \text{a} \quad C(A \Rightarrow B) > c.$$
- U nalezených asociačních pravidel se dále často měří **zdvih** (angl. **lift**) definovaný jako
$$L(A \Rightarrow B) = \frac{C(A \Rightarrow B)}{T(B)},$$
který odpovídá odhadu podílu $\mathrm{P}(B|A)/\mathrm{P}(B)$ což znamená, kolikanásobně je větší $P(B|A)$ oproti $P(B)$.
- Někdy se také měří **pokrytí** (angl. **coverage**) definované jako
$$\text{Coverage}(A \Rightarrow B) = \frac{T(A \Rightarrow B)}{T(B)},$$
což odpovídá odhadu podmíněné pravděpodobnosti $\mathrm{P}(A|B)$.
- Pokrytí tedy indikuje, jak často lze závěr vyložit coby důsledek předpokladu.

Asociační pravidla - příklady

Klasickým příkladem asociačního pravidla je

$$\{\texttt{párky}\} \Rightarrow \{\texttt{hořčice, chléb}\}.$$

- Podpora 0.06 znamená, že v celém datasetu se trojice položek $\{\texttt{párky, hořčice, chléb}\}$ vyskytuje v 6% případů.
- Pokud se `párky` vyskytují v datasetu v 8% případů, bude spolehlivost $0.06/0.08 = 0.75$, což znamená, že když si zákazník koupil `párky`, v 75% případů si koupil také `horčici` a `chléb`.
- Pokud je dvojice `horčice` a `chléb` v datasetu v 15% případů, zdvih bude $0.75/0.15 = 5$.
- Pokrytí v takovém případě bude $0.06/0.15 = 0.4$. Čili ve 40% případů lze `horčici` a `chléb` uvažovat jako důsledek koupě `párků`.

Nevýhoda omezení na podporu je, že pravidla s velkou hodnotou spolehlivosti i zdvihu ale s nízkou podporou, jako např.

$$\{\texttt{doutník}\} \Rightarrow \{\texttt{rum}\},$$

nebudou nalezeny.