SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET ELEKTROTEHNIKE I RAČUNARSTVA

DIPLOMSKI RAD br. 2981

Usporedba algoritama grupiranja u postupcima otkrivanja anomalija

Jelena Nemčić

Zagreb, lipanj 2022.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET ELEKTROTEHNIKE I RAČUNARSTVA

Zagreb, 11. ožujka 2022.

DIPLOMSKI ZADATAK br. 2981

Pristupnica:	**Jelena Nemčić (0036497921)**
Studij:	Računarstvo
Profil:	Računarska znanost
Mentor:	izv. prof. dr. sc. Goran Delač

Zadatak: **Usporedba algoritama grupiranja u postupcima otkrivanja anomalija**

Opis zadatka:

Odabrati, proučiti i opisati algoritme za grupiranje primjerene obradi velikih skupova podataka. Opisati obilježja algoritama i objasniti njihov princip rada nad pokaznim primjerima. Proučiti postojeće metrike za vrednovanje uspješnosti algoritama grupiranja. Odabrati primjeren skup podataka za postupak otkrivanja anomalija. Programski ostvariti i provesti vrednovanje odabranog podskupa algoritama nad odabranim skupom podataka. Opisati programsko ostvarenje sustava, rezultate vrednovanja algoritama te navesti korištenu literaturu i primljenu pomoć.

Rok za predaju rada: 27. lipnja 2022.

Sadržaj

1. Uvod

Svaki dan generira se velika količina podataka koja se zatim obrađuje kako bi se iz nje saznale nove informacije. Jedan od načina korištenja podataka jest otkrivanje neobičnog ponašanja i pronalaženje anomalija.

Anomalijom se smatra svaki događaj ili opažanje koje značajno odstupa od većine podataka i ne ponaša se na očekivan način. Takvi primjeri mogu izazvati sumnju da ih generira drugačiji mehanizam ili se činiti nedosljednima s ostatkom tog skupa podataka.

Otkrivanje anomalija pronalazi primjenu u mnogim domenama uključujući kibernetičku sigurnost, medicinu, računalni vid, statistiku, neuroznanost i oružane snage. Koristi se također i za otkrivanje financijskih prijevara, industrijskih oštećenja i poremećaja u ekosustavu. Anomalije mogu predstavljati problem te su tada tražene radi namjernog izostavljanja iz skupa podataka kako bi se dobila točnija statistička analiza ili bolje predviđanje nekog modela strojnog učenja. Međutim, u mnogim su primjenama anomalije najzanimiljiviji dio skupa podataka i predstavljaju novu pojavu koju je potrebno identificirati i dalje istražiti.

Jedna od tehnika otkrivanja anomalija jest korištenje algoritama grupiranja s ciljem pronalaženja elemenata koji ne pripadaju niti jednoj grupi. U ovom radu dano je objašnjenje problema pronalaska anomalija, opis različitih algoritama grupiranja i korištenih skupova podataka te usporedba izvedbe tih algoritama u postupcima otkrivanja anomalija. Algoritmi odabrani za usporedbu su algoritmi K-sredina, DBSCAN i Gaussova mješavina, a testirani su na problemima otkrivanja ...

2. Anomalije

2.1. Pojava anomalija i njeni uzroci

Postoji više pokušaja definiranja anomalija, a većina njih opisuje anomaliju kao opažanje čiji se obrazac ponašanja razlikuje od očekivanog, najčešće se pojavljuje vrlo rijetko u skupu podataka i njegova su obilježja značajno drugačija od onih većine preostalih opažanja. Također, anomalijom se može smatrati podatak koji se čini nedosljedan i relativno udaljen od drugih podataka iz skupa ili izaziva sumnju da ga generira drugačiji mehanizam.

Anomalije se mogu pojaviti u bilo kojem skupu podataka i ponekad njihovo otkrivanje može biti od izuzetne važnosti. Često se otkrivanje anomalija provodi u predobradi kako bi se mogle ukloniti iz skupa podataka. Time se dobiva točnija statistika podataka, bolje predviđanje modela strojnog učenja i bolja vizualizacija podataka. S druge strane, anomalije mogu biti najvažnija i najzanimljivija opažanja i tada se otkrivanje anomalija provodi radi njih samih. Primjeri takve primjene su otkrivanje upada u području kibernetičke sigurnosti, otkrivanje financijskih prijevara i lažnih informacija, otkrivanje kvarova i pogrešaka, praćenje stanja sustava i vremenskih serija, detekcija događaja u senzorskim mrežama, otkrivanje poremećaja u ekosustavu, otkrivanje nedostataka na slikama pomoću računalnog vida te postavljanje medicinske dijagnoze i provođenje zakona.

Mogući uzroci pojave anomalija su:

1. Podaci pripadaju različitim razredima.
   - Anomalije se razlikuju od ostalih podataka jer pripadaju drugom razredu, koji ima drugačija obilježja.
   - Primjer takvih anomalija su financijske prijevare, strani upad u sustav i pojava bolesti.
2. Prirodna varijacija.

- Neki skupovi podataka mogu se modelirati normalnom distribucijom, gdje su anomalije oni događaji koji imaju vrlo malu vjerojatnost pojavljivanja.

3. Pogreške u mjerenju ili prikupljanju podataka.
   - Do pojave anomalija može doći ako podaci sadrže šum, ako postoji kvar u mjernim instrumentima ili zbog ljudske pogreške.
   - Krajnji je cilj eliminirati ovakve anomalije jer smanjuju kvalitetu podataka.

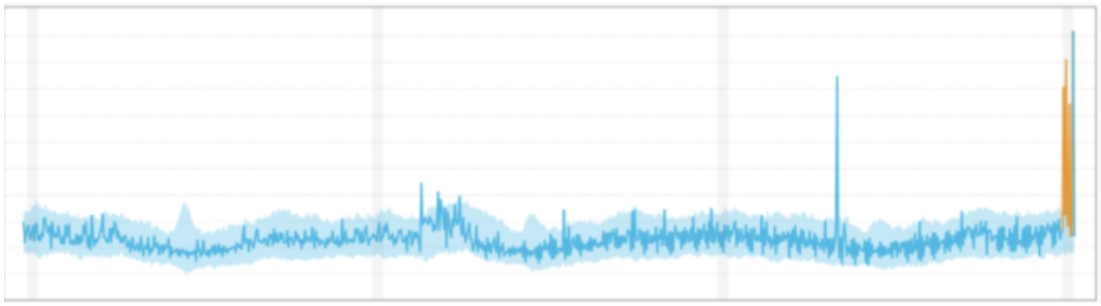
U ovom radu razmatrat će se samo anomalije koje se javljaju kao posljedica toga što podaci prirodno pripadaju različitim razredima.

2.2. Klasifikacija anomalija

Kako bi sustav za otkrivanje anomalija mogao točno identificirati potencijalna odstupanja, nužno je znati koja vrsta anomalije se očekuje. Anomalije se mogu podijeliti u tri glavne kategorije:

1. Globalne anomalije

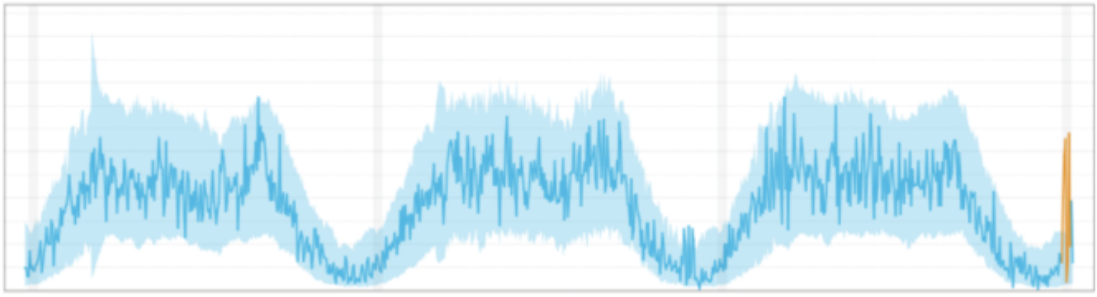
   Opažanje se smatra globalnim odstupanjem ili globalnom anomalijom ako se njegova vrijednost ili vrijednost nekih njegovih obilježja značajno razlikuje od vrijednosti cjelokupnog skupa podataka. Gledano u n-dimenzionalnom prostoru, taj se podatak nalazi daleko od svih ostalih podataka iz skupa. Primjer globalne anomalije dan je na slici 2.1.



Slika 2.1: Globalna anomalija. Preuzeto s https://towardsdatascience.com/outliers-analysis-a-quick-guide-to-the-different-types-of-outliers-e41de37e6bf6

2. Kontekstualne anomalije

Kontekstualne ili uvjetne anomalije su opažanja čije se vrijednosti znatno razlikuju od ostalih opažanja koja postoje u istom kontekstu. Takve vrijednosti ne moraju biti izvan globalnih očekivanja, ali odudaraju od konteksta u kojem se nalaze. Također, jedan podatak koji je anomalija u kontekstu jednog skupa podataka ne mora biti anomalija u drugom. Ovakva odstupanja najčešća su u podacima vremenskih serija jer takvi skupovi podataka sadrže zapise ovisne o vremenskom razdoblju. Slika 2.2 prikazuje primjer takve anomalije.



Slika 2.2: Kontekstualna anomalija

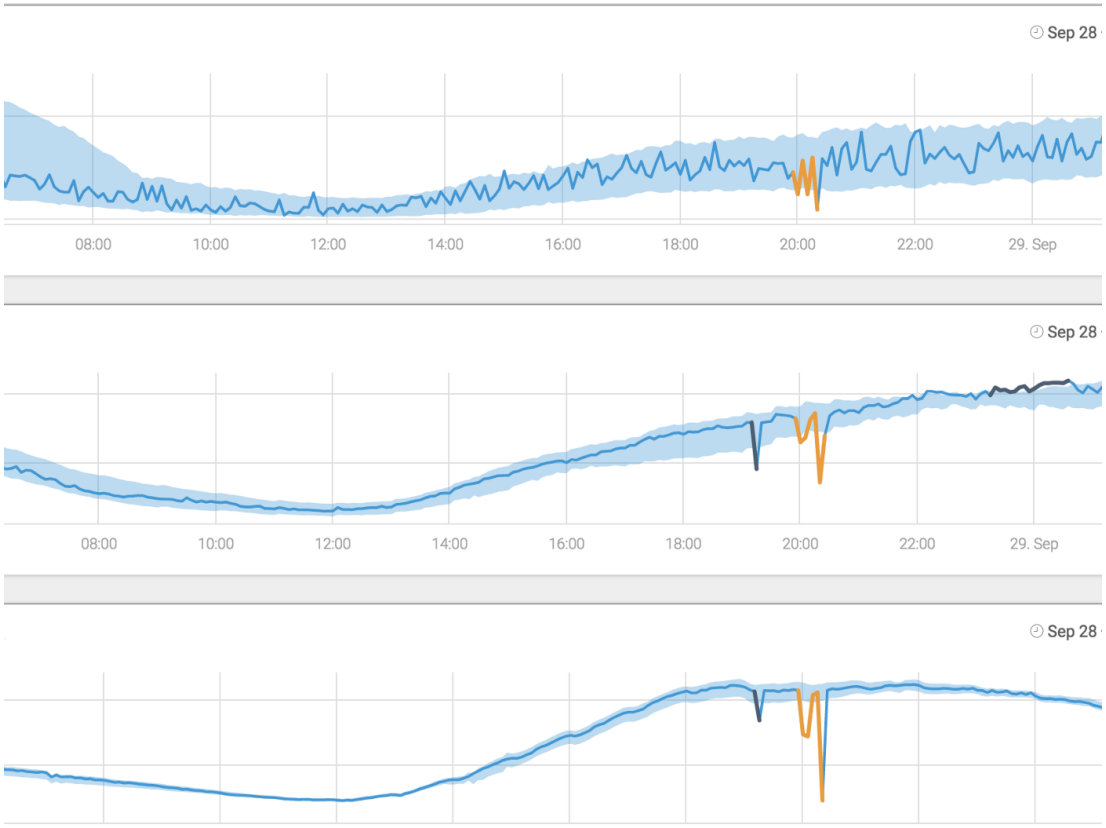
3. Kolektivne anomalije

   Podskup podataka smatra se kolektivnom anomalijom ako njihove vrijednosti kao grupa značajno odstupanju od cijelog skupa podataka, ali vrijednosti pojedinačnih podataka nisu same po sebi anomalne ni u globalnom ni u kontekstualnom smislu. U podacima vremenskih serija, kolektivne anomalije mogu se manifestirati kao vrhovi i doline koje se javljaju izvan vremenskog okvira kada je takvo ponašanje normalno, kao što se vidi na slici 2.3.

Ovisno o vrsti anomalije primjenjuju se različite metode i načini detekcije. Ovaj rad fokusira se na globalne anomalije i njihovo pronalaženje.

2.3. Problem otkrivanja anomalija

Otkivanje anomalija svodi se na problem definiranja očekivanog ponašanja podataka ili granica unutar kojih se podaci smatraju normalnima te identificiranja točaka koje se ne nalaze unutar njih. Postoji nekoliko faktora koji čine ovaj problem vrlo teškim.



Slika 2.3: Kolektivna anomalija

– Učinkovito modeliranje normalnih vrijednosti i ponašanja može biti vrlo izazovan problem. Često je teško nabrojati sva moguća normalna ponašanja nekog objekta i klasificirati neki podatak kao anomaliju. Također, granica između normalnih podataka i anomalija može biti vrlo nejasna.

– Svaki problem zahtjeva specifičan način detekcije anomalija jer su odabir mjere sličnosti i modeliranje odnosa ovisni o svojstvima tog problema. Zbog toga nije moguć razvoj univerzalno primjenjive metode otkivanja anomalija.

– Prikupljeni podaci često sadrže šum koji može imati vrijednosti koje znatno odstupaju od normalnih ili čak nedostaju. Šum smanjuje kvalitetu podataka i otežava definiranje granica između normalnih podataka i anomalija te se često šum može pogrešno identificirati kao anomalija i obrnuto.

– Mnogi načini otkrivanja anomalija postaju neučinkoviti u slučaju velike dimenzionalnosti skupa podataka. Podaci su tada rijetki i udaljenosti među podacima su sve veće te se puno točaka može pogrešno klasificirati kao anomalija.

– U nekim primjenama, korisnik ne želi samo identificirati anomalije već i razumjeti zašto su ti podaci detektirani kao abnormalni. Zbog toga metoda otkrivanja anomalija mora biti razumljiva, smislena i pružiti opravdanje detekciji.

2.4. Metode otkrivanja anomalija

Postoji puno različitih tehnika otkrivanja anomalija i one se mogu podijeliti u četiri glavne kategorije.

1. Statističke metode

   Statistički pristup naziva se još i pristup temeljen na modelu jer sadrži model koji opisuje obilježja skupa podataka. Model najčešće sadrži distribuciju vjerojatnosti podataka i za svaki podatak računa se vjerojatnost njegova pojavljivanja u tom modelu. Ako je ta vjerojatnost vrlo mala, podatak se proglašava anomalijom.

2. Metode temeljene na blizini

   (a) Metode temeljene na udaljenosti

   Metode temeljene na udaljenosti pretpostavljaju da je podatak anomalija ako mu se najbliži susjedi nalaze daleko u prostoru značajki odnosno ako blizina njegovih susjeda značajno odstupa od blizine većine drugih objekata njihovim susjedima u istom skupu podataka.

   (b) Metode temeljene na gustoći

   Metode temeljene na gustoći koriste broj podataka koji se nalaze unutar definiranog prostora ispitivanog podatka za definiranje lokalne gustoće. Što je lokalna gustoća objekta manja, veća je vjerojatnost da je on anomalija.

3. Metode temeljene na grupiranju

   Metode koje se temelje na grupiranju pretpostavljaju da normalni podaci pripadaju velikim i gustim grupama, dok anomalije pripadaju malim i rijetkim grupama ili ne pripadaju niti jednoj. Razlika između grupiranja i metoda temeljenih na gustoći je u tome što grupiranje dijeli podatke u grupe dok metode temeljene na gustoći dijele podatkovni prostor.

U ovom radu za detekciju anomalija koristit će se algoritmi temeljeni na grupiranju. Za usporedbu su izabrani algoritam K-sredina, algoritam DBSCAN i model Gaussove mješavine.

3. Algoritmi grupiranja

3.1. O algoritmima grupiranja

Grupiranje je podjela skupa podataka u grupe, tako da su podaci u istoj grupi sličniji jedni drugima nego podacima iz ostalih grupa. Cilj jest pronalaženje intrinzičnih grupa u skupu podataka. Algoritmi grupiranja pripadaju u skupinu nenadziranih metoda strojnog učenja jer su ulazni podaci dani bez ciljnih vrijednosti odnosno nisu označeni.

3.1.1. Podjela

Grupiranje se može podijeliti u dvije kategorije:

1. Tvrdo grupiranje - podatak ili pripada grupi ili ne pripada
2. Meko grupiranje - podatak pripada svakoj grupi s određenom vjerojatnošću

Osim po tipu grupiranja koje provode, algoritmi grupiranja razlikuju se i po tome kako definiraju pojam grupe i sličnost podataka. Svaki algoritam pretpostavlja specifičan model grupe, a najčešći modeli su:

1. Modeli povezanosti - na temelju udaljenosti podataka stvara se hijerarhijsko stablo grupa
2. Centroidni modeli - podaci se organiziraju u nehijerarhijske grupe ovisno o udaljenosti od centroida te grupe
3. Modeli distribucije - grupe se modeliraju pomoću vjerojatnosti da podaci pripadaju istoj statističkoj distribuciji
4. Modeli gustoće - područja veće gustoće povezuju se u grupe

Ne postoji objektivno najbolji algoritam grupiranja, već odabir algoritma ovisi o problemu koji se rješava. Algoritam se može odabrati na temelju modela grupe ili eksperimentalno. Također, algoritam dizajniran za jednu vrstu modela grupe općenito neće raditi na skupu podataka koji sadrži drugačiji tip grupa.

U ovom radu uspoređivat će se tri različita modela: algoritam K-sredina kao predstavnik centroidnih modela, DBSCAN algoritam kao model gustoće i model Gaussove mješavine koji pripada modelima distribucije.

3.1.2. Vrednovanje

Rezultati algoritama grupiranja mogu se vrednovati na dva načina. Prvi je vredovanje korištenjem podataka za koje su poznate oznake grupa. Takva evaluacija mjeri koliko je dobiveno grupiranje blizu unaprijed određenoj podjeli. Metode vrednovanja tada su često prilagođene varijante metoda koje se koriste za vrednovanje klasifikacije. Neke od tih metrika su:

1. Matrica zabune (eng. *Confusion Matrix*)

   Matrica koja opisuje uspješnost modela prikazom broja istinski pozitivnih (eng. *True Positive - TP*), lažno positivnih (eng. *False Positive - FP*), istinski negativnih (eng. *True Negative - TN*) i lažno negativnih (eng. *False Negative - FP*) primjera.

2. Točnost (eng. *Accuracy*)

   Točnost je udio točno klasificiranih primjera u skupu svih primjera.

   $$Acc = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

3. Preciznost (eng. *Precision*)

   Preciznost predstavlja udio točno klasificiranih primjera među onima koje je model deklarirao kao pozitivne.

   $$P = \frac{TP}{TP + FP}$$

4. Odziv (eng. *Recall*)

   Odziv je udio točno klasificiranih primjera u skupu svih stvarno pozitivnih primjera.

   $$R = \frac{TP}{TP + FN}$$

5. F1-mjera (eng. *F1-score*)

   F1-mjera jest harmonijska sredina preciznosti i odziva i najčešće korištena mjera za usporedbu klasifikatora.

$$F1 = \frac{2PR}{P + R}$$

6. AUC mjera

   ROC krivulja (eng. *Receiver Operating Characteristic curve*) jest graf koji prikazuje odnos stope istiniski pozitivnih primjera (eng. *True Positive Rate - TPR*) odnosno odziva i stope lažno pozitivnih primjera (eng. *False Positive Rate - FPR*), koja se računa kao: $\frac{FP}{FP+TN}$. Njihov odnos prikazuje se na svim mogućim pragovima klasifikacije. AUC mjera (eng. *Area under the ROC curve*) predstavlja površinu ispod cijele ROC krivulje.

7. Randov indeks

   Randov indeks računa u kojoj mjeri dobiveno grupiranje odgovara referentnom grupiranju odnosno točnost na razini parova primjera. Za svaki mogući par iz skupa primjera gleda se jesu li ta dva primjera završila u istoj grupi ili nisu.

$$R = \frac{a + b}{\binom{N}{2}}$$

   gdje je:

   - a - broj jednako označenih parova u istim grupama
   - b - broj različito označenih parova u različitim grupama

Drugi način vrednovanja algoritama grupiranja jest korištenje metrika koje ne zahtjevaju oznake podataka kako bi izračunale efikasnost algoritma. Najčešće korištene metrike su:

1. Koeficijent siluete (eng. *Silhouette Coefficient*)

   Koeficijent siluete definira se na temelju udaljenosti unutar grupe i između različitih grupa i računa se kao:

$$S = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{b_i - a_i}{max(a_i, b_i)}$$

   gdje je:

- a - srednja udaljenost između uzorka i i svih ostalih podataka u toj grupi
- b - srednja udaljenost između uzorka i i svih ostalih podataka u drugoj najbližoj grupi

Vrijednost koeficijenta siluete nalazi se u skupu $[-1, 1]$ i što je ona veća, grupe su jasnije odijeljene i grupiranje se smatra točnijim.

2. Dunnov indeks

   Dunnov indeks zahtjeva da su udaljenosti primjera unutar grupe male, a udaljenosti između različitih grupa što veće. Računa se kao:

$$D = \frac{\min_{1 \leq i < j \leq m} \delta(C_i, C_j)}{\max_{1 \leq k \leq m} \Delta_k}$$

   gdje je:

   - $\delta(C_i, C_j)$ - udaljenost između grupa C_i i C_j (udaljenost između dva najbliža primjera, dva najudaljenija primjera ili prosječna udaljenost)
   - Δ_k - udaljenost primjera unutar iste grupe (najveća udaljenost između dva primjera, prosječna udaljenost ili udaljenost primjera od centroida grupe)

   Što je vrijednost Dunnovog indeksa veća, bolje je grupiranje.

3. Davies Bouldin indeks

   Davies Bouldin indeks računa se kao prosjek sličnosti svake grupe s grupom koja joj je najsličnija:

$$DB = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^{K} \max_{j \neq i} \frac{\Delta_i + \Delta_j}{\delta(C_i, C_j)}$$

   Razlikuje se od ostalih metrika jer manja vrijednost ovog indeksa označava bolje grupiranje.

4. DBCV (eng. *Density-Based Clustering Validation*)

   Metrika DBCV računa gustoću unutar grupe i gustoću između grupa. Visoka gustoća unutar grupe, a niska gustoća između njih ukazuje na dobro grupiranje.

Za evaluaciju algoritama u ovom radu koristit će se sve navedene metode osim točnosti i metode DBCV. Točnost je nepouzdana u slučaju neuravnoteženih razreda kao što je to slučaj u detekciji anomalija, a DBCV neskalabilna metoda čije računanje postaje praktički nemoguće već za nekoliko tisuća točaka.

3.2. Algoritam K-sredina

Algoritam K-sredina (eng. *K-Means*) najpoznatiji je algoritam grupiranja koji se temelji na centroidnom modelu. U ovom algoritmu, svaka grupa ima centroid koji se računa kao srednja vrijednost članova grupe i predstavlja tu grupu. Primjeri se iz neoznačenog skupa podataka grupiraju u K grupa na način da svaki podatak pripada onoj grupi čijem je centroidu najbliži.

Algoritam očekuje broj grupa K kao hiperparameter i njegova se vrijednost može odrediti na više načina, a najpoznatiji su:

- Metoda lakta (eng. *Elbow method*)

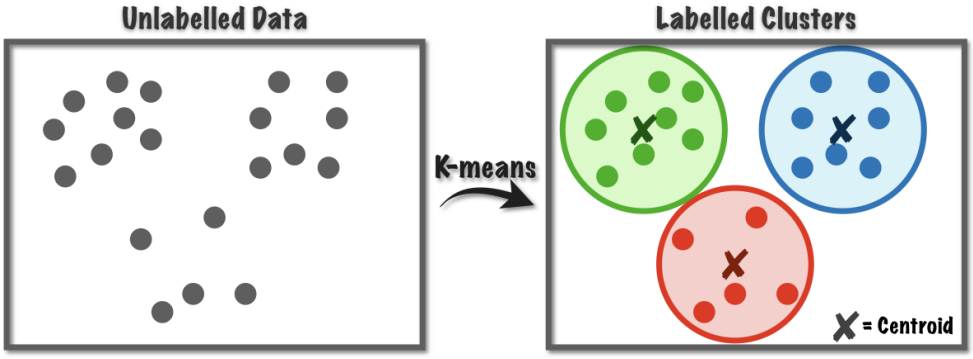
  U metodi lakta grafički se prikazuje ovisnost funkcije gubitka o broju grupa K. S porastom broja grupa vrijednost funckije će se smanjivati te je cilj pronaći "lakat" funkcije, odnosno broj grupa nakon kojeg se vrijednosti funkcija počinju smanjivati vrlo sporo.

- Analiza siluete (eng. *Silhouette analysis*)

  Ova je metoda grafička metoda koja se temelji na ranije objašnjenom koeficijentu siluete. Njegova vrijednost prikaže se za svaki primjer iz skupa podataka ovisno o grupi u koju je primjer raspoređen te se izabere onaj broj grupa za koji svi primjeri imaju približno jednak koeficijent siluete.

Osim odabira broja grupa, potrebno je definirati i način odabira početnih centroida. Neki od mogućih prisupa su:

- Nasumičan odabir K primjera.
- Nasumična dodjela grupe svakom primjeru i izračun centroida na temelju primjera u grupi.
- Izračun srednje vrijednosti sviju primjera i dodavanje K slučajnih vektora toj vrijednosti.
- Nasumičan odabir prvog centroida, nakon čega se svaki sljedeći bira na način da bude što dalje od postojećih. Verzija algoritma koja implementira ovakav pristup zove se *K-sredine++*.



Slika 3.1: Primjer izvođenja algoritma K-sredina uz $K = 3$. Preuzeto s https://medium.com/@luigi.fiori.lf0303/k-means-clustering-using-python-db57415d26e6

Postupak grupiranja algoritma K-sredina je iterativan. Nakon inicijalizacije početnih centroida, svi se primjeri stavljaju u onu grupu čiji im je centroid najbliži. U sljedećem se koraku, na temelju razvrstanih primjera, ponovno računaju novi centroidi za svaku grupu. Dalje se ponavljaju ova dva koraka sve do konvergencije odnosno do trenutka kad više nema promjene u podjeli primjera grupama i u vrijednostima centroida. Ovaj postupak prikazan je pseudokodom 3.1 i na slici 3.1.

Pseudokod 3.1: Pseudokod algoritma K-sredina

```
definiraj broj grupa K
inicijaliziraj centroide μ_k, k = 1, ..., K
ponavljaj
        za svaki x_i ∈ D
                pronađi najbliži centroid
                dodjeli x_i toj grupi
        za svaki μ_k, k = 1, ..., K
                ažuriraj vrijednost centroida
dok svi μ_k ne konvergiraju
```

Bitna karakteristika algoritma K-sredina je da pripada algoritmima tvrdog grupiranja, što znači da će svaku točku dodijeliti jednoj i točno jednoj grupi. Algoritam se dobro nosi s velikim skupovima podataka jer ima linearnu vremensku složenosti $O(nkdi)$, gdje je:

- n - veličina skupa podataka
- k - broj grupa

– d - dimenzionalnost podataka

– i - broj iteracija algoritma

Međutim, algoritam K-sredina uvijek traži grupe sfernog oblika te ne može identificirati nekonveksne grupe. Također, jako je osjetljiv na prisutnost anomalija i šuma u podacima.

3.3. DBSCAN algoritam

DBSCAN algoritam (eng. *Density-based spatial clustering of applications with noise*) priprada u skupinu algoritama grupiranja temeljenih na gustoći. On grupira zajedno točke koje su blizu jedna drugoj odnosno točke s mnogo susjednih točaka. Primjere koji nisu svrstani niti u jednu grupu i nalaze se u područjima niske gustoće algoritam označava kao anomalije. Kao i algoritam K-sredina, i DBSCAN je algoritam tvrdog grupiranja.

Glavna ideja algoritma DBSCAN jest da grupa mora sadržavati određeni minimalni broj točaka unutar definiranog polumjera. Zato algoritam zahtjeva dva parametra:

1. *minPts*

   Parametar *minPts* predstavlja najmanji broj točaka u grupi da bi se ona smatrala gusto popunjenom. Za njegovu procjenu može se primjeniti generalno pravilo $minPts \geq D + 1$, gdje je D broj dimenzija skupa podataka. Također, što je veći skup podataka potrebno je odabrati veći *minPts* i tada se može koristiti pravilo $minPts = 2 * D$. Veće vrijednosti obično daju bolje rezultate kada je u podacima prisutan šum.

2. ϵ

   Parametar ϵ jest polumjer unutar kojeg se traže susjedne točke. Pri odabiru vrijednosti ϵ nema generalnog pravila. Vrijednost ne smije biti ni prevelika niti premala i mora biti u skladu s udaljenostima među podacima.

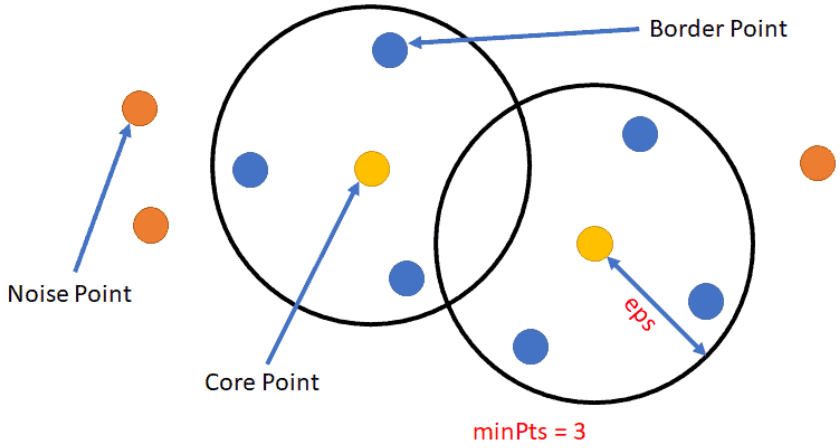
DBCAN algoritam pridjeljuje svakoj točki jednu od tri moguće oznake:

1. Središnja točka (eng. *Core point*) - točka oko koje se nalazi minimalno *minPts* drugih točaka unutar udaljenosti ϵ

2. Granična točka (eng. *Border point*) - točka koja ima barem jednu središnju točku na udaljenosti manjoj od ϵ, ali nalazi se na rubu grupe i broj točaka oko nje manji je od *minPts*

3. Točka šuma (eng. *Noise point*) - točka koja nije niti središnja niti granična točka; nije nužno anomalija, već samo točka od koje DBSCAN nije znao formirati grupu

Na slici 3.2 prikazane su grafički različite vrste točaka.



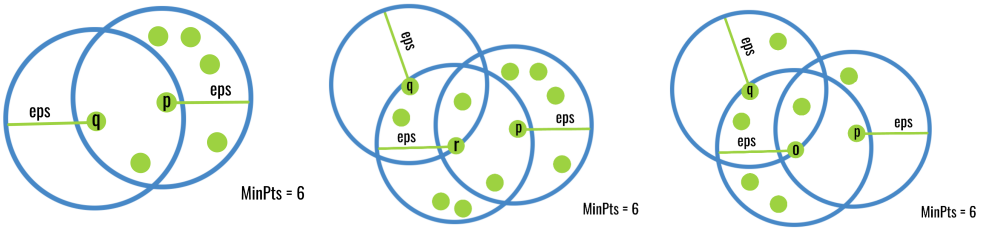
Slika 3.2: Primjer središnje točke, granične točke i točke šuma uz $minPts = 3$. Preuzeto s https://machinelearninggeek.com/dbscan-clustering/

Središnja točka p formira grupu zajedno sa svim središnjim i graničnim točkama koje su iz nje dohvatljive. Točka q može biti:

- Izravno dohvatljiva - ako se nalazi unutar udaljenosti ϵ od točke p
- Dohvatljiva - ako postoji put $p_1, ..., p_n$, pri čemu je $p_1 = p$ i $p_n = q$ i svaka točka p_{i+1} izravno je dohvatljiva iz točke p_i

Dohvatljivost nije simetrična relacija, već samo središnje točke mogu dohvatiti granične. Zbog toga je uveden pojam povezanosti, kojim se formalno definira opseg grupe. Dvije točke p i q povezane su ako postoji točka o takva da su i p i q dohvatljive iz o. Ova relacija je simetrična i grupa tada zadovoljava sljedeća svojstva:

- Sve točke unutar grupe međusobno su povezane.
- Ako je točka dohvatljiva iz bilo koje točke koja pripada grupe, tada ona također pripada grupi.



(a) Točka q je izravno dohvatljiva iz točke p

(b) Točka q je dohvatljiva iz točke p preko točke r

(c) Točka p i točka q su povezane preko točke o

Slika 3.3: Prikaz izravne dohvatljivosti, dohvatljivosti i povezanosti na primjeru gdje je $minPts = 6$. Slike su preuzete s https://www.geeksforgeeks.org/ml-dbscan-reachability-and-connectivity/

Svojstva izravne dohvatljivosti, dohvatljivosti i povezanosti prikazana su grafički na slici 3.3.

Na početku algoritma odabire se nasumična točka od koje se formira grupa ako ona zadovoljava navedeni kriterij. Grupe se zatim rekurzivno proširuju obilaženjem ostalih članova grupe. Kad se grupa više ne može proširiti, odabire se nasumično nova točka iz skupa podataka i algoritam se ponavlja dok sve točke nisu obiđene. Pseudokod 3.2 prikazuje pseudokod algoritma DBSCAN.

Pseudokod 3.2: Pseudokod algoritma DBSCAN

```
definiraj minimalan broj članova grupe minPts i udaljenost ε
inicijaliziraj početni broj grupa: C = 0
za svaku točku p ∈ D
        ako je točka p već označena
                nastavi
        pronađi skup točaka S izravno dohvatljivih iz p
        ako je |S| < minPts onda
                označi p kao točku šuma
                nastavi
        C = C + 1
        dodaj p u grupu C
        za svaku točku q ∈ S
                ako točka q već pripada grupi
                        nastavi
                dodaj q u grupu C
                pronađi skup točaka N izravno dohvatljivih iz q
                ako je |N| ≥ minPts onda
```

```
18                    dodaj točke iz N u skup S
```

Ako je skup podataka pohranjen tako da se upiti o susjedstvu mogu izvoditi u logaritamskom vremenu, složenost DBSCAN algoritma je $O(nlogn)$, gdje je n broj podataka. Ako nema strukture indeksiranja, složenost raste na $O(n^2)$.

Prednosti algoritma DBSCAN su što ne zahtjeva definiranje broja grupa unaprijed, može pronaći grupe proizvoljnog oblika i otporan je na prisutnost šuma i anomalija. Nedostatak mu je što ne može dobro grupirati skup podataka u kojem je prisutna velika razlika u gustoći među grupama jer se tada ne može odabrati kombinacija parametara *minPts* i ϵ koja bi bila prikladna za sve grupe.

3.4. Model Gaussove mješavine

Gaussova je mješavina model distribucije koji pretpostavlja da su sve točke iz skupa podataka generirane iz mješavine konačnog broja Gaussovih distribucija s nepoznatim parametrima. Model zatim grupira podatke na način da svaka grupa sadrži podatke iz jedne distribucije.

Gaussova distribucija još se naziva normalnom distribuciju i ima karakterističan zvonolik oblik. Funkcija gustoće vjerojatnosti Gaussove distribucije u jednoj dimenziji glasi:

$$\mathcal{N}(x;\mu,\sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \tag{3.1}$$

pri čemu je:

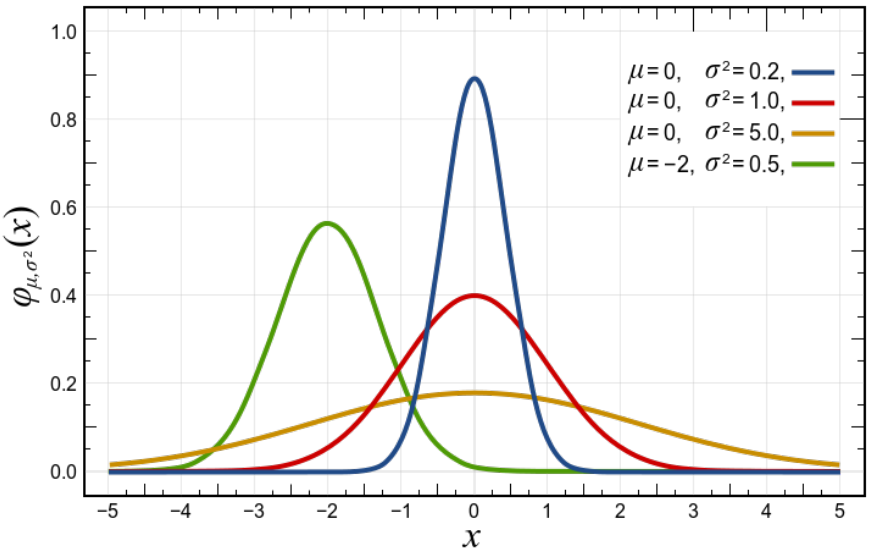
- μ - srednja vrijednost skupa podataka; određuje "visinu" krivulju
- σ - standardna devijacija podataka; odeđuje "širinu" krivulje

Funkcija gustoće vjerojatnosti daje vjerojatnost dobivanja podatka x u slučaju kada imamo normalnu distribuciju s parametrima μ i σ. Slika 3.4 prikazuje funkciju gustoće za različite vrijednosti parametara μ i σ.

U slučaju više dimenzionalnog skupa podataka, formula multivarijatne (višedimenzijske) Gaussove razdiobe glasi:

$$\mathcal{N}(X;\mu,\Sigma) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^k|\Sigma|}} e^{-\frac{1}{2}(X-\mu)^T\Sigma^{-1}(X-\mu)} \tag{3.2}$$

U tom je slučaju k broj dimenzija skupa podatka, μ k-dimenzionalni vektor srednjih vrijednosti, a Σ kovarijacijska matrica veličine $k \times k$. Kovarijacijska matrica prikazuje, osim varijance svake dimenzije podatka, i odnos između različitih dimenzija.



Slika 3.4: Funkcija gustoće vjerojatnosti Gaussove distrubucije za različite vrijednosti parametara μ i σ. Preuzeto s https://en.wikipedia.org/wiki/Normal_distribution

Gaussova je mješavina funkcija koja se sastoji od onoliko Gaussovih funkcija koliko ima grupa u skupu podataka. Broj grupa K jest hiperparametar algoritma. Svaka Gaussova funkcija u mješavini ima sljedeće parametare:

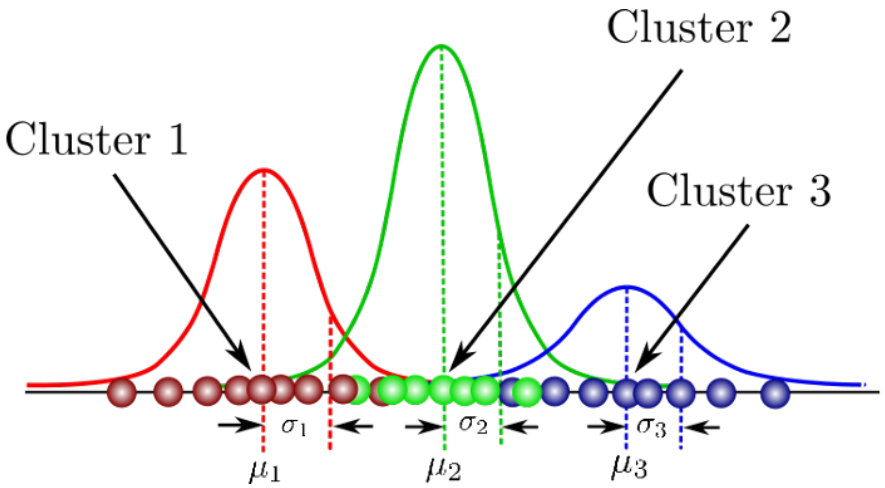
- Srednju vrijednost μ koja definira središte.
- Kovarijancu Σ koja odeđuje "širinu" funckije.
- Vjerojatnost miješanja π koja definira vjerojatnosti pripadnosti primjera toj distribuciji.

Slika 3.5 prikazuje kako model Gaussove mješavine grupira podatke u slučaju kada imamo tri grupe.

Model Gaussove mješavine radi na principu generativnog modeliranja i pretpostavlja se da se ulazni podaci ravnaju po Gaussovoj distribuciji. Iako to nije uvijek slučaj, centralni granični teorem iz statistike kaže da ako se prikuplja sve više i više uzoraka iz skupa podataka, oni imaju tendenciju nalikovati Gaussovoj funkciji, čak i kad izvorna distribucija skupa podataka nije Gaussova.

Cilj ovog modela jest pronaći parametre Gaussove funkcije koji maksimiziraju vjerojatnost dobivanja tih podataka. Svaku točku promatra se kao mješavinu više različitih Gaussovih funkcija te ona ima vjerojatnost:

$$p(x_i) = \sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}(x_i; \mu_k, \Sigma_k) \tag{3.3}$$



Slika 3.5: Primjer Gaussove mješavine za $K = 3$. Preuzeto s [1]

$$\sum_{k=1}^{K} \pi_k = 1 \tag{3.4}$$

Jednadžba 3.3 govori da je određena točka x linearna kombinacija K Gaussovih funkcija. $p(x_i)$ još se naziva i izglednost primjera x_i (eng. *likelihood*). Varijabla π predstavlja vjerojatnost miješanja te Gaussove funkcije odnosno njenu jačinu. Ograničenje na vjerojatnosti miješanja jest da njihova suma mora biti 1, kao što se vidi u jednadžbi 3.4. Cilj algoritma jest maksimizirati logaritamsku izglednost svih podataka u skupu veličine N koja glasi:

$$\ln p(X; \mu, \sigma, \pi) = \sum_{i=1}^{N} p(x_i) \tag{3.5}$$

Potrebno je za svaku Gaussovu funkciju odrediti vrijednosti vjerojatnosti miješanja π_k, srednje vrijednosti μ_k i kovarijance Σ_k, takve da maksimiziraju izraz 3.5. Vrijednosti ovih parametara dobiju se primjenom algoritma Očekivanje-Maksimizacija (eng. *Expectation-Maximization Algorithm - EM*). Taj algoritam ima dva koraka:

1. Očekivanje

   U prvoj iteraciji algoritma inicijaliziraju se vrijednosti parametara slučajnim odabirom ili pomoću rezultata grupiranja nekog drugog algoritma. Zatim se u ovom koraku računa vjerojatnost da je svaki podatak generiran svakom od K Gaussovih funkcija. Vjerojatnost da je primjer x_i generiran pomoću Gaussove funkcije j računa se kao:

$$W_{ij} = \frac{\pi_j \mathcal{N}(x_i; \mu_j, \Sigma_j)}{\sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}(x_i; \mu_k, \Sigma_k)} \tag{3.6}$$

Dijeljenje s $p(x_i)$ provodi se radi normalizacije odnosno kako bi suma svih vjerojatnosti bila 1. U algoritmu K-sredina ovaj korak algoritma odgovara podjeli primjera u grupe.

2. Maksimizacija

   Korak maksimizacije ažurira vrijednosti vjerojatnosti miješanja, srednje vrijednosti i kovarijance na sljedeći način:

$$\pi_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} W_{ij} \tag{3.7}$$

$$\mu_j = \frac{\sum_{i=1}^{N} W_{ij} x_i}{\sum_{i=1}^{N} W_{ij}} \tag{3.8}$$

$$\Sigma_j = \frac{\sum_{i=1}^{N} W_{ij} (x_i - \mu_j)(x_i - \mu_j)^T}{\sum_{i=1}^{N} W_{ij}} \tag{3.9}$$

   Vjerojatnost π_j računa se kao vjerojatnost da je svaka točka generirana Gaussovom funkcijom j podijeljeno s ukupnim brojem točaka. Parametri μ_j i Σ_j računaju se kao srednja vrijednost i kovarijacija svih točaka koje su pomnožene s vjerojatnošću W_{ij}. Ovaj korak analogan je pomicanju centroida grupa u algoritmu K-sredina.

Ova dva koraka ponavljaju se do konvergencije logaritmske izglednosti podataka, a pseudokod je dan kao pseudokod 3.3.

Pseudokod 3.3: Pseudokod modela Gaussove mješavine

```
definiraj broj grupa K
inicijaliziraj parametre π, μ i Σ
ponavljaj
   za svaku točku x_i ∈ N
      za svaku distribuciju k ∈ K
          izračunaj vjerojatnost W_ik da je x_i generiran iz k
   za svaku distribuciju k ∈ K
      ažuriraj vjerojatnost miješanja π_k
      ažuriraj srednju vrijednost μ_k
      ažuriraj kovarijancu Σ_k
dok ln p(X; μ, σ, π) ne konvergira
```

Model Gaussove mješavine model je mekog grupiranja i svakoj točki dodijeljuje vektor vjerojatnosti pripadanja svakoj grupi. Iako sporije konvergira od algoritma K-sredina, za razliku od njega može se koristiti i na malim skupovima

podataka te kada grupe nisu jasno razdvojene. Također, može pronaći grupe različitih oblika i otporniji je na prisutnost anomalija ili loše definiranih podataka.

4. Korišteni skupovi podataka

4.1. Otkrivanje prijevare s kreditnim karticama

Važno je da banke mogu prepoznati neobične transakcije kreditnim karticama kako bi se otkrila prijevara i spasili novci korisnika. Prvi skup podataka koristi se za otkrivanje prijevara kreditnim karicama (eng. *Credit Card Fraud Detection*) i preuzet je s [4]. Sadrži transakcije koje su europski vlasnici kartica izvršili kreditnim karticama u rujnu 2013. godine u 2 dana. Skup podataka izrazito je neuravnotežen te prijevare čine samo 0,172% svih transakcija.

Skup podataka sadrži numeričke značajke koje su rezultat analize glavnih komponenata (eng. *Principal component analysis*). Zbog povjerljivosti nisu dostupni originalni podaci i imena značajki već samo rezultat PCA transformacije. Dobivene glavne komponente su značajke V1, V2, ..., V28. Značajke koje nisu transformirane i koje su zadržale svoje vrijednosti i ime su značajke *Vrijeme* i *Iznos*. Značajka *Vrijeme* sadrži sekunde koje su protekle između svake transakcije i prve transakcije u skupu podataka, a značajka *Iznos* je iznos transakcije. Na kraju, značajka *Klasa* je varijabla oznake koja poprima vrijednost 1 u slučaju prijevare, a 0 inače.

Skup podataka koji se koristi već je obrađen, maknuta je značajka *Vrijeme* jer ne pomaže u problemu detekcije prijevara i provedena je normalizacija podataka.

4.2. Detekcija upada u mrežu

Skup podataka *KDD Cup 1999* može se koristiti za detekciju mrežnog upada. Taj skup podataka korišten je za Treće međunarodno natjecanje u otkrivanju znanja i alatima za rudarenje podataka. Zadatak natjecanja bio je izgraditi prediktivni model koji će detektirati upade u mrežu i razlikovati ih od normalnih veza. Svaka veza je slijed TCP paketa koji počinje i završava u nekom definiranom vremenu, u kojem se podaci šalju od izvorne IP adrese na ciljnu IP adresu prema nekom

definiranom protokolu.

Ovaj skup podataka sadrži standardni skup podataka za provjeru modela i preuzet je s [4]. Nastao je tako što je *Lincoln Labs* postavio okruženje za prikupljanje neobrađenih TCP podataka za lokalnu mrežu (LAN) tokom devet tjedana simulirajući tipični LAN američkih zračnih snaga. Upravljali su LAN-om kao da se radi o pravom okruženju zračnih snaga uz dodatak višestrukih napada. Prikupljeno je oko 7 milijuna zapisa veza, pri čemu svaka veza ima 41 značajku i označena je kao normalna veza ili kao napad, s točno specificiranom vrstom napada. U skupu za treniranje korišteno je ukupno 24 različita tipa napada.

Za potrebe ovog rada korištena su dva podskupa skupa podataka *KDD Cup 1999*, *U2R* i *Probe*.

Napad *U2R* (eng. *User to Root*) jest napad u kojem napadač na početku pristupa normalnom korisničkom računu, a kasnije dobiva pristup korijenskom korisniku (eng. *root*) iskorištavanjem ranjivosti sustava ili greške korisnika. *Probe* napad skenira mrežu sa svrhom praćenja mreže ili prikupljanje podataka o mreži i mrežnoj aktivnosti.

Novi skupovi podataka izvedeni su iz skupa podataka *KDD Cup 1999* koristeći *U2R* ili *Probe* napad kao anomaliju naspram normalnih veza. Ti skupovi su znatno manji i broj značajki smanjen je na 6 osnovnih:

1. Vrsta transportnog protokola
2. Vrsta aplikacijskog protokola
3. Zastavica odnosno status povezivanja
4. Prijava uspješna
5. Prijava ostvarena kao domaćin
6. Prijava ostvarena kao gost

Prve tri značajke su kategoričkog tipa, a druga tri tipa boolean (točno/netočno).

4.3. Detekcija raka

Jedna od važnih primjena otkrivanja anomalija jest u medicini gdje one mogu signalizirati pojavu bolesti. Za predikciju je li tumor dojke dobroćudan ili zloćudan koristi se skup podataka preuzet s [2].

Svaki primjer skupa podataka ima 32 značajke, među kojima su i značajke *Identifikacijski broj* i *Dijagnoza*, koja klasificira tumor kao dobroćudni ili zloćudni. Preostale značajke su zračunate iz digitalizirane slike aspiracijske biopsije finom iglom (FNA) tkiva dojke i opisuju karakteristike staničnih jezgri prisutnih na slici. Za svaku jezgru izračunato je deset vrijednosti kao što su radijus, tekstura, područje i glatkoća. Značajke su zatim dobivene iz tih podataka kao srednja vrijednost, standardna pogreška i najgora (odnosno najveća) vrijednost mjerenja.

Pregled svih korištenih skupova podataka dan u tablici 4.1.

Tablica 4.1: Podaci o korištenim skupovima podataka.

Skup podataka	**Broj primjera**	**Dimenzionalnost**	**Udio anomalija**
Kreditne kartice	284 807	29	0.17%
U2R	60 821	6	0.38%
Probe	64 759	6	6.88%
Rak dojke	569	32	37.26%

5. Implementacija

5.1. Obrada podataka

Na početku implementacije provedena je obrada i priprema podataka kako bi se na njima mogli koristiti algoritmi grupiranja.

Prvi skup podataka, prijevare s kreditnim karticama, nije bilo potrebno mijenjati niti obraditi budući da je na njemu već prethodno provedena normalizacija i maknuta je značajka *Vrijeme*.

Skupovi podataka *U2R* i *Probe* sadrže kategoričke značajke koje su se morale kodirati jer svi navedeni algoritmi rade isključivo s numeričkim podacima. Provedeno je *One-hot* kodiranje u kojem se svaku kategoričku značajku prikazuje vektorom binarnih vrijednosti. Svaka pozicija u vektoru označava jednu vrijednost te značajke i svaka značajka ima jedinicu samo na mjestu koje odgovara njezinoj vrijednosti te nulu na svim ostalim mjestima. Time se broj dimenzija podataka poveća za broj svih različitih vrijednosti značajki. Budući da značajka *Vrsta aplikacijskog protokola* može poprimiti 65 različitih vrijednosti, odabrano je 5 najčešćih vrijednosti dok su ostale označene kao *ostalo*. Najčešće vrijednosti u oba skupa podataka su: *http*, *private*, *smtp*, *domain_u* i *ftp_data*. Značajka *Zastavica* poprima ukupno 9 različitih vrijednosti, od čega 94.86% u jednom skupu odnosno 99.51% podataka u drugom skupu ima vrijednost *SF*. Zbog toga je samo da vrijednost zadržana, dok su ostale označene s *ostalo*. Značajka *Vrsta transportnog protokola* ima samo tri moguće vrijednosti (*tpc*, *udp* i *icmp*) te ovdje reduciranje broja vrijednosti nije bilo potrebno.

U obradi skupa podataka tumora dojke maknute su značajke *Identifikacijski broj* i *Dijagnoza* budući da nam prva ne daje nikakvu informaciju, dok nam druga daje rješenje problema grupiranja. Zbog toga se značajka *Dijagnoza* koristi u vrednovanju kao oznaka grupe kojoj primjer pripada.

5.2. Algoritmi i metrike

5.3. Smanjenje broja uzoraka

6. Rezultati

7. Zaključak

Zaključak.

Literatura

[1] Oscar Contreras Carrasco. Gaussian mixture models explained, 2019. URL https://towardsdatascience.com/gaussian-mixture-models-explained-6986aaf5a95.

[2] Dheeru Dua i Casey Graff. UCI machine learning repository, 2017. URL http://archive.ics.uci.edu/ml.

[3] G Sandhya Madhuri i Dr. M. Usha Rani. Anomaly detection techniques causes and issues. *International Journal of Engineering & Technology*, 2018. URL https://www.sciencepubco.com/index.php/ijet/article/view/22791.

[4] Guansong Pang, Chunhua Shen, Longbing Cao, i Anton Van Den Hengel. Deep learning for anomaly detection: A review. *ACM Computing Surveys (CSUR)*, 54(2):1–38, 2021.

[5] Animesh Patcha i Jung-Min Park. An overview of anomaly detection techniques: Existing solutions and latest technological trends. *ScienceDirect*, 2007. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S138912860700062X.

[6] Ramiz Aliguliyev Rasim Alguliyev i Lyudmila Sukhostat. Anomaly detection in big data based on clustering. *Statistics Optimization & Information Computing*, 2017. URL https://www.researchgate.net/publication/321448608_Anomaly_Detection_in_Big_Data_based_on_Clustering.

[7] Ajay Sreenivasulu. Evaluation of cluster based anomaly detection, 2019. URL https://www.diva-portal.org/smash/get/diva2:1382324/FULLTEXT01.pdf.

[8] Jiong Jin Srikanth Thudumu, Philip Branch i Jugdutt (Jack) Singh. A comprehensive survey of anomaly detection techniques for high dimensional big data. *Journal of Big Data*, 2020. URL https://doi.org/10.1186/s40537-020-00320-x.

Usporedba algoritama grupiranja u postupcima otkrivanja anomalija

Sažetak

Sažetak na hrvatskom jeziku.

Ključne riječi: Ključne riječi, odvojene zarezima.

Title

Abstract

Abstract.

Keywords: Keywords.