SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET ELEKTROTEHNIKE I RAČUNARSTVA

DIPLOMSKI RAD br. 2981

Usporedba algoritama grupiranja u postupcima otkrivanja anomalija

Jelena Nemčić

Zagreb, svibanj 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 K-Means, 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 drugačije 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, detekciju događaja u senzorskim mrežama, otkrivanje poremećaja u ekosustavu, otkrivanje nedostataka na slikama pomoću računalnog vida te za 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.

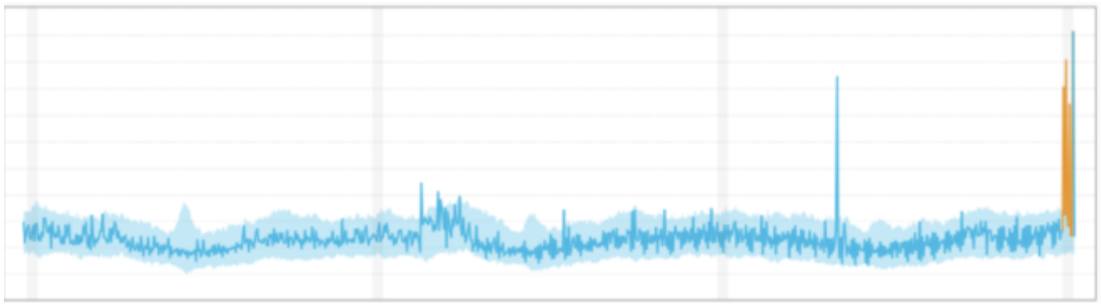
U ovom radu razmatrat će se samo anomalije koje se javljaju kao posljedica toga što podaci prirodno pripadaju različitim razredima.

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

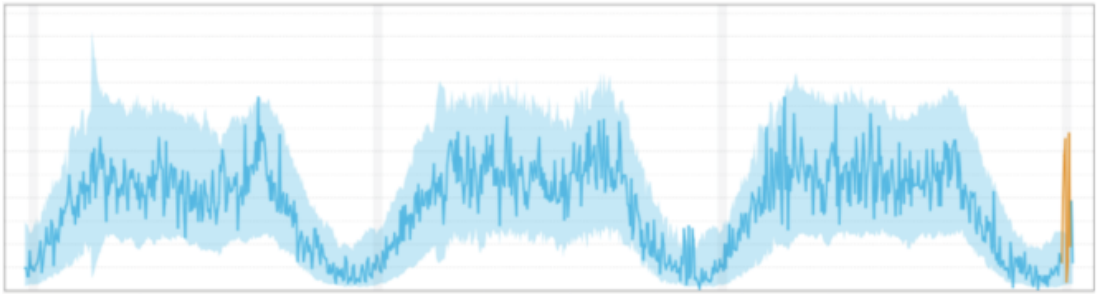
   Opažanje se smatra globalnim odstupanjem ili globalnom anomalijom ako se njegova vrijednost ili vrijednost nekih njegovih obilježja značajno razlikuje od vrijednosti cjelokupnog skupa podataka. Gledano u n-dimenzionalnom prostoru, taj se podatak nalazi daleko od svih ostalih podataka iz skupa. Primjer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

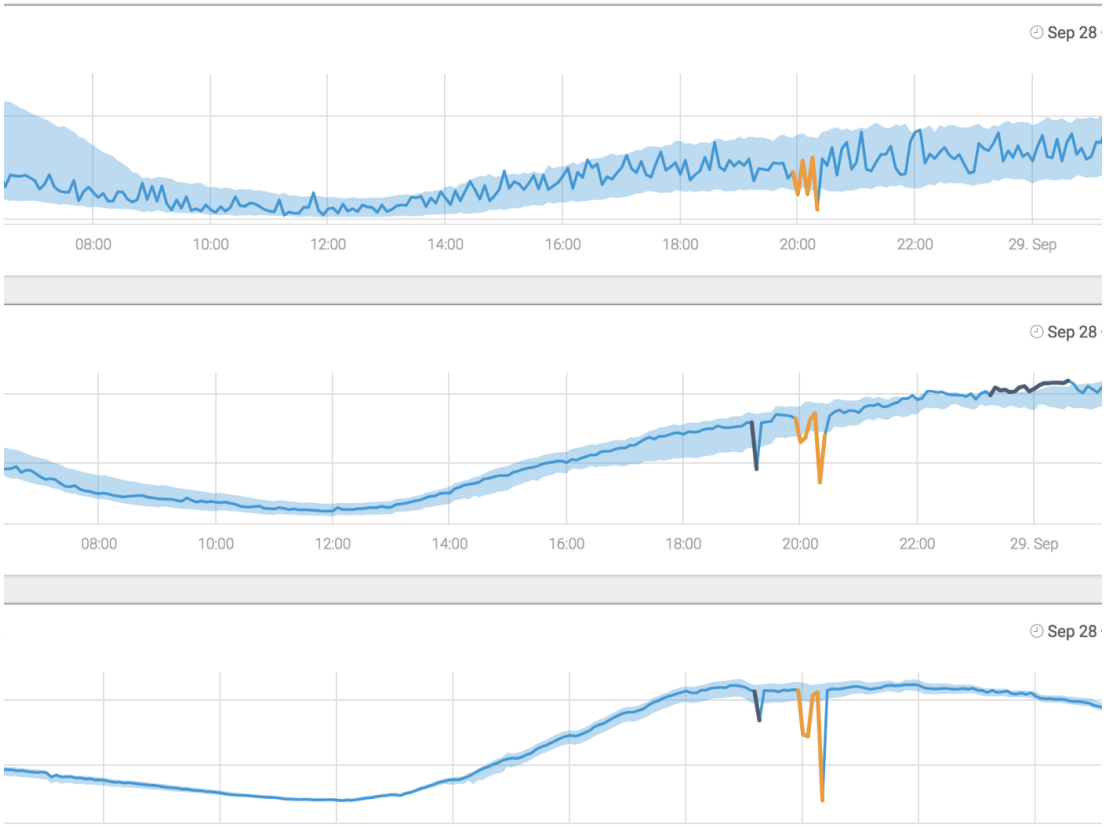
3. Kolektivne anomalije

   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 niti 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 objekta njegovim susjedima 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 algoritmi K-Means, DBSCAN i Gaussova mješavina.

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 iste 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.

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 često su 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 i računa se kao:

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

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.

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:

   $$S = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N}\frac{b_i - a_i}{max(a_i, b_i)}$$

   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. Randov indeks

Za evaluaciju algoritama u ovom radu koristit će se sve navedene metode osim točnosti koja je nepouzdana u slučaju neuravnoteženih razreda, kao što je to slučaj u detekciji anomalija.

3.2. K-Means

K-Means je najpoznatiji 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.

Kriterijska funkcija algoritma grupiranja jest funkcija koju taj algoritam nastoji minimizirati. Za algoritam K-Means to je funkcija koja zbraja koliko primjeri odstupaju od centroida grupe u kojoj se nalaze i glasi:

$$J = \sum_{k=1}^{K} \sum_{x \in C_k} \|x - \mu_k\|^2$$

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-means++*.

Postupak grupiranja K-Means algoritma 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 i pseudokodom 3.1.

Pseudokod 3.1: Pseudokod algoritma K-Means

```
1 definiraj broj grupa K
2 inicijaliziraj centroide μ_k, k = 1,...,K
3 ponavljaj
4       za svaki x_i ∈ D
5               pronađi najbliži centroid
6               dodjeli x_i toj grupi
7       za svaki μ_k, k = 1,...,K
```

```
8                   ažuriraj vrijednost centroida
9   dok svi μ_k ne konvergiraju
10  }
11 }
```

K-Means je algoritam koji se dobro nosi s velikim skupovima podataka jer ima linearne vremensku složenosti $O(nkdi)$, gdje je:

- n - veličina skupa podataka
- k - broj grupa
- d - dimenzionalnost podataka
- i - broj iteracija algoritma

Međutim, K-Means algoritam 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

3.4. Gaussova mješavina

4. Korišteni skupovi podataka

4.1. prvi

4.2. drugi

4.3. treći

5. Implementacija

6. Rezultati

7. Zaključak

Zaključak.

Literatura

[1] 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.

[2] 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.

[3] 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.

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

[5] 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.