UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA COMPUTACIÓN

REGLAS DE ASOCIACIÓN PARA LÍNEAS ESPECTRALES

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL EN COMPUTACIÓN

NICOLÁS MARTÍN MIRANDA CASTILLO

PROFESOR GUÍA:
GUILLERMO CABRERA VIVES

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
GONZALO NAVARRO BADINO
PABLO GUERRERO P'EREZ

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el "D'ECIMO NOVENO CONCURSO DE PROYECTOS DE INVESTIGACI'ON Y DESARROLLO FONDEF 2011, PROYECTO FONDEF D11I1060"

SANTIAGO DE CHILE
DICIEMBRE 2014

Resumen

En el presente trabajo se llevó a cabo la implementación de algoritmos de reglas de asociación con la finalidad de inferir relaciones lógicas existentes en grandes cantidades de datos. En particular, se busca aplicar a conjuntos de líneas espectrales extraídas a partir de datos de observaciones astronómicas, para así obtener información de las relaciones existentes entre ellas bajo distintas medidas de interés y relevancia estadística.

Para ello se utilizó algoritmos de Aprendizaje de Reglas de asociación, o *Association Rule Learning (ARL)*; en particular los algoritmos *Apriori* y *FP-Growth*. La aplicación final permite al usuario observar las reglas obtenidas bajo requerimientos mínimos de *soporte* y *confianza* de ellas, ordenarlas según estas dos medidas junto con su *lift*, y mostrar las que posean un cierto elemento en particular en su antecedente, consecuente o en ambos.

La aplicación se probó sobre datos de observaciones ópticas obtenidas del *Sloan Digital Sky Survey (SDSS)*, previo un pre-procesamiento adecuado de estos, y se espera a futuro poder realizar el proceso de ARL a partir datos en otras frecuencias del espectro electromagnético; como por ejemplo, los datos radioastronómicos del *Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA)*.

Una dedicatoria corta. Por ejemplo, A los creadores de U-Campus

Agradecimientos

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

Nam dui ligula, fringilla a, euismod sodales, sollicitudin vel, wisi. Morbi auctor lorem non justo. Nam lacus libero, pretium at, lobortis vitae, ultricies et, tellus. Donec aliquet, tortor sed accumsan bibendum, erat ligula aliquet magna, vitae ornare odio metus a mi. Morbi ac orci et nisl hendrerit mollis. Suspendisse ut massa. Cras nec ante. Pellentesque a nulla. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Aliquam tincidunt urna. Nulla ullamcorper vestibulum turpis. Pellentesque cursus luctus mauris.

Índice general

Índice de figuras

Introducción

[...] we may in time ascertain the mean temperature of heavenly bodies, but I regard this order of facts as for ever excluded from our recognition. We can never learn their internal constitution [...]

Auguste Comte, *Astronomy, Ch. I: General View*, 1835

Contexto y motivación

En los últimos tiempos, y en gran parte debido al explosivo desarrollo tecnológico, han surgido numerosos campos en los cuales se ha requerido el uso de procesamiento masivo de datos e inteligencia computacional con el fin de automatizar y auxiliar el proceso de generación de nuevo conocimiento. La astronomía es, sin lugar a dudas, uno de ellos. Esto se debe, en parte, al explosivo desarrollo de nuevas tecnologías que ponen al alcance de la comunidad científica una cantidad nunca antes vista de datos; los cuales contienen abundante información sobre el universo, su composición, estructura, origen y destino.

Un claro ejemplo de esto lo constituye el *Atacama Large Millimiter/sub-millimiter Array (ALMA)*[40], un interferómetro radio-astronómico que consiste en un arreglo de 66 antenas que observan el espacio en las bandas milimétricas y submilimétricas del espectro electromagnético. Ubicado en el desierto de Atacama, en el norte de Chile, es parte de uno de los proyectos científicos más importantes del último tiempo; en el cual se ha hecho uso de tecnologías de punta por parte de investigadores, ingenieros y técnicos expertos en diversas áreas del conocimiento, tales como la astronomía, la computación científica y de alto rendimiento, la electrónica, entre otros.

La tecnología involucrada en el proyecto *ALMA* ha permitido, entre otras cosas, obtener datos de alta resolución provenientes de distintas fuentes u objetos del espacio observable desde la tierra. La radiación electromagnética emitida por estos objetos, en bandas de frecuencia de radio, son captadas por el arreglo de antenas y posteriormente procesadas por equipos de alta capacidad con el fin de obtener los espectros electromagnéticos correspondientes. Estos, a su vez pueden ser analizados directamente o utilizarse para generar imágenes de

alta calidad.

Parte principal de la importancia de estos espectros de radiación electromagnética es que dan información valiosa sobre la composición química de los objetos de los que esta proviene. Esto se debe a que los átomos que componen estos objetos emiten o absorben una mayor cantidad de energía en frecuencias muy específicas. Por lo tanto, un espectro en particular tendrá rangos estrechos de mayor o menor intensidad en ciertas frecuencias dependiendo de los elementos químicos de los que está compuesto el objeto del que proviene.

La detección de lineas espectrales es un problema de interés en sí, y que puede llegar a ser muy complejo dependiendo de en qué bandas de frecuencia se esté trabajando. Sin embargo, se puede seguir obteniendo información valiosa de los objetos observados a partir de estas líneas ya detectadas. Esto incluye potencialmente respuestas a preguntas como: ¿de qué forma se relacionan ciertos tipos de líneas entre sí? ¿Existe una mayor correlación de presencia de líneas de ciertos isótopos o moléculas en particular? ¿Hay una mayor presencia de líneas de ciertas especies en algunos objetos que en otros? ¿Qué nos dice esto de la composición de los objetos y de su química subyacente?

Objetivos

Los objetivos del presente trabajo se enumeran a continuación:

Objetivo General

- Implementar un sistema de aprendizaje de reglas de asociación, o *Association Rule Learning (ARL)*, que permita obtener relaciones lógicas entre líneas espectrales presentes dentro de un conjunto de datos de espectroscopía astronómica.

Objetivos Específicos

- Implementar un sistema de ARL genérico que permita aplicarse a datos provenientes de diversos orígenes.
- Obtener reglas de asociación entre líneas espectrales obtenidas a partir de datos reales.
- Visualizar las reglas de asociación, presentes en el conjunto de datos, que sean de mayor interés según medidas estadísticas.
- Filtrar las reglas de asociación encontradas en un conjunto de datos de espectroscopía astronómica según las líneas que las componen.

Descripción de la solución

Si bien existen diversas técnicas de clasificación y caracterización de puntos en un espacio multidimensional (en nuestro caso objetos descritos por parámetros), para resolver las preguntas anteriores se requiere más bien de una herramienta que permita encontrar relaciones explícitas entre los parámetros en sí, y que permita asignar medidas de relevancia estadística a estas relaciones.

Para ello se planteó el uso de *Association Rule Learning (ARL)*, o Aprendizaje de Reglas de Asociación, como una herramienta que puede dar respuesta directa a algunas de las interrogantes mencionadas anteriormente, y ayudar a obtener información clave para el proceso de utilizar otras técnicas en el largo plazo.

El Aprendizaje de Reglas de Asociación como técnica se ubica dentro del área de la minería de base de datos, y su concepción original fue el ser aplicada a sistemas de puntos de venta con el fin de encontrar las relaciones más comunes entre artículos comprados por los clientes. Sin embargo, con el tiempo se ha convertido en una de las herramientas más utilizadas de su área, en una diversa gama de contextos.

En el presente trabajo se llevó a cabo el uso de esta técnica con el fin de encontrar relaciones comunes entre líneas espectrales a través de distintos espectros de frecuencia. Ahora bien, la naturaleza innata de estos es más bien contínua y las líneas en sí mismas poseen diversos parámetros que las caracterizan. Por lo tanto, este caso dista mucho de la binaridad del problema original para el cual se pensó ARL. Sin embargo, como se muestra a lo largo de este informe, si se asume que se realizó con anterioridad un buen trabajo de detección de líneas y se efectúa un pre-procesamiento adecuado de los datos, el algoritmo de ARL arroja resultados que están en concordancia con la química subyecente.

En particular, se utilizó una implementación de dos de los algoritmos más utilizados de ARL: *Apriori* y *FP-Growth*. Luego, se obtuvo una base de datos de líneas espectrales ya detectadas (pero no necesariamente asociadas a alguna especie [átomo, isótopo, etc.]) correspondientes a observaciones del *Sloan Digital Sky Survey (SDSS)*, un sondeo espectroscópico del espacio realizado con un telescopio óptico. Sobre este conjunto de datos se procedió a realizar un pre-procesamiento que, entre otros, consta de filtrar las líneas según su brillo o razón señal a ruido. Luego, se efectuaron particiones según las características de los objetos de procedencia (como tipo de objeto o estructura estelar, cercanía, etc.). Finalmente, sobre estas se procedió a aplicar los algoritmos de ARL.

Los resultados obtenidos fueron efectivamente reglas de asociación entre líneas espectrales que resultaron tener mayor relevancia sobre el conjunto de datos bajo distintas medidas. Quedó para su estudio en trabajos posteriores el crear una forma eficiente e intuitiva para un usuario de recorrer y visualizar estas reglas, facilitar la selección y el pre-procesamiento del conjunto de datos inicial (del cual se extraen las reglas) según sus parámetros y encontrar diferencias entre las reglas generadas por distintos conjuntos. Esto con el fin de hacer aun más sencillo el descubrimiento de información valiosa sobre la química y composición de los objetos estudiados. Junto con esto, queda para desarrollo a futuro una implementación más general del procedimiento para así aplicar los algoritmos a datos obtenidos en otras bandas

de frecuencia, como por ejemplo, las observaciones radioastronómicas de ALMA; que por sus caracterísiticas, promete un mayor número de datos sobre los cuales obtener reglas de asociación para líneas espectrales.

Capítulo 1

Marco Teórico

1.1. Ciencia de datos: espectroscopía astronómica

Durante el siglo XIX nace la astrofísica moderna. Fue entonces que, por primera vez, se logró medir distancias estelares; que revelaron lo lejanos que se encuentran estos objetos de la tierra. Surgió, también en aquel siglo, la *espectroscopía física*, que permitió la identificación de elementos químicos a través de *líneas espectrales*. A partir de esto nace la química moderna, con el descubrimiento de la tabla periódica de los elementos. Gracias a estos avances es que, posteriormente, llega a surgir la mecánica cuántica en el siglo XX y, junto con ello, la clasificación espectral de las estrellas.

En el año 1814, el científico Joseph von Fraunhofer (1787 - 1826), mediante el uso de prismas de alta calidad construidos por él mismo, logró difractar un rayo de luz solar y proyectarlo hacia un muro blanco. Además de los colores característicos del arcoíris, observados de esta manera desde los tiempos de Newton, vio en la proyección resultante muchas líneas oscuras. Procedió, luego, a catalogar meticulosamente la longitud de onda exacta de cada una de estas líneas, que hasta el día de hoy se conocen como líneas de Fraunhofer, y asignó letras a las más notorias. De esta forma, Fraunhofer registró el primer espectro astronómico de alta resolución.

Posteriormente, procedió a realizar el mismo experimento, pero esta vez utilizando un rayo de luz proveniente de la estrella roja cercana Betelgeuse, y observó que el patrón de líneas oscuras cambiaba considerablemente. Fraunhofer concluyó correctamente que estas se encuentran de cierta forma relacionadas con la composición del objeto observado. En efecto, algunas de las líneas observadas por Fraunhofer se deben a las especies (e.g átomos, iones, moléculas) que componen la atmósfera terrestre.

Sin embargo, el gran paso en la comprensión general de las observaciones de Fraunhofer llegó a mediados del siglo XIX de la mano del trabajo de los científicos Gustav Kirchhoff (1824 - 1887) y Robert Bunsen (1811 - 1899), quienes estudiaron el color de la luz emitida al poner distintos metales en llamas. Al hacer esto, descubrieron que, en ciertos casos, la longitud de onda de la luz emitida coincidía exactamente con las líneas observadas por Fraunhofer. Estos

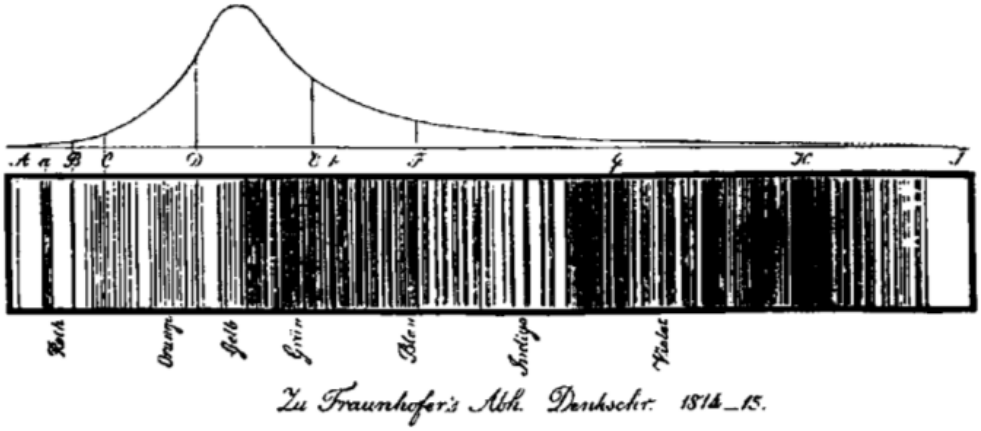


Figura 1.1: Espectro solar registrado por Fraunhofer.

experimentos demostraron que las líneas de Fraunhofer son una consecuencia directa de la composición atómica del sol.

En el siglo XX se llegó a comprender de manera más profunda la razón de la existencia de estas líneas, denominadas *líneas espectrales*, gracias a la revolución que significó la llegada de la mecánica cuántica. Los desarrollos en materia de espectroscopía han estado, desde entonces, estrechamente ligados a los de aquel campo de la física.

Si se observa cuidadosamente ciertos objetos, tales como los planetas Marte o Júpiter, o estrellas tales como Betelgeuse, se puede apreciar que estos objetos tienden a tener un cierto color. Basta utilizar instrumentos de bajo poder resolutivo para separar la luz que llega desde estos objetos a la tierra en colores de amplio espectro. A su vez, el observar estos colores entrega información sobre la temperatura del objeto. Por ejemplo, las estrellas azules poseen mayor temperatura que las rojas. Objetos que emiten rayos X, como la corona solar, son muy calientes, mientras que objetos fríos emitirán radiación en longitudes de onda mayores; por ejemplo, en forma de ondas de radio.

La mejor forma de obtener información astrofísica detallada de objetos del cielo es mediante observaciones de alta resolución espectral. Observaciones llevados a cabo con estos equipos con tal capacidad permiten obtener, no solamente la posición central de una línea dentro del espectro, sino también su forma. Mediante este procedimiento se puede inferir propiedades del objeto, tales como su composición química, su temperatura, la abundancia de las especies que lo componen y que se encuentran emitiendo radiación, el movimiento de las especies y del objeto en sí, la presión y densidad local, el campo magnético presente, entre otros.

Esto se lleva a cabo con equipos de alto poder resolutivo y sensibilidad. Dos ejemplos de estos son, el telescopio óptico SDSS que se encuentra en el Apache Point Observatory (APO, ubicado en Nuevo México, Estados Unidos) y con el cual se lleva a cabo el *Sloan Digital Sky Survey (SDSS)*; y, en mayor medida, el interferómetro radioastronómico *Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA)* ubicado en el norte de Chile.

1.1.1. Atacama Large Millimeter Array (ALMA)

El *Atacama Large Millimeter Array (ALMA)* es un interferómetro de señales de radio ubicado en el desierto de Atacama, en el norte de Chile. Es un proyecto llevado a cabo mediante una asociación de organizaciones de Norteamérica, Europa y el Este de Asia. Comenzó sus observaciones científicas en la segunda mitad del año 2011. Es, por lejor, el mayor y más importante radiotelescopio construido hasta la fecha. Se encuentra realizando observaciones preliminares desde marzo del año 2013, y se espera que que opere al cien por ciento de su capacidad desde marzo del 2017.

ALMA realiza observaciones captando radiación electromagnética proveniente del espacio en bandas milimétricas y submilimétricas en sus longitudes de onda, que corresponden a ondas de radio. Debido a que en condiciones normales la humedad del ambiente y del cielo absorbe gran parte de este tipo de radiación, es crucial para el funcionamiento de los telescopios el estar ubicados en un lugar seco; y el más idóneo en ese sentido es, sin dudas, el llano de Chajnantor en el desierto de Atacama, a más de 5000 metros de altura.

Debido al diseño de ALMA, en muchas de sus observaciones se detectará una abundancia de líneas espectrales; lo cual puede ser un resultado complementario al objetivo principal de una observación en particular, y por ende, puede no ser analizado por el o la astrónomo(a) que lo propuso.

Con el tiempo se espera ocurra una eventual acumulación de grandes cantidades de datos espectrales de ALMA. Esto abre la oportunidad de desarrollar nuevas técnicas de estudio basados en la minería de datos u otras técnicas de computación poco usadas por los astrónomos. De ahí que en el presente trabajo se busque implementar algoritmos de aprendizaje de reglas de asociación, o *Association Rule Learning (ARL)*, para el estudio masivo de datos espectroscópicos

Gran parte de los datos obtenidos desde ALMA son guardados en estructuras de datos llamadas cubos de datos tipo ALMA (o *ALMA Data Cubes*), que contienen información de distintos puntos de observación del cielo a distintas frecuencias. Los cubos de datos tipo ALMA, como estructura de datos, contienen valores indexados en tres coordenadas. Dos de las coordenadas son espaciales, y corresponden al equivalente a una imagen normal de dos dimensiones, en el sentido que describen puntos del cielo (o del espacio observable desde la tierra). La tercera coordenada corresponde al rango de frecuencias en el que se está detectando radiación electromagnética. Por lo tanto, si se fijan las dos coordenadas espaciales (se fija un punto en el espacio) y se extraen todos los valores en la tercera coordenada de aquel punto, se obtiene el espectro de frecuencias observado en ese punto del espacio.

A partir de ALMA se generan enormes cantidades de datos (actualmente cerca el orden de 1 TeraByte al día), los cuales necesariamente deben procesarse por parte de sistemas automatizados de extracción y análisis con el fin de facilitar a los investigadores el inferir información útil a partir de estos.

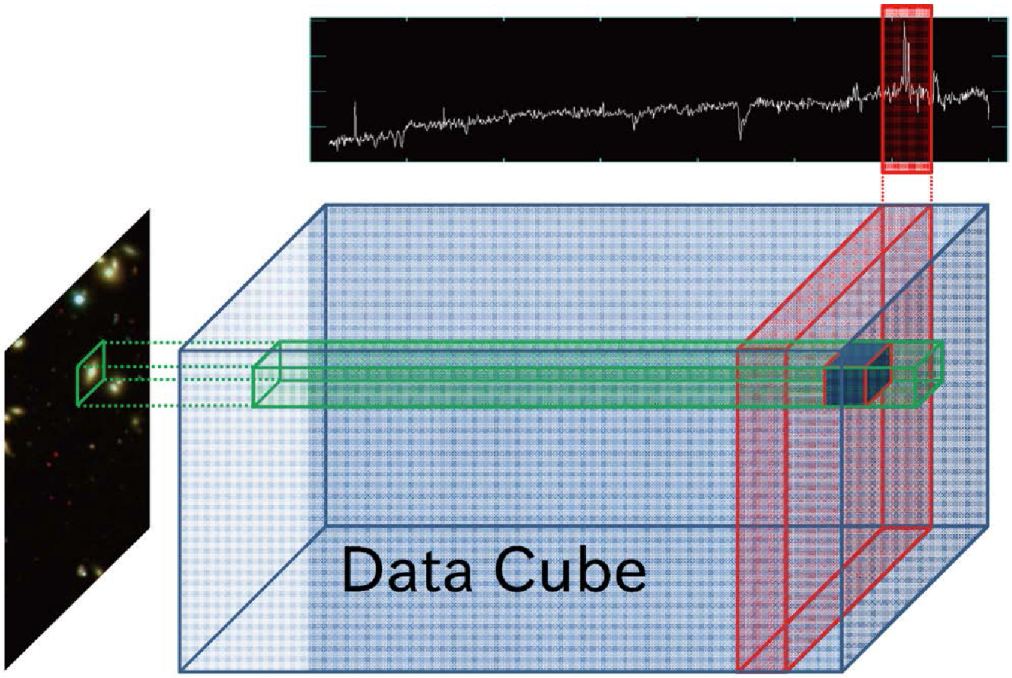


Figura 1.2: Representación gráfica de un cubo de datos tipo ALMA. Dos de sus cordenadas son espaciales mientras la tercera corresponde al dominio de las frecuencias.

1.1.2. Sloan Digital Sky Survey (SDSS)

Dado que se espera obtener datos de ALMA para el uso de técnicas tales como el aprendizaje de reglas de asociación a partir del año 2017, se requiere una base de datos espectroscópicos pre-existente con el fin de poner a prueba el sistema desarrollado en el presente trabajo.

El *Sloan Digital Sky Survey (SDSS)* es un proyecto de inspección y estudio del espacio llevado a cabo mediante el uso de un telescopio óptico ubicado en el observatorio Apache Point (APO), Nuevo México, Estados Unidos. La recolección de datos comenzó en el año 2000, y las imágenes finales de los datos publicados cubren un 35 % del cielo, con observaciones fotométricas de 500 millones de objetos y espectros ópticos de 1 millón de objetos.

Los espectros del SDSS cubren desde 3600 a 10400 Angstroms (Å)[1] con una resolución de 1 Å[2]. Los objetos estudiados son principalmente galaxias, incluyendo *quásares* y *AGN* (un 80 % del total de datos), y el resto son estrellas de distinto tipo (20 % del total) cuyos espectros se encuentran dominados por muchas líneas de absorción. Los espectros de regiones de gas o de galaxias, por otra parte, poseen pocas líneas de absorción. El SDSS tiene en sus catálogos un universo de casi 50 líneas espectrales posibles, presentes dentro de su rango de detección.

Los datos de SDSS se hacen disponibles mediante publicaciones regulares o *data releases* a

[1] `https://www.sdss3.org/instruments/boss_spectrograph.php#Parameters`
[2] $1\,\text{Å} = 10^{-10}\,m = 10^{-1}\,nm$

través de internet. La última publicación llevada a cabo fue la correspondiente al data release 10 (DR10), con fecha de julio del 2013. Los datos de todos los data releases se encuentran en un servidor *Microsoft SQL Server* y pueden accederse mediante diversas interfaces o APIs presentes en el sitio web de SDSS. En particular, existe una interfaz web llamada *CasJobs* que permite realizar consultas en lenguaje *SQL* a un servidor que encola la petición, la ejecuta y guarda los resultados en una base de datos asignada al usuario.

Para probar los algoritmos y el sistema implementados en el presente trabajo, en particular, se utilizó el *data release 7 (DR7)* como fuente de datos.

1.2. Reglas de asociación

El aprendizaje mediante reglas de asociación, o *Association Rule learning (ARL)*, es sin lugar a dudas uno de los métodos más populares y mejor estudiados dentro de la minería de datos. Basta para ello ver que el artículo seminal de Agrawal et al.[5], donde se sentaron las bases de la teoría subyacente, es uno de los más citados del área; según el catálogo y herramienta de búsqueda de publicaciones científicas *Google Scholar*.

La motivación principal de ARL en su concepción fue el encontrar relaciones lógicas entre los artículos adquiridos por usuarios en puntos de venta del tipo *"Si un cliente compra los artículos A y B, entonces es muy probable que también compre el artículo C"*. Sin embargo, la teoría de fondo que se desarrolló con el tiempo tiene una gran cantidad de aplicaciones en los más diversos ámbitos.

1.2.1. Definición formal

Sea $\mathcal{I} = \{\mathrm{i}_1, \mathrm{i}_2, \mathrm{i}_3, \ldots, \mathrm{i}_n\}$ un universo de ítemes posibles. Se denomina, entonces a un conjunto $X \subseteq \mathcal{I}$ como *conjunto de ítemes* o *itemset*. Se tiene, además un conjunto de transacciones $\mathcal{T} = \{T_1, T_2, \ldots, T_m\}$, donde $T_\mathrm{i} \subseteq \mathcal{I}$, $\forall \mathrm{i} \in [1, m]$. Dados un conjunto de ítemes X y una transacción T_i, se dice que la trasacción T_i *satisface* X si y solo si $X \subseteq I_\mathrm{i}$.

Una *regla de asociación* es, entonces, una relación (más específicamente, una implicancia) entre dos conjuntos de la forma $X \Rightarrow Y$, donde $X \subset \mathcal{I}$, $Y \subset \mathcal{I}$, y $X \cap Y = \emptyset$. A X se denomina el *antecedente* de la regla y a Y se denomina el *consecuente* de la regla.

Existen una serie de medidas para cuantificar la relevancia de una regla de asociación. A continuación se define algunas de ellas.

El *soporte* de un conjunto de ítemes X, o $supp(X)$, se define como

$$supp(X) = \frac{|\mathcal{T}_X|}{|\mathcal{T}|} \quad \text{, tal que} \quad \mathcal{T}_X = \{T \in \mathcal{T} \,:\, X \subset T\},$$

donde $|X|$, cuando X es un conjunto finito cualquiera, significa el número de elementos que posee el conjunto. Vale decir, el soporte corresponde a la fracción del total de transacciones

en la que está presente el conjunto.

A su vez, el soporte de una regla de asociación $X \Rightarrow Y$, o $\mathit{supp}(X \Rightarrow Y)$, se define como

$$\mathit{supp}(X \Rightarrow Y) = \mathit{supp}(X \cup Y),$$

vale decir, corresponde a la fracción del total de transacciones en las cuales está presente tanto el antecedente como el consecuente de la regla simultáneamente[3].

La *confianza* de una regla de asociación $X \Rightarrow Y$, denotada por $\mathit{conf}(X \Rightarrow Y)$, se define como

$$\mathit{conf}(X \Rightarrow Y) = \frac{\mathit{supp}(X \cup Y)}{\mathit{supp}(X)},$$

es decir, indica en qué fracción de las transacciones en las cuales está presente el antecedente la regla se cumple (i.e. está presente también el consecuente de la regla). Debido al uso frecuente de esta medida de relevancia, resulta usual el expresar una regla de asociación mediante la notación

$$X \Rightarrow Y \;\Big|\; c$$

donde $c = \mathit{conf}(X \Rightarrow Y)$.

El *lift* de una regla de asociación $X \Rightarrow Y$, denotado por $\mathit{lift}(X \Rightarrow Y)$, se define como

$$\mathit{lift}(X \Rightarrow Y) = \frac{\mathit{conf}(X \Rightarrow Y)}{\mathit{supp}(Y)} = \frac{\mathit{supp}(X \cup Y)}{\mathit{supp}(X) \times \mathit{supp}(Y)}.$$

La intuición detrás del concepto de lift tiene lugar al interpretar las medidas descritas anteriormente desde un punto de vista probabilístico. Tomando el conjunto $\mathcal{T}$ como un universo de posibles resultados, o espacio muestral, se tiene que

$$\mathit{supp}(X) = P(X) \quad \text{y} \quad \mathit{conf}(X \Rightarrow Y) = P(Y|X).$$

Desde este punto de vista, la medida de lift indica qué tan bien la presencia del antecedente de una regla lograría predecir la presencia del consecuente. Por lo tanto, si la presencia del antecedente y del consecuente en una transacción cualquiera son eventos estadísticamente independientes (i.e. la ocurrencia de uno no afecta la probabilidad de que el otro ocurra), se tendrá que $\mathit{lift}(X \Rightarrow Y) = 1$; y este valor irá variando en la medida que ambos eventos sean más dependientes entre sí.

Por ejemplo, supongamos que se tiene el siguiente conjunto de transacciones

TID	**Items**
1	a, c
2	a, d
3	b, c
4	b, d

[3]Debe tenerse en mente que la expresión $\mathit{mathitsupp}(X \cup Y)$ indica la fracción del total de transacciones en las cuales está presente **tanto** el antecedente como el consecuente de la regla **simultáneamente**, y **no** de aquellas en las cuales está presente el antecedente **o** el consecuente. El argumento del soporte *supp* es un conjunto de "pre-condiciones", y, por lo tanto, se vuelve más restrictivo en la medida que su cardinalidad aumenta.

donde *TID* es el número identificador de la transacción. Luego, para este caso, se tiene que

$$\mathit{lift}(\{a\} \Rightarrow \{c\}) = \frac{\mathit{supp}(\{a\} \cup \{c\})}{\mathit{supp}(\{a\}) \times \mathit{supp}(\{c\})} = \frac{1/4}{1/2 \times 1/2} = 1,$$

lo cual indica que la que la ocurrencia de que una transacción cualquiera satisfaga $\{a\}$ es estadísticamente independiente de que una transacción cualquiera satisfaga $\{b\}$.

En cambio, en el siguiente conjunto de transacciones

TID	**Items**
1	a, c
2	a, d
3	b, c
4	b, c

se tiene que

$$\mathit{lift}(\{a\} \Rightarrow \{c\}) = \frac{\mathit{supp}(\{a\} \cup \{c\})}{\mathit{supp}(\{a\}) \times \mathit{supp}(\{c\})} = \frac{1/4}{1/2 \times 3/4} = 2/3 < 1,$$

lo cual quiere decir que hay una mayor razón de transacciones que satisfacen $\{c\}$ dentro del total de transacciones que dentro del conjunto de transacciones que satisfacen $\{a\}$.

Finalmente, en el conjunto de transacciones

TID	**Items**
1	a, c
2	a, d
3	b, d
4	b, d

se cumple que

$$\mathit{lift}(\{a\} \Rightarrow \{c\}) = \frac{\mathit{supp}(\{a\} \cup \{c\})}{\mathit{supp}(\{a\}) \times \mathit{supp}(\{c\})} = \frac{1/4}{1/2 \times 1/4} = 2 > 1,$$

lo cual indica que hay una mayor razón de transacciones que satisfacen $\{c\}$ dentro del conjunto de transacciones que satisfacen $\{a\}$ que dentro del total de transacciones.

1.2.2. Algoritmos principales

Algoritmo *Apriori*

En el mismo artículo seminal de ARL por Agrawal et al.[5], se presentó el algoritmo *Apriori*. Este algoritmo hace uso de las propiedades de clausura descendiente de la frecuencia de los conjuntos con respecto a sus subconjuntos con el fin de optimizar el proceso de generación de conjuntos de ítemes frecuentes.

El algoritmo *Apriori* recibe como entrada un conjunto de transacciones, y tiene como objetivo encontrar y retornar todos aquellos conjuntos presentes que cumplan con el requisito de soporte mínimo indicado, también llamados *conjuntos frecuentes*.

Por ejemplo, supongamos que se cuenta con el un conjunto de transacciones, y que cada una contiene ítemes pertenecientes a un universo de solo 4 elementos posibles, $\mathcal{I} = \{0, 1, 2, 3\}$. Luego, en principio, para extraer los conjuntos frecuentes a partir de estas transacciones, por cada uno de los conjuntos que es posible generar con este universo de 4 ítemes posibles (llamados *conjuntos candidatos*), se debe recorrer cada una de las transacciones, ver si la transaccion satisface este conjunto, y de ser así incrementar un contador. Luego de terminar este proceso para cada uno de los conjuntos posibles, se tendrá el número de veces que cada uno de estos se encuentra dentro del conjunto de transacciones, y teniendo el número total de estas, se puede obtener de forma directa el soporte de estos conjuntos.

Grafo con los conjuntos generados a partir de un universo de 4 ítemes posibles

El problema radica en que el número de conjuntos candidatos crece de manera exponencial en el número de ítemes del universo posible. En efecto, si el número de ítemes del universo es n, entonces a partir de este es posible generar $2^n + 1$ conjuntos. Por tanto, para un universo de 100 elementos, existen nada menos que $1{,}26 \times 10^{30}$ conjuntos candidatos; y debe, por tanto, recorrerse el total de transacciones este número de veces.

No obstante, es posible reducir el número de conjuntos candidatos utilizando la propiedad de *clausura descendiente* de los conjuntos frecuentes, tambien llamado *principio Apriori*. Esta propiedad asegura que si un conjunto dado es, en efecto, frecuente, entonces necesariamente todos sus subconjuntos también lo son. O, expresado de forma recíproca, si un conjunto dado resulta no ser frecuente, entonces necesariamente todos sus superconjuntos tampoco lo son. Esta última expresión es la que resulta más relevante para nuestro caso. Esto implica que luego de generar un conjunto candidato y verificar si es frecuente verificando el número de transacciones que lo satisfacen, si se comprueba que este conjunto no es frecuente (vale decir, no cumple con el requisito de soporte mínimo), entonces necesariamente ninguno de sus conjuntos posibles que lo contienen será frecuente, y por tanto no será necesario obtener sus soportes correspondientes contando el número de transacciones que los satisfacen.

Grafo igual al anterior, pero que muestra cuales de los conjuntos necesariamente no son frecuentes si uno de ellos resulta no serlo.

Esta propiedad permite reducir considerablemente el número de conjuntos candidatos y, por tanto, optimizar el algoritmo final; ya que no será necesario recorrer el total de transacciones tantas veces como se planteó originalmente. Para poder utilizar esta propiedad y beneficiarse de la optimización correspondiente, es necesario generar los conjuntos candidatos comenzando por aquellos que poseen menos elementos, y a partir de estos generar todos los superconjuntos posibles.

El algoritmo *Apriori*, por lo tanto, en terminos generales resulta ser el siguiente

Algoritmo 1: Algoritmo *Apriori*

Data: Conjunto de transacciones $\mathcal{T}$
Result: Conjunto de ítemes frecuentes $\mathcal{L}$
$\mathcal{L}_1 \leftarrow$ {conjuntos de 1 solo ítem}
for $k = 2$; $L_{k-1} \neq \emptyset$; $k++$ **do**
  $C_k =$ `apriori-gen`(L_{k-1})
  for *transacciones* $T \in \mathcal{T}$ **do**
    $\mathcal{C}_T =$ `subset`$(\mathcal{C}_k, T)$
    for *candidatos* $C \in \mathcal{C}_t$ **do**
      C.count $\leftarrow$ C.count $+ 1$
  $\mathcal{L}_k = \{C \in \mathcal{C}_k : \text{C.count} \geq \text{minsup}\}$
$\mathcal{L} \leftarrow \bigcup_k \mathcal{L}_k$

Donde $\mathcal{L}_k$ corresponde a la colección de conjuntos frecuentes con k elementos, los cuales tienen un contador asociado; y $\mathcal{C}_k$ consiste en la colección de conjuntos candidatos con k elementos, que tienen también un contador asociado. La función `apriori-gen` es la encargada de generar la colección de conjuntos frecuentes de tamaño k a partir de la colección de conjuntos candidatos datos de tamaño k. La función `subset` se encarga de recibir una colección de conjuntos de ítemes frecuentes $\mathcal{C}_k$ y una transacción T y de retornar una colección de ítemes $\mathcal{C}_T = \{C \in \mathcal{C}_k : C \subseteq T\}$.

La teoría indica que la complejidad del algoritmo Apriori se encuentra está acotada por $\mathcal{O}(\mathcal{C}_{sum} \times |\mathcal{T}|)$, donde $\mathcal{C}_{sum}$ es la suma de los tamaños del total de conjuntos candidatos considerados y $|\mathcal{T}|$) denota el tamaño del conjunto de transacciones.

Algoritmo *FP-Growth*

Más recientemente, Han et al. introdujeron el uso de una estructura de datos llamada *Frequent Pattern Tree*[23] en la extracción de conjuntos de ítemes frecuentes a partir de conjuntos de transacciones. Con esto dieron origen al algoritmo *FP-Growth*.

Un *Frequent Pattern Tree (FP-Tree)* es una estructura de datos de tipo árbol, que consiste en un nodo raíz que tiene como sus hijos a *sub-árboles de prefijos de ítems*. Cada nodo del *sub-árbol de prefijo de ítem* contiene tres campos: el nombre del ítem al cual el nodo representa, un contador que registra el número de transacciones que satisfacen la rama del árbol que va de la raíz hasta este nodo, y un puntero al siguiente nodo del FP-Tree que contenga el mismo nombre de ítem o un puntero vacío si no existe tal nodo.

A su vez, el FP-Tree posee una estructura de datos auxiliar denominada *tabla de encabezados*. Cada entrada en esta tabla posee dos campos. El primero es el nombre del ítem y el segundo es un puntero al primer nodo del FP-Tree que posee el mismo nombre de ítem.

Supongamos, por ejemplo, que se cuenta con el siguiente conjunto de transacciones:

TID	**Ítemes**
1	r, z, h, j, p
2	z, y, x, w, v, u, t, s
3	z
4	r, x, n, o, s
5	y, r, x, z, q, t, p
6	y, z, x, e, q, s, t, m

Supongamos, entonces que se desea extraer de estas transacciones aquellos conjuntos frecuentes que cumplan un soporte mínimo de 0.5. El procedimiento para generar el FP-Tree es, entonces, el siguiente. En primer lugar, se extrae a partir de las transacciones todos los ítemes presentes y se ordenan por orden de frecuencia. En este caso, el resultado es el conjunto $I = \{z, r, x, y, s, t, p, q, h, j, w, v, u, n, o, \text{e}, m\}$. Luego, se elimina de este conjunto todos aquellos ítemes que no cumplan con el requisito mínimo de soporte deseado, obteniendo como resultado $I = \{z, r, x, y, s, t\}$

Luego, se hace lo mismo con los ítemes de las transacciones, obteniendo el siguiente resultado

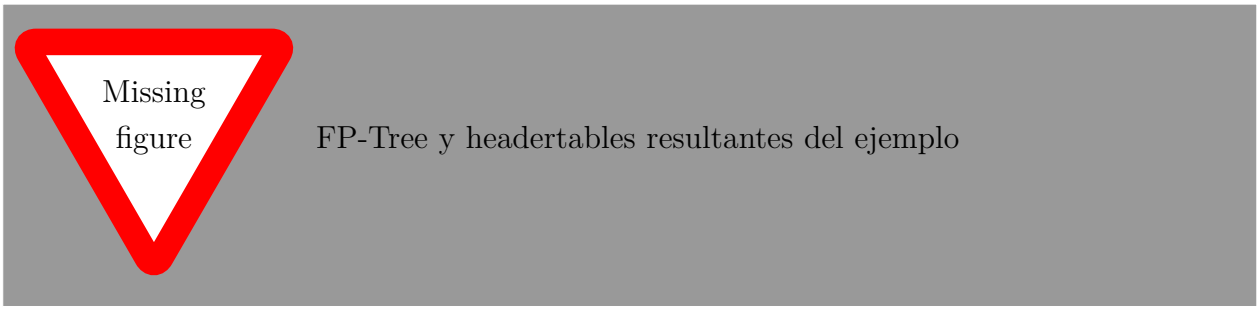
TID	**Ítemes**	**Ítemes ordenados y filtrados**
1	r, z, h, j, p	z, r
2	z, y, x, w, v, u, t, s	z, x, y, s, t
3	z	z
4	r, x, n, o, s	x, s, r
5	y, r, x, z, q, t, p	z, x, y, r, t
6	y, z, x, e, q, s, t, m	z, x, y, s, t

Una vez listo esto, puede comenzarse con el procedimiento de construcción del árbol en sí. Se comienza por insertar el nodo raíz, cuyo nombre es vacío o *null*. Luego se comienza a

añadir los conjuntos frecuentes a partir de las transacciones con ítemes ordenados y filtrados. Estas son sucesivamente añadidas al árbol de tal manera que cada ítem resulte ser hijo del ítem anterior según el orden en que se encuentra en la transacción. Ahora bien, si el ítem a añadir ya se encuentra presente en una cierta posición dentro de el árbol, entonces en vez de agregar un nuevo nodo con el mismo nombre, simplemente se incrementa el contador del nodo ya existente y se inserta el siguiente ítem en la transacción como hijo de este.

Proceso de construcción del FP-Tree del ejemplo

En términos generales, el algoritmo final de generación de FP-Tree es como sigue



FP-Tree y headertables resultantes del ejemplo

Luego, se procede a extraer los conjuntos frecuentes a partir del FP-Tree de la siguiente manera

1.2.3. Otros algoritmos, implementaciones y aplicaciones

Posteriormente, Agrawal et al. presentaron el algoritmo *AprioriTid*, cuyas mejores características fueron combinadas con el algoritmo *Apriori* para crear el algoritmo *AprioriHybrid*, de orden de complejidad lineal en el número de transacciones[7]. Luego se han realizado más desarrollos en ARL orientado a transacciones secuenciales de clientes de puntos de ventas[6].

Savasere et al. introdujeron el algoritmo *Partition*[35] con el fin de extraer reglas de asociación en base de datos, el cual presenta reducciones en las operaciones de la CPU y de entrada/salida, y que además facilita la paralelización. Posteriormente se creó el algoritmo *Dynamic Itemset Counting (DIC)*[10], que realiza menos lecturas sobre los datos que los algoritmos previos, y que utiliza la métrica de *Convicción* a la hora de generar reglas de asociación. Luego, Park et al. presentaron un algoritmo que hace uso de funciones de Hashing con el fin de generar reglas candidatas[30]. Se han realizado, también, adaptaciones de los

algoritmos previos con el fin de realizar ARL en datos de tipo cuantitativo[38].

Esfuerzos posteriores se han realizado con el fin de profundizar en los fundamentos teóricos subyacentes en ARL (e.g. definiendo el conjunto de posibles ítemes como una estructura algebráica llamada *retículo*)[42], y con el fin de extender la noción de reglas de asociación a correlaciones[9].

Luego de esto, se han hecho numerosas implementaciones y optimizaciones a los algoritmos más utilizados en ARL, como, por ejemplo, el algoritmo Apriori[8]; así como implementaciones que facilitan el mantener la privacidad de cada una de las fuentes de datos que participan en el proceso[19].

Desde su concepción, el método de ARL ha sido aplicado en numerosas áreas, tales como la detección de intrusiones[28] y anomalías[31][13], educación[33][34], química[17], privacidad de datos[21], búsqueda en la web[20], tráfico en redes[18], computación social[29], búsqueda semántica[15], biología[27][12], salud[25][14], medios de comunicación[16][26], y la investigación forense[24]. Junto con esto, se han realizado numerosas investigaciones sobre el estado actual de ARL y sus posibles desarrollos a futuro dentro del marco de métodos automatizados de generación de conocimiento[22].

Si bien existen numerosos esfuerzos por utilizar minería de datos y Machine Learning en diversos ámbitos de la astronomía (en particular, en detección, clasificación y caracterización de líneas moleculares en espectros de emisión[36]), hasta la fecha no se ha propuesto abiertamente el uso de ARL sobre datos extraídos de espectros de frecuencia.

Sin embargo, se han realizado avances en ampliar los conceptos subyacentes en ARL con el fin de aplicar el método en campos más diversos[9]. Específicamente, una rama de investigación ha desarrollado lo que se denomina *Weighted Association Rule Learning*[39][11]. Este método permite asociar medidas de interés arbitrario a priori a ciertos conjuntos de datos. Si bien esto hace que se pierdan propiedades de clausura que son útiles a la hora de generar algoritmos eficientes, también permite trabajar con distintos conjuntos de transacciones sin que las reglas generadas estos dependan exclusivamente de su soporte u otras medidas estándar.

Capítulo 2

Especificación del Problema

2.1. Descripción del problema

Supóngase que se cuenta con conjuntos de espectros, y que cada uno de ellos posee todas sus líneas espectrales correctamente detectadas y, por lo tanto, se conoce su posición en el espectro. En la práctica eso puede ser muy difícil de lograr, sobre todo en circunstancias donde pueden existir en principio una alta cantidad de líneas espectrales y estas pueden interferir unas con otras en la señal final, lo que se conoce como *blending*.

Por lo tanto, para efectos de lo que sigue, basta con asumir que existe la posibilidad que no todas las líneas hayan sido detectadas. Pero es importante que las que sí fueron detectadas, lo hayan sido con una seguridad suficiente y que se sepa de manera adecuada su posición. Actualmente existen herramientas que son capaces de ajustar modelos físicos conocidos con anterioridad a datos espectrales con el fin de identificas las líneas en ellos presentes.

Teniendo estos conjuntos de espectros con sus respectivas líneas detectadas se desea aplicar a conjuntos de líneas espectrales extraídas a partir de datos de observaciones astronómicas, para así obtener información de las relaciones existentes entre ellas bajo distintas medidas de interés y relevancia estadística.

2.2. Requisitos de la solución y casos de uso

A continuación se enuncian los requerimientos del sistema:

1. **Obtener reglas de asociación entre líneas de emisión espectrales [esencial].** El sistema debe generar reglas de asociación entre líneas de emisión presentes en espectros, independientemente de si estos pertenecen a una misma o a distintas moléculas o átomos, o si no han sido aun identificadas.
2. **Permitir al usuario observar las reglas generadas, y ordenarlas según distintas medidas de relevancia estadística [esencial].**

3. **Permitir al usuario guardar las reglas de asociación generadas [esencial].**
   Una vez extraídas las reglas de asociación, el usuario debe poder revisarlas y guardarlas para su revisión posterior.
4. **Permitir al usuario aplicar los mismos algoritmos de reglas de asociación a datos de diversas fuentes [esencial].**
   Se desea que el sistema de extracción sea lo más general posible, de modo tal de poder aplicarlo a datos de líneas espectrales extraídos de distintos *surveys*, bases de datos, sistemas de modelamiento y detección de líneas, entre otros.
5. **El sistema debe ser ejecutable en un ambiente de computación de alto rendimiento [deseable].**
6. **El sistema debe ser compatible con plataformas de observatorios virtuales [deseable].**
7. **Implementar una interfaz gráfica de usuario [opcional].**

2.2.1. Casos de Uso

En la Figura 2.1 se muestra un diagrama con los casos de uso preliminares del sistema a desarrollar.

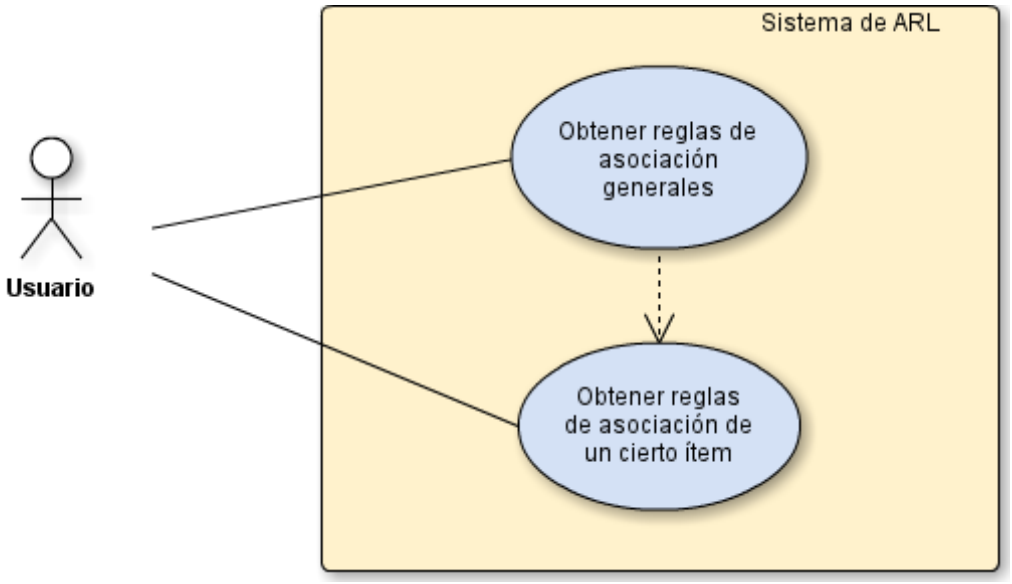


Figura 2.1: Diagrama de casos de uso del sistema.

Actores

Para este sistema existe solo un tipo de actor, dado que todos los usuarios finales tendrán acceso a las mismas funcionalidades. Este usuario será el encargado de seleccionar el conjunto de datos que quiere ingresar al sistema, en forma de vectores de líneas moleculares. Cada vector poseerá las líneas identificadas en un espectro de frecuencia en particular. Este usuario

ingresará estos datos al sistema y luego seleccionará los parámetros de detección de reglas que desee. Una vez ejecutados los algoritmos correspondientes, el usuario podrá observar las reglas generadas y, si así lo desea, ajustar nuevamente los parámetros para obtener mejores resultados sobre el mismo conjunto de datos.

Posteriormente, el mismo u otro usuario podrá verificar los resultados obtenidos en una sesión de ARL anterior y ajustar los parámetros de búsqueda a su agrado para luego volver a correr los algoritmos sobre los mismos iniciales.

Descripción de casos de uso

En la siguiente tabla se muestra una descripción detallada de los casos de uso y se indica, de ser así, a qué requerimiento está asociado.

ID	Caso de uso	Descripción	Tipo	Ref.
1	Obtener reglas de asociación generales	El usuario obtiene reglas de asociación extraídas a partir de un conjunto de transacciones de líneas espectrales y las filtra u ordena mediante soporte, confianza o *lift*	Esencial	1,2,3,4
2	Obtener reglas de asociación de un cierto ítem	El usuario obtiene reglas de asociación extraídas a partir de un conjunto de transacciones de líneas espectrales, selecciona solo aquellas que posean un cierto ítem en su antecedente y/o consecuente, y las ordena mediante soporte, confianza o *lift*.	Esencial	1,2,3,4

Capítulo 3

Descripción de la Solución

A continuación se describe la solución implementada para el presente proyecto. Se detalla aquí la estructura, diseño y funcionamiento del sistema y la aplicación realizados con el fin de cumplir con los requerimientos descritos anteriormente.

3.1. Arquitectura de software

Dado que, para fines del proyecto, se requería de una herramienta con la cual se puediese llevar a cabo una serie de pruebas en distintos contextos, se optó por dividir el sistema en dos paquetes distintos; cada uno con una función específica, e interfaces bien definidas, con el fin de facilitar su posterior extensión y reutilización. En la Figura se muestra un diagrama con la arquitectura general del sistema.

A continuación se detallan sus paquetes, módulos, e interfaces y explica sus funciones.

3.1.1. Paquete de Association Rule Learning (ARL)

El paquete de Association Rule Learning (ARL) es el encargado de realizar el aprendizaje mediante reglas de asociación en sí; vale decir, de recibir un conjunto de datos con transacciones y de retornar reglas de asociación generadas a partir de aquel conjunto.

En las siguientes secciones se espacifican los formatos de entrada y salida de este paquete junto con una descripción de los módulos que lo componen.

Módulo de interfaz de usuario/controlador

El módulo de interfaz de usuario y controlador es el encargado de recibir directamente del usuario los parámetros de entrada correspondientes. Este módulo contiene métodos, clases

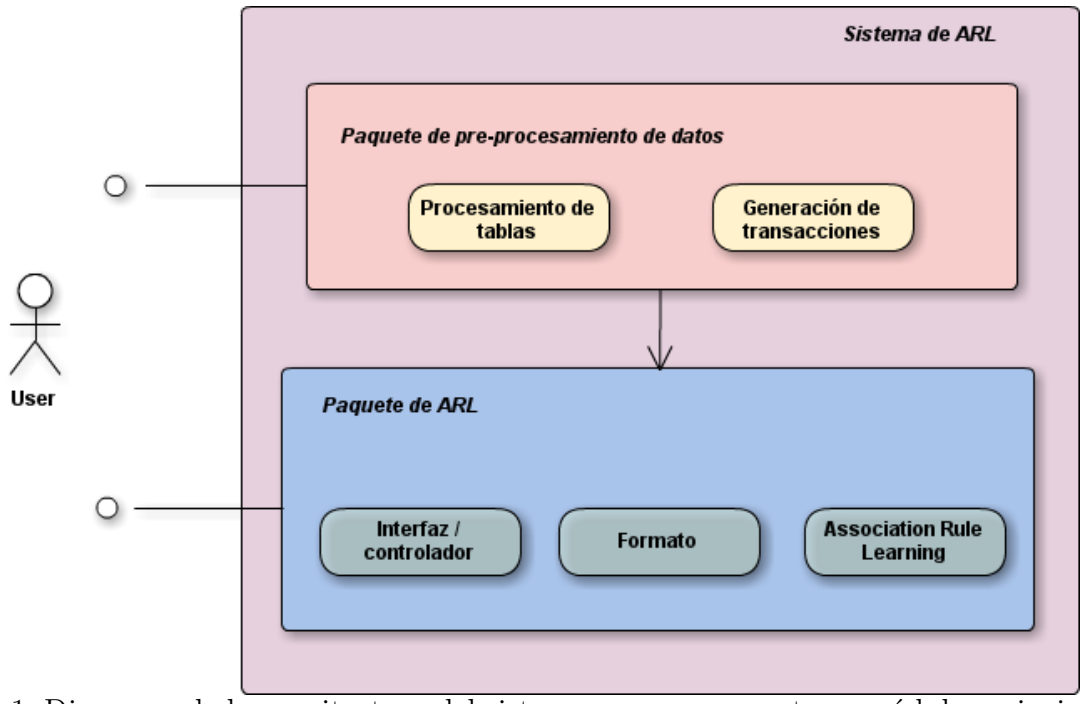


Figura 3.1: Diagrama de la arquitectura del sistema, con sus paquetes y módulos principales.

y funciones que reciben los parámetros del usuario, abren y leen los archivos de entrada adecuados, los procesan de acuerdo al formato especificado, y hacen entrega de los datos al módulo principal de ARL.

Este módulo, es el encargado, además de recibir las reglas de asociación, entregarlas al módulo de formato para luego retornarlas al usuario en un archivo correspondiente.

Módulo de formato

Es el módulo encargado de analizar los archivos de entrada leídos por el módulo de interfaz de usuario, extraer la información pertinente de ellos según el formato especificado, y retornar los datos en una estructura adecuada para luego ser procesados por el módulo principal de ARL. A su vez, este módulo realiza, además la labor inversa; vale decir, recibe las reglas de asociación en una estructura de datos estándar para luego entregarlas al módulo de interfaz en el formato requerido por el usuario.

Hasta el momento los formatos soportados son CSV para archivos de entrada, y CSV o tabla en formato LaTeX para archivos de salida.

Módulo principal de ARL

El módulo principal de ARL es el encargado de llevar a cabo el algoritmo de aprendizaje mediante reglas de asociación en sí. En su parte lógica, consta de dos sub-módulos principales. El primero es es sub-módulo encargado de extraer los conjuntos de ítemes frecuentes;

vale decir, aquellos que cumplen con el requerimiento de soporte mínimo. Y el segundo es el sub-módulo de generación de reglas, que es el encargado de recibir los conjuntos de ítemes frecuentes y generar, a partir de ellos, las reglas de asociación que cumplen con el requerimiento de confianza mínima indicado.

Módulo de testeo de ARL

Se encuentra dentro de este paquete, además, un módulo de testeo de los algoritmos de ARL sobre datos de prueba de pequeña envergadura; con el fin de realizar chequeos periódicos del funcionamiento correcto de estos algoritmos en la medida que se realizan cambios, mejoras o refactorizaciones sobre su código fuente.

Módulo de herramientas

Finalmente, se encuentra el módulo de herramientas generales, que consta de una serie de funciones de uso frecuente por parte de otros módulos del paquete; tales como operaciones sobre listas anidadas, búsqueda de llaves sobre diccionarios específicos, entre otros.

3.1.2. Paquete de procesamiento de datos

Debido a que, en la mayoría de las ocasiones los datos sobre los cuales se desea aplicar los algoritmos de reglas de asociación no se encuentran desde un comienzo en los formatos o estructuras necesarias, se procedió a implementar un paquete de pre-procesamiento. Este contiene una serie de scripts y métodos cuya función principal es extraer los datos desde sus fuentes originales, opcionalmente inferir aquella información que sea relevante, y guardarla en archivos cuyo formato sea comprensible para el paquete de aprendizaje de reglas de asociación.

En su implementación actual, este paquete se encuentra enfocado, en su mayor parte, para trabajar sobre datos extraídos a partir del Sloan Digital Sky Survey (SDSS).

A continuación se enumeran algunos de sus componentes más importantes.

Queries SQL

Una colección de queries relevantes para ejecutar en las bases de datos de SDSS y extraer los datos sobre los cuales obtener las reglas de asociación.

Módulo de procesamiento de tablas

Contiene una serie de scripts cuyo fin es recibir un archivo de tabla de base de datos en formato CSV y procesar los datos que contiene; por ejemplo, eliminando ciertas filas,

añadiendo columnas calculadas a partir de las ya existentes, entre otros. Los resultados son guardados en un nuevo archivo de tabla en formato CSV.

Módulo de generación de transacciones

Este módulo contiene scripts cuya función es recibir un archivo de tabla de base de datos en formato CSV, y a partir de él generar un archivo CSV que contenga una transacción por cada fila; cada una de estas con una lista de ítemes en formato adecuado para ser recibido por el paquete de ARL.

3.2. Diseño de clases

En la Figura se observa un diagrama con las clases más importantes dentro del paquete de Association Rule Learning y sus relaciones.

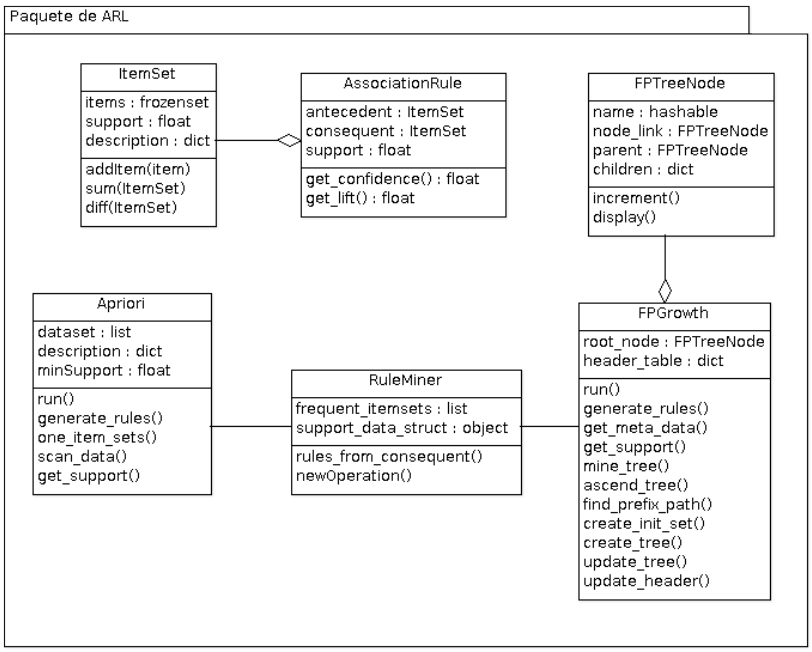


Figura 3.2: Diagrama de clases más importantes del paquete de ARL.

A continuación se detallan las clases de objetos más importantes del sistema.

3.2.1. Clase *ItemSet*

La clase *ItemSet* es la encargada de mantener información sobre un conjunto de ítemes y abstraer su estructura de datos subyacente. Cada instancia de esta clase corresponde a un conjunto de ítemes distinto, y contiene campos que guardan la información más reciente sobre su soporte (calculado sobre un cierto conjunto de transacciones) y punteros a meta-datos con información adicional sobre los ítemes en sí. Su interfaz asegura que se pueda realizar de forma adecuada, visto desde un punto de vista matemáticamente abstracto, las operaciones más comúnes de conjuntos de elementos; como comprobar pertenencia, sumar de conjuntos, diferencia entre conjuntos, entre otros.

3.2.2. Clase *AssociationRule*

La clase *AssociationRule* es la que define la estructura y comportamiento de las reglas de asociación. Cada instancia de esta clase corresponde a una regla de asociación en particular, extraída a partir de un cierto conjunto de datos. Cada regla de asociación consta de dos objetos de la clase *ItemSet*; uno para el antecedente y otro para el consecuente de la regla. Además contiene un campo que codifica su soporte, junto con métodos para calcular sus medidas de relevancia, tales como su confianza y lift.

3.2.3. Clase *FrequentItemSetMiner*

La clase *FrequentItemSetMiner* es la encargada de abstraer y guardar información sobre el proceso de extraer a partir de las transacciones aquellos conjuntos de ítemes que cumplan con un requisito de soporte mínimo dado. Cada instancia de esta clase corresponde a un proceso de estracción distinto, conteniendo campos y estructuras de datos para los algoritmos involucrados, su estado actual y su resultado.

En su implementación actual, esta clase es heredada por dos sub-clases. Una correspondiente al algoritmo *Apriori*, y otra al algoritmo *FP-Growth*. Cada una contiene su propia implementación de los métodos principales, definidos en su clase padre, junto con sus propias funciones auxiliares y estructuras de datos correspondientes.

3.2.4. Clase *RuleMiner*

La clase *RuleMiner* es la que abstrae el proceso de extraer reglas de asociación a partir de conjuntos frecuentes de ítemes. Cada instancia de esta clase corresponde a un proceso de extracción distinto; básicamente el mismo en todo los casos salvo en ciertos detalles, como algunas funciones auxiliares y referencias a estructuras de datos, dependiendo de si los conjuntos fueron extraídos mediante *Apriori* o *FP-Growth*.

3.3. Detalles de implementación

La implementación del sistema se llevó a cabo en el lenguaje de programación Python. Se realizó una implementación propia de los algoritmos antes descritos, con algunas adaptaciones para su funcionamiento correcto en el contexto de este proyecto; y se hizo uso de paquetes externos con el fin de hacer más simple el manejo de archivos CSV y la implementación de la interfaz por línea de comando.

3.3.1. Extracción de conjuntos de ítemes frecuentes

Para la extracción de conjuntos de ítemes frecuentes se procedió a realizar la implementación de los algoritmos *Apriori* y *FP-Growth*. Ambos algoritmos reciben las transacciones en una misma estructura de datos y retornan los conjuntos frecuentes también en una misma estructura en ambos casos. Pero cada una de estas clases posee sus propios métodos, definidos por los algoritmos en general.

En general, para ambos algoritmos la estructura de datos más utilizada para la implementación subyacente en los objetos correspondientes a conjuntos frecuentes, candidatos, antecedentes y consecuentes por igual, fue la de *frozensets*. Esta clase de objetos, además de permitir las operaciones matemáticas de conjuntos clásicas, tales como sumas y diferencias de conjuntos, permite que los objetos sean hasheables; y, por lo tanto, utilizar los conjuntos como llaves de diccionario en forma de tablas de hash, y de esta forma, por ejemplo, indexar por conjunto distintas estructuras de datos auxiliares.

3.3.2. Extracción de reglas de asociación

La extracción de reglas de asociación a partir de conjuntos frecuentes se llevó a cabo mediante una implementación del algoritmo *Apriori* de generación de reglas.

Entrada y salida

El paquete de *Association Rule Learning (ARL)* recibe como entrada un archivo de tabla en formato de valores separados por coma o *comma separated values (CSV)*. Este archivo debe tener el siguiente formato en cada una de sus filas

```
<TID>,"<ItemList>"
```

donde *<TID>* es el identificador de la presente transacción, e *<ItemList>* es una lista de identificadores únicos de los ítemes presentes en la transacción separados por comas. Tal como se indica, esta lista debe ir rodeada por comillas dobles en el archivo de entrada. A continuación se muestra un ejemplo de archivo de entrada válido.

```
000001,"15,2,44"
```

```
000002,"5,4,23,67,43,234"
000003,"66,3,53,23"
```

Adicionalmente, se puede especificar para cada transacción un tipo o clase a la que pertenece, o de la cual se origina, con el fin de realizar estadísticas pertinentes con las reglas generadas. De ser así, el archivo de entrada debe tener el siguiente formato en cada una de sus filas,

```
<TID>,<Class>,"<ItemList>"
```

donde, en esta ocasión, se añade en la segunda posición el campo *<Class>*, que consiste en una secuencia de caracteres válidos que identifique de manera unívoca la clase a la cual la transacción pertenece. A continuación un ejemplo de entrada válida en este formato.

```
000001,MORNING,"15,2,44"
000002,MORNING,"5,4,23,67,43,234"
000003,NIGHT,"66,3,53,23"
```

Esta lista es leída y procesada dentro del paquete de ARL y luego entregada en una estructura de datos correspondiente al algoritmo indicado, que obtendrá las reglas de asociación presentes en el conjunto de transacciones. Estas reglas, por defecto, serán retornadas en un archivo de texto en formato CSV con la siguiente estructura en cada una de sus líneas.

```
<N>,"<Antecedent>","<Consequent>",<Support>,<Confidence>,<Lift>
```

Donde *N* es un número identificador de la regla de asociación, *<Antecedent>* es una lista de ítemes separados por coma correspondientes al antecedente de la regla, *<Consequent>* es una lista de ítemes separados por coma correspondientes al consecuente de la regla, *<Support>* es un valor de punto flotante entre 0 y 1 correspondiente al soporte de la regla, *<Confidence>* es un valor de punto flotante entre 0 y 1 correspondiente a la confianza de la regla, y *<Lift>* es un valor de punto flotante entre 0 y 1 correspondiente al lift de la regla. A continuación un ejemplo de este formato de archivo de salida.

```
1,"15,33","2,89,91",0.21,0.85,2.31
2,"12,33,44","5,23,31",0.23,0.81,3.3
```

Si, además, en los datos de entrada se especificó una clase para cada transacción, entonces el archivo de salida tendrá el siguiente formato

```
<N>,"<Antecedent>","<Consequent>",<Support>,<Confidence>,<Lift>,"<ClassCount>"
```

en donde *<ClassCount>* es una lista de valores separados por comas con el siguiente formato

```
<Class01>:<Count01>,<Class02>:<Count02>,...
```

donde *<Class01>* es el identificador de la primera clase, *<Count01>* es un número entero que indica cuántas de las transacciones que satisfacen la regla actual pertenecen a esta primera clase, y así sucesivamente con todas las clases posibles. A continuación un ejemplo de archivo de salida con el formato recién descrito.

```
1,"15,33","2,89,91",0.21,0.85,2.31,"MORNING:210,NIGHT:15"
2,"12,33,44","5,23,31",0.23,0.81,3.3,"MORNING:20,NIGHT:91"
```

3.4. Interfaz de usuario

Capítulo 4

Validación de la Solución

4.1. Antecedentes de datos de prueba

Una vez lista la implementación de la mayor parte del sistema y los algoritmos de ARL, se procedió a realizar una prueba de concepto con datos reales. El objetivo final del sistema de ARL es poder ser aplicado a datos de líneas espectrales de diversos orígenes y características; sobre todo en observaciones sobre bandas de baja frecuencia, donde una mayor densidad de presencia de líneas hace más difícil el trabajar directamente sobre ellas, como suele ser el caso en bandas de frecuencia más alta.

Sin embargo, se decidió realizar la prueba de concepto de este proyecto sobre datos del *Sloan Digital Sky Survey (SDSS)* por las siguientes razones:

1. Si bien el universo de líneas presentes en cada espectro es bastante reducido (48 líneas), la mayoría de estas se encuentran bien identificadas.
2. Las líneas presentes en el espectro óptico son bien conocidas, y en general se posee información completa sobre sus características, tales como su temperatura.

Ahora bien, hubo que tener en mente de forma constante que se está trabajando con un universo reducido de ítemes (líneas espectrales) al momento de analizar los resultados de estas pruebas.

Para acceder a los datos de *SDSS* se utilizó la interfaz web del sistema *CasJobs*, que recibe consultas en lenguaje SQL y guarda los resultados en una base de datos asociada a la cuenta del usuario. En particular se hizo uso de los datos del *data release 7 (DR7)*, que es el último en contener tablas con información específica sobre las líneas espectrales.

En particular, se utilizó dos tablas pertenecientes al DR7: *SpecObj* y *SpecLineAll*.

La tabla *SpecObj* contiene información de los objetos astronómicos sobre los cuales se ha realizado mediciones espectroscópicas. De esta tabla se extrayeron los siguientes campos:

- **specObjID**: Identificador del objeto astronómico.

- **zStatus**: Flag que indica el método mediante el cual se calculó el *redshift* del objeto.
- **objTypeName**: El tipo de objeto (e.g. galaxia, estrella, quasar), determinado mediante imágenes.
- **specClass**: El tipo de objeto, determinado mediante su espectro.
- **mag_0**. **mag_1** y **mag_2**: Magnitud de emisión en tres frecuencias distintas.
- **z**: *Redshift* del objeto.
- **zErr**: Error de *Redshift* del objeto.

A su vez, la tabla *SpecLineAll* contiene información sobre cada una de las líneas presentes en cada uno de estos objetos. De esta tabla se extrayeron los campos:

- **SpecLineID**: Código identificador único de línea espectral.
- **wave**: Posición central de la línea espectral observada, en longitud de onda (Armstrongs), dentro del espectro.
- **waveErr**: Error en la posición central de la línea espectral.
- **restWave**: Posición central de la línea espectral teórica o medida en laboratorio.
- **lineID**: Identificador de línea espectral (identifica una línea de una especie en particular).
- **category**: 1 si la línea se detectó mediante el uso de ajuste de modelos luego de aplicar un filtro (o *transformada wavelet*) con el fin de determinar el *redshift* de las líneas de emisión y 2 si la línea se detectó una vez que el objeto fue clasificado y su *redshift* determinado.
- **height**: Altura de la función gaussiana ajustada a la línea.
- **heightErr**: Error de la función gaussiana ajustada a la línea.
- **ew**: Ancho equivalente de la línea (una medida de su intensidad).
- **ewErr**: Error del ancho equivalente.
- **z**: *Redshift* de la línea.
- **zErr**: Error de *redshift*.

Ahora bien, la tabla *SpecObj* del DR7 de SDSS posee en total de 1053144 filas. Esto indica que aquel *data release* contiene información espectroscópica de más de un millón de objetos. Cabe recalcar que el caso general del sistema de ARL aplicado a lineas espectrales asume que cada transacción corresponde a una observación o lectura de un espectro de frecuencias; y, por tanto, varios espectros pueden estar asociados a un mismo objeto astronómico. Sin embargo, dado que para el caso de los datos de SDSS puede que las líneas pertenecientes a cada objeto se hayan obtenido en diversas observaciones, se tomará cada **objeto** como una transacción, y no la observación particular de un objeto.

Por lo tanto al hacer una operación *JOIN* entre las tablas *SpecObj* y *SpecLineAll*, se obtendrá la lista de todas las líneas espectrales con información del objeto astronómico del cual provienen. La idea es, entonces, utilizar cada uno de los objetos como una transacción, y las líneas asociadas a cada uno de ellos como sus ítems. Se utilizará el campo *lineID* de la tabla *SpecLineAll* como identificador de cada uno de estos ítemes; dado que dos líneas asociados a distintos objetos pueden tener el mismo valor en *lineID*, cosa que no ocurre con el identificador único **SpecLineID**.

En efecto, existe en el DR7 una tabla llamada *SpecLineNames* que enumera los 49 valores que puede tomar el campo *lineID*. Cada uno de estos corresponde a una línea de una especie en particular. Algunos de estos valores son:

Valor	**Nombre**
1857	AlIII_1857
8500	CaII_8500
8544	CaII_8544
8665	CaII_8665
1335	CII_1335
2326	CII_2326
...	...

A continuación se numeran los objetos de la tabla *SpecObj* según el tipo de objeto determinado mediante su espectro (campo *specClass*).

specClass	**Tipo de objeto**	**Número de objetos**
0	Desconocido	11566
1	Estrella	85564
2	Galaxia	807118
3	Cuasi-estelar (*quasar*)	94994
4	*Quasar* de alto *redshift*	7584
6	Estrella tardía	46318

4.2. Selección y pre-procesamiento de datos

Para fines de esta prueba de concepto y validación del sistema se escogió realizar la extracción de reglas de asociación a partir de objetos de tipo estelar (*specClass* 1 o 6), principalmente debido a que para objetos de este tipo el *redshift* del objeto en general debería ser más coherente que el *redshift* detectado por línea o espectro que en el caso de, por ejemplo, objetos de tipo galáctico.

En total, existen 52570585 líneas asociadas a los 131882 objetos de tipo estelar presentes en el *data release 7*. Esto supone un claro problema técnico, dado que el sistema *CasJobs* no permite descargar tablas de tal envergadura. Por lo tanto, debe realizarse un proceso de selección lo más sistemático posible.

En primer lugar, se consideró el conjunto de 131882 objetos de tipo estelar. En la Figura 4.1 se puede apreciar una selección del histograma del *redshift* de estos objetos. Se puede apreciar que la mayoría de los objetos se encuentran cercanos a 0 y unos pocos se encuentran distribuidos en valores mayores. Se decidió por tanto, eliminar estos objetos de mayor *redshift* (y por tanto más lejanos) con el fin de trabajar sólo con aquellos objetos más cercanos. Se decidió por utilizar solo los objetos que tengan un *redshift* menor que 0.002.

Ahora bien, con el fin de reducir de forma más considerable el número de líneas a analizar, se decidió filtrar estas y dejar sólo las más brillantes. Para esto, se utilizó los valores de

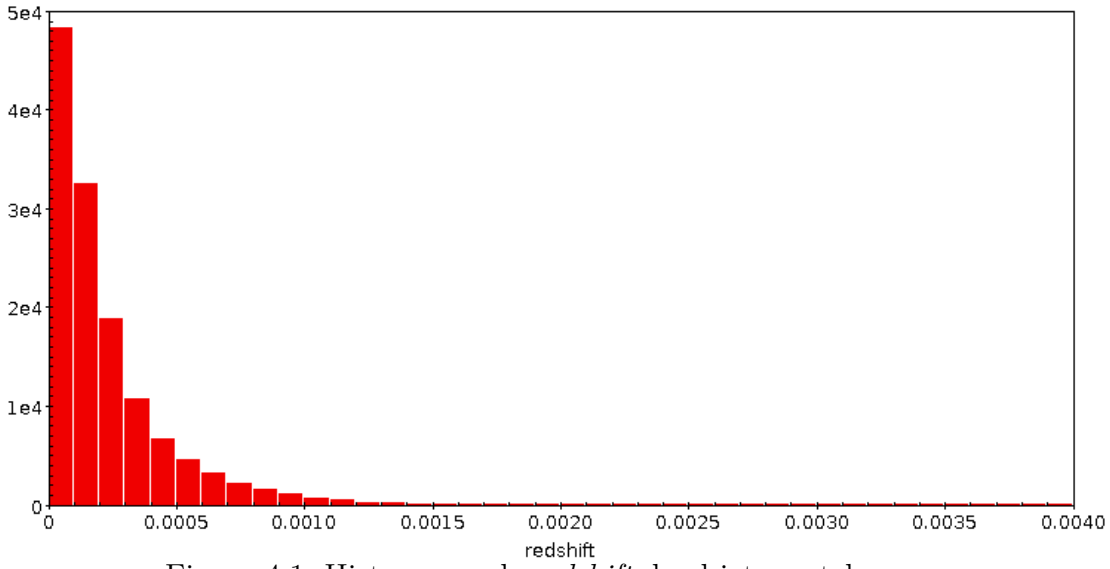


Figura 4.1: Histograma de *redshift* de objetos estelares.

ancho equivalente (ew) de cada una de las líneas, y se calculó una nueva medida a la que se denominó *razón señal a ruido (SNR)* que consiste en la razón entre el ancho equivalente y su error (*ewErr*). Para comprobar si este valor es un filtro efectivo del número de líneas, se tomo una muestra de 1 millón de líneas del total asociado a objetos estelares, y se produjo el histograma acumulativo de la Figura . Observando esta figura, se puede apreciar que, en efecto, esta nueva medida introducida es un parámetro efectivo de selección de líneas (cerca del 20 % de las líneas de la muestra tiene un SNR mayor que 5).

Seleccionando, del total de líneas asociadas a objetos estelares, aquellas que estén asociadas a objetos con redshift menor que 0.002 y que tengan un *SNR* mayor que 5, se obtiene un total de 1189817 líneas asociadas a 120250 objetos estelares.

Sin embargo, algunas de estas líneas no poseen un identificador *lineID* y otras que sí lo poseen se encuentran mal identificadas. La razón de por qué ocurre esto se muestra en la Figura . Como ahí se puede apreciar, existe un gran número de líneas cuyo *redshift* (indicado por el campo **z** de la tabla *SpecLineAll*) tiene como valor -9999. Esto no tiene sentido alguno desde el punto de vista físico, e indica sencillamente un valor nulo o inexistente.

Incluso en muchas las 979173 líneas que resultan de filtrar aquellas que poseen valores nulos de *redshift*, este valor aún así no concuerda con el *redshift* del objeto; tomando el *redshift* de la línea valores que llegan hasta 5, cuando el del objeto correspondiente se encuentra mucho más cercano a 0, como se observa en la Figura

Dado que el identificador de línea *lineID* corresponde a una aproximación del la posición central de la línea espectral teórica o medida en laboratorio en Armstrongs (campo *restWave* de la tabla *specLineAll*) al entero más cercano, y que este último valor se calcula a partir de la posición central observada (campo *wave*) y el *redshift* de la línea (campo z), se entiende que si el valor de *redshift* no es el correcto, entonces finalmente el identificador de línea tampoco lo será.

Por eso, como parte del pre-procesamiento de los datos se prefirió, para aquellas líneas

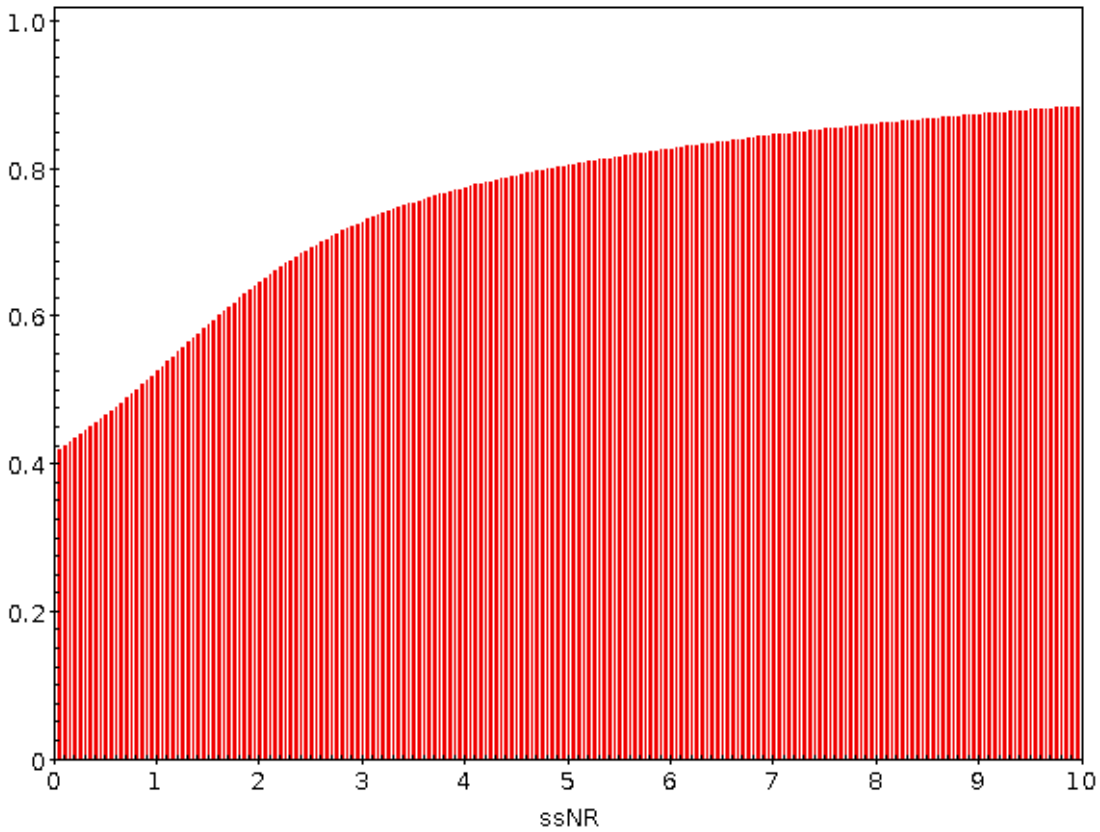


Figura 4.2: Histograma acumulativo de líneas asociadas a objetos estelares por su *SNR*.

con *lineID* inexistente o *redshift* erróneo, volver a calcular un *restWave* a partir del *wave* utilizando el *redshift* del objeto en vez del de la línea; y de ahí asignarle un nuevo *lineID* resultante de aproximar el *restWave* al entero más cercano. El cálculo del *wave* de la línea a partir de su *restWave* y el *redshift* del objeto se llevó a cabo mediante la fórmula

$$\lambda_{restWave} = \frac{\lambda_{wave}}{1 + z_{obj}}$$

donde $\lambda_{restWave}$ corresponde al campo *restWave* de la línea, λ_{wave} a su *wave* y z_{obj} al *redshift* del objeto.

4.3. Resultados

Al aplicar a los datos anteriores ya procesados el algoritmo de ARL, con un soporte mínimo de 0.15 y confianza mínima de 0.7, se produjo un total de 5181 reglas, generadas a partir de 576 conjuntos de ítemes frecuentes. Las 25 reglas con mayor soporte se muestran en la siguiente tabla.

N	Rule	Supp	Conf	Lift
1	$\{ 4863(Hb\_4863) \} \Rightarrow \{ 6565(Ha\_6565) \}$	0.41	0.90	1.69
2	$\{ 6565(Ha\_6565) \} \Rightarrow \{ 4863(Hb\_4863) \}$	0.41	0.77	1.69

3	$\{ 4863(Hb\_4863) \} \Rightarrow \{ 4342(Hg\_4342) \}$	0.40	0.87	2.03
4	$\{ 4342(Hg\_4342) \} \Rightarrow \{ 4863(Hb\_4863) \}$	0.40	0.93	2.03
5	$\{ 4863(Hb\_4863) \} \Rightarrow \{ 3970(H\_3970) \}$	0.39	0.84	1.81
6	$\{ 3970(H\_3970) \} \Rightarrow \{ 4863(Hb\_4863) \}$	0.39	0.83	1.81
7	$\{ 4342(Hg\_4342) \} \Rightarrow \{ 3970(H\_3970) \}$	0.37	0.87	1.88
8	$\{ 3970(H\_3970) \} \Rightarrow \{ 4342(Hg\_4342) \}$	0.37	0.80	1.88
9	$\{ 3970(H\_3970) \} \Rightarrow \{ 6565(Ha\_6565) \}$	0.37	0.79	1.49
10	$\{ 4342(Hg\_4342) \} \Rightarrow \{ 6565(Ha\_6565) \}$	0.37	0.86	1.61
11	$\{ 4103(H\mathrm{d}\_4103) \} \Rightarrow \{ 4342(Hg\_4342) \}$	0.37	0.94	2.19
12	$\{ 4342(Hg\_4342) \} \Rightarrow \{ 4103(H\mathrm{d}\_4103) \}$	0.37	0.86	2.19
13	$\{ 4103(H\mathrm{d}\_4103) \} \Rightarrow \{ 3970(H\_3970) \}$	0.36	0.92	1.99
14	$\{ 3970(H\_3970) \} \Rightarrow \{ 4103(H\mathrm{d}\_4103) \}$	0.36	0.78	1.99
15	$\{ 4863(Hb\_4863) \} \Rightarrow \{ 4342(Hg\_4342), 6565(Ha\_6565) \}$	0.36	0.79	2.14
16	$\{ 4342(Hg\_4342) \} \Rightarrow \{ 4863(Hb\_4863), 6565(Ha\_6565) \}$	0.36	0.84	2.04
17	$\{ 4342(Hg\_4342) \} \Rightarrow \{ 3970(H\_3970), 4863(Hb\_4863) \}$	0.35	0.83	2.15
18	$\{ 4863(Hb\_4863) \} \Rightarrow \{ 3970(H\_3970), 4342(Hg\_4342) \}$	0.35	0.77	2.07
19	$\{ 3970(H\_3970) \} \Rightarrow \{ 4342(Hg\_4342), 4863(Hb\_4863) \}$	0.35	0.76	1.92
20	$\{ 4863(Hb\_4863) \} \Rightarrow \{ 4103(H\mathrm{d}\_4103) \}$	0.35	0.77	1.97
21	$\{ 4103(H\mathrm{d}\_4103) \} \Rightarrow \{ 4863(Hb\_4863) \}$	0.35	0.90	1.97
22	$\{ 4863(Hb\_4863) \} \Rightarrow \{ 3970(H\_3970), 6565(Ha\_6565) \}$	0.35	0.76	2.07
23	$\{ 3970(H\_3970) \} \Rightarrow \{ 4863(Hb\_4863), 6565(Ha\_6565) \}$	0.35	0.75	1.83
24	$\{ 4342(Hg\_4342) \} \Rightarrow \{ 4103(H\mathrm{d}\_4103), 4863(Hb\_4863) \}$	0.35	0.81	2.29
25	$\{ 4103(H\mathrm{d}\_4103) \} \Rightarrow \{ 4342(Hg\_4342), 4863(Hb\_4863) \}$	0.35	0.88	2.23

Como es de esperarse, las reglas con más soporte poseen pocos elementos tanto en su antecedente como en su consecuente. Los valores tanto de confianza como de *lift* observados dentro de este conjunto muestran que las líneas con alto soporte tienden a aparecer juntas en la mayoría de las ocasiones, y que, en general, tanto el antecedente como el consecuente muestran una alta dependencia entre sí.

A continuación se muestra una tabla con las 25 reglas de mayor confianza.

N	**Rule**	**Supp**	**Conf**	**Lift**

1	$\left\{\begin{array}{c} 3836(Oy\_3836) \\ 3889(HeI\_3889) \\ 3935(K\_3935) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.19	1.00	2.59
2	$\left\{\begin{array}{c} 3836(Oy\_3836) \\ 3889(HeI\_3889) \\ 3935(K\_3935) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.19	1.00	2.59
3	$\left\{\begin{array}{c} 3836(Oy\_3836) \\ 3889(HeI\_3889) \\ 3935(K\_3935) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.20	1.00	2.59
4	$\left\{\begin{array}{c} 3889(HeI\_3889) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 4306(G\_4306) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.15	1.00	2.59
5	$\left\{\begin{array}{c} 3836(Oy\_3836) \\ 3889(HeI\_3889) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.22	1.00	2.59
6	$\left\{\begin{array}{c} 3889(HeI\_3889) \\ 3935(K\_3935) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.20	1.00	2.59
7	$\left\{\begin{array}{c} 3889(HeI\_3889) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 4306(G\_4306) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.15	1.00	2.59
8	$\left\{\begin{array}{c} 3836(Oy\_3836) \\ 3935(K\_3935) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.20	1.00	2.59
9	$\left\{\begin{array}{c} 3935(K\_3935) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 4306(G\_4306) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.15	1.00	2.59

10	$\left\{\begin{array}{c} 3836(Oy\_3836) \\ 3889(HeI\_3889) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.22	1.00	2.59
11	$\left\{\begin{array}{c} 3836(Oy\_3836) \\ 3889(HeI\_3889) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.22	1.00	2.59
12	$\left\{\begin{array}{c} 3836(Oy\_3836) \\ 3889(HeI\_3889) \\ 3935(K\_3935) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.20	1.00	2.59
13	$\left\{\begin{array}{c} 3836(Oy\_3836) \\ 3935(K\_3935) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.20	1.00	2.59
14	$\left\{\begin{array}{c} 3889(HeI\_3889) \\ 4306(G\_4306) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.16	1.00	2.59
15	$\left\{\begin{array}{c} 3836(Oy\_3836) \\ 3935(K\_3935) \\ 4306(G\_4306) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.15	1.00	2.59
16	$\left\{\begin{array}{c} 3889(HeI\_3889) \\ 3935(K\_3935) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.20	1.00	2.59
17	$\left\{\begin{array}{c} 3889(HeI\_3889) \\ 3935(K\_3935) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.21	1.00	2.59
18	$\left\{\begin{array}{c} 3836(Oy\_3836) \\ 3935(K\_3935) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.21	1.00	2.59
19	$\left\{\begin{array}{c} 3836(Oy\_3836) \\ 4306(G\_4306) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.16	1.00	2.59
20	$\left\{\begin{array}{c} 3836(Oy\_3836) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.23	1.00	2.59

21	$\left\{\begin{array}{c} 3836(Oy\_3836) \\ 3889(HeI\_3889) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.23	1.00	2.59
22	$\left\{\begin{array}{c} 3935(K\_3935) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 4306(G\_4306) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.16	1.00	2.59
23	$\left\{\begin{array}{c} 3889(HeI\_3889) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.24	1.00	2.58
24	$\left\{\begin{array}{c} 3836(Oy\_3836) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.23	1.00	2.58
25	$\left\{\begin{array}{c} 3935(K\_3935) \\ 4103(Hd\_4103) \\ 4342(Hg\_4342) \\ 6565(Ha\_6565) \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{c} 3970(H\_3970) \\ 4863(Hb\_4863) \end{array}\right\}$	0.23	1.00	2.58

4.4. Observaciones y conclusiones

Una vez observados estos resultados obtenidos a partir de espectros de la selección de objetos estelares del SDSS se pueden extraer las siguientes conclusiones.

Al seleccionar reglas con alto soporte se privilegia aquellas con líneas espectrales comunes a una gran cantidad de espectros. En particular, la mayor parte de las reglas son entre líneas del hidrógeno, que es el elemento más abundante en las estrellas y además tiene una serie de líneas espectrales en el óptico. Existen pocas líneas de otros elementos presentes en estas reglas de alta confianza, como por ejemplo la línea H del calcio. Claramente estas se detectan en una gran cantidad de las estrellas con líneas brillantes del hidrógeno.

Además, se observa que al reducir el soporte y seleccionar por confianza, se encuentran conjuntos de líneas altamente correlacionados, pero presentes en una menor fracción del conjunto total de espectros. Por ejemplo, las líneas O, H_{e}, G y K aparecen, y están muy correlacionadas con las líneas H_a, H_b y H, entre otras.

En síntesis, puede decirse que es preferible, con el fin de no encontrar solo relaciones triviales o comúnes en demasía, buscar reglas por alta confianza y bajo soporte.

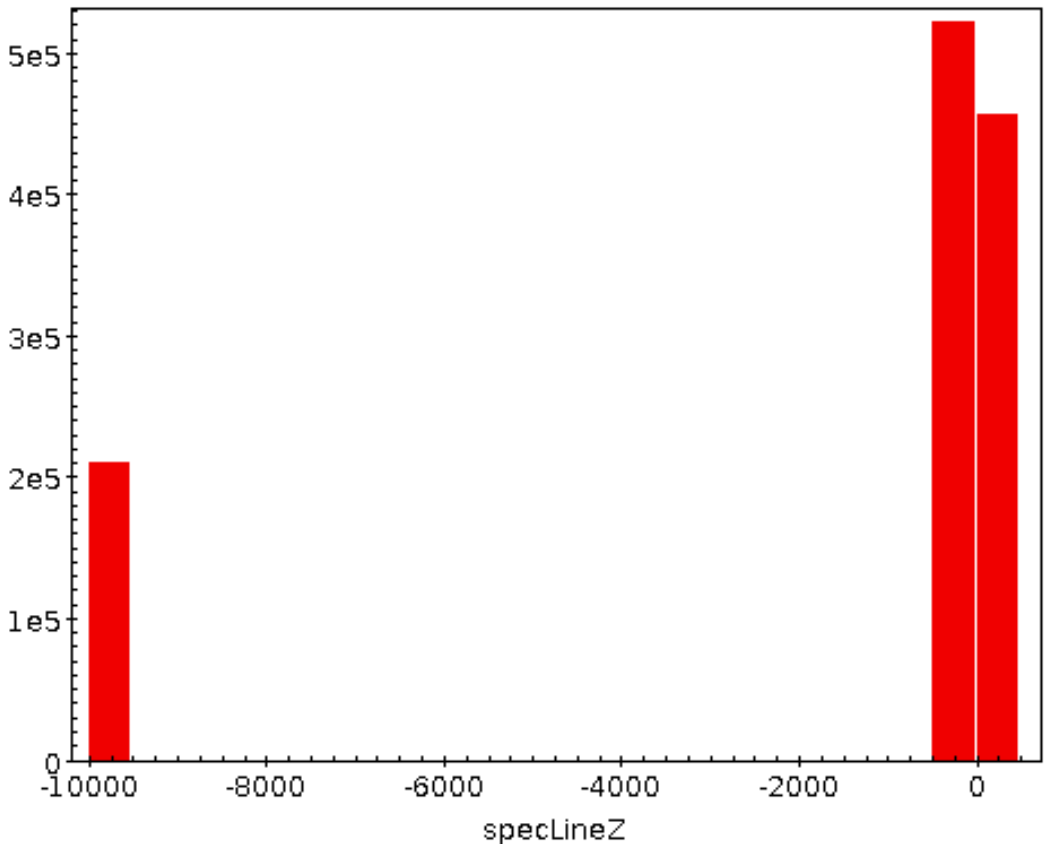


Figura 4.3: Histograma de *redshift* de las líneas espectrales seleccionadas.

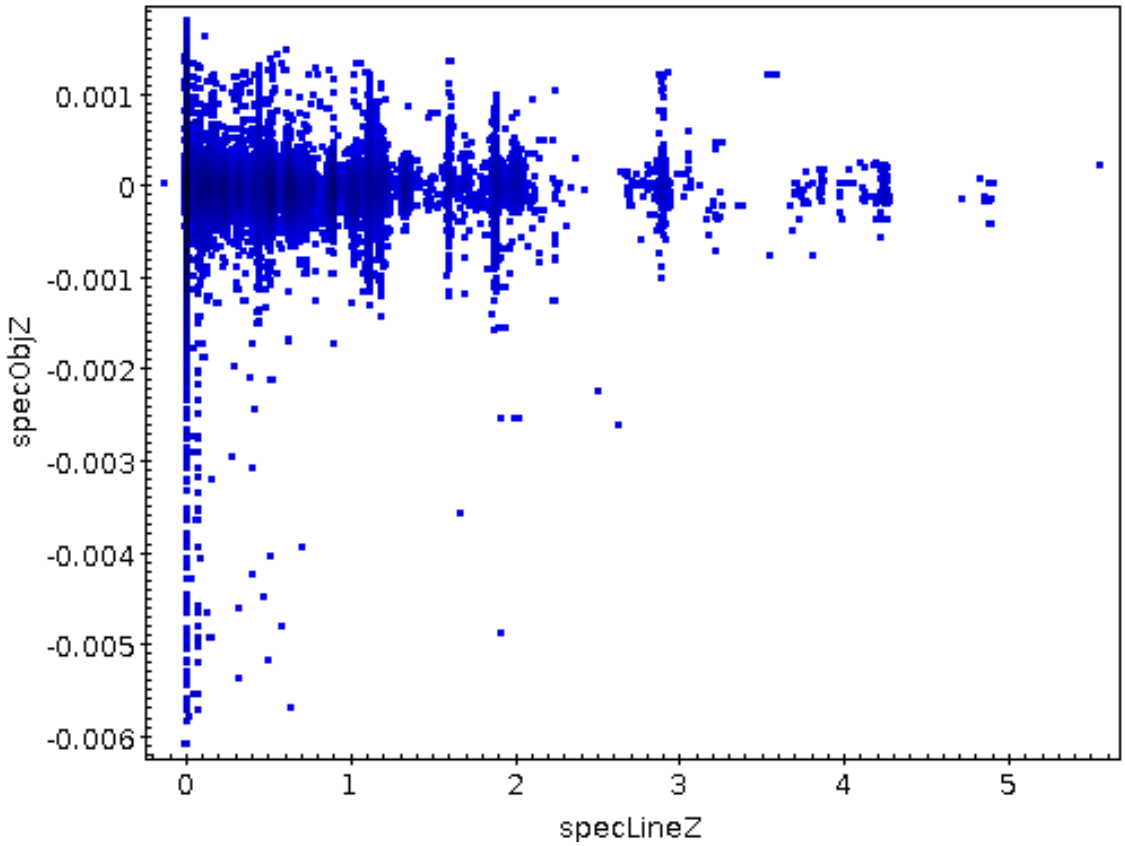


Figura 4.4: Gráfico de *redshift* de las líneas espectrales seleccionadas vs el del objeto al que pertenecen.

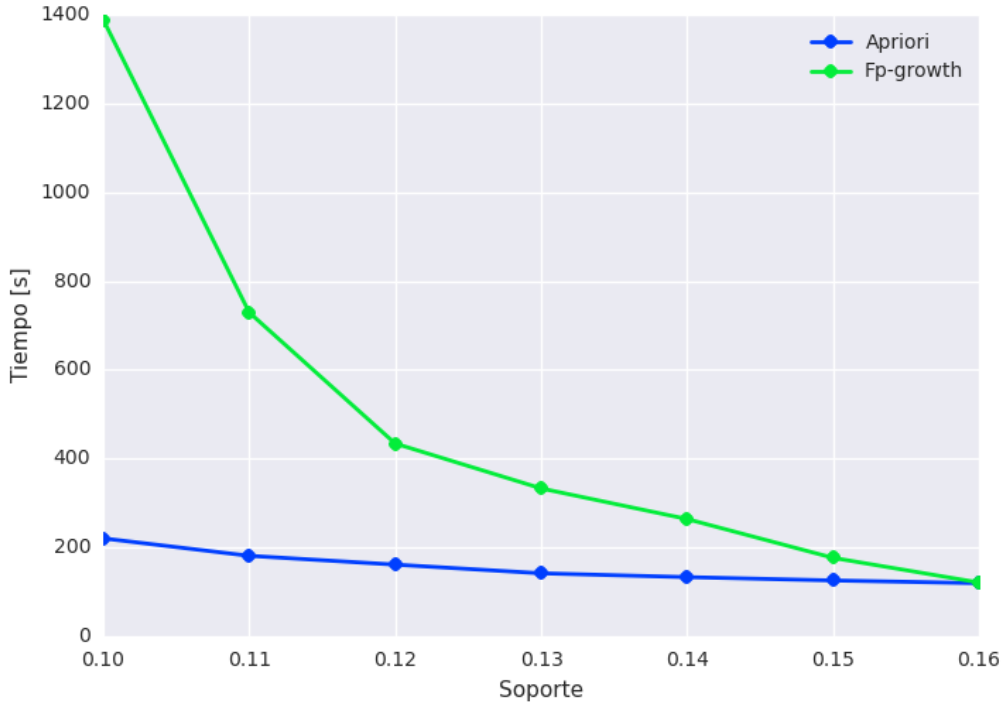


Figura 4.5: Grafico de tiempos de ejecución de algoritmos *Apriori* y *FP-Growth* para distintas medidas de soporte

Conclusión

Breve resumen del trabajo realizado

Recuento de objetivos alcanzados y no alcanzados

Análisis crítico de por qué los resultados fueron los reportados

Reflexión acerca de la relevancia / impacto del trabajo realizado

Lecciones aprendidas

Posibles trabajos futuros que podrían hacerse a partir de la memoria para mejorar aún más la solución

Bibliografía

[1] Atacama large millimeter/submillimeter array (alma). `http://www.almaobservatory.org`, 2014. online, accesed July 2014.

[2] matplotlib: python plotting. `http://www.matplotlib.org`, 2014. online, accesed July 2014.

[3] Numpy – numpy. `http://www.sdss.org`, 2014. online, accesed July 2014.

[4] Welcome to python.org. `http://www.python.org`, 2014. online, accesed July 2014.

[5] Rakesh Agrawal, Tomasz Imieliński, and Arun Swami. Mining association rules between sets of items in large databases. In *ACM SIGMOD Record*, volume 22, pages 207–216. ACM, 1993.

[6] Rakesh Agrawal and Ramakrishnan Srikant. Mining sequential patterns. In *Data Engineering, 1995. Proceedings of the Eleventh International Conference on*, pages 3–14. IEEE, 1995.

[7] Rakesh Agrawal, Ramakrishnan Srikant, et al. Fast algorithms for mining association rules. In *Proc. 20th int. conf. very large data bases, VLDB*, volume 1215, pages 487–499, 1994.

[8] Ferenc Bodon. A fast apriori implementation. In *Proceedings of the IEEE ICDM workshop on frequent itemset mining implementations (FIMI'03)*, volume 90, 2010.

[9] Sergey Brin, Rajeev Motwani, and Craig Silverstein. Beyond market baskets: Generalizing association rules to correlations. In *ACM SIGMOD Record*, volume 26, pages 265–276. ACM, 1997.

[10] Sergey Brin, Rajeev Motwani, Jeffrey D Ullman, and Shalom Tsur. Dynamic itemset counting and implication rules for market basket data. In *ACM SIGMOD Record*, volume 26, pages 255–264. ACM, 1997.

[11] Chun Hing Cai, Ada Wai-Chee Fu, CH Cheng, and WW Kwong. Mining association rules with weighted items. In *Database Engineering and Applications Symposium, 1998. Proceedings. IDEAS'98. International*, pages 68–77. IEEE, 1998.

[12] Pedro Carmona-Saez, Monica Chagoyen, Francisco Tirado, Jose M Carazo, and Alberto

Pascual-Montano. Genecodis: a web-based tool for finding significant concurrent annotations in gene lists. *Genome biology*, 8(1):R3, 2007.

[13] Varun Chandola, Arindam Banerjee, and Vipin Kumar. Anomaly detection: A survey. *ACM Computing Surveys (CSUR)*, 41(3):15, 2009.

[14] R Chaves, JM Górriz, J Ramírez, IA Illán, D Salas-Gonzalez, and M Gómez-Río. Efficient mining of association rules for the early diagnosis of alzheimer's disease. *Physics in medicine and biology*, 56(18):6047, 2011.

[15] Edith Cohen, Amos Fiat, and Haim Kaplan. Associative search in peer to peer networks: Harnessing latent semantics. *Computer Networks*, 51(8):1861–1881, 2007.

[16] James Davidson, Benjamin Liebald, Junning Liu, Palash Nandy, Taylor Van Vleet, Ullas Gargi, Sujoy Gupta, Yu He, Mike Lambert, Blake Livingston, et al. The youtube video recommendation system. In *Proceedings of the fourth ACM conference on Recommender systems*, pages 293–296. ACM, 2010.

[17] Luc Dehaspe, Hannu Toivonen, and Ross D King. Finding frequent substructures in chemical compounds. In *KDD*, volume 98, page 1998, 1998.

[18] Cristian Estan, Stefan Savage, and George Varghese. Automatically inferring patterns of resource consumption in network traffic. In *Proceedings of the 2003 conference on Applications, technologies, architectures, and protocols for computer communications*, pages 137–148. ACM, 2003.

[19] Alexandre Evfimievski, Ramakrishnan Srikant, Rakesh Agrawal, and Johannes Gehrke. Privacy preserving mining of association rules. *Information Systems*, 29(4):343–364, 2004.

[20] Paolo Ferragina and Antonio Gulli. A personalized search engine based on web-snippet hierarchical clustering. *Software: Practice and Experience*, 38(2):189–225, 2008.

[21] Gabriel Ghinita, Panos Kalnis, Ali Khoshgozaran, Cyrus Shahabi, and Kian-Lee Tan. Private queries in location based services: anonymizers are not necessary. In *Proceedings of the 2008 ACM SIGMOD international conference on Management of data*, pages 121–132. ACM, 2008.

[22] Jiawei Han, Hong Cheng, Dong Xin, and Xifeng Yan. Frequent pattern mining: current status and future directions. *Data Mining and Knowledge Discovery*, 15(1):55–86, 2007.

[23] Jiawei Han, Jian Pei, Yiwen Yin, and Runying Mao. Mining frequent patterns without candidate generation: A frequent-pattern tree approach. *Data mining and knowledge discovery*, 8(1):53–87, 2004.

[24] Farkhund Iqbal, Hamad Binsalleeh, Benjamin Fung, and Mourad Debbabi. A unified data mining solution for authorship analysis in anonymous textual communications. *Information Sciences*, 231:98–112, 2013.

[25] Murat Karabatak and M Cevdet Ince. An expert system for detection of breast cancer based on association rules and neural network. *Expert Systems with Applications*, 36(2):3465–3469, 2009.

[26] Georgi Kobilarov, Tom Scott, Yves Raimond, Silver Oliver, Chris Sizemore, Michael Smethurst, Christian Bizer, and Robert Lee. Media meets semantic web–how the bbc uses dbpedia and linked data to make connections. In *The semantic web: research and applications*, pages 723–737. Springer, 2009.

[27] Stefan Kramer, Luc De Raedt, and Christoph Helma. Molecular feature mining in hiv data. In *Proceedings of the seventh ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining*, pages 136–143. ACM, 2001.

[28] Wenke Lee and Salvatore J Stolfo. A framework for constructing features and models for intrusion detection systems. *ACM transactions on Information and system security (TiSSEC)*, 3(4):227–261, 2000.

[29] Xin Li, Lei Guo, and Yihong Eric Zhao. Tag-based social interest discovery. In *Proceedings of the 17th international conference on World Wide Web*, pages 675–684. ACM, 2008.

[30] Jong Soo Park, Ming-Syan Chen, and Philip S Yu. *An effective hash-based algorithm for mining association rules*, volume 24. ACM, 1995.

[31] Animesh Patcha and Jung-Min Park. An overview of anomaly detection techniques: Existing solutions and latest technological trends. *Computer Networks*, 51(12):3448–3470, 2007.

[32] Anthony J Remijan and Andrew J Markwick-Kemper. Splatalogue: Database for astronomical spectroscopy. 2008.

[33] Cristóbal Romero and Sebastian Ventura. Educational data mining: A survey from 1995 to 2005. *Expert Systems with Applications*, 33(1):135–146, 2007.

[34] Cristóbal Romero, Sebastián Ventura, and Enrique García. Data mining in course management systems: Moodle case study and tutorial. *Computers & Education*, 51(1):368–384, 2008.

[35] Ashok Savasere, Edward Robert Omiecinski, and Shamkant B Navathe. An efficient algorithm for mining association rules in large databases. 1995.

[36] Petr Škoda and Jaroslav Vážnỳ. Searching of new emission-line stars using the astroinformatics approach. *arXiv preprint arXiv:1112.2775*, 2011.

[37] Ramakrishnan Srikant and Rakesh Agrawal. Mining generalized association rules. In *VLDB*, volume 95, pages 407–419, 1995.

[38] Ramakrishnan Srikant and Rakesh Agrawal. Mining quantitative association rules in large relational tables. In *ACM SIGMOD Record*, volume 25, pages 1–12. ACM, 1996.

[39] Wei Wang, Jiong Yang, and Philip S Yu. Efficient mining of weighted association rules (war). In *Proceedings of the sixth ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining*, pages 270–274. ACM, 2000.

[40] Alwyn Wootten and A Richard Thompson. The atacama large millimeter/submillimeter array. *Proceedings of the IEEE*, 97(8):1463–1471, 2009.

[41] Donald G York, J Adelman, John E Anderson Jr, Scott F Anderson, James Annis, Neta A Bahcall, JA Bakken, Robert Barkhouser, Steven Bastian, Eileen Berman, et al. The sloan digital sky survey: Technical summary. *The Astronomical Journal*, 120(3):1579, 2000.

[42] Mohammed Javeed Zaki and Mitsunori Ogihara. Theoretical foundations of association rules. In *3rd ACM SIGMOD Workshop on Research Issues in Data Mining and Knowledge Discovery*, pages 71–78. Citeseer, 1998.