

Spis treści

| | |
|---|-----------|
| 1. Wstęp | 3 |
| 2. Odległości na przestrzeni ciągów znaków | 5 |
| 2.1. Podstawowe definicje | 5 |
| 2.2. Odległości na przestrzeni ciągów znaków | 6 |
| 2.2.1. Odległości oparte na operacjach edycyjnych | 7 |
| 2.2.2. Odległości oparte na q -gramach | 17 |
| 2.2.3. Miary heurystyczne | 20 |
| 3. Analiza skupień metodą k-średnich | 23 |
| 3.1. Metoda k -średnich | 23 |
| 3.2. Algorytmy k -średnich | 24 |
| 3.2.1. Algorytm wsadowy | 24 |
| 3.2.2. Algorytmy oparte na metodach najszybszego spadku | 25 |
| 3.3. Metody hierarchiczne | 28 |
| 3.4. Metody oceny jakości podziału na skupienia | 31 |
| 3.4.1. [TO DO] Indeks Fowlkesa-Mallowsa | 31 |
| 3.4.2. Jednorodność, zupełność oraz miara V | 32 |
| 3.4.3. Miara silhouettes | 35 |
| 4. Kategoryzacja tematyczna tekstów przy użyciu metryk w przestrzeni ciągów znaków | 37 |
| 4.1. Opis danych | 38 |
| 4.2. Wstępne przetwarzanie danych | 38 |
| 4.3. Utworzenie skupień „podobnych” słów / Jakiś mądry tytuł | 43 |
| 4.4. Podział tekstów | 47 |
| 4.5. Analiza wyników | 48 |
| 4.6. Szczegółowe wyniki | 52 |
| Literatura | 53 |

Rozdział 1

Wstęp

Informacje zawarte w danych tekstowych są zazwyczaj o wiele bardziej szczegółowe i istotne niż w innych rodzajach danych. Z drugiej strony ilość tekstów rośnie w bardzo szybkim tempie, przez co niemożliwe jest kontrolowanie ich jakości (np. w internecie). Dane tego typu są trudne w analizie z powodu ich objętości, różnorodności oraz podatności na błędy. Stąd, aby wydobyć z nich informacje, zachodzi potrzeba przetworzenia danych tak, żeby uwzględnić powyższe czynniki.

Dane tekstowe mają bardzo duży wymiar równy liczbie unikalnych słów w nich zawartych. Analiza zbioru wielowymiarowego, gdzie liczba atrybutów jest liczona w dziesiątkach tysięcy, jest często wysoce nieskuteczna (tzw. klątwa wielowymiarowości), a czasem wręcz niemożliwa z powodu braku zasobów pamięciowych i obliczeniowych. Rodzi się więc potrzeba zmniejszenia wymiaru danych. Często stosowaną praktyką jest grupowanie słów w jakimś sensie do siebie podobnych. Można to robić na kilka sposobów. Przede wszystkim można oprzeć się na założeniu, że fleksja danego słowa jest nieistotna, tzn. ważne jest znaczenie wyrazu, a nie jego odmiana. Stąd często stosowanym elementem analizy danych tekstowych jest stemming, czyli sprowadzenie słowa do jego rdzenia. Aby tego dokonać trzeba mieć słownik słów wraz z ich odmianami. Rzadko jednak zawiera on wszystkie możliwe wyrazy, zwłaszcza gdy liczba możliwych odmian jest bardzo duża (jak np. w języku polskim). Co więcej, słownik nie zawiera w sobie słów z błędami w pisowni i literówkami, które mogą występować w tekstach. Coraz częściej też przedmiotem analizy są nieformalne teksty lub krótkie wiadomości, w których piszący nie użył znaków diakrytycznych.

Zachodzi zatem potrzeba radzenia sobie z błędnie zapisanymi wyrazami. Można spróbować określić podobieństwo takich słów od innych wyrazów znajdujących się w analizowanych tekstach lub słowniku. Niniejsza praca poświęcona badaniom nad odległościami określonymi na przestrzeni napisów. Różnych konstrukcji tego rodzaju funkcji można znaleźć wiele w literaturze (np. [15, 5, 17]), jednak w głównej mierze opierają się one na porównywaniu liczby wystąpień takich samych sekwencji znaków lub zliczeniu operacji, które przetwarzają jeden napis w drugi.

Rozdział 2

Odległości na przestrzeni ciągów znaków

2.1. Podstawowe definicje

Definicja 2.1. Niech $\Sigma = \{\sigma_1, \dots, \sigma_k\}$ będzie skończonym uporządkowanym zbiorem o liczności $|\Sigma|$, zwanym alfabetem. Napisem nazywamy skończony ciąg znaków z Σ . Zbiór wszystkich napisów o długości n nad Σ jest oznaczony przez Σ^n , podczas gdy przez $\Sigma^* = \bigcup_{n=0}^{\infty} \Sigma^n$ rozumiemy zbiór wszystkich napisów utworzonych ze znaków z Σ [5].

O ile nie podano inaczej, używamy zmiennych s, t, u, v, w, x, y jako oznaczenie napisów oraz a, b, c do oznaczenia napisów jednoznakowych albo po prostu *znaków*. Pusty napis jest oznaczany przez ε . Przez $|s|$, dla każdego napisu $s \in \Sigma^*$, rozumiemy jego długość, czyli liczbę znaków w napisie. Ciąg napisów i/lub znaków oznacza ich złączenie, np. stu to napis powstały ze złączenia napisów s, t oraz u , natomiast abc , to napis powstały ze złączenia znaków a, b oraz c . Dla rozróżnienia napisów od zmiennych reprezentujących napis, te pierwsze oznaczamy pismem maszynowym, np. **napis**.

Poprzez s_i rozumiemy i -ty znak z napisu s , dla każdego $i \in \{1, \dots, |s|\}$. Podciąg kolejnych przylegających do siebie znaków z napisu nazywamy *podnapisem*. Podnapisem napisu s , który zaczyna się od i -tego znaku, a kończy na j -tym znaku, oznaczamy przez $s_{i:j}$, tj. $s_{i:j} = s_i s_{i+1} \dots s_j$ dla $i \leq j$. Zakładamy również, że jeśli $j < i$, to $s_{i:j} = \varepsilon$ [5, 28].

Definicja 2.2. Załóżmy, że napis s jest reprezentacją złączenia trzech, być może pustych, podnapisów w, x i y , tj. $s = wxy$. Wówczas podnapis w nazywamy przedrostkiem, natomiast podnapis y – przyrostkiem [5].

Definicja 2.3. Podnapis złożony z kolejnych, przylegających do siebie znaków, o ustalonej długości $q \geq 1$ jest nazywany q -gramem. q -gramy o q równym jeden, dwa lub trzy mają specjalne nazwy: unigram, bigram i trigram. Jeśli $q > |s|$, to q -gramy napisu s są napisami pustymi [5]. Maksymalna liczba wystąpień różnych q -gramów w napisie s wynosi $|s| - q + 1$.

Przykład 2.1. Niech Σ będzie alfabetem złożonym z 26 małych liter alfabetu łacińskiego oraz niech $s = \mathbf{ela}$. Wówczas mamy $|s| = 3$, $s_1 = \mathbf{e}$, $s_2 = \mathbf{l}$, $s_3 = \mathbf{a}$. Podnapis 1:2 napisu s

to $s_{1:2} = \mathbf{e}1$. W napisie tym mamy do czynienia jedynie z q -gramami o q równym jeden, dwa oraz trzy, odpowiednio: \mathbf{e} , 1 , \mathbf{a} ; $\mathbf{e}1$, $1\mathbf{a}$ oraz $\mathbf{e}1\mathbf{a}$.

We wszystkich przykładach niniejszego rozdziału zakładamy, jeśli nie podano inaczej, że Σ składa się z 32 liter polskiego alfabetu oraz liter \mathbf{q} , \mathbf{v} i \mathbf{x} .

2.2. Odległości na przestrzeni ciągów znaków

Określanie odległości między napisami jest ważną częścią przetwarzania danych, zwłaszcza w problemach takich jak dopasowanie statystyczne, wyszukiwanie tekstów, klasyfikacja tekstów czy sprawdzanie pisowni. Największa trudność polega na policzeniu podobieństwa między dwoma napisami w terminach metryk na przestrzeni ciągów znaków. W niniejszym podrozdziale zajmiemy się odległościami na napisach, tj. funkcjami $d : \Sigma^* \times \Sigma^* \rightarrow [0, \infty)$. W literaturze można znaleźć wiele różnych funkcji tego typu, które różnią się genezą powstania, podejściem do problemu oraz zastosowaniami. W pracy zajmiemy się odległościami, która można podzielić na trzy grupy:

- oparte na operacjach edycyjnych (*edit operations*),
- oparte na q -gramach,
- miary heurystyczne.

Aby wyliczyć odległość opartą na operacjach edycyjnych, trzeba określić liczbę fundamentalnych transformacji potrzebnych do przetworzenia jednego napisu w drugi. Mogą się w nich zawierać zamiany, usunięcia, wstawienia oraz transpozycje znaków. Temu rodzajowi odległości poświęcimy największą część niniejszego rozdziału. Odległości oparte na q -gramach pozwalają na określenie podobieństwa między dwoma napisami przez porównanie liczby występowania q -elementowych ciągów znaków. Natomiast miary heurystyczne są rzadko stosowane, gdyż nie mają silnych matematycznych podstaw, ale zostały rozwinięte jako praktyczne narzędzie stosowane w konkretnych przypadkach.

Pierwsze odległości między napisami zdefiniowane w latach 60. i 70. XX w. Były one i nadal są niezbędne w problemach biologii obliczeniowej, przetwarzaniu sygnałów oraz przeszukiwaniu tekstów. Ten pierwszy obszar zastosowań koncentruje się na wyszukiwaniu wzorców w DNA i sekwencjach białkowych, które mogą być zapisane jako długie napisy nad specyficznym alfabetem (np. $\{\mathbf{A}, \mathbf{C}, \mathbf{T}, \mathbf{G}\}$). Wyszukiwanie w nich szczególnych ciągów znaków okazuje się być fundamentalną operacją przy składaniu części DNA uzyskanych z eksperymentów, czy też określaniu jak bardzo różnią się dwie sekwencje genów [17]. Więcej na temat zastosowań odległości między napisami w biologii obliczeniowej można znaleźć w [25], [18] czy też [23].

Kolejnym obszarem zastosowań odległości na przestrzeni ciągów znaków jest przetwarzanie sygnałów. Jednym z jego zagadnień jest określenie transmitowanego tekstu, mając dany sygnał audio. Nawet uproszczony problem, sprowadzony jedynie do rozpoznawania słowa z małego zbioru alternatyw jest złożony, jako że sygnał może być skompresowany w czasie, części słów mogą być niewyraźne itd. Idealne dopasowanie jest praktycznie niemożliwe [17]. Innym problemem jest poprawianie błędów pisowni. Fizyczna transmisja sygnału podatna jest na błędy. Aby zagwarantować transmisję fizycznym kanałem, konieczne jest, żeby odzyskać poprawną wiadomość po modyfikacji uzyskanej wskutek transmisji. W tym przypadku

można nie wiedzieć nawet czego szukać, a trzeba dostać tekst, który jest poprawny i najbliższy otrzymanej wiadomości [17]. Więcej na temat zastosowań odległości między napisami w przetwarzaniu sygnałów można znaleźć w [15], [29], czy też [7].

Problem poprawy źle napisanego tekstu jest prawdopodobnie najstarszym potencjalnym zastosowaniem dla odległości na napisach. Odniesienia do tego problemu można znaleźć nawet z lat 20. ubiegłego wieku [16]. Od lat 60. optymalne dopasowanie napisów przy pomocy odległości stało się jednym z najbardziej popularnych narzędzi, które radziłyby sobie z poprawą tekstów. Przykładowo, ok. 80% błędów można poprawić używając tylko jednego wstawienia, usunięcia, zamiany bądź transpozycji znaków [6]. Bardzo ważnym zastosowaniem poprawy tekstów jest wydobywanie informacji (ang. *Information Retrieval* – IR) – jest to jedna z najbardziej wymagających gałęzi zastosowań odległości na napisach. W IR chodzi o wydobycie istotnych informacji z dużych zbiorów tekstów, a optymalne dopasowanie napisów jest jego kluczowym narzędziem. Jednakowoż, klasyczne dopasowanie napisów zazwyczaj nie wystarczy, gdyż zbiory tekstów są coraz większe, różnorodniejsze (np. różne języki) i coraz bardziej podatne na błędy. Obecnie, każde narzędzie wydobywające informacje z tekstów, dopasowuje napisy bądź wzorce, aby zniwelować liczbę błędów w tekście. Więcej na temat zastosowań odległości między napisami w problemie optymalnego dopasowania napisów można znaleźć w literaturze, m.in. [5], [17], [30], [31], [19] czy też [13].

2.2.1. Odległości oparte na operacjach edycyjnych

Ścieżka edycyjna i bazowe operacje edycyjne. *Odległość edycyjna* $ED(s, t)$ między dwoma napisami s i t to minimalna liczba operacji edycyjnych potrzebna do przetworzenia s w t (i ∞ , gdy taki ciąg nie istnieje) [17]. *Ścisłą odległością edycyjną* nazywamy minimalną liczbę nienakładających się operacji edycyjnych, które pozwalają przekształcić jeden napis w drugi, i które nie przekształcają dwa razy tego samego podnapisu [5].

Napis może zostać przetworzony w drugi poprzez wykonanie na nim ciągu przekształceń jego podnapisów. Ten ciąg nazywany jest *ścieżką edycyjną* (*śladem edycji*), podczas gdy przekształcenia są nazywane *bazowymi operacjami edycyjnymi*. Bazowe operacje edycyjne, które polegają na przekształceniu napisu s w napis t , są oznaczane przez $s \rightarrow t$. Zbiór wszystkich bazowych operacji edycyjnych oznaczamy przez \mathbb{B} [5].

Bazowe operacje edycyjne są zazwyczaj ograniczone do:

- usunięcia znaku: $l \rightarrow \varepsilon$, tj. usunięcia litery l , np. $ela \rightarrow ea$,
- wstawienia znaku: $\varepsilon \rightarrow k$, tj. wstawienia litery k , np. $ela \rightarrow elka$,
- zamiany znaku: $e \rightarrow a$, tj. zamiany litery e na a , np. $ala \rightarrow ela$,
- transpozycji: $el \rightarrow le$, tj. przestawienia dwóch przylegających liter e i l , np. $ela \rightarrow lea$.

Często transpozycja znaków nie należy do zbioru operacji bazowych, jako że można ją zastąpić usunięciem i wstawieniem znaku. W niniejszej pracy jednak operacja ta należy do zbioru operacji bazowych.

Własność 2.1. Zakładamy, że \mathbb{B} spełnia następujące własności [5]:

- jeśli $s \rightarrow t \in \mathbb{B}$, to odwrotna operacja $t \rightarrow s$ również należy do \mathbb{B} ;
- $a \rightarrow a \in \mathbb{B}$ (operacja identycznościowa dla jednego znaku należy do \mathbb{B});

- zbiór \mathbb{B} jest zupełny: dla dwóch dowolnych napisów s i t , istnieje ślad edycji, który przekształca s w t .

Zauważmy, że zbiór \mathbb{B} nie musi być skończony.

Odległość edycyjna. Podobieństwo dwóch napisów może być wyrażone jako długość ścieżki edycyjnej, dzięki której jeden napis zostaje przekształcony w drugi:

Definicja 2.4. Mając dany zbiór bazowych operacji edycyjnych, odległość edycyjna $ED(s, t)$ jest równa długości najkrótszej ścieżki edycyjnej, która przekształca napis s w napis t . Najkrótsza ścieżka, która przekształca napis s w napis t jest nazywana optymalną ścieżką edycyjną [5].

Przykład 2.2. Weźmy napisy *foczka* oraz *kozak*. Ścieżka edycyjna między nimi może mieć następującą postać:

$$\begin{array}{ccccccc} \text{foczka} & \xrightarrow{\text{trans. } z \ i \ k} & \text{fockza} & \xrightarrow{\text{trans. } c \ i \ k} & \text{fokcza} & \xrightarrow{\text{trans. } o \ i \ k} & \text{fkocza} \xrightarrow{\text{us. } f} \text{kocza} \xrightarrow{\text{us. } c} \text{koza} \\ & \xrightarrow{\text{wst. } k} & & & & & & \xrightarrow{\text{wst. } k} \text{kozak}. \end{array}$$

Optymalna ścieżka natomiast ma następującą postać:

$$\text{foczka} \xrightarrow{\text{zm. } f \ na \ k} \text{koczka} \xrightarrow{\text{us. } c} \text{kozka} \xrightarrow{\text{trans. } k \ i \ a} \text{kozak}.$$

Do przykładowych odległości edycyjnych zaliczamy odległość: Hamminga, najdłuższego wspólnego podnapisu (*longest common substring*), Levenshteina, optymalnego dopasowania napisów (*optimal string alignment*), Damareu-Levenshteina. Odległości te różnią się zbiorem bazowych operacji edycyjnych. Jeśli w zbiorze tym znajduje się tylko zamiana znaków, to mamy do czynienia z odległością Hamminga. Gdy zbiór bazowych operacji edycyjnych zawiera wstawienia i usunięcia znaków, to jest to odległość najdłuższego wspólnego podnapisu. Gdyby \mathbb{B} powiększyć o zamianę znaków, to otrzymamy odległość Levenshteina. Dwie ostatnie odległości, tj. optymalnego dopasowania napisów oraz Damareu-Levenshteina, mają w zbiorze bazowych operacji edycyjnych usunięcie, wstawienie, zamianę oraz transpozycję znaków. Formalne definicje powyższych funkcji znajdują się w dalszej części niniejszego rozdziału.

Definicja odległości edycyjnej może być również interpretowana jako minimalny koszt, dzięki któremu przekształcamy jeden napis w drugi. Definicję można uogólnić na dwa sposoby. Po pierwsze, bazowe operacje edycyjne mogą mieć przydzielone koszty (wagi) $\delta(a \rightarrow b)$ [30]. Zazwyczaj koszt każdej operacji wynosi jeden, jednak można, na przykład, nadać transpozycji mniejszy koszt niż operacji wstawienia znaku. Dalej, można rozszerzyć funkcję kosztu δ na ścieżkę edycyjną $E = a_1 \rightarrow b_1, a_2 \rightarrow b_2, \dots, a_{|E|} \rightarrow b_{|E|}$ przez $\delta(E) = \sum_{i=1}^{|E|} \delta(a_i \rightarrow b_i)$ [5]. Odtąd przez odległość między napisem s a napisem t będziemy rozumieć minimalny ze wszystkich możliwych kosztów ścieżek przekształcających s w t . Odległości zdefiniowane w ten sposób zazwyczaj są nazywane *uogólnionymi* odległościami edycyjnymi.

Po drugie, zbiór operacji edycyjnych \mathbb{B} może zostać rozszerzony o ważone zamiany (pod)napisów, zamiast operacji edycyjnych wykonywanych na pojedynczych znakach [26]. Odległości zdefiniowane w ten sposób zazwyczaj są nazywane *rozszerzonymi* odległościami edycyjnymi. Przykładowo, \mathbb{B} może zawierać operację $x \rightarrow ks$ o koszcie jednostkowym. Wówczas rozszerzona odległość pomiędzy napisami *xero* i *ksero* wynosi jeden, podczas gdy standardowa (zwykła, nierozszerzona) odległość wyniosłaby dwa [5].

Definicja 2.5. *Mając dany zbiór bazowych operacji edycyjnych \mathbb{B} oraz funkcję δ , która nadaje koszt wszystkim bazowym operacjom edycyjnym z \mathbb{B} , uogólniona odległość edycyjna między napisami s i t jest zdefiniowana jako minimalny spośród kosztów wszystkich możliwych ścieżek edycyjnych, które przekształcają s w t [5].*

Zazwyczaj koszt pojedynczej operacji z \mathbb{B} jest równy jeden. Czasem jednak nadaje się poszczególnym operacjom różne koszty, dając np. transpozycji mniejszą wagę niż wstawieniu znaku. Gdy koszt wszystkich operacji jest równy jeden, to mówimy po prostu o odległości edycyjnej, natomiast gdy różne operacje mają różne wagi, to mówimy o *ważonej* odległości edycyjnej.

Własność 2.2. *Zakładamy, że funkcja kosztu $\delta(s \rightarrow t)$ ma następujące własności [5]:*

- $\delta(s \rightarrow t) \geq 0$ (koszt operacji jest liczbą nieujemny),
- $\delta(s \rightarrow t) = \delta(t \rightarrow s)$ (symetria),
- $\delta(s \rightarrow s) = 0$ i $\delta(s \rightarrow t) = 0 \Rightarrow s = t$ (identyczność),
- $\forall \gamma > 0$ zbiór bazowych operacji $\{s \rightarrow t \in \mathbb{B} \mid \delta(s \rightarrow t) < \gamma\}$ jest skończony (skończoność podzbioru bazowych operacji, których koszt jest ograniczony z góry).

Zauważmy, że ostatnia własność jest zawsze spełniona dla skończonego zbioru \mathbb{B} .

Twierdzenie 2.3. *Z własności 2.1 i 2.2 wynika, że:*

- dla każdych dwóch napisów s i t , istnieje ścieżka o minimalnym koszcie, tj. dobrze zdefiniowana odległość edycyjna z s do t [5],
- ogólna odległość edycyjna z definicji 2.5 jest metryką [30].

Dowód. Żeby udowodnić, że $ED(s, t)$ jest metryką, musimy pokazać, że $ED(s, t)$ istnieje, jest dodatnio określona, symetryczna oraz subaddytywna (tj. spełnia nierówność trójkąta).

Z własności 2.2 wynika, że funkcja kosztu jest nieujemna i że tylko identyczność ma koszt równy zero. Stąd, bez utraty ogólności, możemy rozważyć jedynie takie ścieżki edycyjne, które nie zawierają operacji identycznościowych. Zatem, jeśli $s = t$, to jedyna optymalna ścieżka (która nie zawiera operacji identycznościowych) jest pusta i ma zerowy koszt. Jeśli $s \neq t$, to z zupełności zbioru bazowych operacji edycyjnych wynika, że istnieje jedna lub więcej ścieżek edycyjnych, które przekształcają s w t . Wszystkie te ścieżki składają się z operacji edycyjnych o ściśle dodatnim koszcie.

Niech γ będzie kosztem ścieżki przekształcającej s w t . Rozważmy zbiór A ścieżek edycyjnych, które przekształcają s w t i których koszt jest ograniczony z góry przez γ . Zbiór A jest niepusty i składa się z operacji edycyjnych o dodatnim koszcie mniejszym niż γ . Zbiór operacji bazowych, których koszt jest ograniczony z góry przez γ jest skończony, co dowodzi, że zbiór A jest również skończony. Ponieważ A jest niepusty i skończony, to ścieżki edycyjne o minimalnym (dodatnim) koszcie istnieją i należą do A . Stąd, $ED(s, t) > 0$ dla $s \neq t$, tj. odległość edycyjna jest dodatnio określona.

Aby udowodnić symetrię odległości edycyjnej, rozważmy optymalną ścieżkę E , która przekształca s w t , oraz odpowiadającą jej odwrotną ścieżkę E_r , która przekształca t w s . Równość

ich kosztów $\delta(E) = \delta(E_r)$ wynika z symetrii funkcji kosztu i symetrii zbioru operacji bazowych \mathbb{B} .

Aby pokazać subaddytywność, rozważmy optymalną ścieżkę E_1 , która przekształca s w t , optymalną ścieżkę E_2 , która przekształca t w u , oraz złożenie ścieżek $E_1 E_2$, które przekształca s w u . Z tego, że $\delta(E_1 E_2) = \delta(E_1) + \delta(E_2) = ED(s, t) + ED(t, u)$ oraz $\delta(E_1 E_2) \geq ED(s, u)$ (gdyż $E_1 E_2$ nie musi być optymalną ścieżką, przekształcającą s w u) wynika, że $ED(s, t) + ED(t, u) \geq ED(s, u)$. ■

Odległość edycyjna jest metryką, nawet gdy funkcja kosztu δ nie jest subaddytywna. Co więcej, ponieważ ciąg nakładających się operacji, które przekształcają s w t , mogą mieć mniejszy koszt niż $\delta(s \rightarrow t)$, $\delta(s \rightarrow t)$ może być większe niż $ED(s, t)$. Rozważmy, na przykład, następujący alfabet: $\{a, b, c\}$, gdzie symetria i brak subaddytywności funkcji δ jest zdefiniowana następująco:

$$\begin{aligned}\delta(a \rightarrow c) &= \delta(b \rightarrow c) = 1 \\ \delta(a \rightarrow \varepsilon) &= \delta(b \rightarrow \varepsilon) = \delta(c \rightarrow \varepsilon) = 2 \\ \delta(a \rightarrow b) &= 3\end{aligned}$$

Można zobaczyć, że $3 = \delta(a \rightarrow b) > \delta(a \rightarrow c) + \delta(c \rightarrow b) = 2$. Stąd optymalna ścieżka edycyjna $(a \rightarrow c, c \rightarrow b)$ przekształca a w b z kosztem równym 2.

Ścisła odległość edycyjna. Subaddytywność odległości edycyjnej pozwala używać metod właściwych przestrzeniom metrycznym. Niemniej jednak, problem minimalizacji zbioru nakładających się operacji edycyjnych, może być trudny. Aby zrównoważyć złożoność obliczeniową, zazwyczaj używana jest funkcja podobieństwa, zdefiniowana jako minimum kosztu *ścisłej ścieżki edycyjnej*. Ta ostatnia nie zawiera nakładających się na siebie operacji edycyjnych i nie modyfikuje tego samego podnapisu więcej niż raz. Odpowiadająca jej odległość edycyjna nazywana jest *ścisłą odległością edycyjną* [5]:

Definicja 2.6. Niech napisy s i t zostaną podzielone na tę samą liczbę, być może pustych, podnapisów: $s = s_1 s_2 \dots s_l$ i $t = t_1 t_2 \dots t_l$, takich, że $s_i \rightarrow t_i \in \mathbb{B}$. Ścisłą ścieżką edycyjną nazywamy taką ścieżkę, że nie występują w niej następujące operacje:

- $s_i \rightarrow s_{i_j} \rightarrow t_i$ (modyfikacja tego samego podnapisu więcej niż raz),
- $s_i \rightarrow t_i, s_{i+1} \rightarrow t_{i+1}, t_i t_{i+1} \rightarrow t_k$ (nakładające się operacje).

Lemat 2.4. Dowolna nieściśła odległość edycyjna ogranicza z dołu odpowiadającą jej ścisłą odległość edycyjną [5].

Rozważmy napisy ab , ba oraz acb . Z jednej strony, najkrótsza nieściśła ścieżka edycyjna, która przekształca ba w acb , tj. $(ba \rightarrow ab, \varepsilon \rightarrow c)$ zawiera dwie operacje: najpierw zamienia znaki a i b , a następnie wstawia c pomiędzy nie. Zauważmy, że wstawienie przekształca już transformowany napis. Jednakowoż, jeśli kolejne przekształcenia tego samego podnapisu są wykluczone, to najkrótsza ścieżka edycyjna, która przekształca ba w acb , składa się z trzech operacji edycyjnych, np. $(b \rightarrow \varepsilon, \varepsilon \rightarrow c, \varepsilon \rightarrow b)$. Stąd nieściśła odległość edycyjna jest równa dwa, podczas gdy ścisła odległość wynosi trzy [5]. **Optymalne dopasowanie.**

Definicja 2.7. Niech napisy s i t zostaną podzielone na tę samą liczbę, być może pustych, podnapisów: $s = s_1 s_2 \dots s_l$ i $t = t_1 t_2 \dots t_l$, takich, że $s_i \rightarrow t_i \in \mathbb{B}$. Co więcej, zakładamy,

że s_i i t_j nie mogą być puste dla $i = j$. Mówimy, że ten podział definiuje dopasowanie $A = (s_1 s_2 \dots s_l, t_1 t_2 \dots t_l)$ pomiędzy napisami s i t , w którym podnapis s_i jest dopasowany do podnapisu t_i [5].

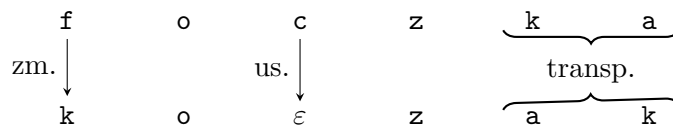
Dopasowanie reprezentuje ścisłą ścieżkę edycyjną $E = s_1 \rightarrow t_1, s_2 \rightarrow t_2, \dots, s_l \rightarrow t_l$. Definiujemy *koszt dopasowania* A jako koszt odpowiadającej mu ścieżki edycyjnej i oznaczamy go przez $\delta(A)$:

$$\delta(A) = \sum_{i=1}^l \delta(s_i \rightarrow t_i), \quad (2.1)$$

gdzie do \mathbb{B} należy usunięcie, wstawienie, zamiana oraz transpozycja znaków.

Optymalne dopasowanie to dopasowanie o najmniejszym koszcie [5].

Przykład 2.3. Przykład optymalnego dopasowania pomiędzy słowami **foczka** i **kozak** prezentuje rys. 2.1. Odpowiadająca mu ścieżka edycyjna składa się z zamiany $f \rightarrow k$, usunięcia $c \rightarrow \varepsilon$ oraz transpozycji $ka \rightarrow ak$.



Rysunek 2.1: Przykład optymalnego dopasowania między napisami **foczka** i **kozak**.

Warto zauważyć, że istnieje równoważnościowe przekształcenie między zbiorem ścisłych ścieżek edycyjnych i zbiorem optymalnych dopasowań: każda ścisła ścieżka edycyjna o minimalnym koszcie reprezentuje dopasowanie o najmniejszym koszcie i odwrotnie. Stąd można zastąpić problem znalezienia optymalnej ścisłej odległości edycyjnej przez problem znalezienia optymalnego dopasowania, co też zastosujemy dalej [5].

Obliczanie odległości edycyjnej. Główną zasadą dynamicznego algorytmu, liczącego koszt optymalnego dopasowania, jest wyrażenie kosztu dopasowania pomiędzy napisami s i t , używając kosztu dopasowania ich przedrostków. Rozważmy przedrostek $s_{1:i}$ o długości i i przedrostek $t_{1:j}$ o długości j , odpowiednio napisów s i t . Załóżmy, że $A = (s_1 s_2 \dots s_l, t_1 t_2 \dots t_l)$ jest optymalnym dopasowaniem między $s_{1:i}$ i $t_{1:j}$, którego koszt oznaczamy przez $C_{i,j}$ [5].

Używając równania (2.1) oraz definicji optymalnego dopasowania, łatwo pokazać, że $C_{i,j}$ może zostać policzone przy użyciu następującej ogólnej rekurencji [26]:

$$\begin{aligned} C_{0,0} &= 0, \\ C_{i,j} &= \min\{\delta(s_{i':i} \rightarrow t_{j':j}) + C_{i'-1,j'-1} \mid s_{i':i} \rightarrow t_{j':j} \in \mathbb{B}\}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Można zauważyć, że:

- koszt dopasowania napisów s i t jest równy $C_{|s|,|t|}$,
- wszystkie optymalne dopasowania mogą zostać wyznaczone przez odwracanie rekurencji (2.2) (przechodzenie od tyłu), tj. obliczanie najpierw $C_{0,0}$, następnie $C_{1,1}$ itd.

Rozważmy teraz odległość Hamminga, gdzie $s_{i':i} \rightarrow t_{j':j}$ to zamiany znaków o koszcie równym jeden. Stąd,

$$\delta(s_{i':i} \rightarrow t_{j':j}) = [s_{i':i} \neq t_{j':j}], \quad (2.3)$$

gdzie $[X]$ jest równe jeden, gdy warunek X jest spełniony, zero w przeciwnym przypadku. Co więcej, w tym przypadku możliwa jest tylko jedna kombinacja i' oraz j' , mianowicie $i' = i$ oraz $j' = j$. Dalej, odległość ta jest zdefiniowana jedynie dla $|s| = |t|$, zatem $C_{i,j}$ może być policzone jedynie dla $i = j$. Wówczas definicja odległości Hamminga nie jest rekurencyjna i można ją zapisać następująco:

Definicja 2.8. Odległością Hamminga nazywamy [9]:

$$d_{\text{hamming}}(s, t) = \begin{cases} \sum_{i=1}^{|s|} \delta(s_i \rightarrow t_i) = \sum_{i=1}^{|s|} [s_i \neq t_i], & \text{gdy } |s| = |t|, \\ \infty, & \text{w przeciwnym przypadku.} \end{cases}$$

Odległość Hamminga zlicza liczbę indeksów (zob. rys. 2.2), na których dwa napisy mają różny znak. Odległość ta przyjmuje wartości ze zbioru $\{0, \dots, |s|\}$, gdy $|s| = |t|$, natomiast jest równa nieskończoności, gdy napisy mają różne długości.

Przykład 2.4. Odległość Hamminga między słowami **koza** i **foka** wynosi $d_{\text{hamming}}(\text{koza}, \text{foka}) = 2$, natomiast między słowami **kozak** i **foczka** wynosi ona $d_{\text{hamming}}(\text{kozak}, \text{foczka}) = \infty$, gdyż $|\text{kozak}| \neq |\text{foczka}|$.

| | | | | |
|-----|---|---|-----|---|
| | k | o | z | a |
| zm. | ↓ | | zm. | ↓ |
| | f | o | k | a |
| | 1 | 2 | 3 | 4 |

Rysunek 2.2: Przykład dopasowania przy pomocy odległości Hamminga między napisami **koza** i **foka**.

Rozważmy teraz odległość najdłuższego wspólnego podnapisu (ang. *longest common substring*), gdzie $s_{i':i} \rightarrow t_{j':j}$ to wstawienia i usunięcia znaków o koszcie równym jeden. Wówczas istnieją dwie kombinacje i' oraz j' z ogólnej rekurencji (2.2), odpowiadające usunięciu i wstawieniu, odpowiednio:

- $i' = i - 1$ oraz $j' = j$,
- $i' = i$ oraz $j' = j - 1$.

Definicja 2.9. Uwzględniając powyższe uproszczenia, możemy następująco przepisać ogólną postać rekurencji (2.2) dla odległości najdłuższego wspólnego podnapisu:

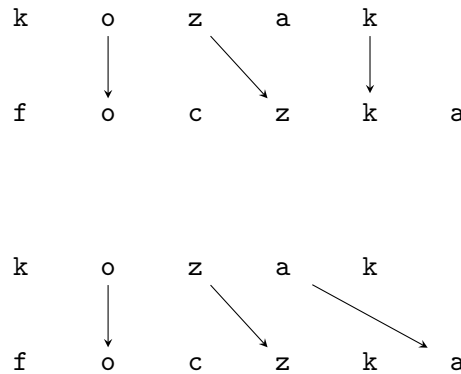
$$C_{i,j} = \begin{cases} 0, & \text{gdy } i = j = 0, \\ C_{i-1,j-1}, & \text{gdy } s_i = t_j, i, j > 0, \\ 1 + \min\{C_{i-1,j}, C_{i,j-1}\}, & \text{wpp.} \end{cases}$$

Odległość najdłuższego wspólnego podnapisu przyjmuje wartości ze zbioru $\{0, |s| + |t|\}$, przy czym maksimum jest osiągnięte, gdy s i t nie mają ani jednego wspólnego znaku. Odległość tę oznaczamy przez d_{lsc} .

Przykład 2.5. Odległość najdłuższego wspólnego podnapisu między napisami **kozak** i **foczka** wynosi: $d_{\text{lsc}}(\text{kozak}, \text{foczka}) = 5$, bo $\text{kozak} \xrightarrow[1]{\text{us. } k} \text{ozak} \xrightarrow[1]{\text{us. } a} \text{ozk} \xrightarrow[1]{\text{wst. } f} \text{fokz} \xrightarrow[1]{\text{wst. } c} \text{foczka}$ oraz $\text{foczka} \xrightarrow[1]{\text{wst. } a} \text{foczka}$.

Powyższy przykład pokazuje, że w ogólności nie ma unikalnej najkrótszej drogi transformacji jednego napisu w drugi, gdyż można zamienić kolejność usuwania (lub wstawiania) znaków i również uzyskać odległość równą 5. Można również usunąć z napisu znak **k** zamiast **a**, otrzymując taką samą odległość między napisami.

Jak sugeruje nazwa, odległość najdłuższego wspólnego podnapisu, ma też inną interpretację. Poprzez wyrażenie *najdłuższy wspólny podnapis* rozumiemy najdłuższy ciąg utworzony przez sparowanie znaków z s i t nie zmieniając ich porządku. Wówczas odległość ta jest rozumiana jako liczba niesparowanych znaków z obu napisów. W powyższym przykładzie może to być przedstawione jak na rys. 2.3.



Rysunek 2.3: Przykład odległości najdłuższego wspólnego podnapisu między napisami **kozak** i **foczka**.

Jak widać, znaki **k**, **a**, **f**, **c** i **a** w pierwszym przypadku oraz **k**, **k**, **f**, **c** i **k** w drugim, pozostają bez pary, dając odległość równą 5.

Przejdźmy do odległości Levenshteina. Odległość ta dopuszcza, oprócz usunięć i wstawień, także zamiany znaków. Istnieją zatem trzy kombinacje i' oraz j' z ogólnej rekurencji (2.3):

- $i' = i - 1$ oraz $j' = j$,
- $i' = i$ oraz $j' = j - 1$,
- $i' = i - 1$ oraz $j' = j - 1$.

Definicja 2.10. Stąd ogólna postać rekurencji (2.2) dla odległości Levenshteina może zostać przepisana następująco:

$$C_{i,j} = \min \begin{cases} 0, & \text{gdy } i = j = 0, \\ C_{i-1,j} + 1, & \text{gdy } i > 0, \\ C_{i,j-1} + 1, & \text{gdy } j > 0, \\ C_{i-1,j-1} + [s_i \neq t_j], & \text{gdy } i, j > 0. \end{cases} \quad (2.4)$$

Odległość Levenshteina oznaczamy przez d_{lv} .

Przykład 2.6. Odległość Levenshteina między napisami **kozak** i **foczka** wynosi: $d_{lv}(\text{kozak}, \text{foczka}) = 4$, bo $\text{kozak} \xrightarrow[1]{zm. k \text{ na } f} \text{fozak} \xrightarrow[1]{wst. c} \text{foczak} \xrightarrow[1]{zm. a \text{ na } k} \text{foczkk} \xrightarrow[1]{zm. k \text{ na } a} \text{foczka}$.

Powyższy przykład ilustruje dodatkową elastyczność w porównaniu do odległości najdłuższego wspólnego podnapisu, bowiem daje ona mniejszą wartość odległości między napisami, jako że w przypadku pierwszego znaku potrzebujemy jedynie zamiany, zamiast wstawienia i usunięcia [28]. Co więcej, ścieżka edycyjna między tymi słowami może być inna i zawierać usunięcie i wstawienie zamiast dwóch ostatnich zamian znaków.

Przypomnijmy, że mówimy o ważonej odległości, gdy zmienimy koszty poszczególnych operacji na różne od jeden. Gdy za koszt przyjmiemy np. $(0.1, 1, 0.3)$ dla usunięć, wstawień i zamian znaków odpowiednio, to uogólniona odległość Levenshteina między napisami **kozak** i **foczka** wynosi: $d_{lv}(\text{kozak}, \text{foczka}) = 1.9$, bo $\text{kozak} \xrightarrow[0.3]{zm. k \text{ na } f} \text{fozak} \xrightarrow[1]{wst. c} \text{foczak} \xrightarrow[0.3]{zm. a \text{ na } k} \text{foczkk} \xrightarrow[0.3]{zm. k \text{ na } a} \text{foczka}$.

Ważona odległość Levenshteina spełnia definicję metryki, gdy koszt usunięcia jest równy kosztowi wstawienia znaku. W przeciwnym przypadku nie spełnia ona założenia o symetrii. Jednakowoż, symetria zostaje zachowana przy jednoczesnej zamianie s i t oraz kosztów usunięcia i wstawienia znaku, jako że liczba usunięć znaków przy przetwarzaniu napisu s w napis t jest równa liczbie wstawień znaków przy transformacji napisu t w napis s [28]. Dobrze obrazuje to następujący przykład:

Przykład 2.7. Przyjmijmy za koszt usunięcia, wstawienia i zamiany znaku odpowiednio $(0.1, 1, 0.3)$. Wówczas uogólniona odległość Levenshteina dla napisów **kozak** i **foczka** wynosi:

$$d_{lv}(\text{kozak}, \text{foczka}) = 1.9, \quad (2.5)$$

gdyż

$$\text{kozak} \xrightarrow[0.3]{zm. k \text{ na } f} \text{fozak} \xrightarrow[1]{wst. c} \text{foczak} \xrightarrow[0.3]{zm. a \text{ na } k} \text{foczkk} \xrightarrow[0.3]{zm. k \text{ na } a} \text{foczka},$$

natomiast

$$d_{lv}(\text{foczka}, \text{kozak}) = 1, \quad (2.6)$$

gdyż

$$\text{foczka} \xrightarrow[0.3]{zm. f \text{ na } k} \text{koczka} \xrightarrow[0.1]{us. c} \text{kozka} \xrightarrow[0.3]{zm. k \text{ na } a} \text{kozaa} \xrightarrow[0.3]{zm. a \text{ na } k} \text{kozak}.$$

Gdy za koszty przyjmiemy $(1, 0.1, 0.3)$, to uogólniona odległość Levenshteina wynosi:

$$d_{lv}(\text{kozak}, \text{foczka}) = 1,$$

gdyż

$$\text{kozak} \xrightarrow[0.3]{\text{zm. } k \text{ na } f} \text{fozak} \xrightarrow[0.1]{\text{wst. } c} \text{foczak} \xrightarrow[0.3]{\text{zm. } a \text{ na } k} \text{foczkk} \xrightarrow[0.3]{\text{zm. } k \text{ na } a} \text{foczka},$$

czyli analogicznie, jak w przypadku (2.6). Natomiast

$$d_{lv}(\text{foczka}, \text{kozak}) = 1.9,$$

bo

$$\text{foczka} \xrightarrow[0.3]{\text{zm. } f \text{ na } k} \text{koczka} \xrightarrow[1]{\text{us. } c} \text{kozka} \xrightarrow[0.3]{\text{zm. } k \text{ na } a} \text{kozaa} \xrightarrow[0.3]{\text{zm. } a \text{ na } k} \text{kozak},$$

czyli analogicznie, jak w przypadku (2.5).

Lemat 2.5. *Ścisła odległość Levenshteina o jednostkowym koszcie operacji bazowych jest równa nieścislej odległości Levenshteina o jednostkowym koszcie operacji bazowych [5].*

Powyższe wynika natychmiast z obserwacji, że optymalna ścieżka edycyjna zawiera jednoznaczne usunięcia, wstawienia oraz zamiany, które nigdy nie modyfikują podnapisu więcej niż raz.

Zgodnie z lematem 2.5 nieściska odległość Levenshteina jest równa ścisłej odległości Levenshteina. Z drugiej strony, ścisła odległość edycyjna jest równa kosztowi optymalnego dopasowania. Stąd rekurencja (2.2) liczy nieściskłą odległość Levenshteina. Spójrzmy na następujące bezpośrednie uogólnienie rekurencji (2.4), dodające transpozycję do zbioru bazowych operacji edycyjnych [5]:

$$C_{i,j} = \min \begin{cases} 0, & \text{gdy } i = j = 0 \\ C_{i-1,j} + 1, & \text{gdy } i > 0 \\ C_{i,j-1} + 1, & \text{gdy } j > 0 \\ C_{i-1,j-1} + [s_i \neq t_j], & \text{gdy } i, j > 0 \\ C_{i-2,j-2} + 1, & \text{gdy } s_i = t_{j-1}, s_{i-1} = t_j \text{ oraz } i, j > 1 \end{cases} \quad (2.7)$$

Rekurencja (2.7) liczy czyli ścisłą odległość Damerau-Levenshteina, która nie zawsze jest równa odległości Damerau-Levenshteina. Dla przykładu, odległość między napisami **ba** i **acb** wyliczona przy pomocy rekurencji (2.7) jest równa trzy, natomiast odległość Damerau-Levenshteina między tymi napisami wynosi dwa (zob. poniżej).

Lemat 2.6. *Nieściska odległość Damerau-Levenshteina oraz ścisła odległość Damerau-Levenshteina są różnymi funkcjami. Co więcej, ścisła odległość Damerau-Levenshteina nie jest metryką, gdyż nie jest subaddytywna [5].*

Dowód. Ścisła odległość Damerau-Levenshteina traktuje transpozycję (tj. zamianę dwóch przylegających do siebie znaków) jako bazową operację edycyjną. Aby udowodnić lemat podamy przykład, w którym zakaz modyfikacji znaków już stransponowanych odróżnia odległość Damerau-Levenshteina od ścisłej odległości Damerau-Levenshteina [5]. ■

Ścisła odległość Damerau-Levenshteina nie spełnia nierówności trójkąta, gdyż

$$\text{ba} \xrightarrow[1]{\text{transp. } b \text{ i } a} \text{ab} + \text{ab} \xrightarrow[1]{\text{wst. } c} \text{acb},$$

natomiast

$$ba \xrightarrow[1]{us. b} a \xrightarrow[1]{wst. c} ac \xrightarrow[1]{wst. b} acb,$$

zatem

$$2 = ED(ba, ab) + ED(ab, acb) \leq ED(ba, acb) = 3.$$

Ponieważ ścisła i nieścisła odległość Damerau-Levenshteina są różnymi funkcjami, tę pierwszą nazywa się często *odległością optymalnego dopasowania napisów*. Od tego momentu w niniejszej pracy ścisłą odległość Damerau-Levenshteina nazywamy odległością optymalnego dopasowania napisów, natomiast nieścisłą odległość Damerau-Levenshteina nazywamy odległością Damerau-Levenshteina [28].

Rekurencyjna definicja odległości Damerau-Levenshteina została po raz pierwszy podana przez Lowrance'a i Wagnera [31]. W ich definicji zamiana zostaje zastąpiona przez minimalizację po możliwych transpozycjach między danym znakiem a wszystkimi nie przetransformowanymi znakami, przy czym koszt transpozycji wzrasta wraz z odległością między transponowanymi znakami [28]. Innymi słowy, do \mathbb{B} należą wstawienia, usunięcia, zamiany oraz operacje $axb \rightarrow bya$ o koszcie równym $|x| + |y| + 1$ [5]. Mając tak zdefiniowane \mathbb{B} ogólna rekurencja (2.2) dla odległości Damerau-Levenshteina przedstawia się następująco:

$$C_{i,j} = \min \begin{cases} 0, & \text{gdy } i = j = 0 \\ C_{i-1,j} + 1, & \text{gdy } i > 0 \\ C_{i,j-1} + 1, & \text{gdy } j > 0 \\ C_{i-1,j-1} + [s_i \neq t_j], & \text{gdy } i, j > 0 \\ \min_{\substack{0 < i' < i, 0 < j' < j \\ s_i = t_{j'}, s_{i'} = t_j}} \{C_{i'-1,j'-1} + (i - i') + (j - j') - 1\} \end{cases} \quad (2.8)$$

Co więcej, Lowrance i Wagner wykazali, że wewnętrzne minimum w rekurencji (2.8) jest osiągnięte dla największych $i' < i$ oraz $j' < j$, które spełniają $s_i = t_{j'}$ oraz $s_{i'} = t_j$. Odległość Damerau-Levenshteina oznaczamy przez d_{dl} .

Przykład 2.8. Odległość optymalnego dopasowania napisów oraz Damerau-Levenshteina między napisami *kozak* i *foczka* wynosi 3, bo *kozak* $\xrightarrow[1]{zm. k \text{ na } f}$ *fozak* $\xrightarrow[1]{wst. c}$ *foczak* $\xrightarrow[1]{transp. a \text{ i } k}$ *foczka*.

W przypadku odległości Levenshteina, optymalnego dopasowania napisów oraz Damerau-Levenshteina, maksymalna odległość między napisami s i t wynosi $\max\{|s|, |t|\}$. Jednak warto zauważyć, że gdy liczba dopuszczalnych operacji edycyjnych rośnie, to liczba dopuszczalnych ścieżek między napisami wzrasta, co pozwala czasem zmniejszyć odległość między napisami. Dlatego relację między zaprezentowanymi powyżej odległościami można podsumować następująco [28]:

$$\left. \begin{aligned} \infty(\geq |s|) &\geq d_{\text{hamming}}(s, t) \\ |s| + |t| &\geq d_{\text{lcs}}(s, t) \\ \max\{|s|, |t|\} &\end{aligned} \right\} \geq d_{\text{lv}}(s, t) \geq d_{\text{osa}}(s, t) \geq d_{\text{dl}}(s, t) \geq 0.$$

Jako że odległości Hamminga i najdłuższego wspólnego podnapisu nie mają wspólnych bazowych operacji edycyjnych, to nie ma pomiędzy nimi porządku relacyjnego. Górne ograniczenie $|s|$ odległości Hamminga jest zachowane jedynie, gdy $|s| = |t|$.

2.2.2. Odległości oparte na q -gramach

Przypomnijmy, że q -gramem nazywamy napis składający się z q kolejnych (przylegających) znaków. q -gramy związane z napisem s są otrzymywane przez przesuwanie przez napis s „okna” o szerokości q znaków i zapisaniu występujących q -gramów. Przykładowo digramy napisu `ela` to `el` i `la`. Oczywiście taka procedura nie ma sensu, gdy $q > |s|$ lub gdy $q = 0$. Z tego powodu definiujemy następujące przypadki brzegowe dla wszystkich odległości $d_q(s, t)$ opartych na q -gramach:

$$\begin{aligned} d_q(s, t) &= \infty, \text{ gdy } q > \min\{|s|, |t|\}, \\ d_0(s, t) &= \infty, \text{ gdy } |s| + |t| > 0, \\ d_0(\varepsilon, \varepsilon) &= 0. \end{aligned}$$

Najprostszą odległością między napisami, opartą na q -gramach, otrzymuje się przez wypisanie unikalnych q -gramów w obu napisach i porównanie które są wspólne. Jeśli przez $\mathcal{Q}(s, q)$ oznaczmy zbiór unikalnych q -gramów występujących w napisie s , to możemy zdefiniować odległość Jaccarda [28]:

Definicja 2.11. Niech $\mathcal{Q}(s, q)$ oznacza zbiór unikalnych q -gramów występujących w napisie s . Wówczas odległość Jaccarda, d_{jac} , między napisami s i t definiuje się jako:

$$d_{\text{jac}}(s, t, q) = 1 - \frac{|\mathcal{Q}(s, q) \cap \mathcal{Q}(t, q)|}{|\mathcal{Q}(s, q) \cup \mathcal{Q}(t, q)|},$$

gdzie $|\cdot|$ oznacza licznosc zbioru.

Odległość Jaccarda przyjmuje wartości z przedziału $[0, 1]$, gdzie 0 odpowiada pełnemu pokryciu zbiorów, tj. $\mathcal{Q}(s, q) = \mathcal{Q}(t, q)$, natomiast 1 oznacza puste przecięcie, tj. $\mathcal{Q}(s, q) \cap \mathcal{Q}(t, q) = \emptyset$.

Przykład 2.9. Odległość Jaccarda między napisami `papaja` i `japa` dla $q = 2$ wynosi: $d_{\text{jac}}(\text{papaja}, \text{japa}, 2) = 0.25$, bo $\mathcal{Q}(\text{papaja}, 2) = \{\text{pa}, \text{ap}, \text{aj}, \text{ja}\}$, a $\mathcal{Q}(\text{japa}, 2) = \{\text{ja}, \text{ap}, \text{pa}\}$, więc odległość wynosi $1 - \frac{3}{4} = 0.25$.

Inną odległością opartą na q -gramach jest odległość q -gramowa. Otrzymuje się ją przez wylistowanie q -gramów występujących w obu napisach i policzenie q -gramów, które nie są wspólne dla obu napisów [28]. Formalnie można to zapisać następująco:

Definicja 2.12. Niech $s = s_1 s_2 \dots s_n$ będzie napisem z Σ^* i niech $x \in \Sigma^q$ będzie q -gramem. Jeśli $s_i s_{i+1} \dots s_{i+q-1} = x$ dla pewnego i , to x wystąpiło w s . Niech $\mathbf{v}(s, q)$ będzie wektorem o długości $|\Sigma|^q$, którego zmienne oznaczają liczbę wystąpień wszystkich możliwych q -gramów z Σ^q w s . Niech $s, t \in \Sigma^*$ oraz $q > 0$ będzie liczbą naturalną. Odległość q -gramową między napisami s i t definiuje się następująco [27]:

$$d_{\text{qgram}}(s, t, q) = \|\mathbf{v}(s, q) - \mathbf{v}(t, q)\|_1 = \sum_{i=1}^{|\Sigma|^q} |v_i(s, q) - v_i(t, q)|. \quad (2.9)$$

Wzór (2.9) definiuje odległość q -gramową między napisami s i t jako odległość L_1 pomiędzy $\mathbf{v}(s, q)$ i $\mathbf{v}(t, q)$. Zauważmy, że zamiast sprawdzać wystąpienie wszystkich możliwych q -gramów z Σ^q w napisach s i t , wystarczy policzyć jedynie liczbę faktycznie występujących q -gramów w obu napisach, by obliczyć odległość q -gramową [28].

Przykład 2.10. Niech $\Sigma = \{a, j, p\}$. Wówczas odległość q -gramowa między napisami **papaja** i **japa** dla $q = 2$ wynosi: $d_{\text{qgram}}(\text{papaja}, \text{japa}, 2) = 2$. Wszystkie możliwe digramy występujące w napisach **papaja** i **japa** to **aj**, **ap**, **ja** i **pa**. Zatem $\mathbf{v}(\text{papaja}, 2) = (1, 1, 1, 2)$, a $\mathbf{v}(\text{japa}, 2) = (0, 1, 1, 1)$. Stąd $d_{\text{qgram}}(\text{papaja}, \text{japa}, 2) = \|(1, 1, 1, 2) - (0, 1, 1, 1)\|_1 = 2$.

Maksymalna liczba wystąpień różnych q -gramów w napisie s wynosi $|s| - q + 1$. Stąd maksymalna odległość q -gramowa między napisami s i t wynosi $|s| + |t| - 2q + 2$, osiągana, gdy s i t nie mają wspólnych q -gramów [28].

Skoro zdefiniowana została odległość q -gramowa w języku wektorów, każda miara podobieństwa w (całkowitej) przestrzeni wektorowej może zostać zastosowana. Przykładowo można zdefiniować *odległość cosinusową* między napisami s i t :

$$d_{\cos}(s, t, q) = 1 - \frac{\mathbf{v}(s, q) \cdot \mathbf{v}(t, q)}{\|\mathbf{v}(s, q)\|_2 \|\mathbf{v}(t, q)\|_2}, \quad (2.10)$$

gdzie $\|\cdot\|_2$ oznacza zwykłą normę Euklidesową. Odległość cosinusowa wynosi zero, gdy $s = t$ oraz jeden, gdy s i t nie mają wspólnych q -gramów. Odległość ta powinna być interpretowana jako kąt pomiędzy $\mathbf{v}(s, q)$ i $\mathbf{v}(t, q)$, jako że drugie wyrażenie równania (2.10) przedstawia cosinus kąta między dwoma wektorami.

Przykład 2.11. Niech $\Sigma = \{a, j, p\}$. Wówczas odległość cosinusowa między napisami **papaja** i **japa** dla $q = 2$ wynosi: $d_{\cos}(\text{papaja}, \text{japa}, 2) \approx 0.127$, bo $\mathbf{v}(\text{papaja}, 2) = (1, 1, 1, 2)$, a $\mathbf{v}(\text{japa}, 2) = (0, 1, 1, 1)$ (zob. przykład 2.10), więc $d_{\cos}(\text{papaja}, \text{japa}, 2) = 1 - \frac{4}{\sqrt{3} \cdot \sqrt{7}} \approx 0.127$.

Wszystkie trzy odległości oparte na q -gramach są nieujemne i symetryczne. Odległości Jaccarda i q -gramowa spełniają również nierówność trójkąta (dowód dla tej pierwszej poniżej), w odróżnieniu od odległości cosinusowej. Żadna z powyższych miar nie spełnia warunku identyczności, ponieważ zarówno $\mathcal{Q}(s, q)$, jak i $\mathbf{v}(s, q)$ jest funkcją wiele-do-jednego. Jako przykład, zauważmy, że $\mathcal{Q}(\text{abaca}, 2) = \mathcal{Q}(\text{acaba}, 2)$ oraz $\mathbf{v}(\text{abaca}, 2) = \mathbf{v}(\text{acaba}, 2)$, więc $d_{\text{jac}}(\text{abaca}, \text{acaba}, 2) = d_{\text{qgram}}(\text{abaca}, \text{acaba}, 2) = d_{\cos}(\text{abaca}, \text{acaba}, 2) = 0$. Innymi słowy, odległość oparta na q -gramach równa zero, nie gwarantuje, że $s = t$. Jeszcze inaczej, odległość Jaccarda i q -gramowa są pseudometrykami. Inne własności $\mathbf{v}(s, q)$ można znaleźć w [27].

Udowodnimy teraz, że odległość Jaccarda spełnia nierówność trójkąta.

Lemat 2.7. Niech $A := \mathcal{Q}(s, q), B := \mathcal{Q}(t, q)$ dla ustalonego q . Wówczas odległość Jaccarda można napisać następująco:

$$\begin{aligned} d_{\text{jac}}(s, t, q) &= 1 - \frac{|\mathcal{Q}(s, q) \cap \mathcal{Q}(t, q)|}{|\mathcal{Q}(s, q) \cup \mathcal{Q}(t, q)|} = \\ &= 1 - \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} =: d(A, B). \end{aligned}$$

d spełnia nierówność trójkąta:

$$\forall A, B, C \quad d(A, C) \geq d(A, B) + d(B, C).$$

Dowód. Przypuśćmy, że nierówność nie jest spełniona, tj. istnieją zbiory A, B oraz C , takie, że $d(A, C) > d(A, B) + d(B, C)$. Wówczas

$$1 - \frac{|A \cap C|}{|A \cup C|} > 1 - \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} + 1 - \frac{|B \cap C|}{|B \cup C|}$$

lub równoważnie

$$\frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} + \frac{|B \cap C|}{|B \cup C|} - \frac{|A \cap C|}{|A \cup C|} > 1. \quad (2.11)$$

Ponieważ postulujemy, że nierówność trójkąta nie jest spełniona, chcemy aby lewa strona ostatniej nierówności była jak najmniejsza. Stąd wystarczy rozważyć przypadki, gdy $A \subseteq B$ lub $B \subseteq A$, gdyż w przeciwnym przypadku, dla $B' = A \cap B$ mamy

$$\frac{|A \cap B'|}{|A \cup B'|} = \frac{|A \cap B|}{|A \cup (A \cap B)|} \geq \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|}.$$

Zastępujemy zatem B przez B' i dostajemy:

$$\frac{|A \cap B'|}{|A \cup B'|} + \frac{|B \cap C|}{|B \cup C|} - \frac{|A \cap C|}{|A \cup C|} \geq \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} + \frac{|B \cap C|}{|B \cup C|} - \frac{|A \cap C|}{|A \cup C|}.$$

Analogicznie możemy rozważyć jedynie przypadki gdy $C \subseteq B$ lub $B \subseteq C$. Przeanalizujemy teraz cztery przypadki.

Przypadek 1. $A \subseteq B$ oraz $C \subseteq B$. Wówczas

$$\begin{aligned} \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} + \frac{|B \cap C|}{|B \cup C|} - \frac{|A \cap C|}{|A \cup C|} &= \frac{|A|}{|B|} + \frac{|C|}{|B|} - \frac{|A \cap C|}{|A \cup C|} = \frac{|A| + |C|}{|B|} - \frac{|A \cap C|}{|A \cup C|} = \\ &= \frac{|A \cup C| + |A \cap C|}{|B|} - \frac{|A \cap C|}{|A \cup C|} \leq \frac{|A \cup C|}{|B|} + \frac{|A \cap C|}{|B|} - \frac{|A \cap C|}{|B|} = \frac{|A \cup C|}{|B|} \leq 1 \end{aligned}$$

Przypadek 2. $A \subseteq B$ oraz $B \subseteq C$. Wówczas

$$\frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} + \frac{|B \cap C|}{|B \cup C|} - \frac{|A \cap C|}{|A \cup C|} = \frac{|A|}{|B|} + \frac{|B|}{|C|} - \frac{|A|}{|C|} \leq \frac{|A|}{|C|} + \frac{|B|}{|C|} - \frac{|A|}{|C|} = \frac{|B|}{|C|} \leq 1$$

Przypadek 3. $C \subseteq B$ oraz $B \subseteq A$. Wówczas

$$\frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} + \frac{|B \cap C|}{|B \cup C|} - \frac{|A \cap C|}{|A \cup C|} = \frac{|B|}{|A|} + \frac{|C|}{|B|} - \frac{|C|}{|A|} \leq \frac{|B|}{|A|} + \frac{|C|}{|A|} - \frac{|C|}{|A|} = \frac{|B|}{|A|} \leq 1$$

Przypadek 4. $B \subseteq A$ oraz $B \subseteq C$. Wówczas

$$\frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} + \frac{|B \cap C|}{|B \cup C|} - \frac{|A \cap C|}{|A \cup C|} = \frac{|B|}{|A|} + \frac{|B|}{|C|} - \frac{|A \cap C|}{|A \cup C|} \leq \frac{|A \cap C|}{|A|} + \frac{|B|}{|C|} - \frac{|A \cap C|}{|A|} = \frac{|B|}{|C|} \leq 1$$

Wszystkie cztery powyższe przypadki są w sprzeczności ze stwierdzeniem, że wyrażenie (2.11) jest ostro większe od 1. Stąd założenie jest nieprawdziwe, więc nierówność trójkąta jest spełniona [33]. ■

2.2.3. Miary heurystyczne

Odległość Jaro została stworzona w amerykańskim Bureau of the Census (rządowa agencja, która jest odpowiedzialna m.in. za spis ludności Stanów Zjednoczonych) w celu połączenia rekordów, które były wpisane w niewłaściwe pola formularza oraz zlikwidowaniu literówek. Pierwszy publiczny opis tej odległości pojawił się w instrukcji obsługi [11], co może wyjaśniać dlaczego nie jest rozpowszechniona w literaturze informatycznej. Jednak odległość ta została skutecznie zastosowana w statystycznych problemach dopasowania w przypadku dość krótkich napisów, głównie imion, nazwisk oraz danych adresowych [28].

Rozumowanie stojące za odległością Jaro jest następujące: błędny znak oraz transpozycje znaków są spowodowane błędem przy wpisywaniu, ale mało prawdopodobne jest znalezienie błędnego znaku w miejscu odległym od zamierzonego, żeby mogło to być spowodowane błędem przy wpisywaniu. Stąd odległość Jaro mierzy liczbę wspólnych znaków w dwóch napisach, które nie są zbyt odległe od siebie i dodaje karę za dopasowanie znaków, które są stransponowane. Formalna definicja wygląda następująco [28]:

Definicja 2.13. Niech $\lfloor x \rfloor$ oznacza największą liczbę całkowitą, nie większą niż x . Niech s i t będą napisami z Σ^* . Niech m oznacza liczbę wspólnych znaków z s i t , przy czym zakładając, że $s_i = t_j$, to znak ten jest wspólny dla obu napisów, jeśli:

$$|i - j| < \left\lfloor \frac{\max\{|s|, |t|\}}{2} \right\rfloor$$

i każdy znak z s może być wspólny ze znakiem z t tylko raz. W końcu, jeśli s' i t' są podnapisami utworzonymi z s i t poprzez usunięcie znaków, które nie są wspólne dla obu napisów, to T jest liczbą transpozycji potrzebnych to otrzymania t' z s' . Transpozycje znaków nieprzylegających są dozwolone.

Wówczas odległość Jaro definiuje się jako:

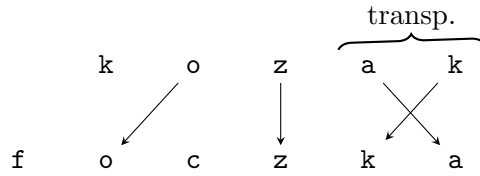
$$d_{\text{jaro}}(s, t) = \begin{cases} 0, & \text{gdy } s = t = \varepsilon, \\ 1, & \text{gdy } m = 0 \text{ i } |s| + |t| > 0, \\ 1 - \frac{1}{3} \left(\frac{m}{|s|} + \frac{m}{|t|} + \frac{m-T}{m} \right) & \text{w przeciwnym przypadku.} \end{cases} \quad (2.12)$$

Odległość Jaro przyjmuje wartości z przedziału $[0, 1]$, gdzie zero oznacza, że $s = t$, natomiast jeden wskazuje na kompletną odmiennosć napisów z $m = T = 0$.

Przykład 2.12. Odległość Jaro między napisami **kozak** i **foczka** wynosi: $d_{\text{jaro}}(\text{kozak}, \text{foczka}) \approx 0.261$, bo liczba wspólnych znaków wynosi $m = 4$, a liczba potrzebnych transpozycji wynosi $T = 1$ (zob. rys. 2.4), co daje odległość równą $d_{\text{jaro}}(\text{kozak}, \text{foczka}) = 1 - \frac{1}{3} \left(\frac{3}{5} + \frac{4}{6} + \frac{3}{4} \right) = \frac{47}{180} \approx 0.261$.

Winkler rozszerzył odległość Jaro przez włączenie dodatkowej kary za błędny znak wśród pierwszych czterech znaków napisu [28]:

Definicja 2.14. Niech s i t będą napisami z Σ^* , $\ell(s, t)$ oznacza długość najdłuższego wspólnego przedrostka, mającego maksymalnie cztery znaki i niech p będzie liczbą z przedziału $[0, \frac{1}{4}]$. Wówczas odległość Jaro-Winklera dana jest wzorem [34]:

Rysunek 2.4: Przykład odległości Jaro między napisami **kozak** i **foczka**.

$$d_{\text{jw}}(s, t, p) = d_{\text{jaro}}(s, t)[1 - p\ell(s, t)] \quad (2.13)$$

Czynnik p określa jak bardzo różnice w czterech pierwszych znakach w obu napisach wpływają na odległość między nimi. Zmienna p jest liczbą z przedziału $[0, \frac{1}{4}]$, by mieć pewność, że odległość Jaro-Winklera miała wartości w przedziale $[0, 1]$ ($0 \leq d_{\text{jw}}(s, t) \leq 1$). Jeśli $p = 0$, to odległość ta redukuje się do odległości Jaro i wszystkie znaki wnoszą taki sam wkład do funkcji odległości. Jeśli $p = \frac{1}{4}$, to odległość Jaro-Winklera jest równa zero nawet wówczas gdy tylko cztery pierwsze znaki w obu napisach pokrywają się. Powód jest taki, że podobno ludzie są mniej skłonni do popełniania błędów w czterech pierwszych znakach lub też są one lepiej zauważalne, więc różnice w pierwszych czterech znakach wskazują na większe prawdopodobieństwo, że dwa napisy są rzeczywiście różne [28]. Winkler [34] używał w swoich badaniach $p = 0.1$ i zauważył lepsze rezultaty niż dla $p = 0$.

Przykład 2.13. Odległość Jaro-Winklera między napisami **faktura** i **faktyczny** dla $p = 0$, $p = 0.1$ oraz $p = 0.25$ wynosi odpowiednio:

$$\begin{aligned} d_{\text{jw}}(\text{faktura}, \text{faktyczny}, p = 0.00) &\approx 0.328 = d_{\text{jaro}}(\text{faktura}, \text{faktyczny}) \\ d_{\text{jw}}(\text{faktura}, \text{faktyczny}, p = 0.10) &\approx 0.197 \\ d_{\text{jw}}(\text{faktura}, \text{faktyczny}, p = 0.25) &= 0 \end{aligned}$$

Łatwo zauważyć z równań (2.12) i (2.13), że odległości Jaro i Jaro-Winklera, dla $p \neq \frac{a}{4}$, są nieujemne, symetryczne i spełniają warunek identycznościowy. Nierówność trójkąta w obu przypadkach nie jest jednak spełniona. Rozważmy następujący przykład: $s = \text{ab}$, $t = \text{cb}$, $u = \text{cd}$. Jako że napisy s i u nie mają wspólnych znaków, to odległość Jaro między nimi wynosi $d_{\text{jaro}}(s, u) = 1$, podczas gdy $d_{\text{jaro}}(s, t) = d_{\text{jaro}}(t, u) = \frac{1}{3}$, więc w tym przypadku $d_{\text{jaro}}(s, u)$ jest większe od $d_{\text{jaro}}(s, t) + d_{\text{jaro}}(t, u)$. Z tego łatwo zauważyć, że odległość Jaro-Winklera nie spełnia nierówności trójkąta dla tego samego przykładu dla $p \in [0, \frac{1}{4}]$ [28].

W niniejszym rozdziale przedstawiono odległości określone na przestrzeni ciągów znaków. Mając do wyboru wachlarz różnych funkcji nasuwa się pytanie, której użyć. Ostateczna decyzja zależy od konkretnego przypadku, jednak istnieją pewne ogólne reguły. Wybór pomiędzy odległościami opartymi na operacjach edycyjnych i q -gramach z jednej strony, a miarami heurystycznymi z drugiej zależy w dużej mierze od długości napisów – te ostatnie są dedykowane krótszym napisom takim jak np. dane osobowe. W odróżnieniu od odległości opartych na operacjach edycyjnych i miarach heurystycznych, odległości oparte na q -gramach można łatwo policzyć dla bardzo długich tekstów, jako że liczba q -gramów możliwych do utworzenia z języka naturalnego (dla niezbyt małego q , tj. $q \geq 3$) jest z reguły o wiele mniejsza niż liczba q -gramów, którą można otrzymać z całego alfabetu. Wybór spośród odległości opartych na operacjach edycyjnych zależy przede wszystkim od dokładności jaką chce się otrzymać. Przykładowo do wyszukiwania haseł w słowniku, gdzie różnice między dobranymi napisami

są niewielkie, odległości pozwalające na więcej operacji edycyjnych (tak jak np. odległość Damerau-Levenshteina) mogą dać lepsze rezultaty. Odległości Jaro i Jaro-Winklera zostały skonstruowane do krótkich, napisanych przez człowieka, napisów, więc ich zakres zastosowania powinien być jasny.

Rozdział 3

Analiza skupień metodą k -średnich

Analiza skupień polega na wyróżnieniu w zbiorze ustalonej liczby rozłącznych i niepustych podzbiorów obserwacji w jakimś sensie do siebie podobnych, równocześnie zachowując maksymalne zróżnicowanie obserwacji pomiędzy poszczególnymi podzbiorami [12]. W niniejszym rozdziale przedstawimy analizę skupień metodą k -średnich w trzech odsłonach: metodę wsadową, przy użyciu stochastycznego spadku gradientu oraz metodę pośrednią, tzw. minisadową. Dodatkowo zaprezentujemy metody hierarchiczne analizy skupień.

3.1. Metoda k -średnich

[TO DO: DOROBIC PRZYKŁADY:

- (2.1, 2.1) POKAZAC SKUPIENIA OTRZYMANE PRZY UZYCIU 3/4 ALGORYTMOW NP. NA IRISIE
 - (2.3) NARYSOWAC JAKIS DENDROGRAM
 - (2.3) POKAZAC ODMIENNOŚCI NAJBLIŻSZEGO, NAJDALSZEGO, ŚREDNIEGO
 - (2.4) PRZYKŁADY JAKOŚCI NA PODSTAWIE JAKICHŚ LOSOWYCH KLAS
-]

Rozważmy przestrzeń euklidesową \mathbb{R}^p i niech będzie dana liczba skupień $k \in \mathbb{N}$. Wówczas zadanie znalezienia skupień o wyżej wymienionych własnościach można sprowadzić do dobrze określonego zadania optymalizacyjnego. Weźmy próbę n -elementową obserwacji \mathbf{x}_i , $i = 1, \dots, n$ o wartościach w \mathbb{R}^p . Suma kwadratów odległości euklidesowej między obserwacjami próby wynosi [12]:

$$T = \frac{1}{2} \sum_i^n \sum_j^n \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2^2, \quad (3.1)$$

gdzie $\|\cdot\|_2$ oznacza normę euklidesową. Niech funkcja $C : \{1, \dots, n\} \rightarrow \{1, \dots, k\}$ oznacza przydzielenie danej obserwacji danemu skupieniu, tzn. jeśli $C(i) = l$, to oznacza, że \mathbf{x}_i należy do l -tego skupienia. Zakładając, że dokonano podziału próby na k podzbiorów, można całkowitą sumę kwadratów rozłożyć na sumę kwadratów odległości między obserwacjami z tego samego skupienia oraz na sumę kwadratów odległości między obserwacjami z różnych

skupień [12]:

$$T = W + B = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^k \sum_{C(i)=k} \sum_{C(j)=k} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2^2 + \frac{1}{2} \sum_{l=1}^k \sum_{C(i)=k} \sum_{C(j) \neq k} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2^2. \quad (3.2)$$

Mając tak sformułowany rozkład sumy T widzimy, że zmieniając podział punktów na skupienia zmienia się zarówno suma W , jak i B . Można więc sformułować problem analizy skupień jako zadanie minimalizacji sumy W lub, równoważnie, maksymalizacji sumy B . Maksymalizacja B to po prostu maksymalizacja rozproszenia punktów z różnych podzbiorów, co jest równoznaczne z minimalizacją rozproszenia punktów z tego samego skupienia. Stąd, rozwiązaniem problemu analizy skupień jest dokonanie takiego podziału próby, aby zminimalizować sumę W . Niestety, ze względu na złożoność obliczeniową, niemożliwe jest bezpośrednie rozwiązanie tego problemu [12]. Można pokazać, że jest on NP-trudny [2].

Przez n_l oznaczmy licznosc l -tego skupienia i niech $\mathbf{m}_l = \frac{1}{n_l} \sum_{C(i)=l} \mathbf{x}_i$ oznacza wektorową średnią obserwacji z l -tego skupienia. Łatwo zauważyć, że [12]:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^k \sum_{C(i)=l} n_l \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_l\|_2^2. \quad (3.3)$$

Średnie \mathbf{m}_l , $l = 1, \dots, k$ nazywamy *środkami* lub *centroidami skupień*. Równanie (3.3) można uprościć do następującej postaci:

$$\widetilde{W} = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^k \sum_{C(i)=l} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_l\|_2^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_{C(i)}\|_2^2. \quad (3.4)$$

Algorytmy, które rozwiązują problem minimalizacji sumy (3.4), znane są pod nazwą *metody k -średnich*.

3.2. Algorytmy k -średnich

3.2.1. Algorytm wsadowy

Algorytm *wsadowy* (ang. *batch algorithm*) zostaje zainicjalizowany przez losowe wyznaczenie k punktów jako początkowe środki skupień. Dalej następuje przydzielenie wszystkich punktów próby do najbliższego skupienia, a następnie przeliczenie środków jako średniej ze wszystkich obserwacji w danym skupieniu. Procedura ta jest powtarzana aż do ustabilizowania się algorytmu, tj. do momentu aż żaden punkt próby nie zmieni skupienia [35].

Algorytm wsadowy jest najbardziej popularnym i najczęściej stosowanym algorytmem, gdyż jest szybki i zazwyczaj daje dobre rezultaty. Jednakże jeśli liczba obserwacji w zbiorze jest bardzo duża, to obliczanie średnich z obserwacji we wszystkich skupieniach jest dość kosztowne obliczeniowo, zbiegając w czasie $O(knp)$, gdzie p to liczba zmiennych. Stąd Bottou i Bengio [4] zaproponowali algorytm oparty na stochastycznym spadku gradientu.

Algorytm 3.1 Algorytm wsadowy k -średnich

```

1: dane: liczba skupień  $k$ , zbiór danych  $X$ 
2: losowa inicjalizacja  $\mathbf{m}_l, \forall l = 1, \dots, k$ 
3: repeat
4:   for  $i = 1, \dots, n$  do
5:      $C(i) = \arg \min_l \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_l\|_2^2$ 
6:   end for
7:   for  $l = 1, \dots, k$  do
8:      $\mathbf{m}_l = \frac{1}{n_l} \sum_{C(i)=l} \mathbf{x}_i$ 
9:   end for
10: until zbieżność

```

3.2.2. Algorytmy oparte na metodach najszybszego spadku

Algorytmy oparte na metodach najszybszego spadku (zwane też metodami największego spadku oraz algorytmami gradientowymi) są często stosowane np. w regresji liniowej [3]. Idea polega na szukaniu minimum z danej funkcji kosztu, w kolejnych krokach algorytmu aktualizując zmienną, w kierunku, w którym spadek gradientu był największy. Każda aktualizacja zależy od parametru, zwanego *parametrem uczenia*, który musi być odpowiednio dobrany. W niniejszym podrozdziale opiszemy trzy algorytmy gradientowe.

Mając daną funkcję kosztu $\widetilde{W} = \widetilde{W}(\mathbf{m}, \mathbf{x}_i) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_{C(i)}\|_2^2$, możemy znaleźć minimum używając tzw. *spadku gradientu*. W każdej iteracji algorytmu uaktualniamy wektor \mathbf{m} na podstawie gradientu $\widetilde{W}(\mathbf{m}, \mathbf{x}_i)$:

$$\mathbf{m}_l^{(t+1)} = \mathbf{m}_l^{(t)} + \gamma \sum_{i=1}^n \frac{\partial \widetilde{W}(\mathbf{m}, \mathbf{x}_i)}{\partial \mathbf{m}}, \quad (3.5)$$

gdzie γ jest odpowiednio dobranym *parametrem uczenia*, a t oznacza iterację algorytmu [3]. Zaobserwowano, że parametrem uczenia, które daje najlepsze rezultaty dla algorytmu k -średnich jest $\frac{1}{n_{C(i)}}$ [4]. Stąd też algorytm *wsadowy*, w każdej iteracji algorytmu aktualizuje wektor \mathbf{m} następująco [4]:

$$\mathbf{m}_l^{(t+1)} = \mathbf{m}_l^{(t)} + \sum_{C(i)=l} \frac{1}{n_l} (\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_l^{(t)}). \quad (3.6)$$

Algorytm *stochastyczny największego spadku*, ozn. SGD (ang. *stochastic gradient descent*), jest daleko idącym uproszczeniem. Zamiast liczyć gradient z $\widetilde{W}(\mathbf{m}, \mathbf{x}_i)$ wprost, każda iteracja estymuje gradient na podstawie *jednej losowo wybranej obserwacji* \mathbf{x}_i [3]:

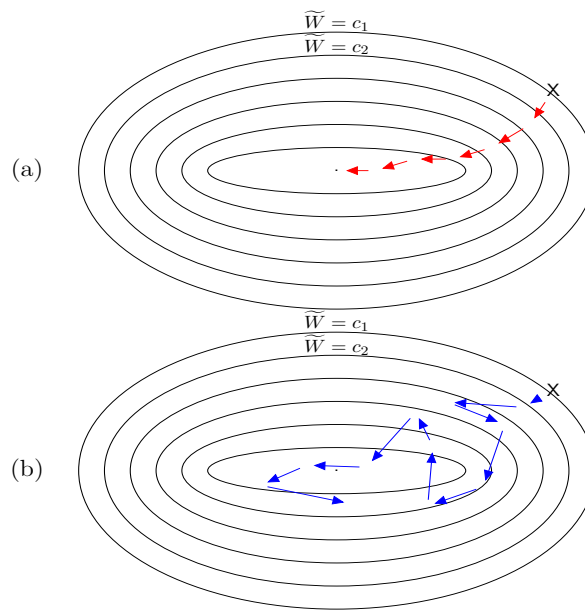
$$\mathbf{m}_l^{(t+1)} = \mathbf{m}_l^{(t)} + \gamma \frac{\partial \widetilde{W}(\mathbf{m}, \mathbf{x}_i)}{\partial \mathbf{m}}, \quad (3.7)$$

gdzie γ jest odpowiednio dobranym parametrem uczenia. Tak samo jak w przypadku algorytmu wsadowego, parametrem uczenia, które daje najlepsze rezultaty jest $\frac{1}{n_{C(i)}}$ [4]. Stąd też algorytm stochastyczny w każdej iteracji algorytmu aktualizuje wektor \mathbf{m} następująco [4]:

$$n_l^{(t+1)} = n_l^{(t)} + \begin{cases} 1, & \text{gdy } l = C(i), \\ 0, & \text{wpp.} \end{cases} \quad (3.8)$$

$$\mathbf{m}_l^{(t+1)} = \mathbf{m}_l^{(t)} + \begin{cases} \frac{1}{n_l}(\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_l^{(t)}), & \text{gdy } l = C(i), \\ 0, & \text{wpp.} \end{cases} \quad (3.9)$$

Algorytm SGD opiera się na przeliczaniu średniej po każdym przydzieleniu obserwacji do skupienia, choć z powodu stochastycznego szumu, takie rozwiązanie może nie prowadzić do lokalnego minimum, a jedynie w jego otoczenie. Na rys. 3.1 przedstawiono przykładową drogę aktualizacji parametrów.



Rysunek 3.1: Przykładowa droga wsadowego spadku gradientu (rys. a) i stochastycznego spadku gradientu (rys. b).

Kolejne elipsy oznaczają warstwyce $\widetilde{W}(\mathbf{m}, \mathbf{x}_i)$ w zależności od wartości zmiennej \mathbf{m} , a centrum oznacza (lokalne) minimum tej funkcji. Jeśli algorytm rozpoczyna działanie w punkcie oznaczonym przez X , to w przypadku algorytmu wsadowego, w kolejnych iteracjach zmienna \mathbf{m} zmienia swoją wartość, przybliżając się do (lokalnego) minimum funkcji \widetilde{W} . Natomiast algorytm stochastyczny w każdej iteracji przybliży się w stronę minimum w sposób quasi-losowy, tzn. może nigdy nie osiągnąć właściwego minimum, a jedynie „krążyć” wokół niego.

Algorytm stochastyczny rozpoczyna się tak samo jak algorytm wsadowy, tj. inicjalizacją losowych k środków skupień. Następnie zbiór obserwacji jest mieszany i obserwacje po kolei są przydzielane do najbliższego skupienia. Środki skupień przeliczane są po każdym przydzieleniu punktu do skupienia. Procedura ta powtarzana jest do uzyskania zbieżności [4]. Algorytm ten jest dużo szybszy od dwóch wcześniejszych, kosztem dokładności rozwiązania [3].

Algorytm *mini-wsadowy* (ang. *mini-batch k-means*) jest połączeniem dwóch poprzednich algorytmów, tj. w każdej iteracji przydzielanych do najbliższego skupienia jest b losowo wybranych obserwacji, po czym następuje przeliczenie środków skupień [24]. Algorytm ten jest porównywalnie szybki do algorytmu SGD, osiągając przy tym lepsze rezultaty z powodu mniejszego stochastycznego szumu.

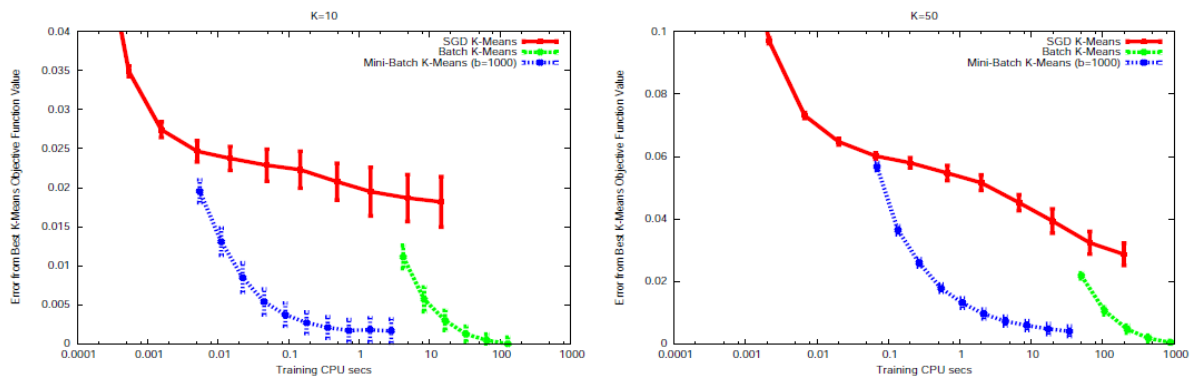
Algorytm 3.2 Algorytm SGD k -średnich

-
- 1: dane: liczba skupień k , zbiór danych X
 - 2: losowa inicjalizacja $m_l, \forall l = 1, \dots, k$
 - 3: inicjalizacja $n_l = 0, \forall l = 1, \dots, k$
 - 4: **repeat**
 - 5: losowo wybierz jedną obserwację \mathbf{x}_i z X
 - 6: $C(i) = \arg \min_l \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_l\|_2^2$
 - 7: $n_{C(i)} = n_{C(i)} + 1$
 - 8: $\mathbf{m}_{C(i)} = \mathbf{m}_{C(i)} + \frac{1}{n_{C(i)}} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_{C(i)}\|_2$
 - 9: **until** zbieżność
-

Algorytm 3.3 Algorytm mini-wsadowy k -średnich

-
- 1: dane: liczba skupień k , zbiór danych X , parametr b
 - 2: losowa inicjalizacja $m_l, \forall l = 1, \dots, k$
 - 3: inicjalizacja $n_l = 0, \forall l = 1, \dots, k$
 - 4: **repeat**
 - 5: $B = b$ obserwacji losowo wybranych z X
 - 6: **for** $i : \mathbf{x}_i \in B$ **do**
 - 7: $C(i) = \arg \min_l \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_l\|_2^2$
 - 8: **end for**
 - 9: **for** $i : \mathbf{x}_i \in B$ **do**
 - 10: $n_{C(i)} = n_{C(i)} + 1$
 - 11: $\mathbf{m}_{C(i)} = \mathbf{m}_{C(i)} + \frac{1}{n_{C(i)}} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_{C(i)}\|_2$
 - 12: **end for**
 - 13: **until** zbieżność
-

Porównanie działania trzech wyżej zaprezentowanych algorytmów dla $k = 10, 50$ prezentuje rys. 3.2. Na osi rzędnych mamy uzyskany błąd analizy, na osi odciętych natomiast – czas działania algorytmu na skali logarytmicznej. Można zauważyć, że najszybszy był algorytm SGD (czerwona krzywa), jednak błąd oszacowania był największy. Z drugiej strony mamy algorytm wsadowy (zielony), który ma bardzo mały błąd, choć czas działania algorytmu był najdłuższy. Algorytm mini-wsadowy (niebieski) połączeniem dwóch poprzednich. Błąd w tym przypadku jest podobny jak błąd algorytmu wsadowego, natomiast czas działania jest o wiele krótszy, porównywalnie do algorytmu SGD.



Rysunek 3.2: Szybkość a jakość zbieżności algorytmów k -średnich. Czerwona krzywa oznacza metodę SGD, zielona – wsadową, natomiast niebieska – mini-wsadową. Źródło: [24]

Zauważmy, że wszystkie znane i stosowane wersje algorytmów k -średnich są zbieżne. W tym celu wystarczy, aby w każdej iteracji algorytmu suma \bar{W} była zmniejszona. W przeciwnym przypadku algorytm zostaje zatrzymany. Warto zauważyć jednak, że rozwiązanie takie może nie prowadzić do rozwiązania optymalnego, tj. algorytm może zatrzymać działanie w minimum lokalnym wartości \bar{W} , zamiast zbiec do minimum globalnego. Stąd zaleca się wielokrotne stosowanie danego algorytmu z różnymi warunkami początkowymi [12].

3.3. Metody hierarchiczne

Metody hierarchiczne to zbiór algorytmów analizy skupień, które nie wymagają znajomości liczby skupień. W niniejszym podrozdziale przedstawimy pokrótce schemat ich działania w dowolnej przestrzeni obserwacji.

Powyżej przedstawiliśmy algorytm k -średnich, dzielący zbiór z przestrzeni euklidesowej na podzbiory punktów podobnych do siebie, tj. mieliśmy do czynienia ze zmiennymi liczbowym. Problem ten można uogólnić dla obserwacji z dowolnej przestrzeni. Po pierwsze odległość euklidesową z równania (3.4) można zamienić na dowolną funkcję odmienności d między obserwacjami z danej przestrzeni. Przez funkcję odmienności rozumiemy następującą funkcję:

Definicja 3.1. Funkcją odmienności nazywamy funkcję $d : X \times X \rightarrow \mathbb{R}_+ \cup \{0\}$, która $\forall x, y \in X$ spełnia następujące warunki:

- $d(x, x) = 0$,
- $d(x, y) = d(y, x)$.

Po drugie trzeba zastąpić średnie skupień $\mathbf{m}_l, l = 1, \dots, k$ inną wartością wektorową, która miałaby sens w przypadku np. atrybutów jakościowych. Wartość ta to punkt ze zbioru obserwacji, który minimalizuje sumę odległości między nim samym, a pozostałymi punktami ze skupienia [12]:

$$\mathbf{m}_l = \min_{\mathbf{y} \in X} \sum_{i \in C(l)} d(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}), \quad (3.10)$$

gdzie X to zbiór obserwacji.

Przejdźmy do metod hierarchicznych analizy skupień. Jak wspomniano wcześniej, nie wymagają one specyfikowania liczby podzbiorów. Zamiast tego trzeba zdefiniować miarę odmienności (rozłącznych) zbiorów obserwacji, opartą na odmienności pojedynczych punktów w tych zbiorach. Jak sugeruje nazwa, metody te konstruują hierarchiczną reprezentację, w której skupienie na każdym poziomie hierarchii powstaje poprzez połączenie skupień z najbliższego niższego poziomu. Na najniższym poziomie znajdują się skupienia złożone z pojedynczych obserwacji. Najwyższy poziom to skupienie zawierające wszystkie obserwacje ze zbioru [10].

Metody hierarchiczne można podzielić na dwie grupy: aglomeracyjne oraz dzielące. W tej pierwszej, na początku tworzy się tyle skupień ile jest obserwacji w zbiorze, traktując każdą obserwację jako osobne skupienie. Następnie w każdym kroku łączona jest ta para podzbiorów, które są od siebie najmniej odmienne. W ten sposób na kolejnym poziomie otrzymujemy (przynajmniej) o jedno skupienie mniej. Procedura łącząca skupienia najmniej odmienne trwa

na dal, w każdym kolejnym kroku zmniejszając liczbę skupień. W ostatnim kroku algorytmu otrzymujemy jedno duże skupienie zawierające wszystkie obserwacje z próby [10, 12].

Metody dzielące działają w przeciwnym kierunku: zaczynamy od jednego skupienia zawierającego cały zbiór. Następnie w każdym kroku algorytmu jedno ze skupień dzielone jest na dwa skupienia, w których odmiennosc jest największa. W ten sposób na kolejnym poziomie otrzymujemy o jedno skupienie więcej. Procedura dzieląca skupienia najbardziej odmienne trwa nadal, w każdym kolejnym kroku otrzymując coraz więcej skupień. W ostatnim kroku algorytmu dostajemy podzbiory jednoelementowe, dostając n rozłącznych skupień (gdzie n to liczba obserwacji). Warto przy tym zauważyć, że algorytm ten jest znacznie bardziej złożony obliczeniowo niż algorytm aglomeracyjny [10, 12].

Zastanówmy się teraz w jaki sposób mierzyć odmiennosc między podzbiorami. Ponieważ metody dzielące są o wiele bardziej złożone obliczeniowo, skupimy się na metodach aglomeracyjnych, jako tych częściej stosowanych w praktyce. Odmiennosc między skupieniami można definiować na różne sposoby, jednak literatura podaje zazwyczaj najbardziej popularne, tj. odmiennosc najbliższego sąsiada, odmiennosc najdalszego sąsiada, średnią odmiennosc kryterium Warda, odmiennosc centroidów i mediany [10, 12].

Metoda Warda jest kryterium stosowanym w hierarchicznej analizie skupień. Ward zaproponował ogólną procedurę metod aglomeracyjnych, gdzie o wyborze połączenia pary skupień decyduje się na podstawie wartości pewnej funkcji celu. Tą funkcją celu może być każda funkcja, która odzwierciedla cel badacza. Wiele standardowych procedur tworzenia skupień jest zawartych w tym bardzo ogólnym podejściu. Aby zilustrować procedurę, Ward użył przykładu, gdy funkcja celu jest sumą kwadratów błędów, a przykład ten jest znany jako *metoda Warda* lub dokładniej jako *metoda minimalnej wariancji Warda* [32].

Metoda ta może być zdefiniowana i zaimplementowana przy pomocy rekurencyjnych wzorów Lance’a-Williamsa [14]. Wzory te to nieskończona rodzina algorytmów grupowania aglomeracyjnego, które są reprezentowane przez rekurencyjny wzór aktualizujący odległości skupień na każdym poziomie. W każdym kroku niezbędne jest, aby zoptymalizować funkcję celu. Rekurencyjna formuła ułatwia więc znalezienie odpowiedniej pary skupień.

Oznaczmy przez D_{ij} odmiennosc między skupieniem i -tym a j -tym, których licznosci wynoszą odpowiednio n_i, n_j , a przez $D_{(ij)l}$ odleglosc między połączonym skupieniem i -tym i j -tym a skupieniem l -tym.

Definicja 3.2. Wzory Lance’a-Williamsa definiujemy następująco [14]:

$$D_{(ij)l} = \alpha_i D_{il} + \alpha_j D_{jl} + \beta D_{ij} + \gamma |D_{il} - D_{jl}|,$$

gdzie $\alpha_i, \alpha, \beta, \gamma$ są parametrami zależnymi od licznosci skupień.

Metoda minimalnej wariancji Warda wyrażona w terminach wzorów Lance’a-Williamsa przyjmuje następującą postać:

$$D_{(ij)l} = \frac{n_i + n_l}{n_i + n_j + n_l} D_{il} + \frac{n_j + n_l}{n_i + n_j + n_l} D_{jl} - \frac{n_l}{n_i + n_j + n_l} D_{ij},$$

gdzie n_l to licznosc l -tego skupienia. Wartości parametrów z algorytmu Lance’a-Williamsa w powyższym wzorze wynoszą:

$$\alpha_i = \frac{n_i + n_l}{n_i + n_j + n_l}, \quad \beta = \frac{-n_l}{n_i + n_j + n_l}, \quad \gamma = 0.$$

Definicja 3.3. Odmiennosc najblizszego sasioda (*ang.* single linkage dissimilarity) między skupieniem i -tym a j -tym, definiujemy jako najmniejszą spośród wszystkich możliwych odmiennosci między parami obserwacji z i -tego i j -tego skupienia:

$$D_{ij} = \min_{\mathbf{x}_a \in C(i), \mathbf{x}_b \in C(j)} d(\mathbf{x}_a, \mathbf{x}_b).$$

W terminach wzorów Lance’a-Williamsa można to wyrazić jako $D_{(ij)l} = 0.5D_{il} + 0.5D_{jl} - 0.5|D_{il} - D_{jl}|$, tj. $\alpha_i = 0.5, \gamma = -0.5$, a $\beta = 0$.

Definicja 3.4. Odmiennosc najdalszego sasioda (*ang.* complete linkage dissimilarity) między skupieniem i -tym a j -tym, definiujemy jako największą spośród wszystkich możliwych odmiennosci między parami obserwacji z i -tego i j -tego skupienia:

$$D_{ij} = \max_{\mathbf{x}_a \in C(i), \mathbf{x}_b \in C(j)} d(\mathbf{x}_a, \mathbf{x}_b).$$

W terminach wzorów Lance’a-Williamsa można to wyrazić jako $D_{(ij)l} = 0.5D_{il} + 0.5D_{jl} + 0.5|D_{il} - D_{jl}|$, tj. $\alpha_i = \gamma = 0.5$, a $\beta = 0$.

Definicja 3.5. Odmiennosc średnią (*ang.* average linkage dissimilarity) między skupieniem i -tym a j -tym, definiujemy jako średnią odmiennosci między parami obserwacji z i -tego i j -tego skupienia:

$$D_{ij} = \frac{1}{n_i n_j} \sum_{\mathbf{x}_a \in C(i), \mathbf{x}_b \in C(j)} d(\mathbf{x}_a, \mathbf{x}_b).$$

W terminach wzorów Lance’a-Williamsa można to wyrazić jako $D_{(ij)l} = \frac{n_i}{n_i + n_j} D_{il} + \frac{n_j}{n_i + n_j} D_{jl}$, tj. $\alpha_i = \frac{n_i}{n_i + n_j}$, a $\beta = \gamma = 0$.

Odmiennosc najblizszego sasioda wymaga, żeby jedna odmiennosc $d(\mathbf{x}_a, \mathbf{x}_b)$, gdzie $\mathbf{x}_a \in C(i)$, $\mathbf{x}_b \in C(j)$, miała małą wartość, aby uznać dwa podzbiory za bliskie sobie, bez względu na odmiennosci innych obserwacji z tych dwóch grup. Metoda ta będzie zatem mieć skłonność do łączenia skupień połączonych przez szereg bliskich obserwacji pośrednich. Takie zjawisko nazywane jest *efektem łańcuchowym* i uważane jest za wadę tej metody. Skupienia otrzymane w wyniku jej działania często nie są zwarte, jako że podobieństwo skupień określone jest na podstawie dwóch najblizszych obserwacji [10]. Odmiennosc najblizszego sasioda daje zazwyczaj skupienia wąskie i wydłużone [12].

Metoda odmiennosci najdalszego sasioda ma działanie przeciwne. Dwa skupienia są do siebie podobne, wtedy i tylko wtedy, gdy wszystkie obserwacje z ich połączenia są dość podobne. Jednakże, metoda ta może nie zachowywać własności „bliskości” dwóch podzbiorów, tj. obserwacje przypisane do danego skupienia mogą znajdować się o wiele bliżej obserwacji z innego podzbioru, niż do punktów ze swojego skupienia [10]. W wyniku jej działania otrzymujemy podzbiory o kulistym kształcie [12].

Metoda średniej odmiennosci jest kompromisem pomiędzy dwoma powyższymi. Próbuje ona dać skupienia relatywnie zwarte i względnie oddalone od siebie [10]. Podobnie jak metoda odmiennosci najdalszego sasioda, daje ona skupienia o kształcie kulistym [12].

Jeśli odmiennosci poszczególnych obserwacji mają silną tendencję do skupiania się, przy czym każde skupienie jest zwarte i dobrze odseparowane, to wszystkie trzy metody dadzą podobne rezultaty [10].

Przejdźmy do odmienności centroidów.

Definicja 3.6. Odmiennność centroidów (*ang. centroid linkage dissimilarity*) między skupieniem i -tym a j -tym, definiujemy jako odległość między środkami skupień:

$$D_{ij} = d(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j),$$

gdzie $\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j$ oznaczają środki, odpowiednio, skupienia i -tego i j -tego.

Definicja 3.7. Odmiennność median (*ang. median linkage dissimilarity*) między skupieniem i -tym a j -tym, definiujemy jako odległość między medianami obserwacji ze skupień:

$$D_{ij} = d(\mathbf{med}_i, \mathbf{med}_j),$$

gdzie $\mathbf{med}_i, \mathbf{med}_j$ oznaczają medianę obserwacji, odpowiednio, skupienia i -tego i j -tego.

[TO DO: NAPISAC ZE 2 SŁOWA O POWYZSZYCH + PRZYKŁADY]

3.4. Metody oceny jakości podziału na skupienia

[TUTUJAJ KORZYSTAŁAM MOCNO Z DOKUMENTACJI SCIKIT: <http://scikit-learn.org/stable/modules/clustering.html#clustering-evaluation> ZAWRZEC TO GDZIES??]

Dokonawszy podziału zbioru na skupienia, należy ocenić jakość zastosowanego algorytmu. Ocena skuteczności działania algorytmów analizy skupień nie należy do zadań tak prostych jak np. ocena modelu klasyfikacji pod nadzorem. W szczególności żadna metoda ocena nie powinna brać pod uwagę wartości etykiety skupienia, ale powinna sprawdzać, czy zbiór danych jest dobrze podzielony, tzn. czy obserwacje w poszczególnych skupieniach są do siebie „podobne”, a obserwacje z różnych skupień – „niepodobne”, zgodnie z przyjętą metryką podobieństwa. W niniejszych podrozdziale przedstawimy kilka miar oceny jakości podziału na skupienia.

Przyjmujemy następującego założenia: Niech K i C oznaczają dwa różne podziały n -elementowego zbioru X na skupienia. Zazwyczaj K oznacza podział uzyskany przy pomocy algorytmu dzielącego zbiór, a C jest zbiorem prawdziwych klas, do których należą obserwacje, choć K i C mogą również oznaczać dwa niezależne podziały uzyskane przy pomocy różnych algorytmów.

3.4.1. Indeks Fowlkesa-Mallowsa

Definicja 3.8. Niech macierz $M = [m_{ij}]$, $i, j = 1, \dots, k$ oznacza liczbę elementów z X , które należą do i -tego skupienia w K i j -tego skupienia w C . Możemy wówczas zdefiniować indeks Fowlkesa-Mallowsa, ozn. indeks FM [8]:

$$\text{FM} = \frac{T}{\sqrt{P \cdot Q}}, \quad (3.11)$$

gdzie

$$\begin{aligned} T &= \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k m_{ij}^2 - n, \\ P &= \sum_{i=1}^k \left(\sum_{j=1}^k m_{ij} \right)^2 - n, \\ Q &= \sum_{j=1}^k \left(\sum_{i=1}^k m_{ij} \right)^2 - n. \end{aligned}$$

Wartości indeksu FM znajdują się w przedziale $[0, 1]$.

Przykładowo, jeśli mamy dany sześćelementowy zbiór, który dzielimy na trzy skupienia i $K = [1, 1, 2, 2, 3, 3]$, a $C = [2, 1, 3, 1, 2, 2]$, to

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \end{bmatrix},$$

$T = 2$, $Q = 6$, a $P = 8$. Stąd $FM = \frac{2}{\sqrt{6 \cdot 8}} \approx 0.29$.

Indeks FM przyjmuje wartości z przedziału $[0, 1]$, gdzie zero oznacza zupełnie różne podziały, natomiast jeden – pełną zgodność. Ponieważ indeks FM jest wprost proporcjonalny do sumy liczby wspólnych elementów w obu podziałach, większa wartość indeksu oznacza większe podobieństwo między uzyskanymi podziałami. Ponadto Fowlkes i Mallows [8] pokazali, że porównując dwa niezależne podziały, to indeks osiąga wartości bliskie zeru, podczas gdy inne wskaźniki, np. indeks Randa [20] często szybko dążą w takim przypadku do 1. Stąd indeks FM jest o wiele bardziej dokładny dla niezależnych podziałów. FM daje również dobre rezultaty w przypadku, gdy do danych zostanie dodany szum – czym większy szum w danych, tym indeks przyjmuje mniejsze wartości. Czyni go tym samym solidnym narzędziem mierzącym jakość uzyskanego podziału. Jednak w przypadku sprawdzenia jakości działania jednego algorytmu, wymagana jest znajomość prawdziwego podziału zbioru, co w praktyce rzadko występuje lub wymaga ręcznego podziału zbioru.

3.4.2. Jednorodność, zupełność oraz miara V

Niech C oznacza zbiór prawdziwych klas, do których należą obserwacje. Mówimy, że podział zbioru jest *jednorodny*, jeśli wszystkie skupienia zawierają jedynie obserwacje z jednej klasy. Podział zbioru jest *zupełny*, jeśli wszystkie obserwacje z danej klasy są w tym samym skupieniu. Jednorodność i zupełność podziału mogą być często w opozycji do siebie, tzn. gdy jednorodność rośnie, to zupełność zazwyczaj maleje i odwrotnie. Przykładowo, rozważmy dwa skrajne podziały. W przypadku pierwszego, gdy przydzielamy wszystkie obserwacje do jednego skupienia, to dostajemy idealną zupełność – wszystkie elementy z jednej klasy należą do tego samego skupienia. Jednakże, podział taki jest tak *niejednorodny*, jak to tylko możliwe, skoro wszystkie klasy znajdują się w jednym skupieniu. Z drugiej strony, rozważmy przydzielenie każdej obserwacji do osobnego skupienia. W tym przypadku, podział jest idealnie jednorodny – każde skupienie zawiera jedynie obserwacje z jednej klasy. Jednak w terminach zupełności, taki podział bardzo słaby, chyba że rzeczywiście każda klasa zawiera jeden element. Miara V jest ważoną średnią harmoniczną dwóch powyższych miar [21].

[TO DO POWIEDZIEC COS O ENTROPII]

Jednorodność. Żeby spełnić kryteria, jak musi spełniać podział jednorodny, każde ze skupień musi zawierać tylko i wyłącznie te obserwacje, które należą do jednej klasy. To znaczy, że rozkład klas w każdym ze skupień powinien skośny i zawierać tylko jedną klasę, tj. entropia powinna wynosić zero. Aby ustalić jak blisko idealnego znajduje się dany podział, sprawdzamy warunkową entropię rozkładu klas pod warunkiem zaproponowanego podziału. W idealnie jednorodnym podziale, ta wartość, tj. $H(C|K)$, wynosi zero. Jednak w przeciwnym przypadku, wartość ta zależy od wielkości zbioru i rozkładu klas. Stąd, zamiast badać warunkową entropię, normalizujemy tę wartość przez maksymalną redukcję entropii jaką informacja o podziale może przynieść, tj. $H(C)$ [21].

Zauważmy, że $H(C|K)$ jest maksymalne (i równe $H(C)$), kiedy podział na skupienia nie wnosi żadnej nowej informacji – rozkład klas w każdym skupieniu jest równy ogólnemu rozkładowi klas. $H(C|K)$ jest równy zero, gdy każde skupienie zawiera jedynie obserwacje z jednej klasy, tj. w przypadku idealnie jednorodnego podziału. W przypadku zdegenerowanym, gdy $H(C) = 0$, kiedy istnieje tylko jedna klasa, definiujemy jednorodność jako równą 1. W idealnie jednorodnym rozwiązaniu, taka normalizacja, tj. $\frac{H(C|K)}{H(C)}$, wynosi zero. Stąd, aby utrzymać konwencję, że wartość 1 jest pożądana, a wartość 0 jest niepożądana, definiujemy jednorodność jako [21]:

Definicja 3.9. Przez jednorodność rozumiemy:

$$h = 1 - \frac{H(C|K)}{H(C)} \quad (3.12)$$

gdzie:

$$H(C) = - \sum_{c=1}^{|C|} \frac{n_c}{n} \cdot \log \frac{n_c}{n},$$

$$H(C|K) = - \sum_{c=1}^{|C|} \sum_{k=1}^{|K|} \frac{n_{c,k}}{n} \cdot \log \frac{n_{c,k}}{n_k},$$

gdzie n_c oznacza licznosc klasy c , $c = \{1, \dots, |C|\}$, a $n_{c,k}$ oznacza liczbe elementow, która należy do klasy c i skupienia k , $k = \{1, \dots, |K|\}$.

Przykładowo, jeśli mamy dany sześcieelementowy zbiór, który dzielimy na trzy skupienia i $K = [1, 1, 2, 2, 3, 3]$, a $C = [2, 1, 3, 1, 2, 2]$, to $h \approx 0.54$.

Zgodność. Miara zgodności jest symetryczna do miary jednorodności. Aby spełnić warunki zgodności, podział zbioru musi przydzielić wszystkie obserwacje z jednej klasy, do tego samego skupienia. Żeby policzyć zgodność, badamy rozkład przypisanych skupień w obrębie jednej klasy. W idealnie zgodnym podziale, każdy z rozkładów będzie skośny i będzie zawierać jedynie tylko jedno skupienie. Możemy oszacować poziom skośności, licząc warunkową entropię zaproponowanego podziału pod warunkiem klas, tj. $H(K|C)$. W idealnie zgodnym rozwiązaniu $H(K|C) = 0$. Jednak w najgorszym możliwym przypadku, gdy wszystkie obserwacje z tej samej klasy są we wszystkich skupieniach, rozkład tych ostatnich jest równy rozkładowi rozmiarów klastrów, $H(K|C)$ jest maksymalne i równe $H(K)$. W końcu, w zdegenerowanym przypadku, kiedy $H(K) = 0$, kiedy mamy tylko jedno skupienie, definiujemy zgodność jako równą 1. Stąd, robiąc symetryczne wyliczenie do poprzedniego, definiujemy zgodność jako [21]:

Definicja 3.10. Przez zgodność rozumiemy:

$$c = 1 - \frac{H(K|C)}{H(K)}, \quad (3.13)$$

gdzie:

$$H(K) = - \sum_{k=1}^{|K|} \frac{n_k}{n} \cdot \log \frac{n_k}{n},$$

$$H(K|C) = - \sum_{c=1}^{|C|} \sum_{k=1}^{|K|} \frac{n_{c,k}}{n} \cdot \log \frac{n_{c,k}}{n_c},$$

gdzie n_c oznacza licznosc klasy c , $c = \{1, \dots, |C|\}$, a $n_{c,k}$ oznacza liczbe elementow, która należy do klasy c i skupienia k , $k = \{1, \dots, |K|\}$.

Przykładowo, jeśli mamy dany sześćoelementowy zbiór, który dzielimy na trzy skupienia i $K = [1, 1, 2, 2, 3, 3]$, a $C = [2, 1, 3, 1, 2, 2]$, to $h = 0.5$.

Miara V. Mając zdefiniowane miary jednorodności i zgodności, możemy wyliczyć ich średnią harmoniczną [21]:

Definicja 3.11. Niech h oznacza jednorodność, a c zgodność. Przez miarę V rozumiemy:

$$V_\beta = \frac{(1 + \beta) \cdot h \cdot c}{(\beta \cdot h) + c}, \quad (3.14)$$

gdzie $\beta \in (0, 1)$.

Zauważmy, że jeśli β jest mniejsza niż 1, jednorodność ma większą wagę niż zgodność. Często za β przyjmuje się po prostu 1, dając równą wagę obu miarom.

Przykładowo, jeśli mamy dany sześćoelementowy zbiór, który dzielimy na trzy skupienia i $K = [1, 1, 2, 2, 3, 3]$, a $C = [2, 1, 3, 1, 2, 2]$, to dla $\beta = 1$ mamy $V \approx 0.52$.

Warto zwrócić uwagę na fakt, że jednorodność, zgodność oraz miara V są niezależne od liczby klas, skupień, liczby obserwacji oraz użytego algorytmu. Stąd miary te mogą być używane do porównania każdego algorytmu dzielącego na skupienia, niezależnie od powyższych parametrów. Co więcej, wyliczając zarówno jednorodność, jak i zgodność, może zostać otrzymana bardziej precyzyjna ocena jakości podziału skupień.

Wszystkie trzy wyżej zaprezentowane miary dają wartości z przedziału $[0, 1]$, gdzie 0 oznacza najgorszy możliwy przypadek, natomiast 1 to bardzo dobre rozwiązanie. Mają one intuicyjną interpretację: podział z niską wartością miary V może zostać oceniony w terminach jednorodności i zgodności, aby mieć lepsze pojęcie o błędach jakich dokonał algorytm. Dodatkowo, aby jednorodność, zgodność oraz miara V nie mają założeń o strukturze skupienia: przy ich pomocy można porównywać podział na skupienia uzyskany przy użyciu różnych algorytmów, które mają różne założenia o strukturze skupienia.

Z drugiej strony powyższe miary nie są znormalizowane pod względem losowego przypisania do skupienia. Oznacza to, że w zależności od liczby obserwacji, podziału na skupienia i klasy, losowy przydział do skupień nie zawsze da takie same wartości jednorodności, zgodności oraz miary V. W szczególności, losowe przyporządkowanie może nie dać wartości powyższych

miar równych zero, zwłaszcza gdy liczba skupień jest duża. Problem ten może być bezpiecznie zignorowany, gdy liczba obserwacji jest większa od tysiąca, a liczba skupień mniejsza niż 10. Dla mniejszej próbki i większej liczby skupień, bezpieczniej jest używać miary FM. Dodatkowo, w przypadku sprawdzenia jakości działania jednego algorytmu, wymagana jest znajomość prawdziwego podziału zbioru, co w praktyce rzadko występuje lub wymaga ręcznego podziału zbioru.

3.4.3. Miara silhouettes

Sylwetki obserwacji (czy też *silhouettes*) są użyteczne, gdy odległości są określone na skali przedziałowej oraz gdy pożądane są wyraźnie odseparowane skupienia. Co więcej nie wymagana jest znajomość prawdziwych klas, do których należą obserwacje, a mówi jedynie o jakości uzyskanego podziału.

Aby skonstruować sylwetkę obserwacji potrzebne są dwa elementy: podział zbioru na skupienia C oraz miarę odległości d pomiędzy obserwacjami [22].

Definicja 3.12. Weźmy każdą obserwację z próbki \mathbf{x}_i i oznaczmy przez $C(i)$ skupienie, do którego należy. Średnią odmiennością \mathbf{x}_i od swojego skupienia nazywamy [22]:

$$a(\mathbf{x}_i) = \frac{\sum_{u \in C(i)} d(\mathbf{x}_i, u)}{n_{C(i)}}.$$

Średnią odmiennością \mathbf{x}_i od skupienia J nazywamy:

$$c(\mathbf{x}_i, J) = \frac{\sum_{u \in J} d(\mathbf{x}_i, u)}{n_J}.$$

Wówczas możemy wyliczyć odległość obserwacji \mathbf{x}_i od najbliższego skupienia innego niż $C(i)$:

$$b(\mathbf{x}_i) = \min_{j \neq i} c(\mathbf{x}_i, J).$$

Skupienie L , dla którego minimum jest osiągnięte (tj. $b(\mathbf{x}_i) = c(\mathbf{x}_i, L)$) nazywamy sąsiadem obserwacji \mathbf{x}_i . Jest ono drugim najlepszym wyborem dla tej obserwacji. Stąd znajomość sąsiada jest bardzo użyteczna, gdyż mówi o tym które skupienie zostałoby wybrane, gdyby nie zostało nim skupienie $C(i)$.

Definicja 3.13. Sylwetka obserwacji jest definiowana następująco [22]:

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

Sylwetki otrzymujemy dla każdej obserwacji z osobna, ale najczęściej interesująca jest miara zdefiniowana dla całego zbioru, stąd sylwetką zbioru nazywamy średnią z sylwetek po wszystkich obserwacjach:

$$\text{sil} = \sum_{i=1}^n s(\mathbf{x}_i).$$

Miara ta daje wartości z przedziału $[-1, 1]$, gdzie -1 oznacza niepoprawny podział, natomiast 1 to bardzo gęste skupienia. Wartości w okolicy zera sugerują nakładające się skupienia.

Wartość sylwetki jest wyższa, gdy skupienia są gęste i dobrze odseparowane, co jest jedną z najbardziej pożądanых cech analizy skupień. Miara nie wymaga znajomości prawdziwych klas, na jakie można podzielić zbiór.

Rozdział 4

Kategoryzacja tematyczna tekstów przy użyciu metryk w przestrzeni ciągów znaków

Wikipedia¹ jest to wielojęzyczna encyklopedia internetowa, która działa w oparciu o zasadę otwartej treści. Portal umożliwia każdemu z użytkowników odwiedzających stronę, edycję i aktualizację treści w czasie rzeczywistym. Wikipedia ma ponad 35.9 miliona artykułów we wszystkich wersjach językowych, w tym prawie 5 milionów w wersji angielskiej i nieco ponad 1.1 miliona artykułów w języku polskim (dane na sierpień 2015) [1].

Każdy artykuł może być edytowany przez dowolnego użytkownika, jak również nowe teksty może stworzyć każda osoba odwiedzająca portal. Przy procesie edycji oraz pisania artykułu obowiązują liczne reguły, między innymi takie jak wskazanie źródeł bibliograficznych, podlinkowanie do innych artykułów oraz nadanie artykułowi kategorii tematycznych [1].

Ta ostatnia zasada może w szczególności przysporzyć nieco kłopotów. Liczba dostępnych kategorii jest bardzo duża (ponad 125 tys. w polskiej wersji językowej), co więcej poziom ich szczegółowości jest zróżnicowany, tzn. mamy kategorie bardzo ogólne (np. *Matematyka*), jak i dość szczegółowe (np. *Działania dwuargumentowe*). Można się spodziewać, że automatyczny podział tekstów na kategorie na podstawie słów, jakie w nich występują, mógłby dać lepszy, bardziej dopasowany do treści, temat. Sprawdzenie jak automatyczny podział tekstów na kategorie tematyczne, przy użyciu występujących w nich słów oraz ich liczności, jest zasadniczym celem tej pracy. Idea działania jest następująca: algorytm analizuje jakie słowa w jakich ilościach występują w danym artykule i następnie przydziela go do grupy artykułów które zawierają takie same i podobne słowa w zbliżonych licznosciach. To podejście opiera się na założeniu, że artykuły o podobnej tematyce będą zawierały takie same lub podobne do siebie słowa.

Schemat działania algorytmu jest następujący:

1. Wstępne przetwarzanie danych.
2. Utworzenie skupień „podobnych” słów.
3. Stworzenie macierzy o wymiarach liczba artykułów \times liczba słów, gdzie wartością jest licznosc występowania danego słowa w artykule.

¹www.wikipedia.org

4. Użycie algorytmu k -średnich do podzielenia tekstów na skupienia.

4.1. Opis danych

Skuteczność algorytmu automatycznej kategoryzacji tematycznej testowana jest na artykułach polskiej wersji Wikipedii. Omówimy teraz rzeczony zbiór danych.

Dobór losowy [edytuj]

Dobór losowy – taki dobór elementów z populacji do próby statystycznej, w którym wszystkie elementy populacji (przedmiotów, regionów, ludzi, itp.) mają znane szanse (znane prawdopodobieństwo) dostania się do próby.

Badacz eksperymentuje na próbie, która jest podzespółem populacji, po to, aby nie badać całej populacji (populacje są zwykle bardzo liczne). W związku z tym zależy mu na tym, aby próba była jak najbardziej podobna do populacji (była miniaturką populacji). Jeśli próba jest taką miniaturką, to badacz może spodziewać się, że wyniki eksperymentu uzyskane na próbie byłyby takie same jak wyniki uzyskane na populacji. Można powiedzieć, że badacz stara się na podstawie własności próby (wartości estymatorów) oszacować własności populacji (wartości parametrów).

Przykład. Badacz zastanawia się, jaka jest przeciętna masa Polaka. Aby się o tym dowiedzieć, nie musi ważyć wszystkich Polaków. Wystarczy, że dobierze taką próbę, która będzie charakterystyczna dla całej populacji Polaków. Badacz nie może dobierać według swojego uznania osób badanych. Ucieka się do *doboru losowego*, zakładając, że jeśli ślepy traf zrządzi tym, kto znajdzie się w jego próbie, to nie ma powodów przypuszczać, że grupa ta będzie składała się z samych chudych lub z samych otyłych. Jeśli dobór był losowy, to struktura próby jest prawdopodobnie taka jak struktura populacji.

Tego rodzaju wnioskowanie jest obciążone błędem wynikającym z przybliżenia (cechy próby będą jedynie przybliżone do cech populacji). Na wyniki uzyskane przy pomocy doboru losowego wpływa też błąd systematyczny wynikający z niewłaściwego próbkowania i innych możliwych systematycznych błędów. Błędy doboru próby nie występują w próbie o wielkości równej wielkości populacji.

Istotą doboru losowego nie jest losowanie, ale prawdopodobieństwo znalezienia się w próbie. Jeśli badacz na przykład zastanawia się, ilu Polaków z jego miasta wyjechało za granicę do pracy, i postanowi, że przebieje cyrklem książkę telefoniczną i będzie dzwonić do wszystkich abonentów, którzy zostali "przeziurawieni", pytając ich, czy ktoś z rodziny wyjechał, to jest to wprawdzie ślepe losowanie, ale nie jest to dobór losowy. Nie wszyscy mieszkańcy jego miasta mieli bowiem szanse znalezienia się w jego próbie. Niektórzy nie mają telefonów, mają zastrzeżone numery lub innego operatora. Oznacza to, że mimo inteligentnego losowania dobór nie jest losowy, a wyniki z próby nie mogą być uogólnione na populację mieszkańców jego miasta.

Zobacz też [edytuj] edytuj kod

- dobór próby
- dobór celowo-losowy
- dobór celowy

Kategoria: Dobór próby statystycznej

Rysunek 4.1: Przykładowy artykuł z portalu Wikipedia. Na niebiesko wyróżnione zostały linki do innych tekstów z portalu. Źródło: http://pl.wikipedia.org/wiki/Dob%C3%B3r_losowy

Zgromadzone dane to zbiór 1 075 568 artykułów z polskiej Wikipedii z dnia 2. listopada 2014 roku w postaci plików XML ². Teksty składają się z treści sformułowanych w języku naturalnym, wzorów, kodów, linków wewnętrznych Wikipedii, linków do źródeł zewnętrznych, odniesień do źródeł bibliograficznych, cytatów, przypisów, rysunków (zdjęć, wykresów) wraz z podpisami, tabel, komentarzy, uwag, spisu treści, sekcji „Zobacz też”, kategorii oraz znaczników typowych dla plików HTML-owych. Każdy z wyżej wymienionych elementów jest wyróżniony w tekście w inny sposób (np. linki wewnętrzne Wikipedii zawsze znajdowały się wewnątrz podwójnych nawiasów kwadratowych), co nie pozostaje bez znaczenia przy wstępnym przetwarzaniu danych.

4.2. Wstępne przetwarzanie danych

Ważnym elementem przy pracy z danymi jest ich wstępna obróbka, szczególnie gdy są to dane tekstowe. Jednocześnie nie ma ogólnych, odpowiednich dla wszystkich zagadnień, reguł postępowania – schemat działania trzeba dostosować pod konkretny problem i posiadane dane. Naturalnie kwestię wstępnej obróbki danych można pominąć, jednak wiąże się to z ryzykiem negatywnego wpływu na działanie algorytmu. Co więcej w przypadku gdy szczególnie istotne są słowa znajdujące się w tekście, przygotowanie danych może okazać się jedną z kluczowych kwestii, jeśli chodzi o jakość działania algorytmu.

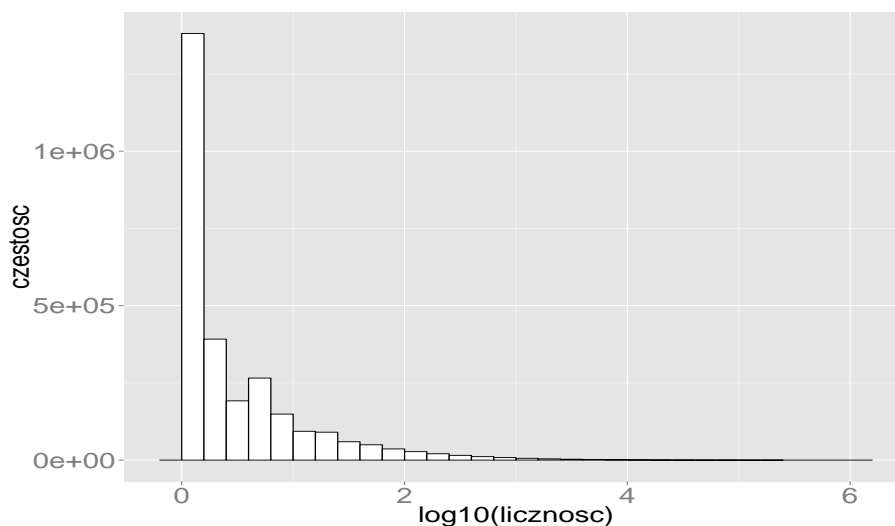
²Źródło: <http://dumps.wikimedia.org/plwiki/20141102/>

Jak wspomniano wcześniej pobrane dane składają się w dużej mierze z treści sformułowanych w języku naturalnym, jak i zawartości technicznej takiej jak linki czy znaczniki HTML-owe. Określenie istotności treści zawartej w poszczególnych częściach jest zasadniczym problemem przy wstępnej obróbce danych. Przyjmijmy, że część związaną z językiem naturalnym będziemy nazywać „tekstową”, a pozostałe części tekstu – „techniczną”. Związane są z nimi następujące aspekty (zaznaczmy, że rozważania te wymagają nieformalnego podejścia, intuicji oraz początkowego przejrzenia tekstów, co jest nieodłączną częścią praktycznej analizy danych):

- Część tekstowa zawiera główny opis artykułu, można się więc spodziewać, że w tej części zawarte zostanie meritum tekstu.
- Linki składają się ze słowa, które pojawia się w tekście, jak i odniesienia do innej strony. Ta pierwsza część może więc zawierać dużo informacji o temacie tekstu.
- Wzory oraz kody mogą dużo powiedzieć o tematyce artykułu (np. bardzo łatwo odróżnić wzór chemiczny od matematycznego), jednak w większości składają się one ze krótkich ciągów znaków (np. pojedynczych liter), które mogą być charakterystyczne dla wielu problemów.
- Cytaty mogą być ważne, choć często mogą mocno odbiegać od głównej tematyki tekstu.
- Przypisy są dodatkową informacją zawartą w tekście, często poruszające tematy poboczne.
- Odniesienia bibliograficzne, choć ważne z punktu widzenia wartości treści zawartych w artykule, nie wnoszą istotnych informacji o tematyce artykułu.
- Część artykułów zawiera bardzo dużo tabel, które czasem stanowią niemal jedyną treść. Jednakowoż służą one uporządkowaniu wiedzy i treść w nich zawarta często nie wnosi istotnych informacji o tematyce tekstu, zawierając jedynie słowa hasłowe bądź wylistowania danych zagadnień.
- Podpisy pod rysunkami są zazwyczaj powtórzeniem zdań bądź ich fragmentów z części opisowej.
- Spis treści zawiera tytuły, które są następnie powtórzone w tekście.
- Sekcja „Zobacz też” może być ważna, gdyż wskazuje na połączenia tematyczne między tekstami.
- Podobnie kategorie wskazują w szczególności na tematy poruszanego zagadnienia.
- Znaczniki HTML-owe oraz wyróżnienia powyższych elementów nie wnoszą żadnej informacji o tematyce tekstu i służą jedynie odpowiedniemu wyświetleniu treści.

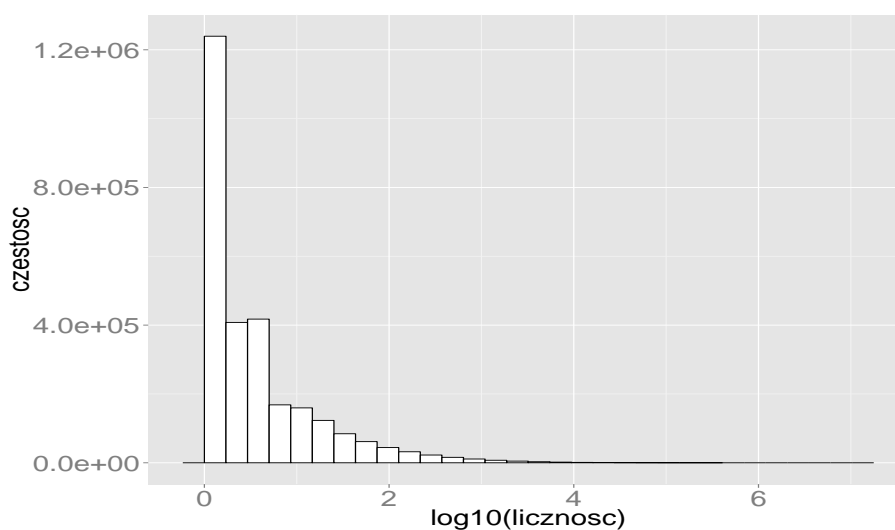
Wstępną obróbkę danych przeprowadzamy uwzględniając powyższe aspekty. Początkowo z części tekstowej usuwamy wszystkie znaki nie będące literami alfabetu łacińskiego. Poddajemy jej dalszej obróbce po przetworzeniu części technicznej. Słowa, które występują w tekście, a pod którymi znajduje się link, pozostawiamy bez zmian. Wzory oraz kody usuwamy w całości ze względu na trudność w rozróżnieniu czego podany fragment dotyczy oraz ze względu na krótkie znaki, które zawierają. Cytaty pozostawiamy bez zmian. Przypisy usuwamy z artykułów, jako że zawierają jedynie dodatkową z punktu widzenia głównego tekstu, treść. Źródła bibliograficzne usuwamy w całości. Teksty oczyszczamy także z tabel, rysunków, podpisów pod nimi oraz spisu treści. Sekcję „Zobacz też” oraz kategorie pozostawiamy jako potencjalne

źródło podobnej tematyki do tej zawartej w tekście. Wszelkie znaczniki HTML-owe usuwamy jako bezwartościowe z punktu widzenia treści artykułu. Podobnie teksty oczyszczamy z tytułów, które pojawiają się w większości tekstów, tj. *Zobacz też*, *Linki zewnętrzne* oraz *Bibliografia*.



Rysunek 4.2: Histogram logarytmu dziesiętnego z liczby artykułów, w których dane słowo występuje.

Tak otrzymane teksty dzielimy na słowa, które przekształcamy do wyrazów o małych literach. Nie chcemy rozróżniać słów ze względu na wielkość liter, gdyż nie powinna ona mieć znaczenia dla tematyki treści. Do każdego tekstu dodajemy informację o tym, jakie słowa i w jakich licznosciach w nim występują. W ten sposób otrzymujemy 2 806 765 różnych słów we wszystkich, tj. w 1 075 568, artykułach. 49% słów występuje tylko w jednym tekście (zob. rys. 4.2). Nieco ponad 3.5% słów znajduje się w stu i więcej artykułach, natomiast jedynie 0.6% wszystkich wyrazów pojawia się w więcej niż tysiącu tekstów.



Rysunek 4.3: Histogram logarytmu dziesiętnego z liczby wystąpień słów we wszystkich artykułach.

44% słów występuje dokładnie raz we wszystkich artykułach (zob. rys. 4.3). Prawie 4.3% wyrazów pojawia się ponad sto razy, natomiast mniej niż jeden procent słów występuje tysiąc i więcej razy.

Słowa występujące tylko w jednym tekście to zazwyczaj słowa w obcych językach, przykładowo: *juzdortransstroj*, *youtsos*, *odety*, *kneźlaz*, *pallebitzke*, *rulicach*, *werkowie*, *rumilla*, *metryklotiazyd*, *bazelak*, choć czasem są to słowa będące odmianą słów bardziej częściej występujących, np. słowo *uchybiają* jest odmianą czasownika *uchybiać*. Takie słowa warto wziąć pod uwagę przy analizie, gdyż są „podobne” do słów częściej występujących, a więc mogą polepszyć jakość dopasowania pod względem tematycznym.

| | Słowo | Liczba artykułów | Liczba wystąpień |
|----|--------|------------------|------------------|
| 1 | w | 1 003 961 | 10 330 250 |
| 2 | i | 726 209 | 4 290 653 |
| 3 | na | 689 559 | 3 215 428 |
| 4 | z | 649 564 | 3 252 352 |
| 5 | do | 559 672 | 2 297 910 |
| 6 | się | 537 360 | 2 094 912 |
| 7 | roku | 420 178 | 1 292 537 |
| 8 | a | 378 941 | 919 278 |
| 9 | od | 378 327 | 935 799 |
| 10 | jest | 343 846 | 993 143 |
| 11 | przez | 336 596 | 852 463 |
| 12 | oraz | 288 718 | 663 760 |
| 13 | po | 286 818 | 765 075 |
| 14 | o | 273 574 | 674 431 |
| 15 | ur | 241 888 | 365 934 |
| 16 | to | 234 629 | 527 121 |
| 17 | jako | 232 919 | 663 364 |
| 18 | latach | 232 017 | 380 362 |
| 19 | był | 229 219 | 503 938 |
| 20 | został | 228 985 | 509 705 |

Tabela 4.1: Lista dwudziestu najczęściej występujących słów. Kolumna oznaczona jako *Liczba artykułów* oznacza liczbę tekstów, w których wystąpiło dane słowo, natomiast ostatnia kolumna mówi o ilości wystąpień wyrazu ogółem we wszystkich artykułach.

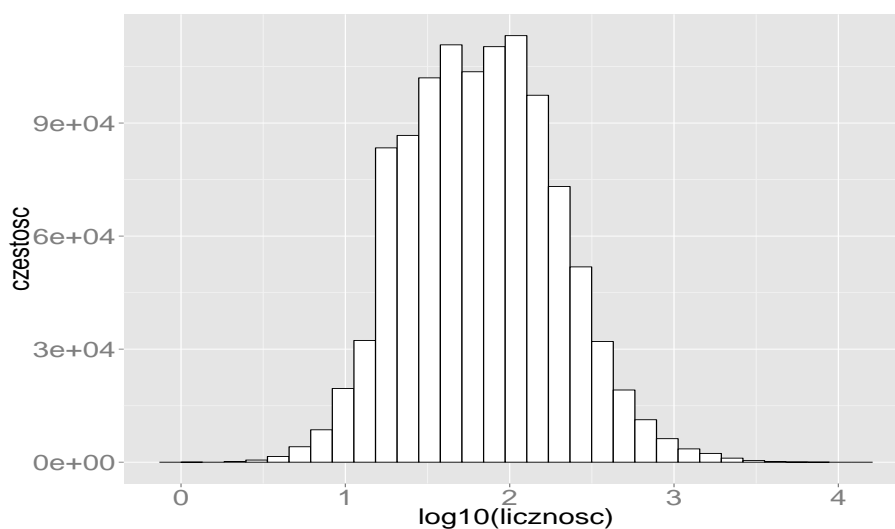
Słowa najczęściej występujące prezentuje tabela 4.1. W większości przypadków są to słowa nie istotne w kontekście analizy tematycznej tekstu (ang. *stopwords*). Takich słów można wyróżnić więcej, np.

ach, aj, albo, bardzo, bez, bo, być, ci, cię, ciebie, co, czy, daleko, dla, dlaczego, dlatego, do, dobrze, dokąd, dość, dużo, dwa, dwaj, dwie, dwoje, dziś, dzisiaj, gdyby, gdzie, go, ich, ile, im, inny, ja, ją, jak, jakby, jakże, je, jeden, jedna, jedno, jego, jej, jemu, jeśli, jest, jestem, jeżeli, już, każdy, kiedy, kierunku, kto, ku, lub, ma, mają, mam, mi, mną, mnie, moi, mój, moja, moje, może, mu, my, na, nam, nami, nas, nasi, nasz, nasza, nasze, natychmiast, nią, nic, nich, nie, niego, niej, niemu, nigdy, nim, nimi, niż, obok, od, około, on, ona, one, oni, ono, owszem, po, pod, ponieważ, przed, przedtem, są, sam, sama, się, skąd, tak, taki, tam, ten, to, tobą, tobie, tu, tutaj, twój, twoja, twoje, ty, wam, wami, was, wasi, wasz,

wasza, wasze, we, więc, wszystko, wtedy, wy, żaden, zawsze, że

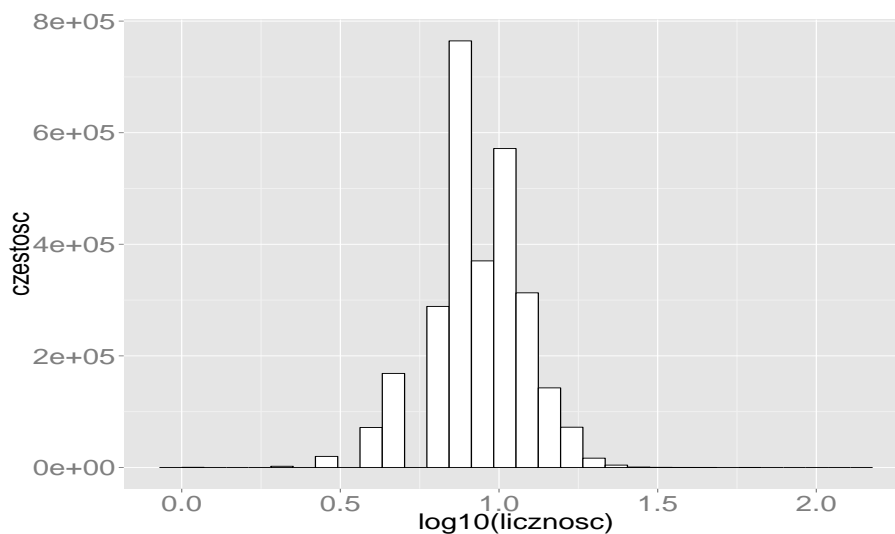
Te i podobne słowa oraz wyrazy jedno- i dwuznakowe, należy usunąć ze zbioru danych, gdyż nie wnoszą żadnej istotnej informacji o tematyce tekstu. Dokonujemy tego w kolejnym etapie wstępnej obróbki tekstów. Łącznie ze zbioru słów usuwamy 1 822 wyrazy.

Średnia liczba unikalnych słów występujących w artykule wynosi 121, mediana to zaledwie 66 unikalnych wyrazów. W 2 272 tekstach wystąpiło mniej niż pięć słów. Artykuły te zawierały przede wszystkim tabele i rysunki, stąd po wstępnej obróbce danych pozostało w nich niewiele wyrazów. Histogram logarytmu dziesiętnego liczby unikalnych słów w tekstach przedstawia rys. 4.4.



Rysunek 4.4: Histogram logarytmu dziesiętnego liczby unikalnych słów w artykule.

Mediana długości słów wynosi 9, średnia jest nieco wyższa (zob. rys. 4.5). Najkrótsze występujące słowa są jednoznakowe, jest ich 249. Najdłuższe słowo ma 128 znaków. Słowa o długości ponad 11 znaków stanowią 19.5% wszystkich słów.



Rysunek 4.5: Histogram logarytmu dziesiętnego długości słów.

4.3. Utworzenie skupień „podobnych” słów / Jakiś mądry tytuł

Po wstępnej obróbce danych dostajemy 2 806 765 unikalnych słów, z czego blisko połowa występuje jedynie raz we wszystkich tekstach. Algorytm dzielący teksty tematycznie bierze pod uwagę liczebności słów, które znajdują się w artykule a daną wejściową jest macierz o wymiarach liczba artykułów \times liczba słów. Jeśli nie przetworzyć dalej danych, to macierz ta miałaby wymiary $1\,075\,568 \times 2\,806\,765$, gdzie przeważająca większość rekordów byłaby równa zeru. Algorytm mógłby nie poradzić sobie z tak dużą ilością danych, zwłaszcza gdy większa część rekordów jest „niewypełniona”. Stąd zachodzi potrzeba zmniejszenia wymiaru danych.

Ponieważ rekordy składają się ze słów, można wyznaczyć skupienia wyrazów „podobnych” do siebie. Podobieństwo (odmienność) słów można określić za pomocą odległości na przestrzeni ciągów znaków opisanych w rozdziale 2. Następnie dany tekst można przedstawić jako sumę liczby wystąpień słów z danego skupienia, zamiast liczby wystąpień pojedynczych słów. Przykładowo, jeśli skupienie A składa się ze słów s , t , u , które wystąpiły w danym artykule, odpowiednio, x , y , z razy, to słowa ze skupienia A wystąpiły w tym tekście łącznie $x + y + z$ razy. Dzieląc wszystkie wyrazy na skupienia, możemy znacząco zmniejszyć liczbę wyrazów, biorąc pod uwagę liczebności grup słów, zamiast liczebności pojedynczych wyrazów.

Aby podzielić zbiór słów na skupienia, najbardziej naturalne wydaje się zbudowanie macierzy odległości wszystkich słów od siebie i zastosowanie algorytmu aglomeracyjnego. Jednakowoż wiąże się to z dużą złożonością pamięciową i obliczeniową, stąd też podejście takie nie zostało wykorzystane w niniejszej pracy. Inny pomysł polega na przyłączaniu do skupienia słów dopóty, dopóki średnia odległość w zbiorze nie przekroczy zadanej liczby. Wstępne testy na losowej próbce tysiąca słów wykazały, że jakość takiego podziału jest słaba, a czas obliczeń względnie długi.

Stemming. Stąd postanowiono dokonać podziału zbioru słów w inny sposób. Początkowo przeprowadzamy tzw. *stemming*, czyli sprowadzenie słowa do jego rdzenia. Odmiana słowa nie zmienia jego tematyki, a dzięki takiemu podejściu możemy znacznie ograniczyć liczbę unikalnych słów w zbiorze. Przykładowo słowa *zjednoczonych*, *zjednoczyli*, *drużynom*, *drużynie* zostaną sprowadzone odpowiednio do form *zjednoczyć*, *drużyna*. Dzięki takiemu podejściu, każde skupienie będzie miało swoje *słowo-reprezentanta* (środek), które jednoznacznie charakteryzuje podzbiór. Będziemy je nazywać środkiem, słowem-reprezentantem lub po prostu *reprezentantem* skupienia. W ten sposób do odpowiedniego podzbioru słów możemy odnosić się poprzez jego reprezentanta.

| | Język | Liczba słów | Procent ogółu |
|---|-----------|-------------|---------------|
| 1 | polski | 664 315 | 23.7 |
| 2 | angielski | 41 087 | 1.5 |
| 3 | niemiecki | 21 117 | 0.8 |
| 4 | francuski | 20 438 | 0.7 |
| 5 | ogółem | 746 942 | 26.6 |

Tabela 4.2: Liczba słów na których zastosowano *stemming* w poszczególnych językach

Do przeprowadzenia *stemmingu* używamy programu *Hunspell*³ – korektora pisowni i analizatora morfologicznego używany w wielu programach typu *open source*. Aplikacja ta ma wbudowany słownik słów języka polskiego wraz z ich odmianami. Do każdego wyrazu jest też przypisany jego rdzeń. Sposób działania jest następujący: program znajduje szukane słowo w słowniku, a następnie zwraca jego rdzeń lub nie zwraca nic, jeśli słowo nie pasuje do żadnego wyrazu ze słownika. W szczególności słownik nie zawiera wyrazów, w których popełniono tzw. „literówki” ani złączeń słów.

Ponieważ część wyrazów stanowią słowa obcojęzyczne przeprowadzamy *stemming* w języku polskim, angielskim, niemieckim oraz francuskim (zob. tabela 4.2). W ten sposób grupujemy 746 942 słów, co stanowi ok. 27% wszystkich słów, w 186 958 skupienia. Przykładowe skupienia prezentuje tabela 4.3. Warto zauważyć, że słowa w podzbiorach są podobne tematycznie, choć do skupienia o reprezentancie **główny** trafiły wyrazy o znaczeniu przeciwnym. Widać więc, że podział taki nie jest idealny.

| Reprezentant | Słowa w skupieniu |
|--------------|---|
| czas | czasie, czasach, czas, czasom |
| główny | głównie, główne, główną, głównych, głównego, głównym, główna, głównymi, główny, głównej, główni, głównemu, niegłówny, niegłównym, niegłówne, niegłównych, niegłówną |
| miał | miał, miały, miałem, miału, miałach, miałe, miałów, miałami, miałom |
| nazwa | nazwa, nazwę, nazwy, nazwą, nazwie, nazw, nazwami, nazwach, nazwom |
| nr | nr, nry, nru, nrem, nrze, nrów |
| osoba | osób, osoby, osoba, osobą, osobę, osobom, osobie, osobami, osobach, osobo |
| udział | udział, udziału, udziałem, udziale, udziały, udziałów, udziałami, udziałach, udziałom |
| wieś | wsi, wsie, wieś, wsią, wsiach, wsiami, wsiom |
| zostać | został, została, zostały, zostało, zostanie, zostali, zostać, zostaną, zostania, zostałyby, zostałyby, zostałyby, zostaniu, zostałem, zostałoby, zostaniesz, zostanę, zostaliby, zostaliśmy, zostaniemy, zostaniem, zostałam, zostałeś, zostaliście, zostaniecie, zostałeś, zostałbym, zostalibyśmy, zostałbyś, zostano, zostałabym |

Tabela 4.3: Przykładowe skupienia uzyskane przy pomocy *stemmingu*.

Podział przy użyciu metryk. Tak zaproponowany podział słów na skupienia wykorzystuje jedynie ok. 27% zbioru wszystkich wyrazów. Co więcej większość z podzbiorów jest zaledwie kilkuelementowa (zob. tabela 4.4).

| Min. | 1st Qu. | Median | Mean | 3rd Qu. | Max. |
|------|---------|--------|------|---------|------|
| 1 | 1 | 2 | 4 | 5 | 89 |

Tabela 4.4: Rozkład liczby słów w skupieniu.

Stąd można zastosować następujące schematy postępowania, które po pierwsze zredukują liczbę używanych grup słów, a po drugie wykorzystają dodatkowo zbiór niegrupowanych wyrazów. Procedury te polegają na [PLIK R/14]:

1. Dołączeniu do skupień słów jeszcze niegrupowanych.

³<http://hunspell.sourceforge.net/>

2. Dołączeniu do skupień zawierających pięć i więcej elementów, podzbiorów o mniejszej liczności.
3. Zastosowaniu najpierw punktu 1, a następnie punktu 2.

Omówimy teraz bliżej na czym polegają powyższe kroki.

Procedura 1. W kroku tym chcemy użyć większej liczby dostępnych słów. Dzięki temu zwiększą się liczności występowania grup słów w tekście, co być może polepszy jakość podziału artykułów na skupienia. Algorytm ten jednak nie zmieni liczby skupień.

Schemat działania jest następujący: bierzemy słowo nieprzydzielone do żadnego skupienia. Liczymy odległość tego wyrazu (przy użyciu odległości zdefiniowanych w rozdziale 2) od wszystkich słów-reprezentantów dotychczasowo otrzymanych skupień. Słowo przydzielamy do tego podzbioru, do którego reprezentanta było mu najbliżej (zob. algorytm 4.4). Jeśli wyraz ma taką samą (najmniejszą) odległość do kilku środków, wybieramy pierwszy w kolejności. Jeśli odległość słowa do wszystkich reprezentantów jest nieokreślona lub równa nieskończoności, to wyraz ten pomijamy, tj. nie dodajemy go do żadnego ze skupień. Taka sytuacja może się zdarzyć, w przypadku zastosowania odległości opartych na q -gramach, gdy długość słowa jest mniejsza od q .

Algorytm 4.4 Algorytm przydzielający niepogrupowane słowo do skupienia.

```

1: given: data set of representants  $R$ , data set of words to categorize  $W$ , metric  $d$ 
2: for  $w \in W$  do
3:    $C(w) = \arg \min_{i: r_i \in R} d(w, r_i)$ 
4:   if  $\text{length}(C(w)) > 1$  then
5:      $C(w) = C(w)[1]$ 
6:   end if
7: end for
```

Zauważmy, że powyższy algorytm podobny jest do metody aglomeracyjnej analizy skupień. Różnice polegają na tym, że do utworzonych już skupień przyłączamy pojedyncze obserwacje (słowa), a kryterium oceny odmienności jest odległość danego słowa od środka (reprezentanta) skupienia.

Procedura 2. W tym kroku chcemy zredukować liczbę uzyskanych skupień. Dzięki temu zwiększą się liczności występowania grup słów w tekście, a ponadto zmniejszy się liczba skupień, co może przyczynić się do lepszego działania algorytmu dzielącego teksty na skupienia.

Schemat działania jest następujący (zob. algorytm 4.5): sprawdzamy, jakie są liczności wszystkich skupień. Jeśli liczność skupienia jest większa od pięciu, to taki podzbiór oznaczamy jako „duży”. Do takich skupień będziemy przyłączać mniejsze podgrupy. Jeśli liczność skupienia jest mniejsza lub równa 5, to podzbiór oznaczamy jako „mały”. Takie skupienie będziemy przyłączać do podzbiorów „dużych”. Te pierwsze skupienia nazwijmy dużymi skupieniami, natomiast te drugie – małymi.

Mając tak podzielone skupienia, weźmy reprezentantów małych podzbiorów. Jeśli długość słowa-reprezentanta nie przekracza trzech znaków, to skupienie takie pomijamy w dalszej analizie. Ma to na celu uniknięcie analizy słów, które nie mają znaczenia, jak zbitek dwóch lub trzech takich samych liter (np. **aa** lub **bbb**). Następnie postępowanie jest podobne jak w algorytmie 4.4: liczymy odległość środka małego skupienia od wszystkich słów-reprezentantów dużych skupień. Sprawdzamy, która z wyliczonych odległości była najmniejsza. Podzbiór,

Algorytm 4.5 Algorytm łączący małe i duże skupienia.

```

1: given: data set of representants  $R$ , vector of clusters' size  $s$ , metric  $d$ 
2:  $R_m = \emptyset, R_d = \emptyset$ 
3: for  $r \in R$  do
4:   if  $s_r \leq 5$  then
5:      $R_m = R_m \cup r$ 
6:   else
7:      $R_d = R_d \cup r$ 
8:   end if
9: end for
10: for  $w \in C_m$  do
11:   if  $|w| < 4$  then
12:     continue / next
13:   end if
14:    $C(w) = \arg \min_{i: r_i \in R_d} d(w, r_i)$ 
15:   if  $\text{length}(C(w)) > 1$  then
16:      $C(w) = C(w)[1]$ 
17:   end if
18: end for

```

którego reprezentantem jest analizowane słowo, przydzielamy do tego skupienia, do którego środka było mu (słowu) najbliższe. Jeśli wyraz ma taką samą (najmniejszą) odległość do kilku reprezentantów, wybieramy pierwszego w kolejności.

Zauważmy, że druga część algorytmu to po prostu metoda aglomeracyjna z innym niż zaprezentowane w rozdziale 3 kryterium liczenia odmienności dwóch skupień. W tej procedurze odmiennosc między podzbiorami określona jest jako odległość między środkami (reprezentantami) skupień.

Procedura 3. Krok trzeci polega na wykonaniu najpierw procedury pierwszej, a następnie drugiej.

Wybór odległości. Mając trzy powyższe algorytmy, możemy przystąpić do dalszej obróbki zbioru słów. Zanim to jednak nastąpi należy wybrać odległości, dzięki którym będzie to możliwe. W rozdziale 2 przedstawiono pięć odległości opartych na operacjach edycyjnych, trzy odległości oparte na q -gramach oraz dwie miary heurystyczne.

Odległość Hamminga odrzucamy, gdyż można ją zastosować jedynie na napisach o tej samej długości. Odległości najdłuższego wspólnego podnapisu, Levenshteina, optymalnego dopasowania napisów i Damerau-Levenshteina różnią się jedynie zbiorem bazowych operacji edycyjnych, często dając tę samą odległość. Stąd postanowiliśmy użyć dwóch „skrajnych” odległości, tj. takich, które pozwalają na najmniejszą i największą liczbę bazowych operacji edycyjnych, czyli odległość najdłuższego wspólnego podnapisu (lcs) i Damerau-Levenshteina (dl).

Z odległości opartych na q -gramach wyselekcjonowaliśmy odległość Jaccarda (jac) oraz q -gramową (qg) jako najbardziej reprezentatywne. W obu przypadkach wybraliśmy $q = 4$. Dzięki takiemu podejściu unikniemy przetwarzania słów o długości mniejszej niż cztery znaki.

Miary heurystyczne pominęliśmy.

Otrzymane zbiory. [GDZIES TU NAPISAC, ZE UZYWALAM R-A?] Na zbiorze skupień otrzymanym po wykonaniu *stemmingu* zastosowano trzy powyższe algorytmy przy użyciu każdej z czterech odległości, dostając łącznie 13 różnych zbiorów skupień (wliczając w to zbiór, otrzymany ze *stemmingu*). Zbiory te oznaczmy jako *clust_X* gdzie X jest przyrostkiem oznaczającym algorytm i zastosowaną odległość. Metodologia nazewnictwa jest następująca: w przypadku, gdy dołączaliśmy słowa do istniejących skupień (tj. zastosowany był algorytm 4.4 / procedura 1) dodajemy jedynie przyrostek oznaczający zastosowaną odległość, tj. *lcs*, *dl*, *jac* lub *qg*, np. *clust_lcs*. Jeśli użyliśmy algorytmu 4.5 / procedury 2, zmniejszającego liczbę skupień, to dodajemy przyrostek *red_* oraz zastosowaną odległość, np. *clust_red_lcs*. Jeśli oba algorytmy zostały zastosowane, to łączymy je w nazwie, dostając np. *clust_lcs_red_lcs*. Zbiór otrzymany po wykonaniu *stemmingu* oznaczamy po prostu *clust*.

Liczbę skupień oraz liczbę słów zawartą w skupieniu dla poszczególnych zbiorów zawiera tabela 4.5. Zbiory, na których zastosowano algorytm 4.4 lub jedynie *stemming* zawierają 186 958 skupień, co dało redukcję ok. 93% względem oryginalnego zbioru słów (tj. 2 806 765). W skupieniach tych znajduje się od prawie 750 000 do ponad 1 000 000 słów, czyli między 27% a 38% wszystkich wejściowych wyrazów. Druga grupa zbiorów, tj. taka, która jest wynikiem działania algorytmu 4.5 zawiera dokładnie 43 919 skupienia, co daje redukcję równą 98.4%. Słowa zawarte w tych skupieniach stanowią ok. 26% wejściowego zbioru wyrazów. Trzecia grupa zbiorów, ma nieco mniejszą redukcję niż poprzednia i wynosi prawie 98%, zawierając jednocześnie ok. 38% wszystkich wyrazów.

| | Zbiór | Liczba skupień | Redukcja | Liczba słów | Procent |
|----|----------------------------------|----------------|----------|-------------|---------|
| 1 | <i>clust</i> | 186 958 | 93.3% | 746 957 | 27% |
| 2 | <i>clust_lcs</i> | 186 958 | 93.3% | 1 080 260 | 38% |
| 3 | <i>clust_dl</i> | 186 958 | 93.3% | 1 080 260 | 38% |
| 4 | <i>clust_jaccard</i> | 186 958 | 93.3% | 1 070 750 | 38% |
| 5 | <i>clust_qgram</i> | 186 958 | 93.3% | 1 070 750 | 38% |
| 6 | <i>clust_red_lcs</i> | 43 919 | 98.4% | 743 053 | 26% |
| 7 | <i>clust_red_dl</i> | 43 919 | 98.4% | 743 053 | 26% |
| 8 | <i>clust_red_jaccard</i> | 43 919 | 98.4% | 739 338 | 26% |
| 9 | <i>clust_red_qgram</i> | 43 919 | 98.4% | 739 338 | 26% |
| 10 | <i>clust_lcs_red_lcs</i> | 65 350 | 97.7% | 1 037 393 | 37% |
| 11 | <i>clust_dl_red_dl</i> | 66 378 | 97.6% | 1 060 474 | 38% |
| 12 | <i>clust_jaccard_red_jaccard</i> | 69 570 | 97.5% | 1 063 131 | 38% |
| 13 | <i>clust_qgram_red_qgram</i> | 62 434 | 97.8% | 1 063 131 | 38% |

Tabela 4.5: Zbiory skupień wraz z ich liczbą oraz liczbą słów w skupieniu. Redukcja oznacza procent zredukowania z wejściowego zbioru słów do liczby otrzymanych skupień. Ostatnia kolumna mówi ile procent wszystkich słów zbioru wejściowego znajduje się w skupieniu.

[TO DO: DODAC PRZYKŁADOWE SKUPIENIA DLA WSZYSTKICH 13 ZBIOROW]

4.4. Podział tekstów

Mając tak zdefiniowane skupienia słów możemy przystąpić do podziału zbioru artykułów. Do tego celu użyjemy algorytmu mini-wsadowego *k*-średnich (algorytm 3.3 z rozdziału 3). Przypomnijmy, że algorytm ten jest metodą pośrednią pomiędzy algorytmem wsadowym, który w każdej iteracji opiera się na wszystkich obserwacjach, a algorytmem SGD, biorącym w każdej iteracji po jednej obserwacji ze zbioru.

Aby więc użyć algorytmu mini-wsadowego musimy wybrać najpierw liczbę skupień k oraz parametr b , określający ile obserwacji będzie miało swój wkład w każdej iteracji. Zajmijmy się najpierw tą drugą wartością. Ponieważ nie wiemy jak bardzo jakość podziału zależy od parametru b , postanowiliśmy sprawdzić działanie algorytmu dla czterech wartości b : 5 000, 10 000, 35 000 oraz 70 000. Dostaniemy w ten sposób 52 wyniki analizy, oparte na 13 różnych zbiorach wejściowych.

Zanim określimy wartość parametru k , zastanówmy się w jaki sposób będziemy mierzyć jakość otrzymanych podziałów. Cztery na pięć zaprezentowanych miar w rozdziale 3 wymaga znajomości prawdziwego podziału zbioru. Przypomnijmy, że nasz zbiór danych to artykuły z polskiej Wikipedii, które mają określoną kategorię tematyczną. Można więc wykorzystać znaną nam wiedzę o kategoriach i na jej podstawie określić jakość podziału otrzymanego w wyniku działania algorytmu. Liczba różnych kategorii, które określają tematykę artykułów wynosi 56 283. Próba wykonania analizy skupień przy użyciu algorytmu mini-wsadowego z tak dużym k , zakończyła się niepowodzeniem, mimo posiadania dużej ilości pamięci RAM (wraz z partycją wymiany (SWAP) ponad 100 GB). Stąd też nastąpiła potrzeba zredukowania tej liczby. Ponieważ struktura kategorii Wikipedii jest drzewiasta ⁴, można zastąpić kategorię przypisaną do artykułu kategorią ogólniejszą. Po takiej redukcji otrzymano 6 922 grup tematycznych. Jednak rozkład liczby artykułów w otrzymanych kategoriach był mocno skośny. Taka sytuacja jest silnie niesprzyjająca, gdyż chcemy mieć podobne licznosci w grupach. Ręcznie podzielono zatem najbardziej liczne tematy na podtematy, natomiast te o najmniejszej liczności połączono zachowując przy tym podobieństwo tematyki. W ten sposób uzyskano sto różnych tematów o podobnym rozkładzie liczby artykułów. Wstępne testy wykazały, że tak otrzymane k pozwala na dokonanie obliczeń w relatywnie krótkim czasie i nie zajmując dużej ilości pamięci RAM.

Wstępne testy na ok. 2% artykułów wykazały dość dobre przyporządkowanie (jednorodność i zgodność na poziomie, odpowiednio, 0.3 i 0.7). Testy na większej próbce ok. 15% tekstów dały wyniki nieco gorsze (jednorodność i zgodność na poziomie, odpowiednio 0.2 i 0.5). Stąd też postanowiono przeanalizować działanie algorytmu dla trzech różnych licznosci próbki: 100% (1 075 568 artykułów), ok. 15% (152 772 artykuły) oraz ok. 2% zbioru (25 000 artykułów). Dla tej ostatniej próbki za wartość parametru b , określającego liczbę obserwacji mających wkład w każdej iteracji algorytmu, przyjęliśmy 5 000 oraz 10 000. Większe wartości (tj. 35 000 oraz 70 000) nie mają sensu, gdyż są większe od licznosci próby.

Wszystkie analizy puszczono z tym samym ziarnem losowania, tj. w każdej analizie obserwacje były losowane w tej samej kolejności.

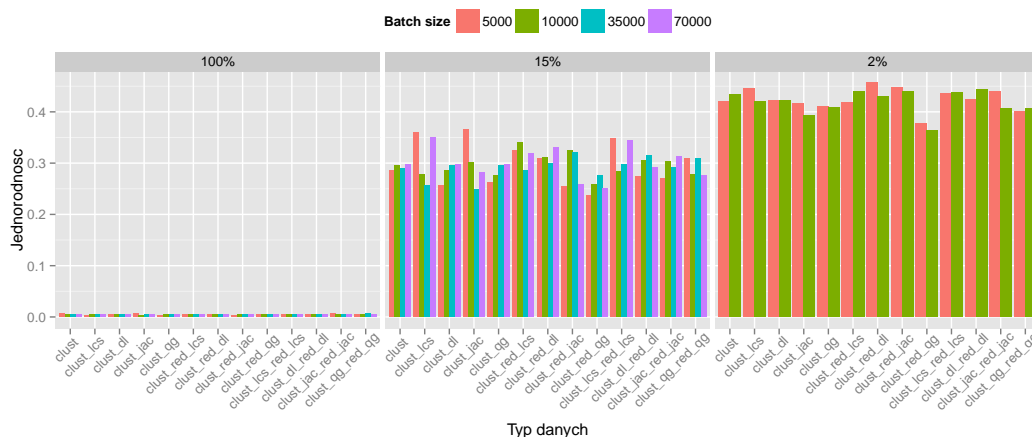
4.5. Analiza wyników

W niniejszym podrozdziale przeanalizujemy uzyskane wyniki dla uzyskanych podziałów tekstów.

Dokładne wyniki można znaleźć w tabelach 4.5, ?? oraz ??. Na rysunkach 4.6, 4.7, 4.8, 4.9 oraz 4.11 prezentujemy wartości uzyskanych, odpowiednio, jednorodności, zgodności, miary V , skorygowanego indeksu Randa oraz miary silhouettes dla wszystkich zbudowanych podziałów zbiorów. Przypomnijmy, że klasami porównawczymi do uzyskanych podziałów są tematy artykułów.

⁴por. http://pl.wikipedia.org/wiki/Wikipedia:Drzewo_kategorii

Weźmy pierwszy wykres, tj. jednorodność. Na pierwszy rzut oka widać, że największe wartości tej miary uzyskał podział zbudowany na 2% zbioru, uzyskując, nieco ponad 0.3 dla wszystkich uzyskanych podziałów. Nieco mniejszą wartość jednorodności dostaliśmy w przypadku podziału 15% artykułów o średniej równej ok. 0.2. Dla całego zbioru jednorodność jest bardzo mała i wynosi jedynie ok. 0.03. Oznacza to, że zdecydowana większość skupień zawiera teksty z różnych klas (tematów), co jest cechą wysoce niepożądaną. Wynika z tego, że czym mniejszy zbiór, tym lepszy jego podział ze względu na temat.



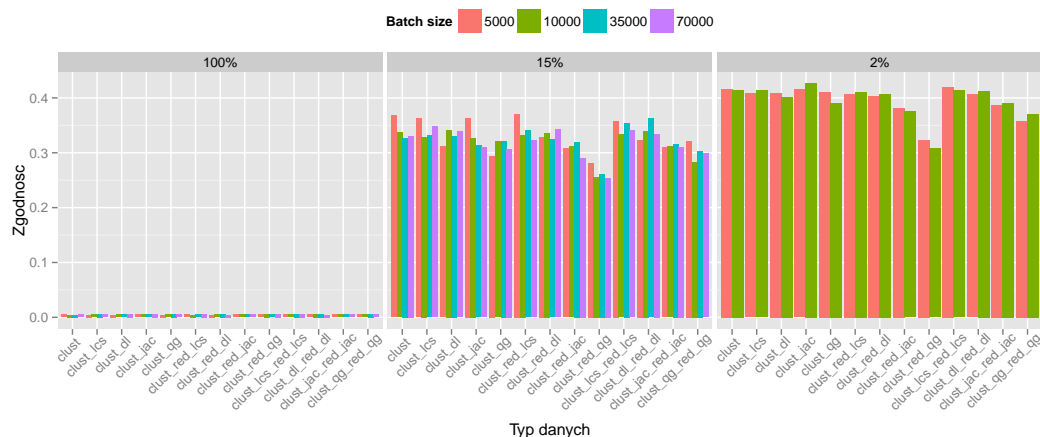
Rysunek 4.6: Jednorodność.

Przyjrzyjmy się teraz wartościom jednorodności ze względu na wielkość parametru b . Można stwierdzić, że wartość b nie ma istotnego wpływu na wysokość jednorodności. Warto przy tym zauważyć, że często jednorodność ma największą wartość dla $b = 5\,000$ (zwłaszcza w przypadku podziału zbudowanego na całym zbiorze artykułów), co wydaje się być sprzeczne z teorią zaprezentowaną w rozdziale 3.

W końcu spójrzmy na wartości jednorodności w podziale na użyty zbiór (skupień) słów. Najwyższą wartość jednorodności uzyskano dla zbiorów *clust_red_jac* oraz *clust_red_dl*, *clust_jac* i *clust_dl*, odpowiednio, podziału opartego na 2%, 15% oraz 100% zbioru. Wysoką wartość jednorodności uzyskano również dla *clust_lcs*, *clust_red_lcs*, *clust_jac_red_jac*. Stąd też można wnioskować, że pozytywny wpływ na jakość podziału miała procedura zmniejszająca liczbę skupień. Co więcej, najlepsze rezultaty uzyskano przy użyciu odległości Jaccarda oraz lcs. Warto przy tym zauważyć, że we wszystkich przypadkach najgorsze podziały uzyskano dla odległości q -gramowej.

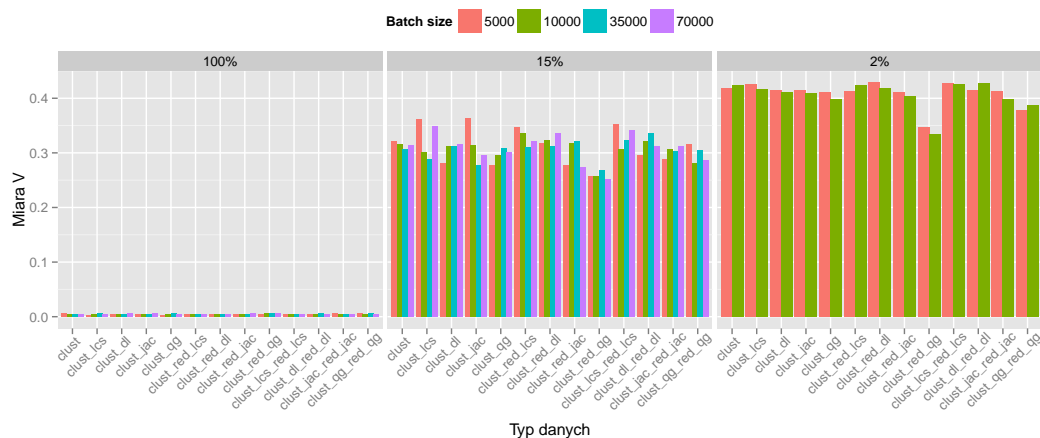
Przejdźmy do analizy zgodności podziału zbiorów na skupienia. Najwyższe wartości tej miary uzyskano na 2% zbioru tekstów i zawierały się w przedziale $[0.58, 0.72]$. Nieco mniejsze wartości zgodności dostaliśmy dla 15% zbioru i wynosiła ona średnio 0.52. Najniższe wartości zgodności uzyskano dla całego zbioru tekstów i były one równe ok. 0.06. Oznacza to, że obserwacje z danej klasy (tematu) znajdują się w prawie wszystkich możliwych skupieniach, a więc podział taki jest słaby. Stąd, czym mniejszy zbiór tym lepszy podział pod względem tematycznym.

Przyjrzyjmy się teraz wartościom zgodności ze względu na wielkość parametru b . Dla analizy wykonanej na 2% zbioru istotnie lepsze rezultaty uzyskano dla $b = 10\,000$ – w prawie wszystkich przypadkach zgodność jest wyższa o 0.01 – 0.02. Dalej, dla 15% tekstów w większości przypadków najlepsze wyniki dał algorytm z $b = 5\,000$. Dla pełnego zbioru artykułów miara zgodności jest równa dla prawie wszystkich grup.



Rysunek 4.7: Zgodność.

Dalej spójrzmy na wartości zgodności w podziale na użyty zbiór (skupień) słów. Widać, że w przypadku dwóch mniejszych zbiorów tekstów, miara ta dla jest istotnie niższa dla skupień, które opierały się na odległości q -gramowej, tj. *clust_qg*, *clust_red_qg* oraz *clust_qg_red_qg* niż w analogicznych grupach, dla których użyto innej odległości. Z drugiej strony, średnio najlepsze wyniki uzyskano dla tych podzbiorów, do utworzenia których zastosowano metrykę lcs. Pośrednio znalazły się odległości dl oraz jac. Lepsze rezultaty dały algorytmy, gdzie zastosowano algorytm 4.5 lub najpierw algorytm 4.4, a następnie 4.5, choć różnice pomiędzy nimi są niewielkie.

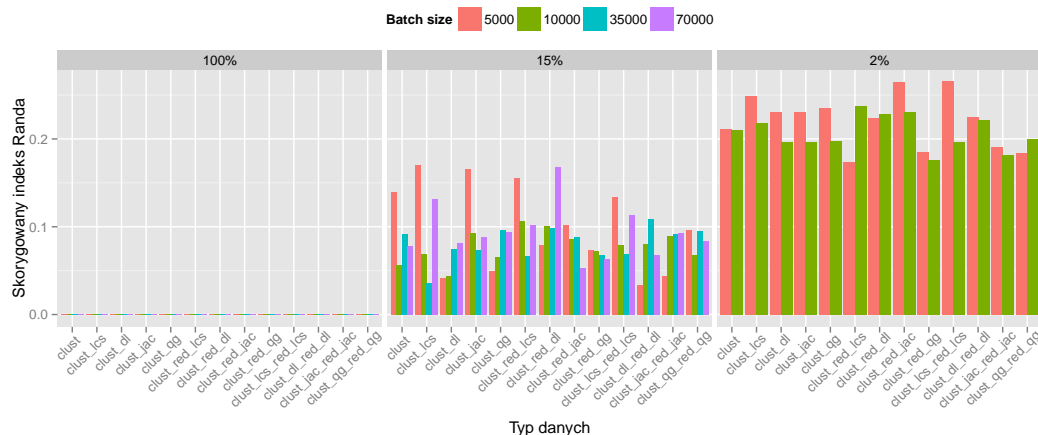


Rysunek 4.8: Miara V.

Ponieważ miara V jest średnią harmoniczną dwóch poprzednich miar, skupimy się jedynie na analizie uzyskanych wyników dla różnych zbiorów wejściowych. Jak można było się spodziewać, najlepsze wyniki uzyskano dla zbiorów, które budowane były przy użyciu odległości lcs. W drugiej kolejności najlepiej wypadła metryka dl. Również lepszy podział uzyskano, gdy zastosowano algorytm 4.5 lub najpierw algorytm 4.4, a następnie 4.5.

Przejdźmy do skorygowanego indeksu Randa. Podobnie jak w przypadku poprzednich miar, najwyższe wartości ARI uzyskano dla najmniejszego zbioru, i wynosiły średnio 0.07; 0.02 – dla analizy opartej o 15% zbioru wejściowego oraz 0.00 na podziale wykonanym na wszystkich

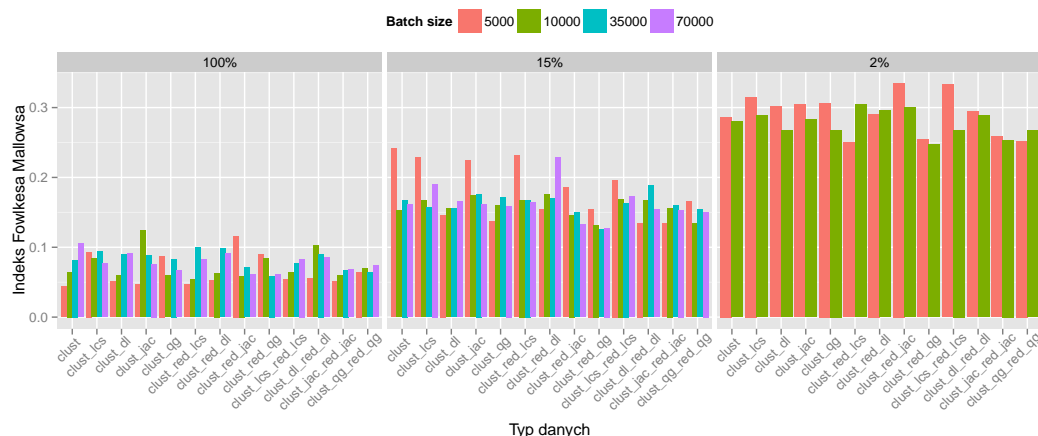
artykułach. Oznacza to, że podział tekstów na skupienia jest mocno niezgodny z klasami (tematami) artykułów.



Rysunek 4.9: ARI.

W przypadku zbioru 2% tekstów, wyższą wartość ARI uzyskano dla $b = 10\,000$. Dla drugiego pod względem liczności obserwacji zbioru, najwyższą wartość uzyskano dla $b = 70\,000$. W przypadku analizy opartej na wszystkich artykułach b nie miało wpływu na wartość ARI.

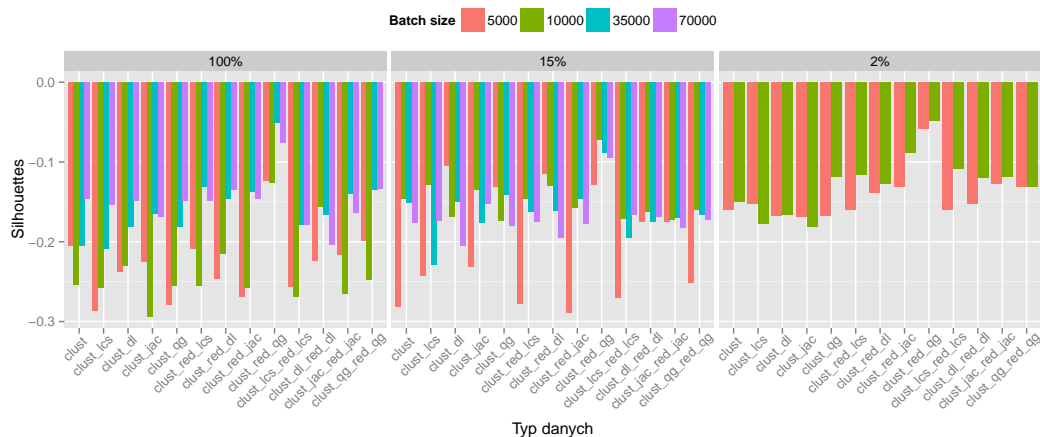
Przyjrzyjmy się teraz wartościom ARI pod względem zbioru, który był dzielony na skupienia. Odwrotnie niż wcześniej najwyższe wartości tej miary uzyskano dla *clust_red_jac* oraz *clust_red_qg* dla najmniejszego zbioru. W przypadku dwóch pozostałych najlepszy okazał się podział zastosowany na zbiorach opartych o odległość lcs. Podobnie jak poprzednio lepsze rezultaty dały algorytmy, gdzie zastosowano algorytm 4.5 lub najpierw algorytm 4.4, a następnie 4.5 niż w przypadku zbiorów otrzymanych w wyniku działania tylko 4.4.



Rysunek 4.10: FMI.

Przejdźmy do miary silhouettes (sylwetek). Ze względu na złożoność obliczeniową niemożliwe było policzenie średniej z sylwetek wszystkich obserwacji. Uzyskane sylwetki są średnią z próbki 10 000 losowych punktów. Wszystkie uzyskane wartości silhouettes są mniejsze od

zera, czyli często teksty nie są dobrze przypisane do skupienia, tzn. lepsze byłoby przyporządkowanie danego artykułu do innej grupy niż tej, do której został przypisany.



Rysunek 4.11: Silhouettes.

Największe wartości sylwetek uzyskano dla *clust_red_qg*, co oznacza, że uzyskane przyporządkowania tekstów do skupień były lepsze niż w przypadku pozostałych zbiorów. Najniższe wartości uzyskano dla zbiorów opartych na odległości lcs i Jaccarda.

Podsumowując:

- najlepszy podział artykułów na grupy tematyczne uzyskano dla 2% tekstów,
- parametr b nie miał istotnego wpływu na jakość uzyskanego podziału,
- najlepsze wyniki uzyskano dla zbiorów powstałych przy użyciu odległości lcs,
- lepszy podział dostaliśmy, gdy zbiór przetworzono algorytmem 4.5, tj. zmniejszono liczbę skupień słów.

[TO DO:

- DLACZEGO WYSZŁO TAK SŁABO - JESZCZE NIE WIEM
- LICZNOŚCI SKUPIEN
- PRZYKŁADY JAKIE BYŁY ARTYKUŁY W SKUPIENIACH
- CZY PODZIAŁY BYŁY ZGODNE MIĘDZY SOBĄ

]

4.6. Szczegółowe wyniki

Literatura

- [1] Wikipedia - wikipedia, wolna encyklopedia. <http://pl.wikipedia.org/wiki/Wikipedia>. Dostęp: 2015-12-01.
- [2] Daniel Aloise, Amit Deshpande, Pierre Hansen, Preyas Popat. Np-hardness of euclidean sum-of-squares clustering. *Machine Learning*, 75(2):245–248, 2009.
- [3] Léon Bottou. Stochastic gradient tricks. Grégoire Montavon, Genevieve B. Orr, Klaus-Robert Müller, redaktorzy, *Neural Networks, Tricks of the Trade, Reloaded*, Lecture Notes in Computer Science (LNCS 7700), strony 430–445. Springer, 2012.
- [4] Léon Bottou, Yoshua Bengio. Convergence properties of the k-means algorithms. *Advances in Neural Information Processing Systems 7*, strony 585–592. MIT Press, 1995.
- [5] Leonid Boytsov. Indexing methods for approximate dictionary searching: Comparative analysis. *J. Exp. Algorithmics*, 16:1.1:1.1–1.1:1.91, 2011.
- [6] Fred J. Damerau. A technique for computer detection and correction of spelling errors. *Commun. ACM*, 7(3):171–176, 1964.
- [7] N.R. Dixon, T.B. Martin. *Automatic Speech and Speaker Recognition*. IEEE Press book. IEEE Press, 1979.
- [8] E. B. Fowlkes, C. L. Mallows. A Method for Comparing Two Hierarchical Clusterings. *Journal of the American Statistical Association*, 78(383):553–569, 1983.
- [9] R. W. Hamming. Error Detecting and Error Correcting Codes. *Bell System Technical Journal*, 29:147–160, 1950.
- [10] Trevor J. Hastie, Robert John Tibshirani, Jerome H. Friedman. *The elements of statistical learning : data mining, inference, and prediction*. Springer series in statistics. Springer, New York, 2009.
- [11] Matthew A. Jaro. *UNIMATCH: A record linkage system: User manual*. United States Bureau of the Census, 1978.
- [12] J. Koronacki, J. Ćwik. *Statystyczne systemy uczące się*. Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, 2005.
- [13] Karen Kukich. Techniques for automatically correcting words in text. *ACM Comput. Surv.*, 24(4):377–439, 1992.
- [14] G. N. Lance, W. T. Williams. A general theory of classificatory sorting strategies 1. hierarchical systems. *The Computer Journal*, 9(4):373–380, 1967.
- [15] V. Levenshtein. Binary codes capable of correcting spurious insertions and deletions of ones. *Problems of Information Transmission*, 1:8–17, 1965.

- [16] H. Masters. *A study of spelling errors*. Univ. of Iowa Studies in Educ. 4, 1927.
- [17] G. Navarro. A guided tour to approximate string matching. *ACM Computing Surveys*, 33(1):31–88, 2001.
- [18] S. B. Needleman, C. D. Wunsch. A general method applicable to the search for similarities in the amino acid sequence of two proteins. *J. Mol. Biol.*, 48:443–453, 1970.
- [19] O. Owolabi, D. R. McGregor. Fast approximate string matching. 18(4):387–393, 1988.
- [20] William M. Rand. Objective criteria for the evaluation of clustering methods. *Journal of the American Statistical Association*, 66(336):846–850, 1971.
- [21] Andrew Rosenberg, Julia Hirschberg. V-measure: A conditional entropy-based external cluster evaluation measure. *Proceedings of the 2007 Joint Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and Computational Natural Language Learning (EMNLP-CoNLL)*, strony 410–420, 2007.
- [22] Peter Rousseeuw. Silhouettes: A graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis. *J. Comput. Appl. Math.*, 20(1):53–65, 1987.
- [23] D. Sankoff, J. B. Kruskal. *Time warps, string edits, and macromolecules: the theory and practice of sequence comparison*. Addison-Wesley, 1983.
- [24] D. Sculley. Web-scale k-means clustering. *Proceedings of the 19th International Conference on World Wide Web, WWW '10*, strony 1177–1178, New York, NY, USA, 2010. ACM.
- [25] Peter H Sellers. The theory and computation of evolutionary distances: Pattern recognition. *Journal of Algorithms*, 1(4):359 – 373, 1980.
- [26] Esko Ukkonen. Algorithms for approximate string matching. *Inf. Control*, 64(1-3):100–118, 1985.
- [27] Esko Ukkonen. Approximate string-matching with q-grams and maximal matches. *Theoretical Computer Science*, 92(1):191 – 211, 1992.
- [28] Mark P. J. van der Loo. The stringdist Package for Approximate String Matching. *The R Journal*, 6:111–122, 2014.
- [29] T. K. Vintsyuk. Speech discrimination by dynamic programming. *Cybernetics*, 4(1):52–57, 1968. Russian Kibernetika 4(1):81-88 (1968).
- [30] Robert A. Wagner, Michael J. Fischer. The string-to-string correction problem. *Journal of the ACM*, 21(1):168–173, 1974.
- [31] Robert A. Wagner, Roy Lowrance. An extension of the string-to-string correction problem. *J. ACM*, 22(2):177–183, 1975.
- [32] J.H. Ward Jr. Hierarchical grouping to optimize an objective function. *Journal of the American statistical association*, 58(301):236–244, 1963.
- [33] Anna Wilbik, James M. Keller. A distance metric for a space of linguistic summaries. *Fuzzy Sets and Systems*, 208:79–94, 2012.
- [34] William E. Winkler. String comparator metrics and enhanced decision rules in the fellegi-sunter model of record linkage. *Proceedings of the Section on Survey Research*, strony 354–359, 1990.

-
- [35] Xindong Wu, Vipin Kumar, J. Ross Quinlan, Joydeep Ghosh, Qiang Yang, Hiroshi Motoda, Geoffrey J. McLachlan, Angus Ng, Bing Liu, Philip S. Yu, Zhi-Hua Zhou, Michael Steinbach, David J. Hand, Dan Steinberg. Top 10 algorithms in data mining. *Knowl. Inf. Syst.*, 14(1):1–37, 2007.