机器学习算法系列（14）：关联分析

一、关联分析

1.1 引言

在数据挖掘与机器学习中，关联规则（Association Rules）是一种较为常用的无监督学习算法，与分类、聚类等算法不同的是，这一类算法的主要目的在于发掘数据内在结构特征之间的关联性。

简单一点来说，就是在大规模的数据集中寻找一些有意义有价值的关系。有了这些关系，一方面，可以帮助我们拓宽对数据及其特征的理解；另一方面，则可以实现推荐系统的构建与应用（例如购物篮分析等）。

在对关联规则有了基本的认识后，我们对其进行进一步的细分，以日常生活中的关联性举例，在逛超市的顾客中，购买面包的人很大程度上会购买牛奶，这一类的关联性被称为简单关联规则；再例如，购买汽车遮阳板的很多顾客会在近期内购买零度玻璃水，这样的事例不仅反映了事物间的关联关系，而且还具有时间上的先后顺序，因此这一类的关联性被称为序列关联规则。

广义上的关联规则包含了简单关联和序列关联，接下来我们分别对这两块知识进行深入学习。

1.2 简单关联规则初探

首先我们需要明确关联分析中的一些基本概念：

- 事务：指关联分析中的分析对象，我们可以把它理解成为一种宽泛行为（例如顾客的一次超市购买行为，电脑的使用者的一次网页浏览行为等都可以称之为事务），由事务标识（TID）与项目集合组成。
- 项集：即事务中的一组项目的集合，单个的项目可以是一种商品、一个网页链接等。假设X为项集，I为项目全体且$I = \{i_1, i_2, \cdots, i_n\}$，那么项集$X \subseteq I$。进一步的，如果$X$中包含$p$个项目，则称该项集为$p-$项集。

Database

TID	Items
100	1 3 4
200	2 3 5
300	1 2 3 5
400	2 5

以上图为例，这里包含了4个事务，I包含了5个项目。对于第一个事务而言，由于X包含了三个项目，所以该X是一个$3-$项集。
明确了基本概念后，接下来学习关联规则的一般表现形式

$$X \rightarrow Y\,(S = s\%, C = c\%)$$

其中：

- X和Y分别为规则的前项和后项，前项为项目或项集，后项表示某种结论或事实。
- $S = s\%$表示规则支持度为$s\%$，$C = c\%$表示规则置信度为$c\%$

到这里大家可能会疑惑，直接得到关联规则不就可以了吗？为什么要在结论中加入支持度和置信度呢？这就涉及到关联分析中非常重要的一块内容——**有效性的判别**

1.3 简单关联规则的有效性

实际上，在数据中使用关联分析进行探索时，我们可以找出很多关联规则，但并非所有的关联规则都是有效的，有的可能令人信服的程度并不高，也有的可能适用范围很有限，带有这些特征的所谓“关联规则”，我们则称之为不具有“有效性”。
判断一条关联规则是否有效，需要用到以下两大测度指标，即规则置信度与规则支持度。

1.规则置信度（Confidence）
置信度是对简单关联规则准确度的测量，定义为包含项目A的事务中同时也包含项目B的概率，数学表述为：

$$Confidence\,(A \rightarrow B) = P\,(B|A) = \frac{P\,(AB)}{P\,(A)}$$

置信度的本质就是我们所学过的条件概率，置信度越高，则说明A出现则B出现的可能性也就越高。假设在电脑→杀毒软件的关联规则中，置信度$C = 60\%$，表示购买电脑的顾客中有60%的顾客也购买了杀毒软件。

2.规则支持度（Support）

支持度测量了简单关联规则应用的普适性，定义为项目A与项目B

同时出现的概率，数学表述为：$Support\left(A \rightarrow B\right) = P\left(B \cap A\right) = P\left(AB\right)$\$

假设某天共有100个顾客到商场购买物品，其中有10个顾客同时购买了电脑和杀毒软件，那么上述关联规则的支持度就为10%，同样，支持度越高，表明某一关联规则的适用性就越大。

一个有效的简单关联规则，势必同时具有较高的置信度与支持度。因为，如果支持度较高而置信度较低，则证明规则的可信度差；而相反，如果支持度较低而置信度较高，则说明规则的应用范围较小。

举例来说，假设在1000个顾客购买行为的事务中，只有一个顾客购买了烧烤炉，同时也只有他购买了碳，虽然规则“烧烤炉→碳”的置信度很高，为100%，但支持度仅有0.1%，说明这条规则缺乏普遍性，应用价值不高。

所以一个有效的关联规则，必须具有较高的置信度与支持度，那么在实际应用中，我们就需要给定最小的置信度C_{min}与支持度S_{min}，只要同时大于C_{min}和S_{min}的规则，我们才可以将其定义为是“有效”的。

1.4 简单关联规则的实用性

在对关联规则的有效性有一个基本的掌握后，我们在此基础上进行进一步的探讨——关联规则的实用性。

关联规则的实用性主要体现在以下两个方面：

- 1）是否具有实际意义。例如“怀孕→女性”的关联规则就没有实用价值。
- 2）是否具有指导意义，即帮助我们在现有的基础上做出有价值的优化。

对第二点进一步展开说明，假设“牛奶→男性顾客（$S = 40\%$，$C = 40\%$）”在C_{min}和S_{min}均为20%时是一条有效规则时，如果进一步计算发现顾客中男性的比例也为40%，也就是说购买牛奶的男性顾客等于所有顾客中的男性比例，那么这条规则就是一条前后项无关的随机性关联，因此它就没有有意义的指导信息，不具有实用性。

如何衡量关联规则具有实用性呢？这里我们就需要借助规则的提升度了。
规则提升度（Lift）： 置信度与后项支持度之比，数学表述为：

$$Lift\left(A \rightarrow B\right) = \frac{Confidence\left(A \rightarrow B\right)}{P\left(B\right)} = \frac{P\left(AB\right)}{P\left(A\right)P\left(B\right)}$$

提升度反映了项目A的出现对项目B出现的影响程度。从统计角度来看，如果A的出现对项B的出现没有影响，即A与B相互独立的化，$P(AB) = P(A)P(B)$，此时规则提升度为1。所以，具有实用性的关联规则应该是提升度大于1的规则，即A的出现对B的出现有促进作用。同样，提升度越大，证明规则实用性越强。

这样我们就阐述清楚了关联规则的一些基本假定与判别标准，当数据集较小时，关联规则的使用较为简单，但是如果数据集很大的话，如何在这海量的数据中快速找出关联规则呢？这就引出了进一步要叙述的内容——简单关联规则下的$Apriori$算法。

二、Apriori算法

2.1 简介

在数据量庞大的前提下，由于简单搜索可能产生大量无效的关联规则，并导致计算效率底下。出于克服这些弊端的目的，Apriori算法应运而生，该算法自1996年提出后，经过不断地完善和发展，已成为简单关联分析中的核心算法。

2.2 频繁项集的相关定义

频繁项集很好理解，他是指大于等于最小支持度S_{min}的项集。其中，若频繁项集中包含一个项目，则成为频繁$1-$项集，记为L_1；若包含k个项目，则成为频繁$k-$项集，记为L_k。
频繁项集具有以下两个性质，这俩条性质将应用于我们后面频繁项集及其关联规则的寻找中：

- 1）频繁项集的子集必为频繁项集（假设项集$\{A, C\}$是频繁项集，那么$\{A\}$和$\{C\}$也为频繁项集）
- 2）非频繁集的超集一定也是非频繁的（假设项集$\{D\}$不是频繁项集，那么$\{A, D\}$和$\{C, D\}$也不是频繁项集）

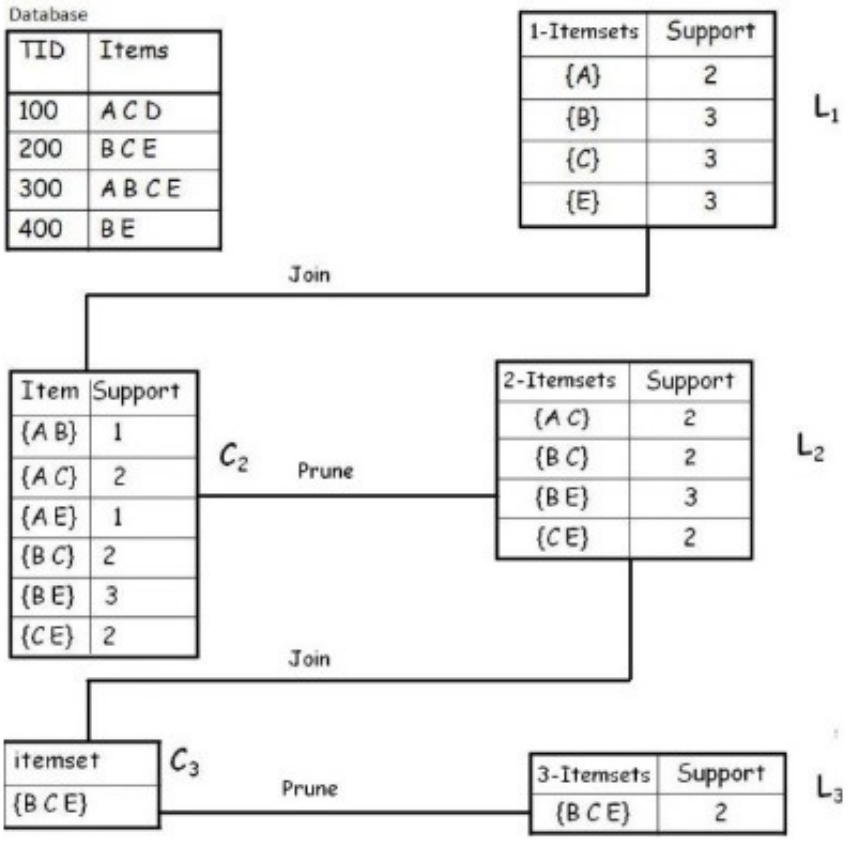
进一步，当某一个L_k的所有超集都是频繁项集时，我们就可以称此L_k为最大频繁$k-$项集，确定它的目的就在于使之后的到的关联规则具有较高的普适性。

2.3 寻找频繁项集

对频繁项集的寻找，是Apriori算法提高寻找规则效率的关键。它采用迭代的方式逐层寻找下层的超集，并在超集中发现频繁项集。经过层层迭代，直到最顶层得到最大频繁项集为止。在每一轮的迭代中都包含以下两个步骤：

- 1）产生候选集C_k，它是有可能成为频繁项集的项目集合；
- 2）修剪候选集C_k，即基于C_k计算相应的支持度，并依据最小支持度S_{min}对候选集C_k进行删减，得到新的候选集C_{k+1}，如此循环迭代，直到无法产生候选项集为止，这样最后一轮所得到的频繁项集就是Apriori所要求的最大频繁项集。

接下来我们以一个下例子帮助理解：



假设我们指定的最小支持阈度为0.5（计数≥2）
- 在第一轮迭代过程中，由于D的支持度小于0.5（只有0.25），所以没有进入频繁项集，其余均进入频繁项集，定义为L_1。
- 在第二轮迭代中，候选集C_2是L_1中所有项目的组合，计算各项目支持度，淘汰$\{A, B\}$和$\{A, E\}$，其余进入频繁项集，定义为L_2。
- 在第三轮迭代中，只有$\{B, C, E\}$进入候选集C_3，而其余都没有进入，之所以会这样，是因为这里使用到了前面所提到的频繁项集的第二个性质：**非频繁项集的超集一定也是非频繁的**。所以，包含$\{A, B\}$与$\{A, E\}$的超集是不可能成为频繁项集的。

由于L_3不能继续构成候选集C_4，所以迭代结束，得到的最大频繁项集为$L_3\{B, C, E\}$。

2.4 在最大频繁项集的基础上产生简单关联规则

得到最大频繁项集并不是最终的目的。之前在判断关联规则的有效性时，我们学习了置信度与支持度两个指标。其中，支持度已经在寻找最大频繁项集的过程中发挥了作用，那么，在接下来关联规则的产生上，就轮到置信度大显身手了。

首先，每个频繁项集都需要计算所有非空子集L^*的置信度，公式为

$$C_{L^* \to \{L - L^*\}} = \frac{P(L)}{P(L^*)}$$

如果所求得的$C_{L^* \to \{L-L^*\}}$大于我们自行指定的C_{min}，则生成相应的关联规则$L^* \to \{L - L^*\}$

在上面的例子中，$L_3\{B, C, E\}$的非空子集就包括$\{B\}$，$\{C\}$，$\{E\}$，$\{B, C\}$，$\{B, E\}$，$\{C, E\}$，举例来说，根据公式可计算得到

$$C_{C \to \{B,E\}} = \frac{P(B, C, E)}{P(C)} = \frac{2}{3} = 66.7\%$$

其余置信度依次为：$C_{B \to \{C,E\}} = 66.7\%$，$C_{E \to \{B,C\}} = 66.7\%$，$C_{\{B,C\} \to E} = 100\%$，$C_{\{B,E\} \to C} = 66.7\%$，$C_{\{C,E\} \to B} = 100\%$

如果我么设定$C_{min} = 80\%$的话，只有$C_{\{C,E\} \to B}$和$C_{\{B,C\} \to E}$可以入围，如果设定为50%，那么六条规则就都是有效规则了。置信度的选取和支持度一样，只有结合具体应用情况，算法才能给到我们切合实际的结论。