Nenadzorovano učenje: odkrivanje vzorcev

Ljupčo Todorovski

Univerza v Ljubljani, Fakulteta za upravo
Institut Jožef Stefan, Odsek za tehnologije znanja (E-8)

April 2020

Pregled predavanja

Razvrščanje v skupine (*clustering*)

- Problem razvrščanja v skupine
- Hierarhično razvrščanje v skupine
- Algoritem k-tih voditeljev (*k-means*)

Povezovalna pravila (*association rules*)

- Algoritem APRIORI za odkrivanje pogostih množic postavk
- Od pogostih množic postavk do povezovalnih pravil

Nenadzorovano in nadzorovano učenje

Nadzorovano učenje

- Primeri $e \in \bigtimes_{i=1}^{p} D_i \times D_Y$,
  $e = (\boldsymbol{x}, y) = (x_1, x_2, \ldots x_p, y), x_i \in D_i, y \in D_Y$
- Rezultat učenja je napovedni model $y = m(\boldsymbol{x})$

Nenadzorovano učenje

- Primeri $e \in \bigtimes_{i=1}^{p} D_i$ oziroma $e = \boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots x_p), x_i \in D_i$
- Rezultat učenja so vzorci

Dva tipa vzorcev

Skupine primerov

- To so množice primerov, ki so si medsebojno podobni
- Algoritmi za razvrščanje v skupine (*clustering*)

Pogoste množice postavk (*freqent itemsets*)

- To so vrednosti spremenljivk, ki se pogosto pojavljajo skupaj
- Algoritem APRIORI za odkrivanje pogostih množic postavk
- Algoritem za odkrivanje povezovalnih pravil (*association rules*)

Problem razvrščanja v skupine

Vhoda

- Učna množica S primerov brez ciljne spremenljivke
- Želeno (pričakovano) število skupin k

Rezultat je razbitje množice S na k (disjunktnih) podmnožic S_i

$$S_i : \bigcup_{i=1}^{k} S_i = S,\ \forall\, i, j : S_i \cap S_j = \emptyset$$

Primeri v vsaki podmnožici S so medsebojno kar se da **podobni** (blizu).

Mera razdalje med primeri

$$d(e_1, e_2) = \sum_{i=1}^{p} \delta(x_{1i}, x_{2i})$$

- Pri Evklidski razdalji velja $d(e_1, e_2) = \sqrt{\sum_{i=1}^{p} \delta(x_{1i}, x_{2i})}$
- x_{ji} je vrednost spremenljivke X_i za primer e_j

δ je mera razdalje med vrednostmi $\delta : D_i \times D_i \to \mathbb{R}_0^+$

Če je X_i numerična, sta običajni izbiri

- Evklidska razdalja $\delta(v_1, v_2) = (v_1 - v_2)^2$
- Manhatnska razdalja $\delta(v_1, v_2) = |v_1 - v_2|$

Če je X_i diskretna, je običajna izbira $\delta(v_1, v_2) = I(v_1 \neq v_2)$

Iterativni algoritem za hierarhično razvrščanje

Začetni pogoj

Vsak primer e_i iz učne množice S je v svoji skupini S_i.

Iteracija

- V trenutnem naboru skupin izberimo dve **najbližji**: S_i in S_j
- Izbrani dve skupini zlijemo v eno $S_{ij} = S_i \cup S_j$

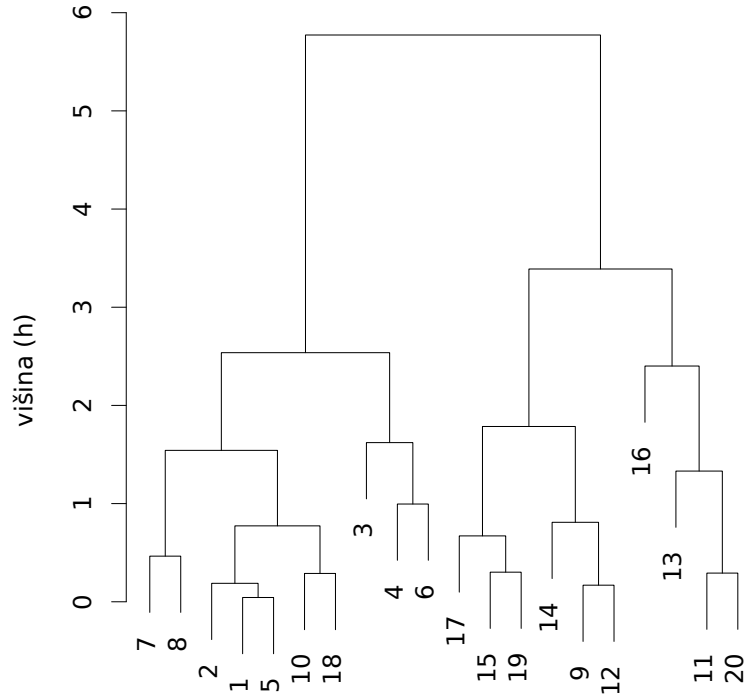
Ustavitveni pogoj

- V vsaki iteraciji število skupin zmanjšamo za 1
- Na koncu iteracije $|S| - 1$ dobimo eno skupino, ki je enaka S

Rezultat: dendrogram (hierarhija skupin)

Višina združevanja na osi y

Razdalja med skupinami primerov $\{2, 1, 5\}$ in $\{10, 18\}$ je nekaj manj kot 1.



Kako merimo razdaljo med skupinami (*linkage*)?

MAX ali *complete linkage*

$$D(S_1, S_2) = \max_{e \in S_1, f \in S_2} d(e, f)$$

MIN ali *single linkage*

$$D(S_1, S_2) = \min_{e \in S_1, f \in S_2} d(e, f)$$

MEAN ali *average linkage*

$$D(S_1, S_2) = \frac{1}{|S_1||S_2|} \sum_{e \in S_1, f \in S_2} d(e, f)$$

Ward-ova razdalja med skupinami (*linkage*)

Na splošno lahko definiramo razdaljo nove skupine kot

$$\begin{aligned} D(S_1 \cup S_2, S_3) &= \alpha_1 D(S_1, S_3) + \alpha_2 D(S_2, S_3) \\ &\quad + \beta D(S_1, S_2) + \gamma |D(S_1, S_3) - D(S_2, S_3)| \end{aligned}$$

Za Ward-ovo razdaljo velja

$$\begin{aligned} \alpha_i &= \frac{|S_i| + |S_3|}{|S_1| + |S_2| + |S_3|} \\ \beta &= -\frac{|S_3|}{|S_1| + |S_2| + |S_3|} \\ \gamma &= 0 \end{aligned}$$

Tudi prve tri metode lahko pametriziramo na enak način

Za razdaljo MAX velja

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \beta = \frac{1}{2},\ \gamma = 0$$

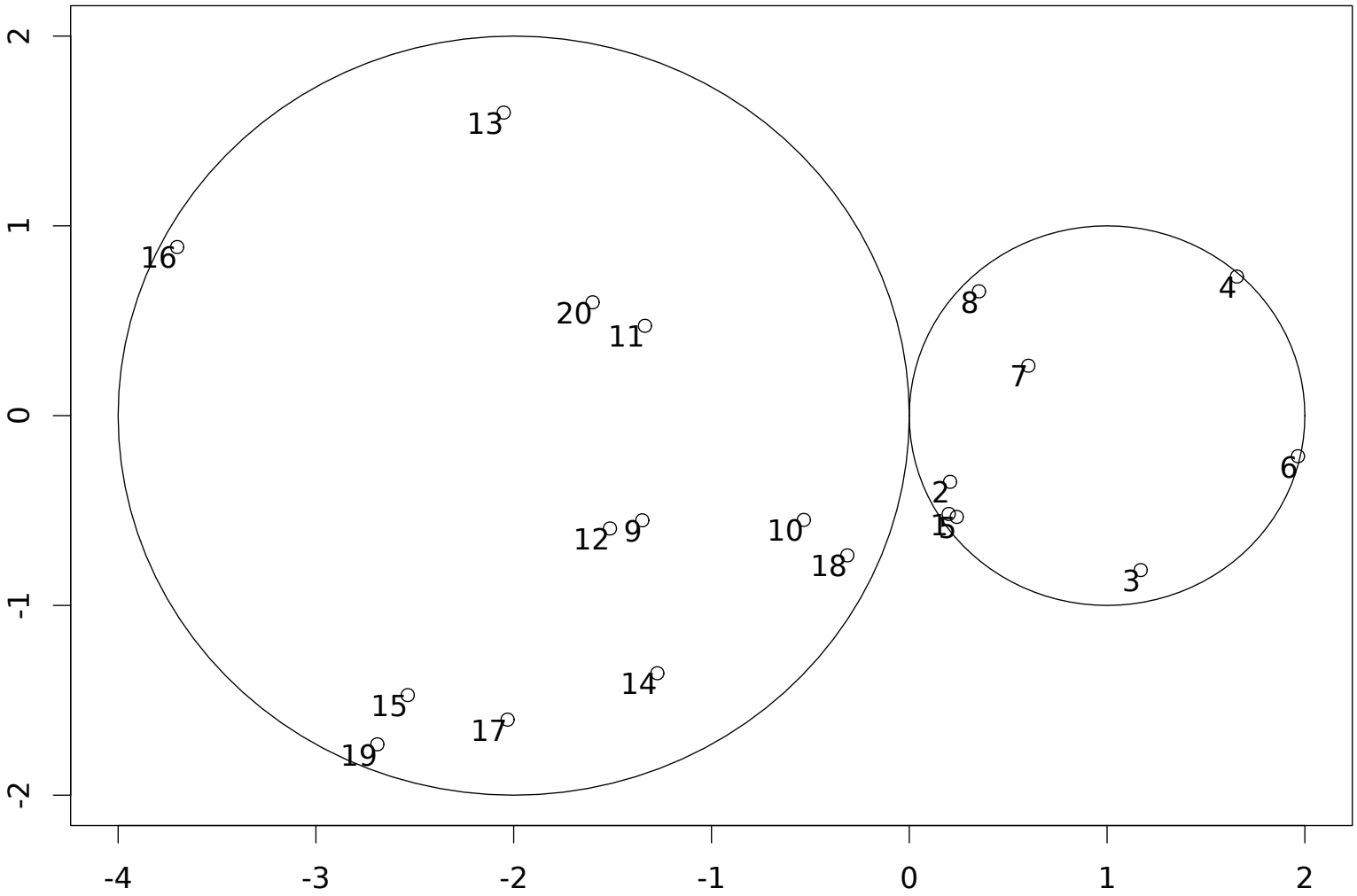
Za razdaljo MIN velja

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{2},\ \beta = -\frac{1}{2},\ \gamma = 0$$

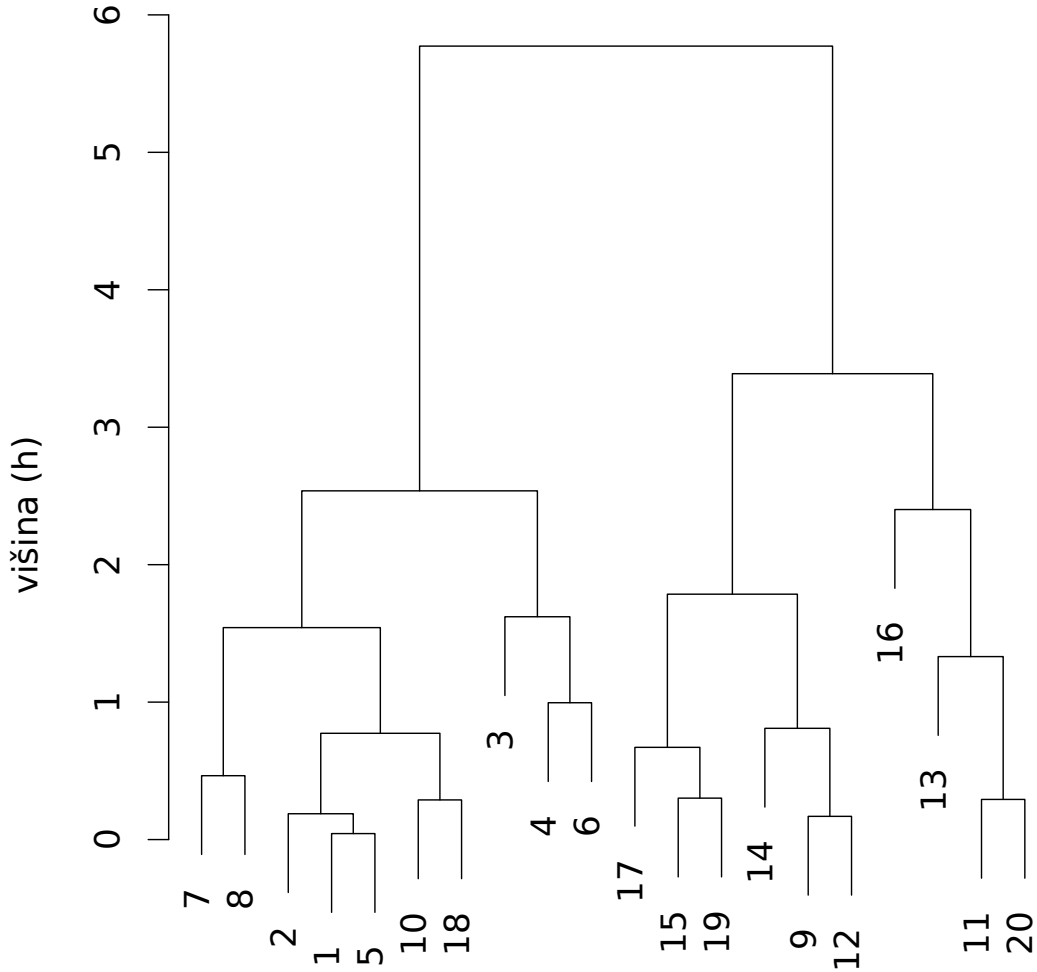
Za razdaljo MEAN velja

$$\alpha_i = \frac{|S_i|}{|S_1| + |S_2|},\ \beta = \gamma = 0$$

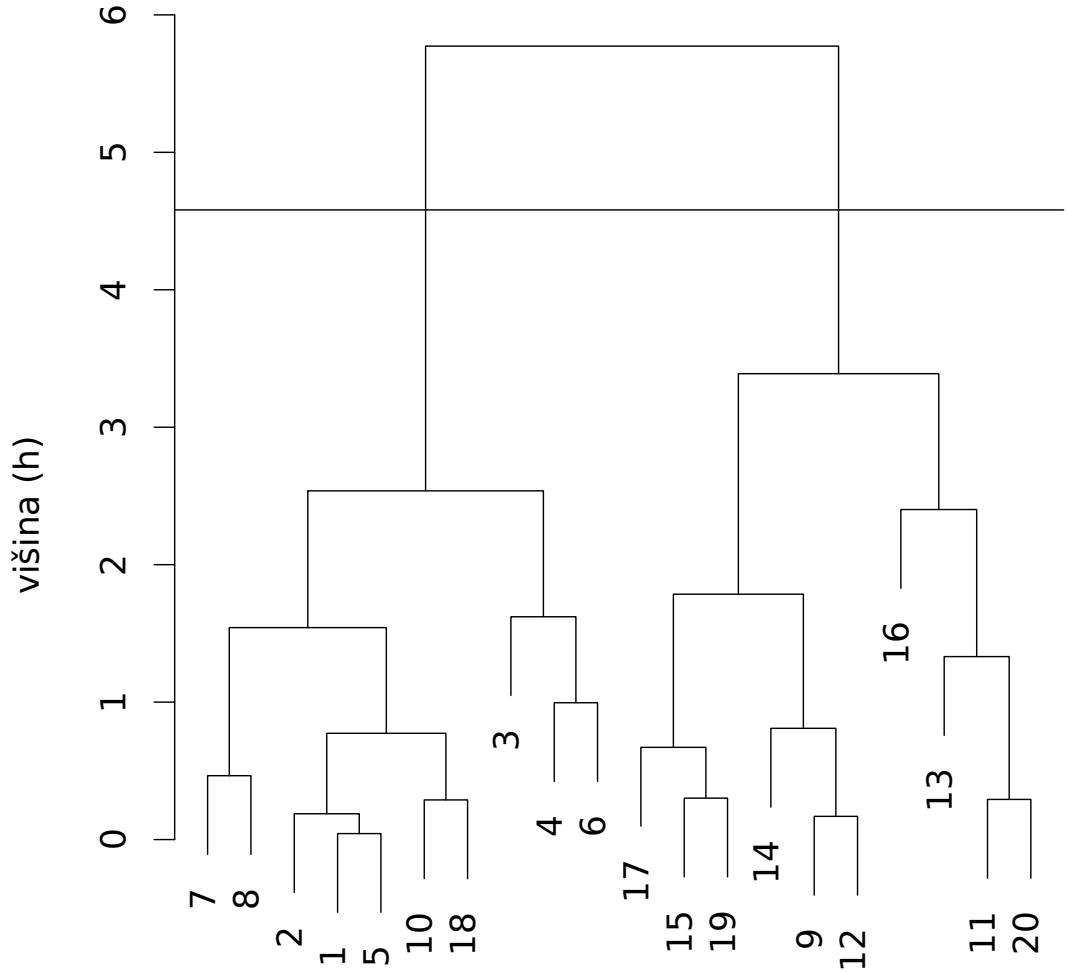
Primer podatkov za razvrščanje: dva kroga



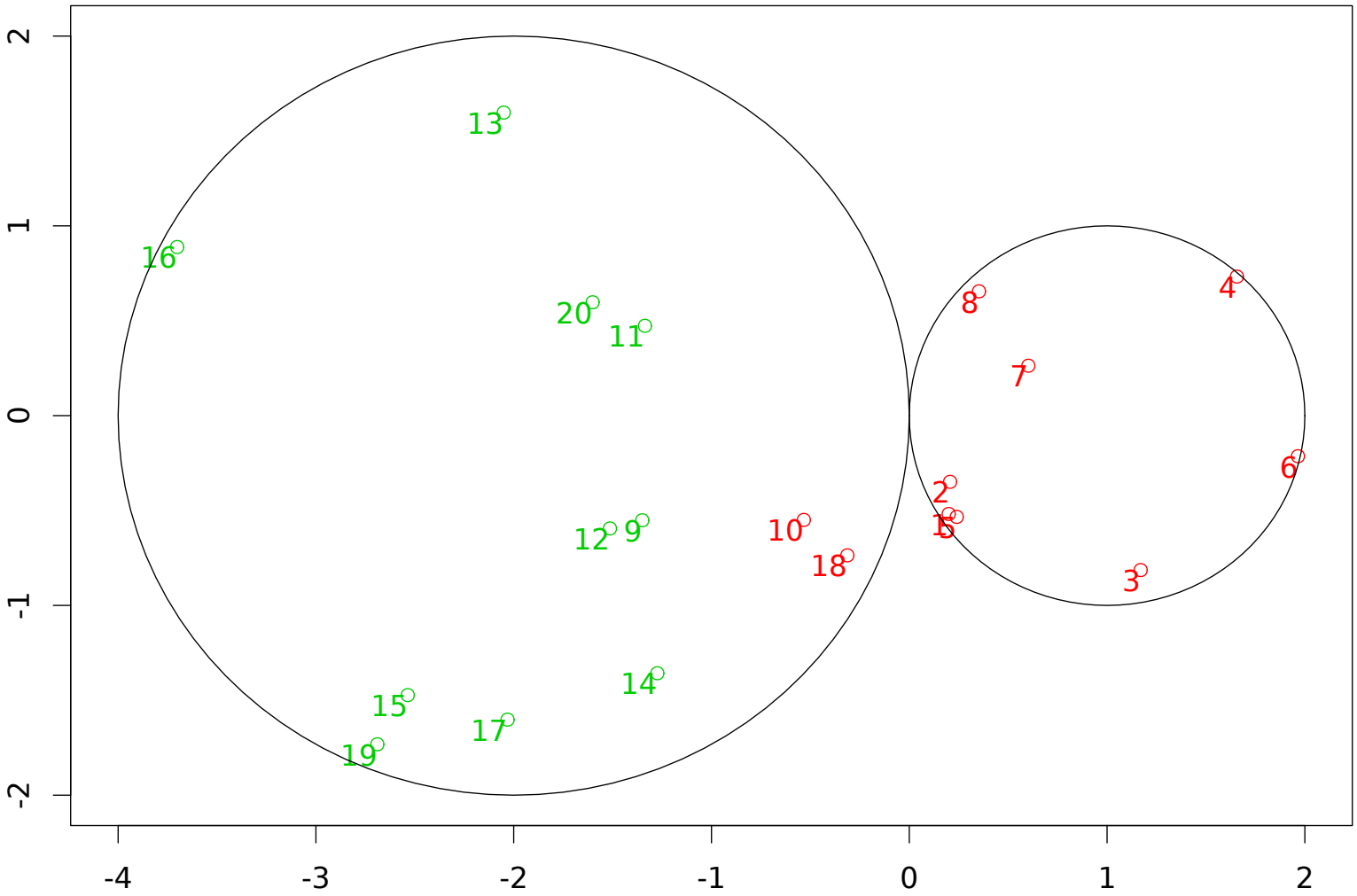
Primer dendrograma: MAX, *complete*



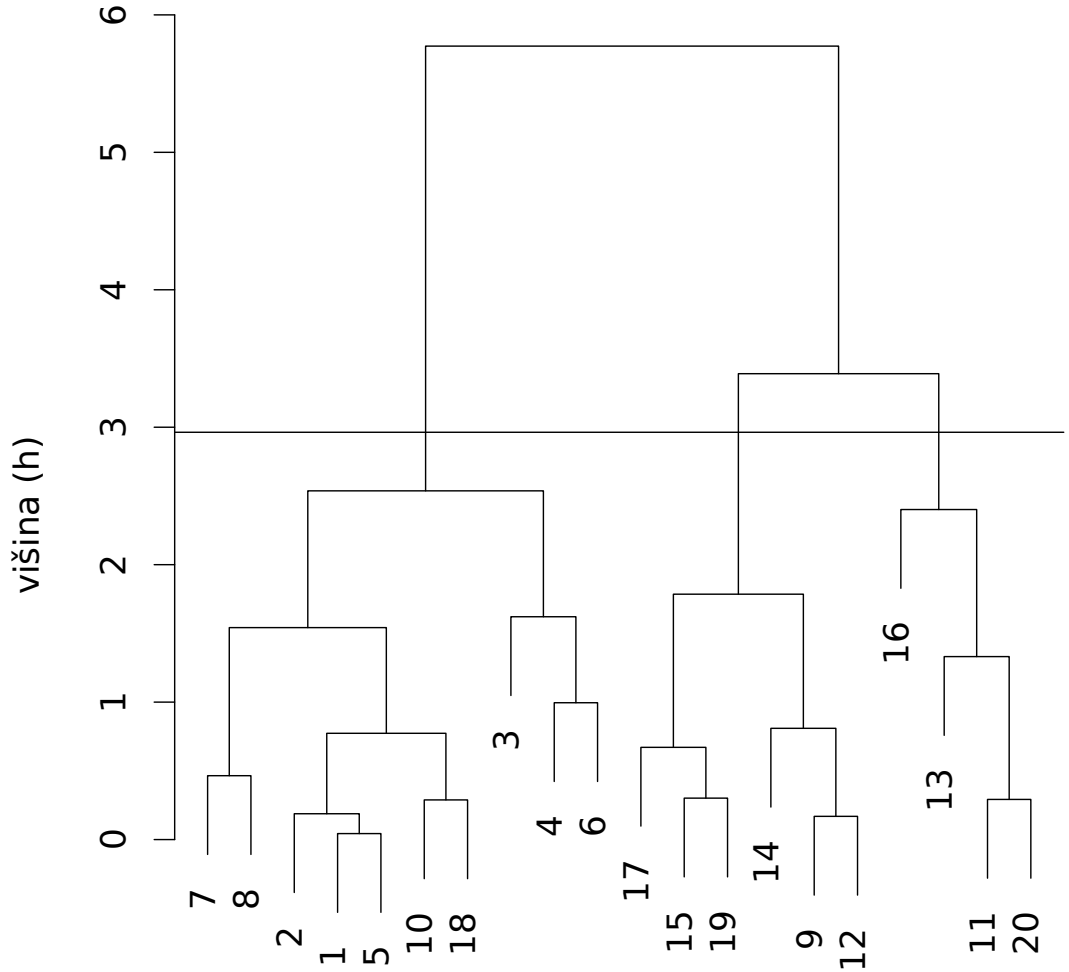
Od dendrograma do skupin (*complete*): dve skupini



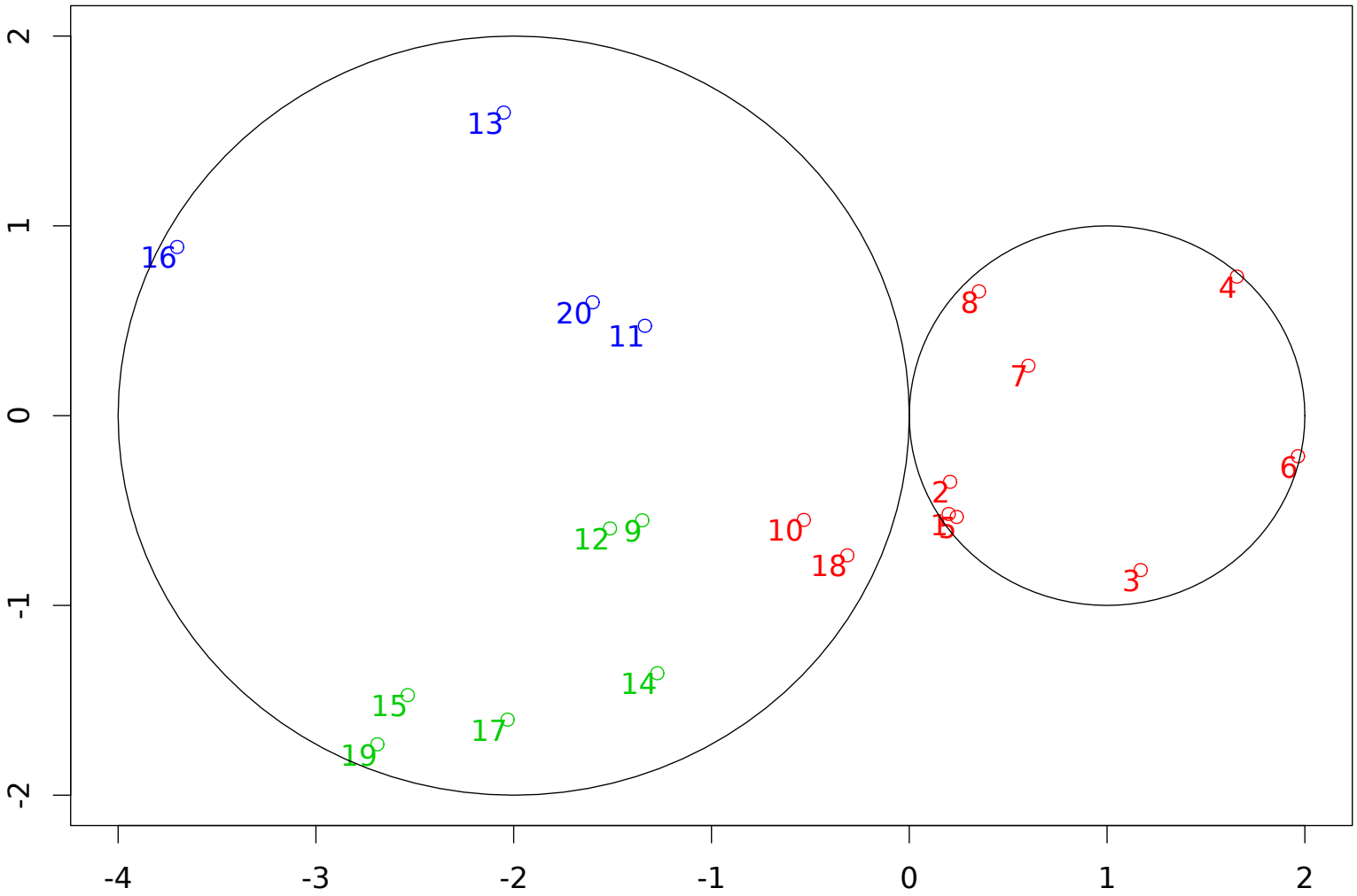
Dve skupini (*complete*): podatki



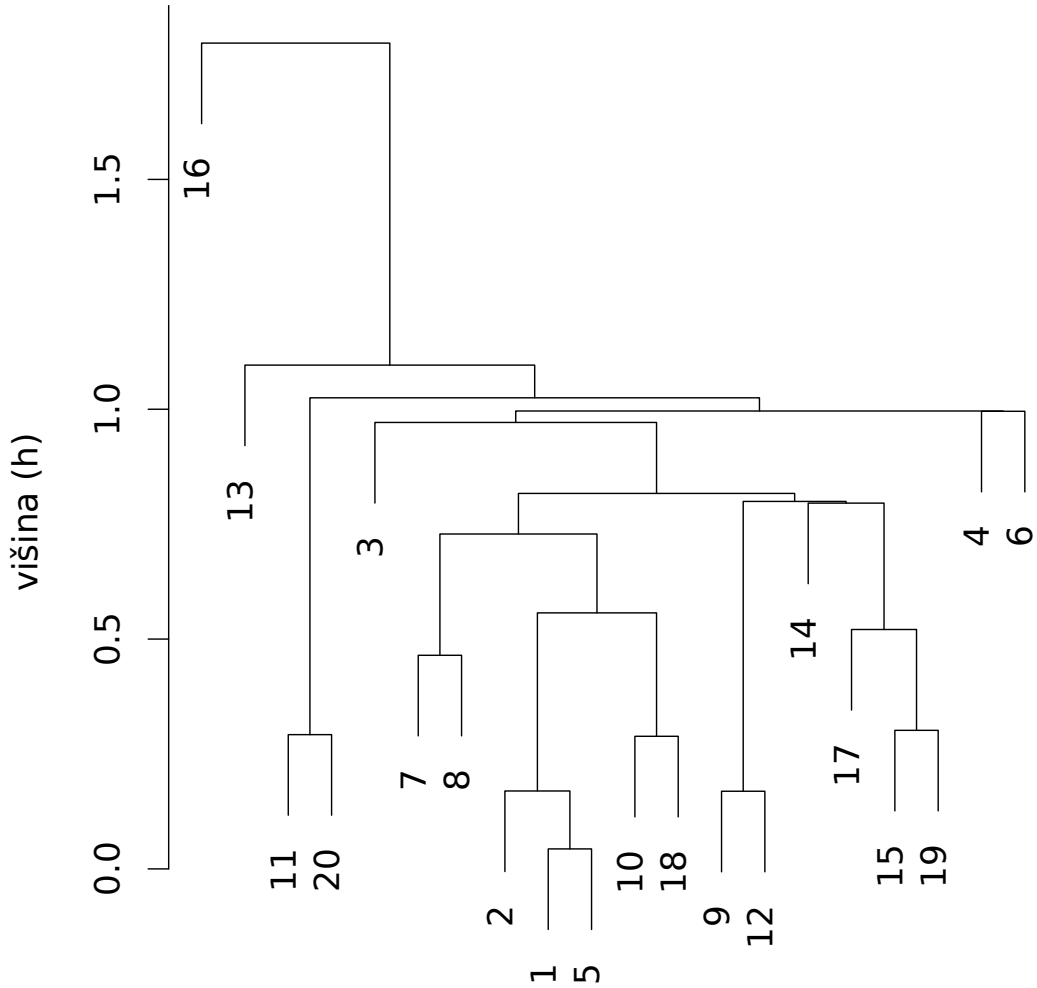
Od dendrograma do skupin (*complete*): tri skupine



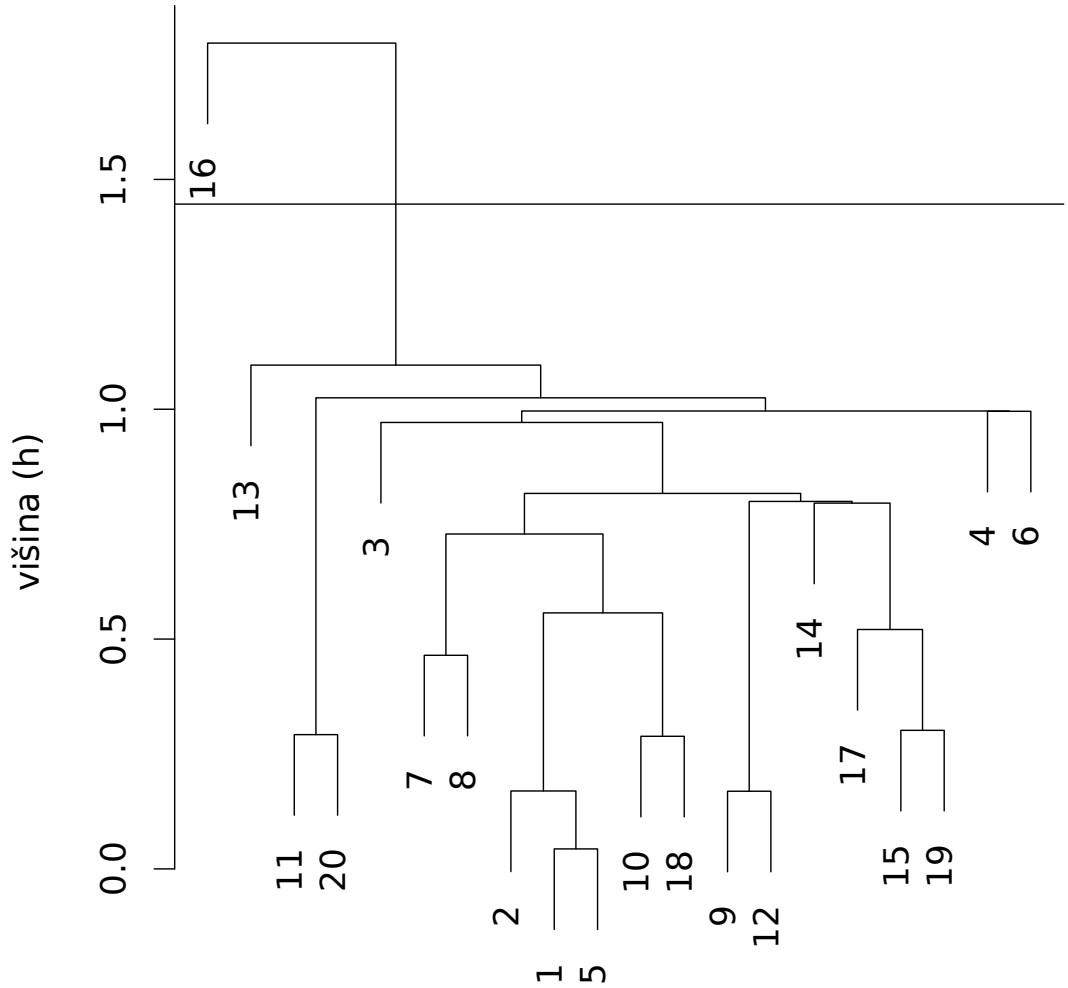
Tri skupine (*complete*): podatki



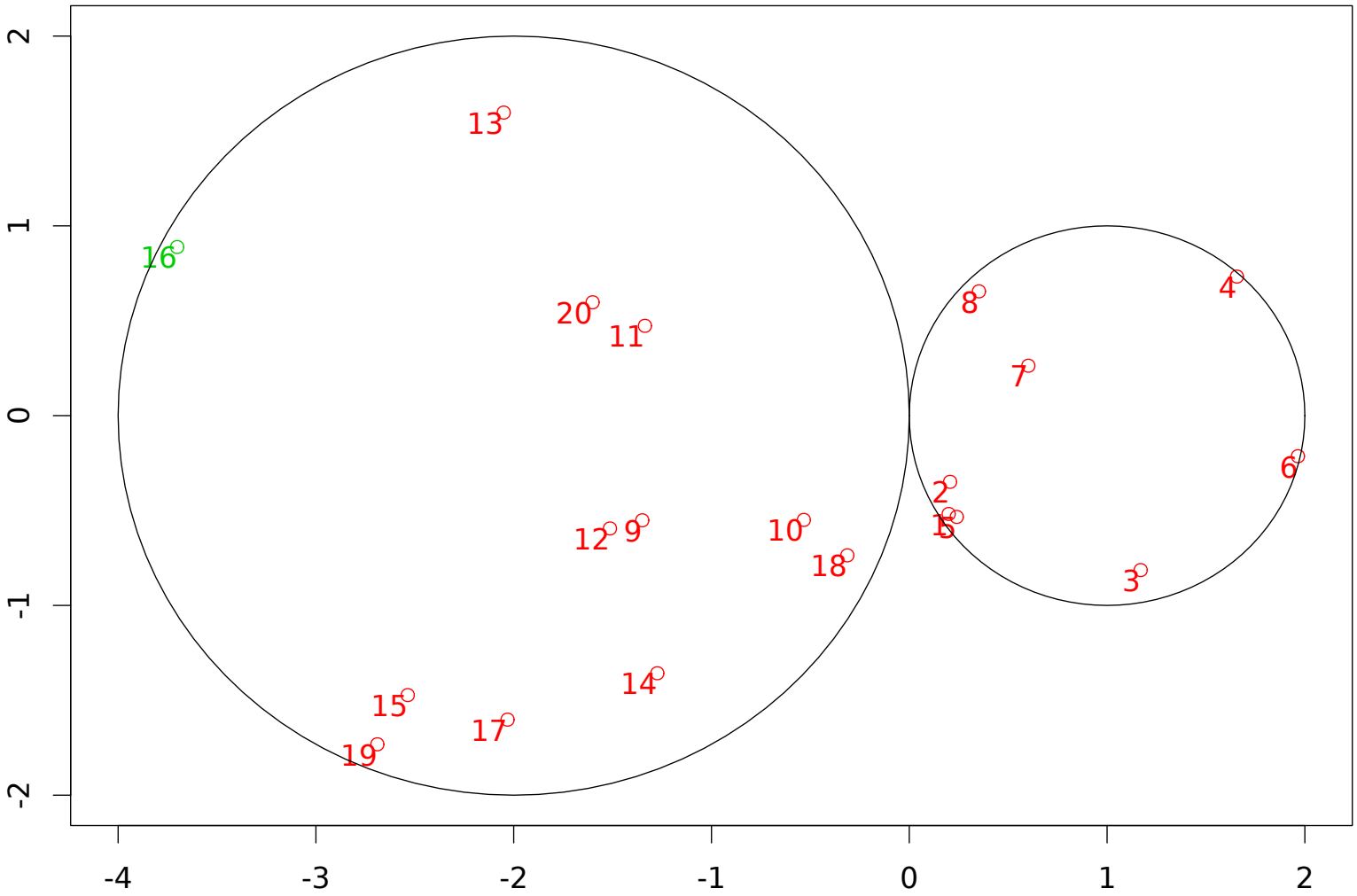
Primer dendrograma: MIN, *single*



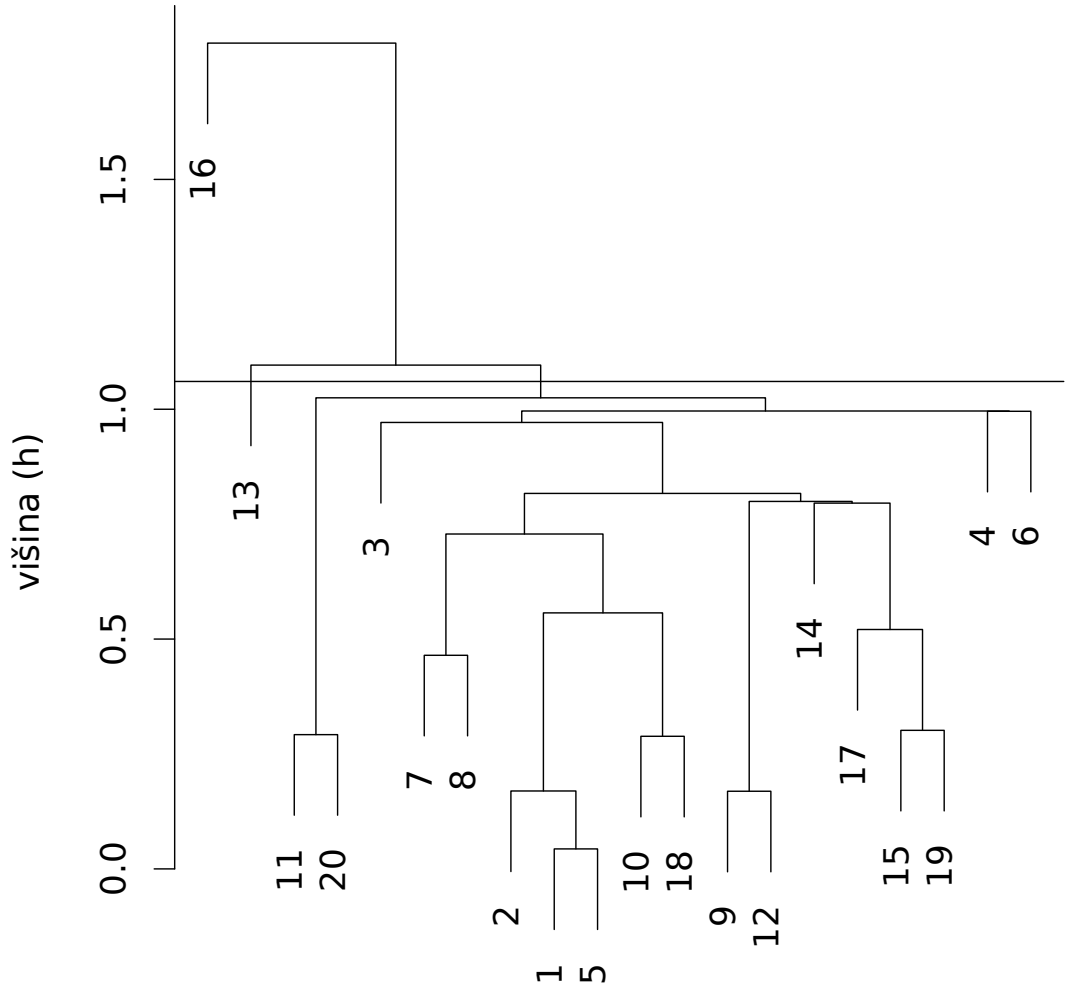
Od dendrograma do skupin (*single*): dve skupini



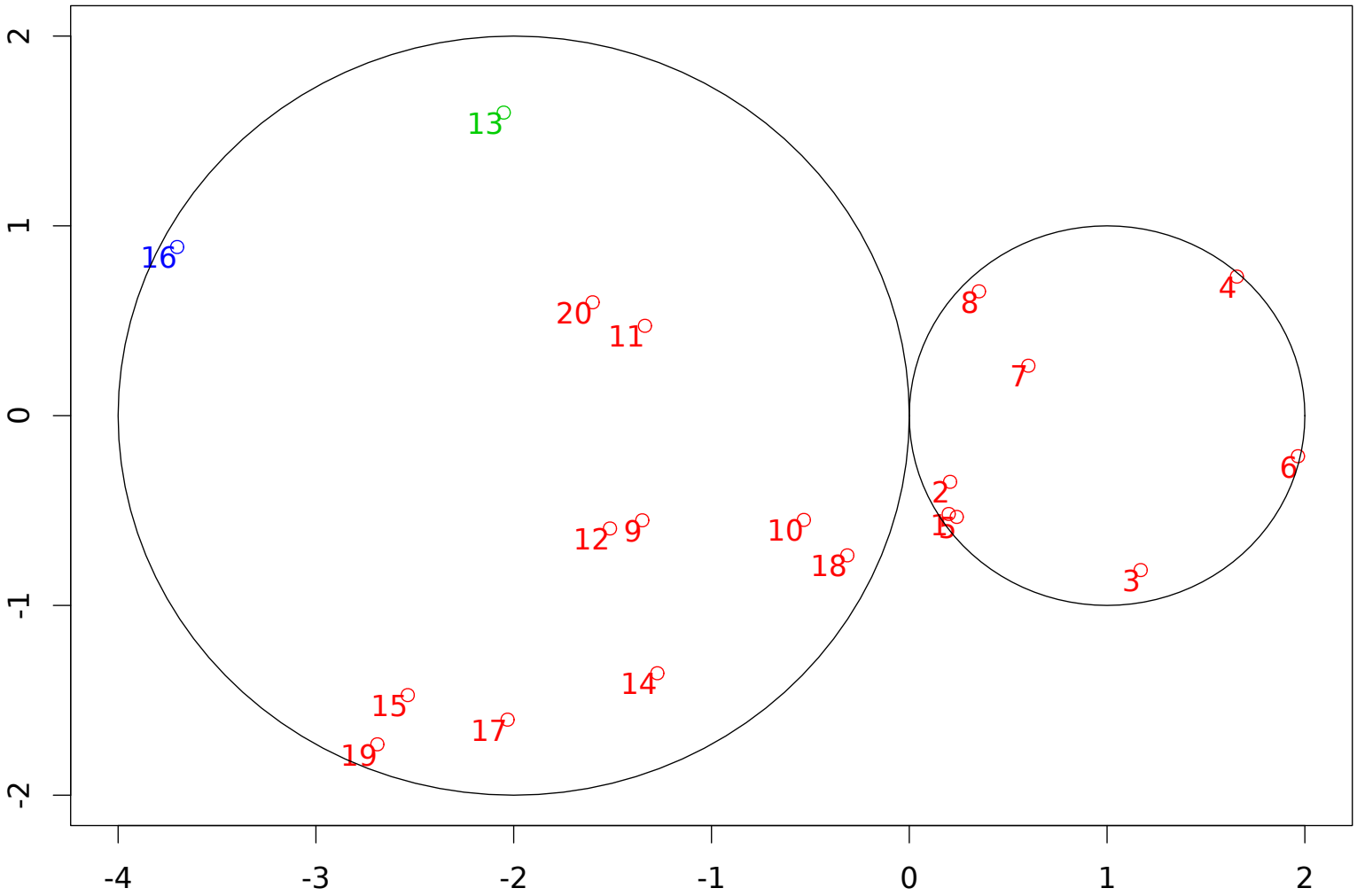
Dve skupini (*single*): podatki



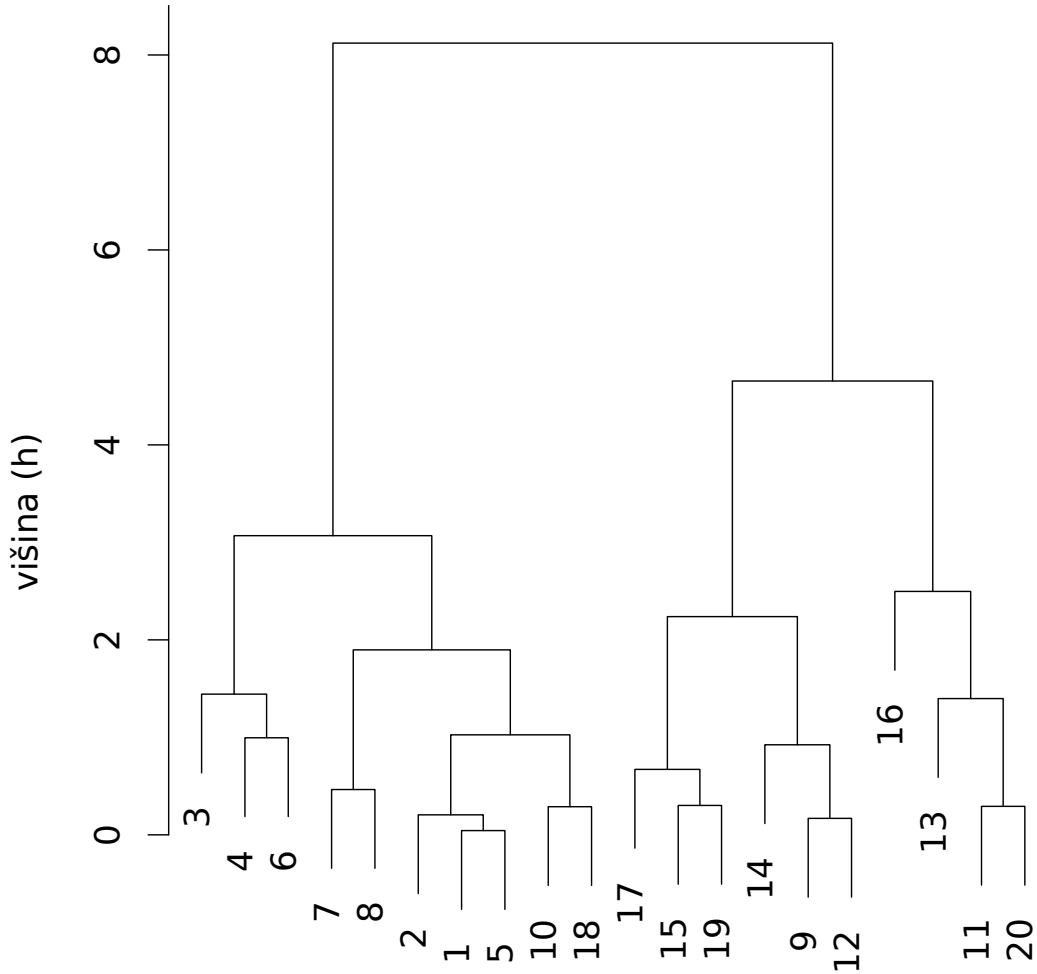
Od dendrograma do skupin (*single*): tri skupine



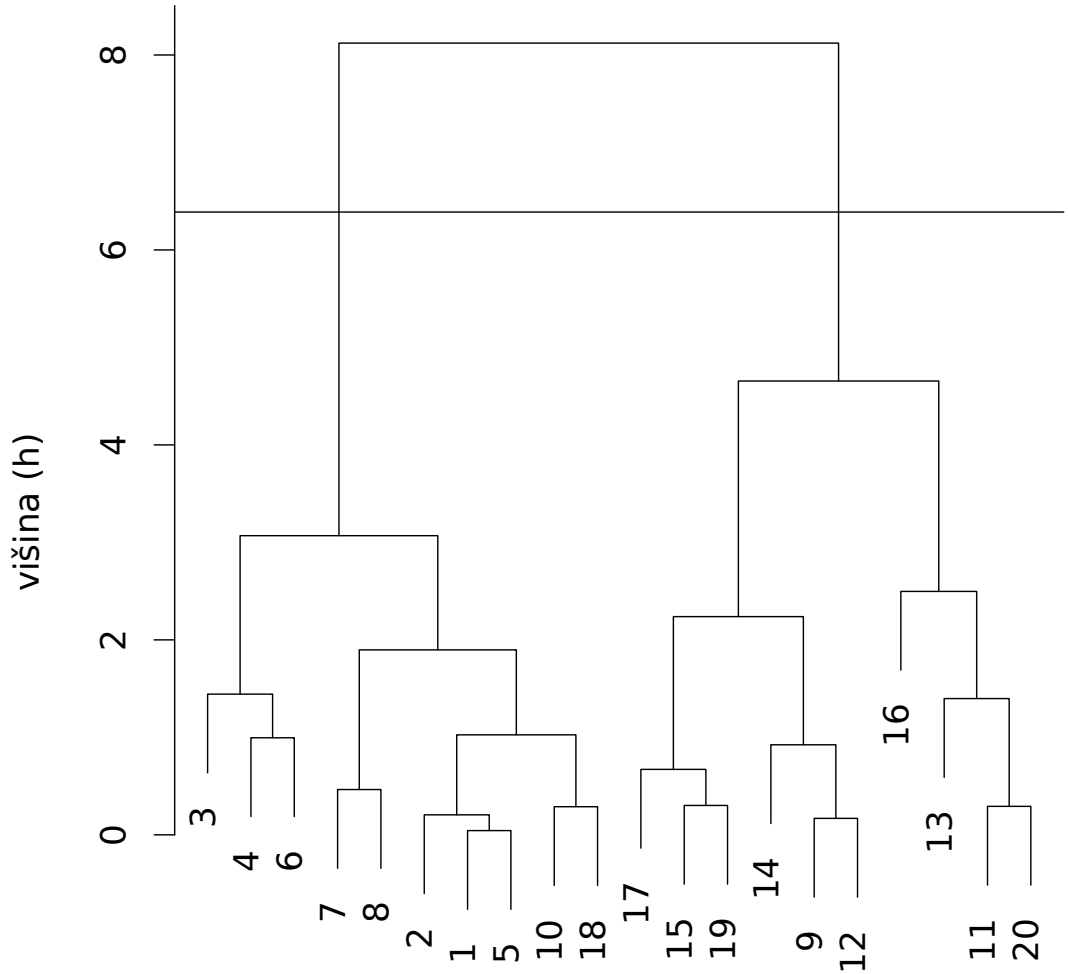
Tri skupine (*single*): podatki



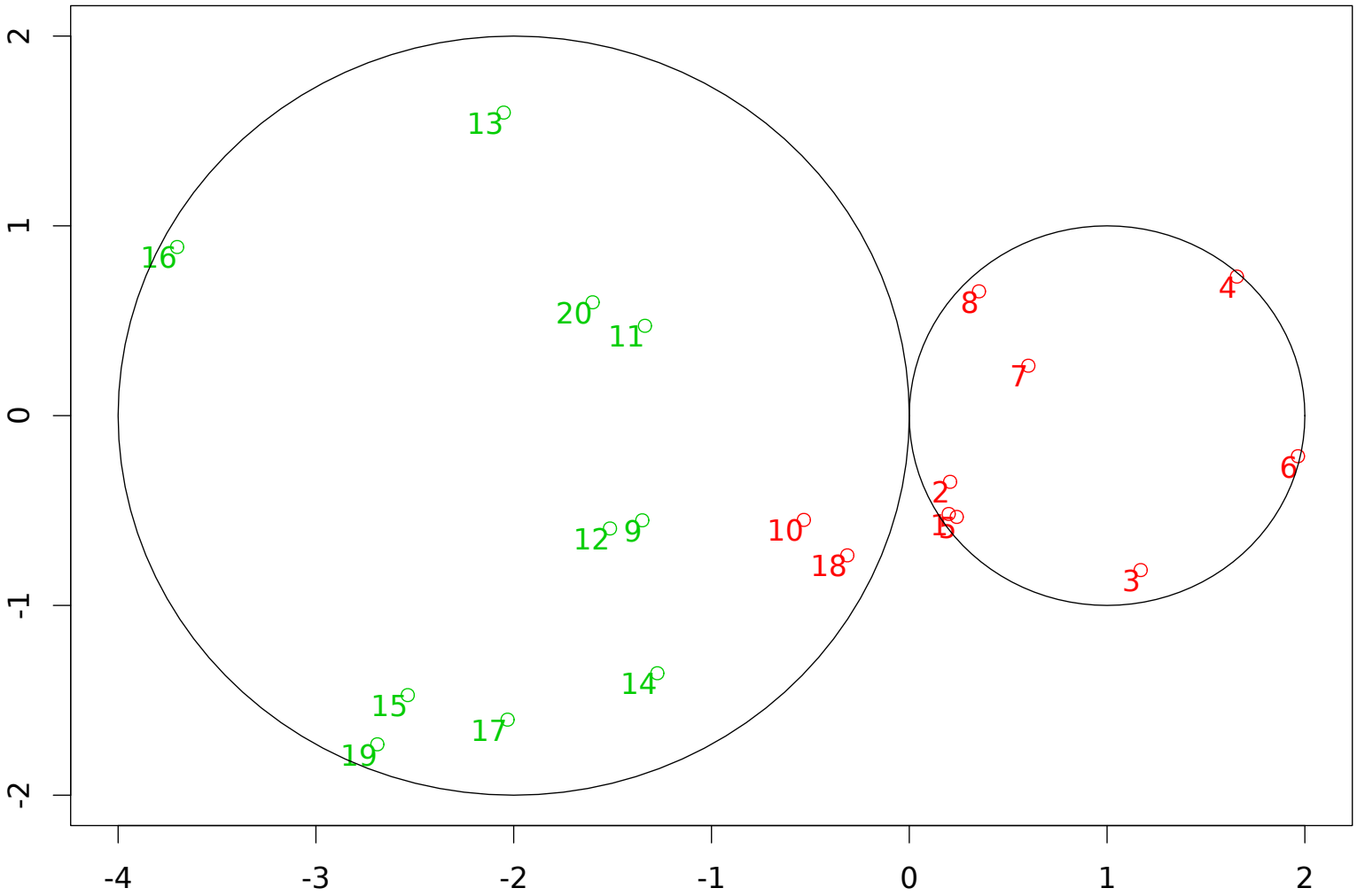
Primer dendrograma: *Ward*



Od dendrograma do skupin (*Ward*): dve skupini

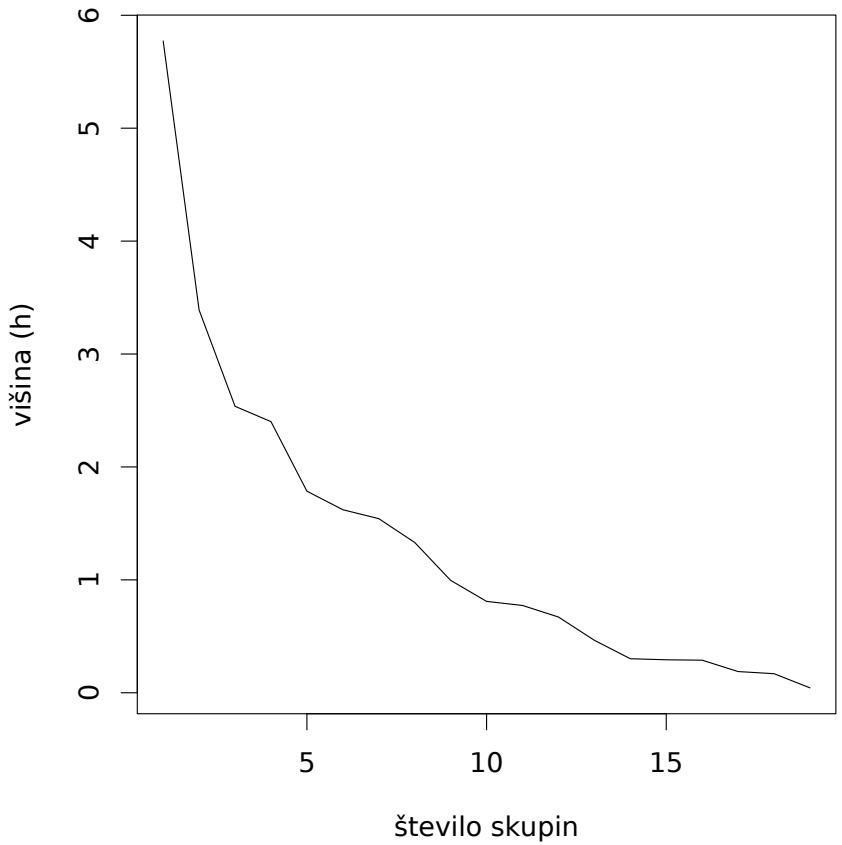


Dve skupini (*Ward*): podatki

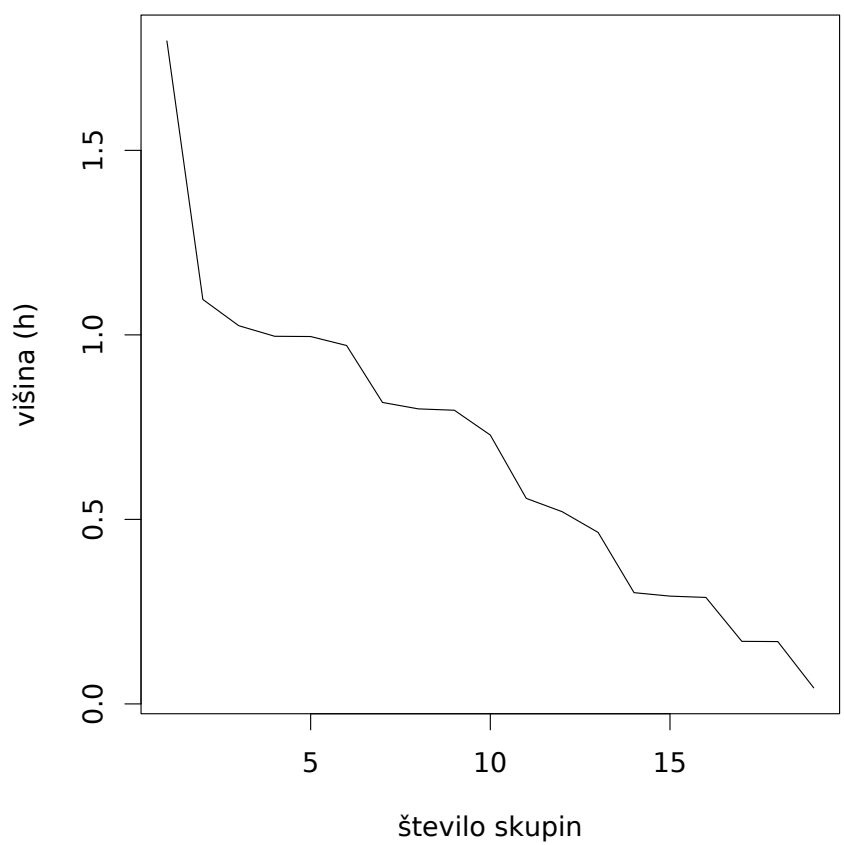


Primerjava združitvenih višin

complete



single



Razvrščanje v skupine kot optimizacijski problem

Najdi razbitje učne množice S na skupine $S_1, S_2, \ldots S_k$

$$\arg\min_{S_1,S_2,\ldots S_k} \sum_{i=1}^{k} |S_i| \, Var(S_i)$$

Minimiziramo torej varianco primerov znotraj skupin, hkrati (ker je celotna varianca v podatkih konstantna) maksimiramo varianco primerov iz različnih skupin.

Iterativni algoritem za optimizacijo (Lloyd)

Začetni pogoj

Primere iz S naključno razdelimo v k skupin, za vsako skupino S_i izračunamo centroid

$$\mu_i = Centroid(S_i) = \frac{1}{|S_i|} \sum_{e \in S_i} e$$

Iteracija iz dveh zaporednih korakov

1. Dodelitev (*assignment*) primerov skupinam
2. Posodabljanje (*update*) centroidov: izračun po zgornji formuli

Ustavitvena pogoja (lahko je izpolnjen le eden)

- V zadnji iteraciji se skupine niso spremenile
- Maksimalno število iteracij

Korak dodelitve (*assignment*)

Vsakemu primeru poiščemo najbližji centroid

In nato primer uvrstimo v skupino tega centroida:

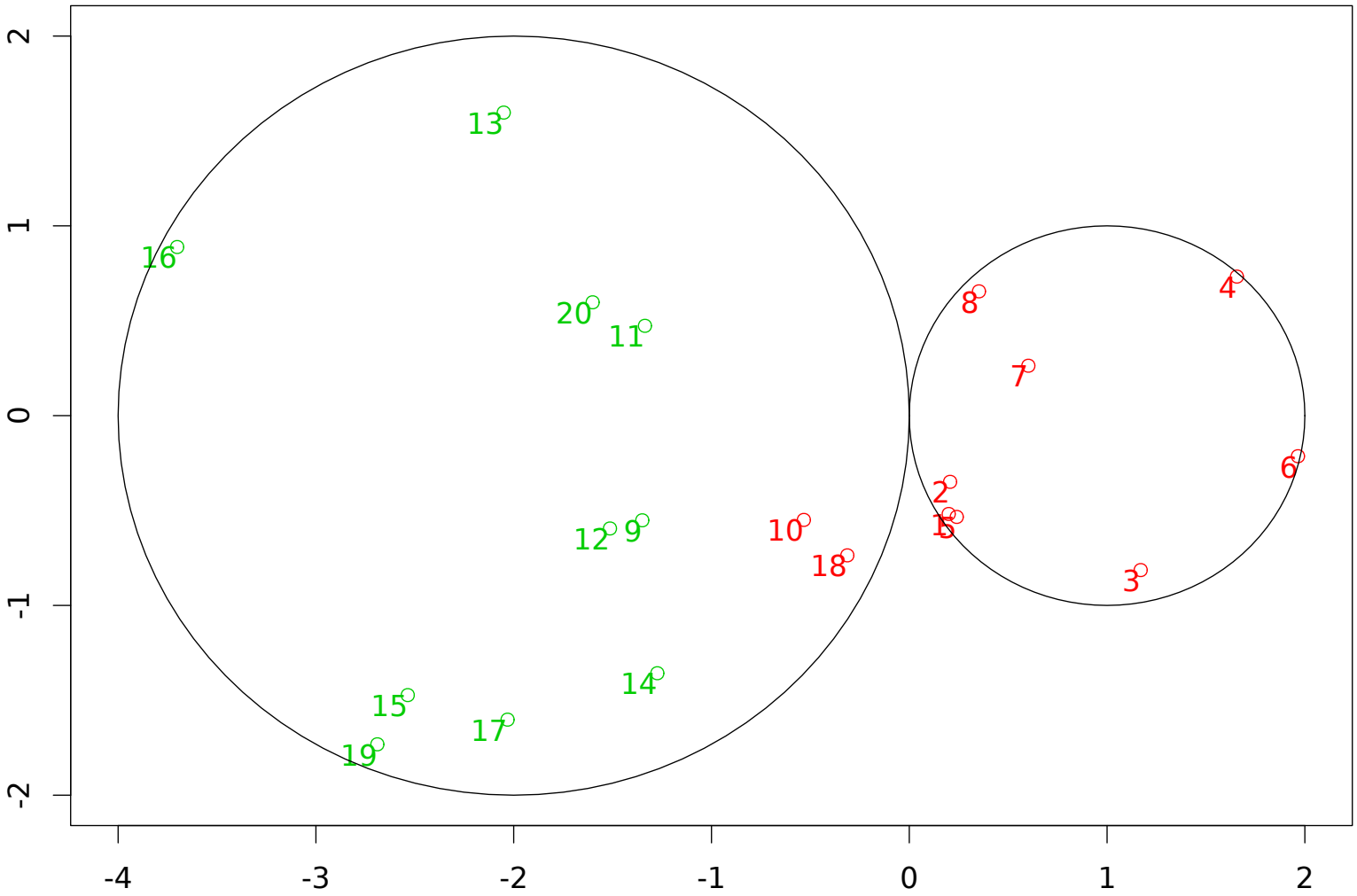
$$S_i = \{e : d(e, \mu_i) \leq d(e, \mu_j), \forall j : 1 \leq j \leq k\}$$

Če je primer enako oddaljen od več centroidov, naključno izberemo enega.

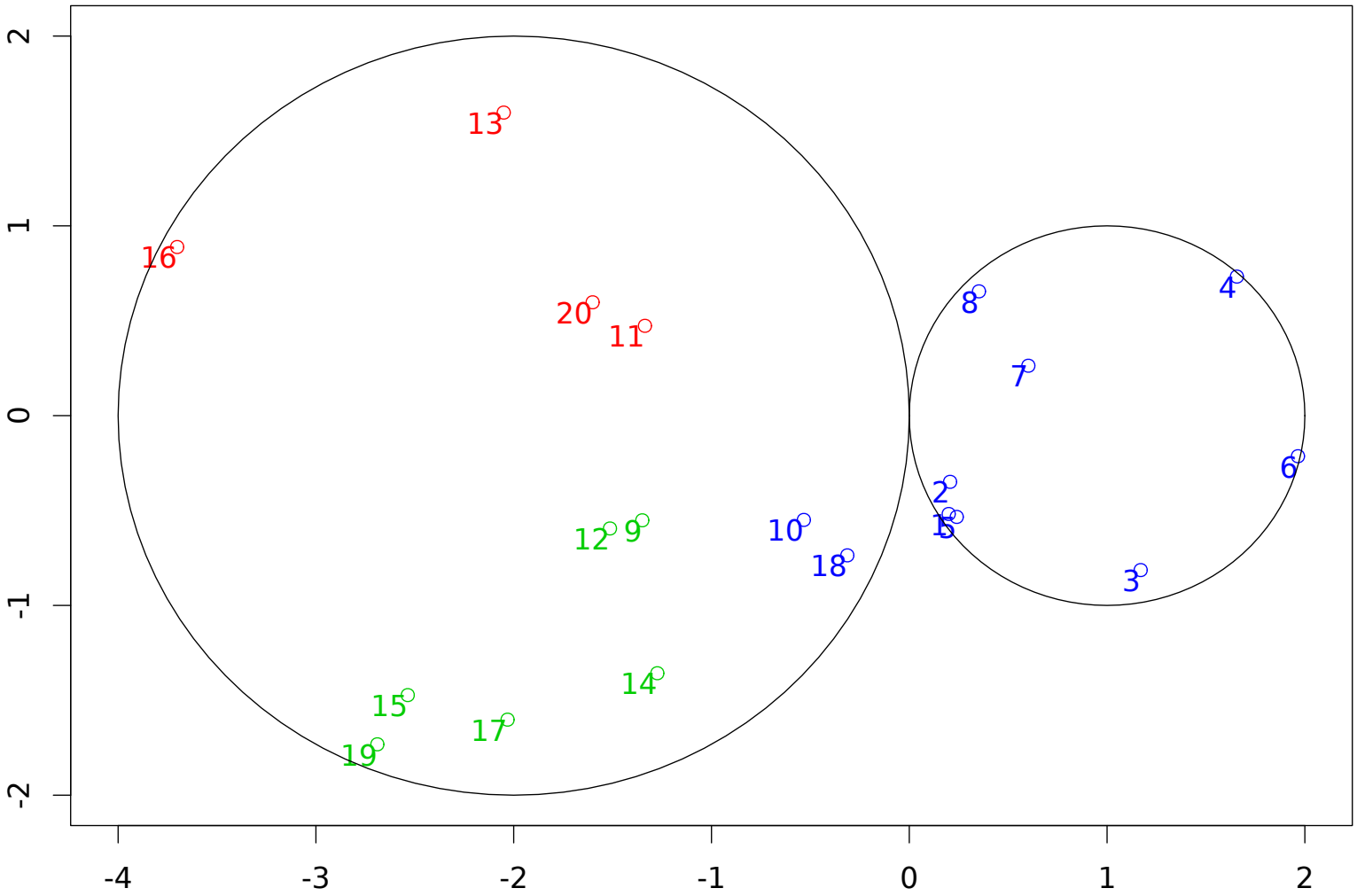
Običajna predpostavka za uporabo algoritma Lloyd

Evklidski prostor in razdalje: formula za centroid je prilagojena temu.

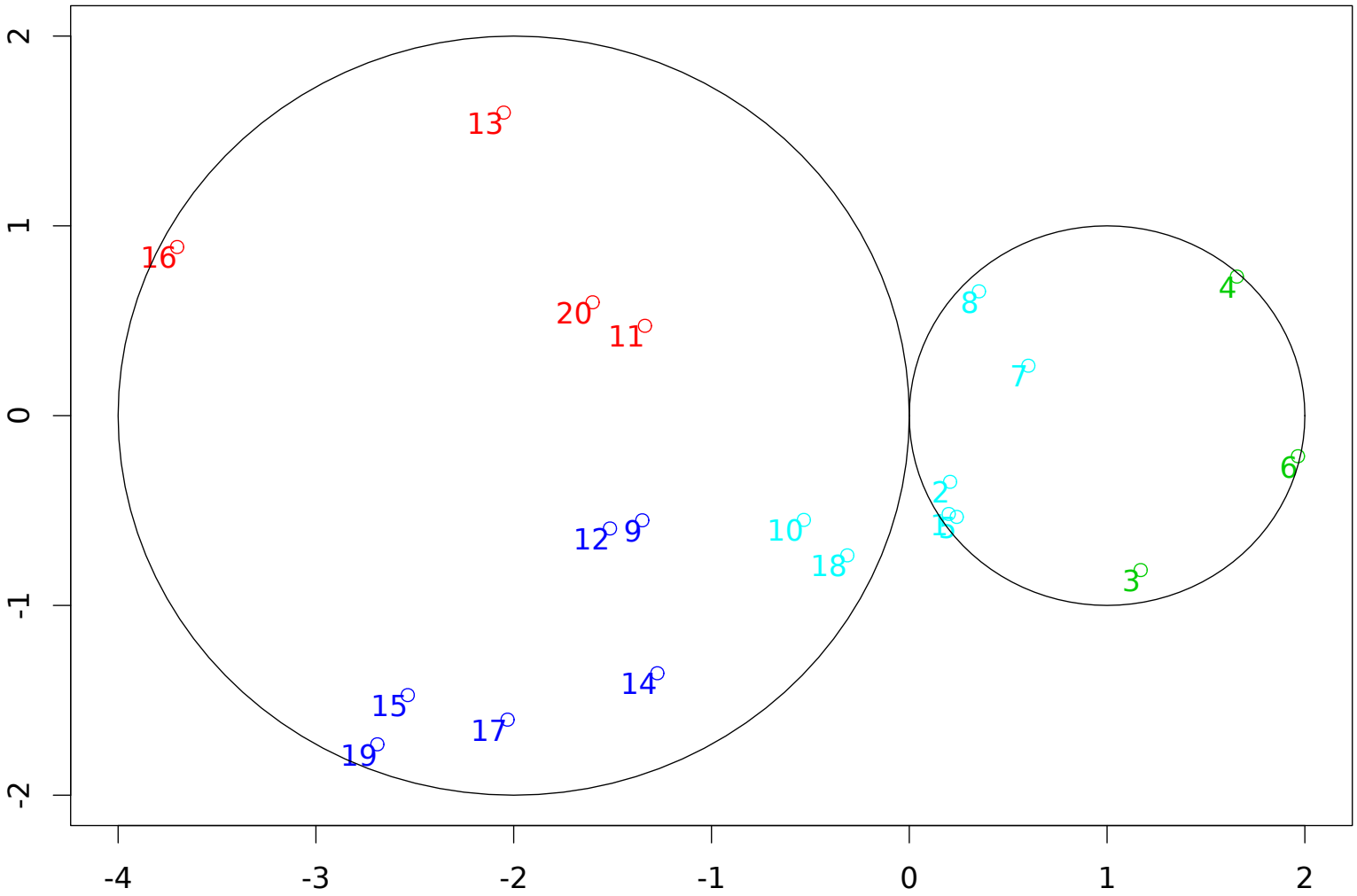
Dve skupini (k-means): podatki



Tri skupine (k-means): podatki



Štiri skupine (k-means): podatki



Osnovne definicije

Množica vseh postavk $I = \{i_1, i_2, \ldots i_p\}$

Predstavlja množico vseh postavk iz katerih so sestavljene transakcije.

Transakcijska baza podatkov T na množici postavk I

- Je množica transakcij $T = \{t_1, t_2, \ldots t_n\}$
- Vsaka transakcija je množica postavk $t_i \subseteq I$

Običajni primer

- Postavke so produkti $I = \{jabolka, kruh, mleko, pivo, plenice\}$
- Transakcije so nakupi

Transakcijska baza podatkov in učna množica

Transakcijska baza podatkov T na I je pravzaprav učna množica S:

- Vsaka postavka $i \in I$ ustreza Boolovi spremenljivki X_i iz S, $D_i = \{0, 1\}$
- Vsaka transakcija $t \in T$ ustreza enemu primeru iz S
- Vrednost spremenljivke X_i za primer t je $I(i \in t)$

Primer transakcijske baze devetih transakcij v trgovini

	transakcija	*jabolka*	*kruh*	*mleko*	*pivo*	*plenice*
t_1	*jabolka*, *kruh*, *plenice*	1	1	0	0	1
t_2	*kruh*, *pivo*	0	1	0	1	0
t_3	*kruh*, *mleko*	0	1	1	0	0
t_4	*jabolka*, *kruh*, *pivo*	1	1	0	1	0
t_5	*jabolka*, *mleko*	1	0	1	0	0
t_6	*kruh*, *mleko*	0	1	1	0	0
t_7	*jabolka*, *mleko*	1	0	1	0	0
t_8	*jabolka*, *kruh*, *mleko*, *plenice*	1	1	1	0	1
t_9	*jabolka*, *kruh*, *mleko*	1	1	1	0	0

Algoritem *APRIORI*: vhodi in rezultat

Vhodi T, I in ϵ

- Transakcijska baza T na množici postavk I
- Parameter ϵ, ki določa minimalno pogostost množice postavk

Rezultat *FreqentItemsets*

Množica pogostih množic postavk, ki imajo pogostost $\geq \epsilon$.

Pogostost množice postavk s (tudi podpora, *support*) v T

$$support(s) = \frac{|\{t \in T : s \subseteq t\}|}{|T|}$$

Pogostost je ocena verjetnosti $p(s)$, da transakcija iz T vsebuje s.

Pomembna lastnost pogostosti: anti-monotonost

Vzamemo dve množici postavk s in r

- Naj velja $s \subseteq r$
- Kaj lahko rečemo o $support(s)$ in $support(r)$?

Poglejmo najprej transakcije T_s in T_r

- $T_s = \{t \in T : s \subseteq t\}$
- $T_r = \{t \in T : r \subseteq t\}$

Očitno velja $s \subseteq r \implies T_r \subseteq T_s$.

Torej, velja anti-monotonost pogostosti

$$s \subseteq r \implies support(s) \geq support(r)$$

Algoritem $APRIORI(T, I, \epsilon) = FreqentItemsets$

- L_k je množica pogostih postavk velikosti k
- C_k je množica kandidatov za pogoste postavke velikosti k

function $APRIORI(T, I, \epsilon)$
1 $L_1 = \{pogoste\ postavke\ iz\ I\}$
2 **for** $k = 2$ **to** $|I|$ **do**
3 $C_k = Join(L_{k-1}, L_{k-1})$
4 $C_k = C_k \setminus \{t : (\exists s : s \subset t \wedge |s| = k - 1 \wedge s \notin L_{k-1})\}$
5 **for** $t \in T$ **do**
6 **for** $s \in \{s : s \in C_k \wedge s \subseteq t\}$ **do**
7 $support[s] = support[s] + 1/|T|$
8 $L_k = \{s : s \in C_k \wedge support[s] \geq \epsilon\}$
9 **if** $L_k = \emptyset$ **then break**
10 **return** $FrequentItemsets = \cup_k L_k$

Algoritem *APRIORI*: vrstica 1

Pogoste postavke $L_1 = \{\{i\} : i \in I \wedge support(\{i\}) \geq \epsilon\}$

- Za $\epsilon = 20\%$ je $L_1 = \{\{jabolka\}, \{kruh\}, \{mleko\}, \{pivo\}, \{plenice\}\}$
- Saj velja

postavkai	*jabolka*	*kruh*	*mleko*	*pivo*	*plenice*
$support(i)$	$6/9$	$7/9$	$6/9$	$2/9$	$2/9$

Algoritem *APRIORI*: vrstica 3 ($k = 2$)

$C_k = Join(L_{k-1}, L_{k-1})$

$$C_k = \{t \cup \{i\} : t \in L_{k-1} \wedge i \notin t \wedge \exists s \in L_{k-1} : i \in s\}$$

- Množicam pogostih postavk t iz L_{k-1} dodajamo po eno postavko i
- Postavka i ne sme biti element množice, kamor jo dodamo, $i \notin t$
- Postavka i mora biti element ene od množic L_{k-1}

Elementi $Join(L_1, L_1)$ za primer trgovine

$\{jabolka, kruh\}$, $\{jabolka, mleko\}$, $\{jabolka, pivo\}$, $\{jabolka, plenice\}$, $\{kruh, mleko\}$, $\{kruh, pivo\}$, $\{kruh, plenice\}$, $\{mleko, pivo\}$, $\{mleko, plenice\}$, $\{pivo, plenice\}$

Algoritem *APRIORI*: vrstica 4 ($k = 2$)

$C_k = C_k \setminus \{t : (\exists s : s \subset t \wedge |s| = k - 1 \wedge s \notin L_{k-1})\}$

Pobrišemo vse množice postavk iz C_k, ki imajo vsaj eno podmnožico velikosti $k - 1$, ki ni iz L_{k-1}. ZAKAJ?

Anti-monotonost pogostosti: $s \subset t \implies support(t) \leq support(s)$

Torej: če s ni pogosta množica postavk, potem tudi t ni.

Elementi C_2 za primer trgovine so vsi elementi $Join(L_1, L_1)$

$\{jabolka, kruh\}$, $\{jabolka, mleko\}$, $\{jabolka, pivo\}$, $\{jabolka, plenice\}$, $\{kruh, mleko\}$, $\{kruh, pivo\}$, $\{kruh, plenice\}$, $\{mleko, pivo\}$, $\{mleko, plenice\}$, $\{pivo, plenice\}$

Algoritem *APRIORI*: vrstice 5-8 ($k = 2$)

$t \in C_2$	*transakcije iz* T	$support(t)$
$\{jabolka, kruh\}$	t_1, t_4, t_8, t_9	$4/9$
$\{jabolka, mleko\}$	t_5, t_7, t_8, t_9	$4/9$
$\{jabolka, pivo\}$	t_4	$1/9$
$\{jabolka, plenice\}$	t_4, t_8	$2/9$
$\{kruh, mleko\}$	t_3, t_6, t_8, t_9	$4/9$
$\{kruh, pivo\}$	t_2, t_4	$2/9$
$\{kruh, plenice\}$	t_1, t_8	$2/9$
$\{mleko, pivo\}$		$0/9$
$\{mleko, plenice\}$	t_8	$1/9$
$\{pivo, plenice\}$		$0/9$

$L_2 = \{\{jabolka, kruh\}, \{jabolka, mleko\}, \{jabolka, plenice\}, \{kruh, mleko\}, \{kruh, pivo\}, \{kruh, plenice\}\}$

Algoritem *APRIORI*: vrstica 3 ($k = 3$)

Elementi $Join(L_2, L_2)$ za primer trgovine

- $\{jabolka, kruh, mleko\} = \{jabolka, kruh\} \cup \{mleko\}$
- $\{jabolka, kruh, plenice\} = \{jabolka, kruh\} \cup \{plenice\}$
- $\{jabolka, mleko, plenice\} = \{jabolka, mleko\} \cup \{plenice\}$
- $\{kruh, mleko, pivo\} = \{kruh, mleko\} \cup \{pivo\}$
- $\{kruh, mleko, plenice\} = \{kruh, mleko\} \cup \{plenice\}$
- $\{kruh, pivo, plenice\} = \{kruh, pivo\} \cup \{plenice\}$

Algoritem *APRIORI*: vrstica 4 ($k = 3$)

Elementi C_3 za primer trgovine

- $\{jabolka, kruh, mleko\}$ je, ker so vse podmnožice velikosti 2 v L_2
- $\{jabolka, kruh, plenice\}$ je; enako kot zgoraj
- $\{jabolka, mleko, plenice\}$ ni, ker $\{mleko, plenice\} \notin L_2$
- $\{kruh, mleko, pivo\}$ ni, ker $\{mleko, pivo\} \notin L_2$
- $\{kruh, mleko, plenice\}$ ni, ker $\{mleko, plenice\} \notin L_2$
- $\{kruh, pivo, plenice\}$ ni, ker $\{pivo, plienice\} \notin L_2$

$C_3 = \{\{jabolka, kruh, mleko\}, \{jabolka, kruh, plenice\}\}$

Algoritem *APRIORI*: vrstice 5-8 ($k = 3$)

$t \in C_3$	*transakcije iz* T	$support(t)$
$\{jabolka, kruh, mleko\}$	t_8, t_9	$2/9$
$\{jabolka, kruh, plenice\}$	t_1, t_8	$2/9$

$L_3 = \{\{jabolka, kruh, mleko\}, \{jabolka, kruh, plenice\}\}$

Algoritem *APRIORI*: vrstici 3 in 4 ($k = 4$)

Element $Join(L_3, L_3)$ za primer trgovine

$\{jabolka, kruh, mleko, plenice\} = \{jabolka, kruh, mleko\} \cup \{plenice\}$

Elementi C_4 za primer trgovine

$\{jabolka, kruh, mleko, plenice\}$ ni, ker $\{kruh, mleko, plenice\} \notin L_3$

$C_4 = \emptyset, L_4 = \emptyset$

Algoritem *APRIORI*: vrstica 9

$$
\begin{aligned}
\mathit{FreqentItemsets} &= L_1 \cup L_2 \cup L_3 \\
&= \{\{\mathit{jabolka}\}, \{\mathit{kruh}\}, \{\mathit{mleko}\}, \{\mathit{pivo}\}, \{\mathit{plenice}\}, \\
&\quad \{\mathit{jabolka}, \mathit{kruh}\}, \{\mathit{jabolka}, \mathit{mleko}\}, \{\mathit{jabolka}, \mathit{plenice}\}, \\
&\quad \{\mathit{kruh}, \mathit{mleko}\}, \{\mathit{kruh}, \mathit{pivo}\}, \{\mathit{kruh}, \mathit{plenice}\}, \\
&\quad \{\mathit{jabolka}, \mathit{kruh}, \mathit{mleko}\}, \{\mathit{jabolka}, \mathit{kruh}, \mathit{plenice}\}\}
\end{aligned}
$$

Oblika povezovalnih pravil

if B then H

- B je pogoj (telo, *body*)
- H je posledica (glava, *head*)
- B in H sta pogosti množici postavk, $B \cap H = \emptyset$

Zaupanje povezovalnega pravila r : if B then H

$$confidence(H, B) = \frac{support(H \cup B)}{support(B)}$$

Zaupanje je ocena pogojne verjetnosti $p(H|B)$, to je da transakcija iz T vsebuje H, pod pogojem, da vsebuje B.

Rudarjenje povezovalnih pravil: vhodi in rezultat

Vhodi T, I, ϵ in μ

- Transakcijska baza T na množici postavk I
- Parameter ϵ, ki določa minimalno pogostost množice postavk
- Parameter μ, ki določa minimalno zaupanje pravila

Rezultat *AssociationRules*

Množica povezovalnih pravil, ki imajo zaupanje $\geq \mu$.

Algoritem za rudarjenje povezovalnih pravil *MAR*

$MAR = MiningAssociationRules$

function $MAR(T, I, \epsilon, \mu)$
  $F = APRIORI(T, I, \epsilon)$
  $R = \emptyset$
  for f **in** F **do**
    for (H, B) **in** $\{(H, B) : H \subseteq f \wedge B \subseteq f \wedge H \cap B = \emptyset\}$ **do**
      if $confidence(H, B) \geq \mu$ **then**
        $R = R \cup \{r : \text{if } H \text{ then } B\}$
  return $AssociationRules = R$

Algoritem *MAR*: $f = \{jabolka, kruh, plenice\}$

povezovalno pravilo r	$confidence(r)$
if $\{jabolka\}$ then $\{kruh, plenice\}$	$2/6 = 33\%$
if $\{kruh\}$ then $\{jabolka, plenice\}$	$2/7 = 29\%$
if $\{plenice\}$ then $\{jabolka, kruh\}$	$2/2 = 100\%$
if $\{jabolka, kruh\}$ then $\{plenice\}$	$2/4 = 50\%$
if $\{jabolka, plenice\}$ then $\{kruh\}$	$2/2 = 100\%$
if $\{kruh, plenice\}$ then $\{jabolka\}$	$2/2 = 100\%$

Vzpon povezovalnih pravil

Vzpon (*lift*) povezovalnega pravila r : if B then H

$$lift(H, B) = \frac{support(H \cup B)}{support(H) \cdot support(B)}$$

Vzpon je mera (ne)odvisnosti med dogodkoma "transakcija vključuje H" in "transakcija vključuje B"; vzpon 1 nakazuje neodvisnost, višje vrednosti pa odvisnost.

povezovalno pravilo r	$confidence(r)$	$lift(r)$
if $\{plenice\}$ then $\{jabolka, kruh\}$	$2/2 = 100\%$	$9/4 = 2.25$
if $\{jabolka, plenice\}$ then $\{kruh\}$	$2/2 = 100\%$	$9/7 = 1.29$
if $\{kruh, plenice\}$ then $\{jabolka\}$	$2/2 = 100\%$	$9/6 = 1.50$

Povezovalna in odločitvena pravila: podobnost in razlike

Podobnost

Oboje enake oblike: if *Pogoj* then *Posledica*.

Razlike

- Odločitvena pravila imajo posledico, ki omogoča napoved $Y = v$
- Množica (urejena ali ne) odločitvenih pravil je en **napovedni model**

- Povezovalna pravila v posledici se lahko sklicujejo na poljubni X
- Povezovalna pravila tolmačimo vsakega posebej kot **vzorec**, ki pojasni podatke oz. razkrije prej neznane podatkovne povezave
- Obstajajo algoritmi za učenje odločitvenih pravil iz povezovalnih

Znani algoritmi in implementacije

Hierarhično razvrščanje v skupine (Florek in ost 1951)

Vgrajena funkcija v R.

Algoritem k-tih voditeljev (Lloyd 1957)

Vgrajena funkcija v R.

APRIORI (Agrawal in ost 1993), a pravzaprav GUHA (Hájek 1966)

Pogoste množice postavk in rudarjenje povezovalnih pravil, tudi implementacija v R.