

Poglavje 1

Odkrivanje skupin

Odkrivanje skupin, ali razvrščanje podatkov v skupine, je ena od osnovnih tehnik podatkovne analitike. Na podlagi podatkov o uporabnikih marketinški oddelek lahko zanima segmentacija uporabnikov, oziroma kateri so njihovi tipični uporabniki in koliko takih skupin sploh imajo. Poznavanje skupin in njihovih lastnosti lahko privede do izdelave boljših ciljnih akcij. Na področju medicine nas lahko zanimajo tipične skupine bolnikov, da bi lahko njim prilagodili in izboljšali bolnišnični sistem. Raziskovalce vesolja lahko zanima, kakšne skupine galaksij (poleg teh, ki so jih že odkrili) poznamo in predvsem, kakšne so njihove karakteristike. V množici dokumentov nas mnogokrat lahko razveseli, če lahko z algoritmi odkrijemo skupine med seboj podobnih enot in uporabnikom na ta način olajšamo brskanje po gradivu. Fotografu lahko pomagamo, če mu s pomočjo računalnika uredimo slikovno gradivo, ki ga je v zadnjem desetletju nakopičil na zunanem disku. Iz podatkov o odnosih šolskimi otroci šolske sociologe mnogokrat zanima oblikovanje skupin, pa tudi odkrivanje osamelcev, ki jim je potrebno pomagati pri socializaciji. Različnih uporab tehnik odkrivanja skupin je mnogo in vsekakor preveč, da bi jih tu vse našteali, zato raje pričnemo s primerom.

1.1 Primer podatkov

V razredu 8.A je šestnajst učencev, ki jih je šolski sistem ravno izmučil z republiškim eksternim preverjanjem znanja. Uspeh, ki so ga dosegli, je podan v tabeli 1.1. Številke so percentili; Branka je na primer bila dobra pri angleščini, kjer je bila boljša od 95 odstotkov vseh učencev, ki so pisali test. Ni pa ji ravno šla fizika, kjer je bilo slabših od nje le 11 odstotkov.

Zanima nas, ali so v razredu kakšne značilne skupine učencev in če so, kakšne so njihove karakteristike oziroma kako se razlikujejo med sabo. Zanima nas tudi, kateri učenci so si med sabo podobni. Spoznanja na tem področju bodo šoli pomagala pri oblikovanju skupin, kjer bi na primer skupini, ki je dobra v naravoslovnih predmetih slaba pa pri slovenščini posebej poiskali kakšno zanimivo knjigo za domače branje, te, ki pa jim gre družboslovje, navdušili za novinarski krožek.

Tabela 1.1: Rezultati zunanjega preverjanja za 16 učencev razreda 8.A. Rezultati posameznih predmetov so podani v percentilih z ozirom na republiške rezultate.

ime	slo	ang	zgo	geo	mat	bio	fiz	kem	tel
Albert	22	81	32	39	21	37	46	36	99
Branka	91	95	65	96	89	39	11	22	29
Cene	51	89	21	39	100	59	100	89	27
Dea	9	80	18	34	61	100	90	92	8
Edo	93	99	39	100	12	47	17	12	63
Franci	49	83	17	33	92	30	98	91	73
Helena	91	99	97	89	49	96	81	94	69
Ivan	12	69	32	14	34	12	33	48	96
Jana	91	80	20	10	82	93	87	91	22
Leon	39	100	19	29	99	31	77	79	23
Metka	20	91	10	15	71	99	78	93	12
Nika	90	60	45	34	45	20	15	5	100
Polona	100	98	97	89	32	72	22	13	37
Rajko	14	4	15	27	61	42	51	52	39
Stane	9	22	8	7	100	11	92	96	29
Zala	85	90	100	99	45	38	92	67	21

1.2 Nekaj matematičnih oznak

Učencem iz tabele 1.1 bomo rekli učni primeri in jih bomo označili z $x^{(i)}$, kjer je i indeks primera. Ker se bomo na teh primerih skušali naučiti, kakšne skupine poznamo v razredu 8.A, bomo tem primerom rekli učni skupine. Množico učnih primerov označimo z \mathcal{U} , njeno moč oziroma število primerov pa označimo z m , torej $m = |\mathcal{U}|$. Naj bo $C \subset \mathcal{U}$ skupina primerov, $C = \{C_j\}$ pa razvrstitev, to je množica skupin, ki smo jo odkrili v podatkih. Tu se bomo ukvarjali samo s postopki, ki odkrivajo neprazne skupine, $|C_i| > 0$. Zanimali nas bodo različni tipi razvrstitev. Možna razvrstitev je lahko takšna, kjer si skupine med seboj ne delijo nobenega primera,

$$C_i \cap C_j = \emptyset; C_i, C_j \in C$$

in kjer je unija vseh skupin enaka učni množici,

$$\bigcup_{C_i \in C} C_i = \mathcal{U}$$

Pri taki razvrstitvi torej vsak primer pripada natanko eni skupini. Tako razvrstitev imenujemo razbitje.

Zanimale nas bodo tudi hierarhije skupin, kjer velja $C_i \cap C_j \in \{C_i, C_j, \emptyset\}$. Presek dveh skupin je lahko samo prazna množica, ali pa v celoti ena od skupin. Pri nepraznem preseku

to pomeni, da je ena od skupin v celoti vsebovana v drugi. Tako lastnost bodo imele skupine pri hierarhičnem razvrščanju.

Vsak primer v tabeli 1.1 je opisan z n atributi (številskimi spremenljivkami). Primer x zapišemo kot:

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$$

Tu smo zaradi poenostavitve namenoma izpustili indeks primera. Primer $x^{(i)}$ smo tako označili s simbolom x . Ker je vsak primer vektor, bi temu primerno morali izpisati tudi oznako, torej kot \mathbf{x} , a bomo tudi poenostavili in primer označili kar z x .

Primer smo zapisali kot stolpični vektor, v tabeli s primeri pa je zapisan kot vrstični vektor, ki ga zato, da dobimo stolpec, transponiramo. Pravzaprav je to, ali je primer zapisan kot stolpec ali vrstica, za sedaj precej nepomembno, bo pa notacija pomembna takrat, kadar bomo o naboru primerov razmišljali kot o matriki. Primeri v naši tabeli so poimenovani (imena učencev), atributi pa imajo prav tako ime. Lahko bi sicer za naš primer Albert pisali $x_{slo}^{(Albert)} = 22$, a bomo v nadaljevanju zaradi splošnosti raje uporabljali numerične indekse.

1.3 Mere različnosti

V postopku odkrivanja skupin primerov bi želeli poiskati množice primerov, kjer so si ti med seboj čim bolj podobni. Oziroma enakovredno, vsebujejo primere, kjer so si ti med sabo čimmanj različni. Tu nam bo torej prav prišla mera različnosti. Najbolj enostavno je pričeti s parom primerov in za ta zapisati enačbo, s katero ocenimo, kako različna sta. Vzemimo primera a in b in predpostavimo, da sta ta opisana z atributi, ki lahko zavzamejo zvezne vrednosti:

$$a = (a_1, a_2, \dots, a_n)$$

$$b = (b_1, b_2, \dots, b_n)$$

Tu bi lahko primera označil z $x^{(a)}$ in $x^{(b)}$, a bi potem enačbe, ki sledijo, dobile nepotrebno prtljago.

Če si predstavljamo, da je domenski atributni prostor Evklidski, potem je primerna razdalja oziroma mera različnosti med primeri kar evklidska razdalja:

$$d(a, b) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (a_i - b_i)^2}$$

Kako bi najbolj enostavno izmerili razdalje med primeri za $n = 2$ in za primere, ki jih v ta namen izrišemo na milimetrski papir? Z drugimi besedami, kako bi izmerili razdalje med primeri v razsevnem diagramu? Z ravnilom. Zato razdalji, ki je opisana z zgornjo enačbo, rečemo Evklidska.

Še enostavnejša je Manhattanska razdalja (od kod in zakaj to ime?):

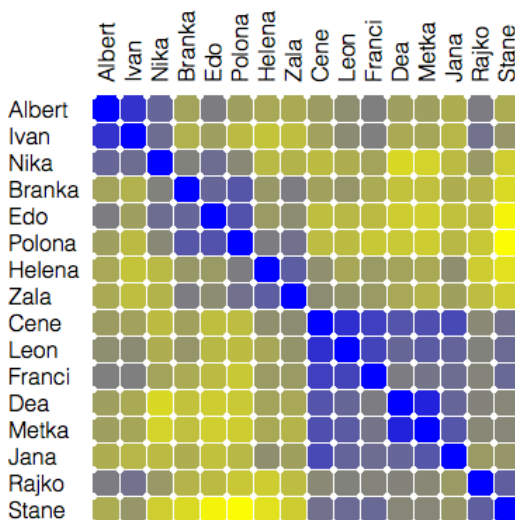
$$d(a, b) = \sum_{i=1}^n |a_i - b_i|$$

Obe, Manhattanska in Evklidska razdalja pa sta posebni primer razdalje Minkowskega:

$$d(a, b) = \left(\sum_{i=1}^n |a_i - b_i|^r \right)^{\frac{1}{r}}$$

O merah različnosti bomo še govorili. Premisliti bo na primer še potrebno, kako merimo razdalje pri različnih tipih atributov. Na primer, če ti zavzemajo diskretne vrednosti. Ali pa kako merimo razdalje med besedili in nizi znakov, med dokumenti, med stvarmi v priporočilnih sistemih, med slikami, med glasbenimi posnetki in podobno. A za naš primer so zgornje definicije dovolj.

Z izbrano mero različnosti lahko izmerimo razdalje med vsemi pari primerov. Te potem lahko vizualiziramo s toplotno karto (angl. *heatmap*), kot to prikazuje slika 1.1. Če “močne” skupine obstajajo, in če smo primere na toplotni karti pravilno uredili (kako?), bi se na karti morali prikazati vzorci, ki nakazujejo skupine (kakšni?).



Slika 1.1: Vizualizacija podobnosti oziroma različnosti med primeri s tabele 1.1.

1.4 Ocenjevanje razdalj med skupinami

Tudi med skupinami primerov lahko merimo razdaljo. A tu naletimo na problem, saj so sedaj skupine podane z množico primerov. Med primeri znamo meriti razdalje, med skupinami

pa (še) ne. Razdaljo bomo merili med dvema skupinama primerov, C_u in C_v . Predpostavimo najprej, da si skupine ne delijo primerov, torej $C_u \cap C_v = \emptyset$. Uvedimo nekaj možnih razdalj:

- Razdalja med skupinama C_u in C_v je razdalja med njunima najbližjima primeroma $a \in C_u$ in $b \in C_v$ (angl. *single linkage*):

$$d_{\min}(C_u, C_v) = \min_{a,b} \{d(a, b) \mid a \in C_u, b \in C_v\}$$

- Razdalja med skupinama C_u in C_v je razdalja med njunima najbolj oddaljenima primeroma $a \in C_u$ in $b \in C_v$ (angl. *complete linkage*):

$$d_{\max}(C_u, C_v) = \max_{a,b} \{d(a, b) \mid a \in C_u, b \in C_v\}$$

- Razdalja med skupinama C_u in C_v je povprečna razdalja med vsemi pari primerov iz teh dveh skupin (angl. *average linkage*), torej:

$$d(C_u, C_v) = \sum_{a \in C_u} \sum_{b \in C_v} \frac{d(a, b)}{|C_u||C_v|}$$

- Wardova razdalja, ki privzame, da je za vsako skupino C znan njen centroid R oziroma točka v središču skupine. Naj bo R_u centroid skupine C_u , R_v centroid skupine C_v , R_{uv} pa centroid združene skupine $C_{uv} = C_u \cup C_v$. Potem je Wardova razdalja določena kot:

$$d_w(C_u, C_v) = \sum_{x \in C_{uv}} d(x, R_{uv})^2 - \left(\sum_{x \in C_u} d(x, R_u)^2 + \sum_{x \in C_v} d(x, R_v)^2 \right)$$

1.5 Hierarhično razvrščanje v skupine

Postopek, ki iz podatkov razvije hierarhijo skupin, kjer je najnižje v hierarhiji vsak primer predstavljen s svojo skupino, najvišje v hierarhiji pa tvori skupino kar celotna množica učnih primerov, se imenuje hierarhično razvrščanje v skupine.

1.5.1 Algoritem

Hierarhično razvrščanje v skupine najlažje opišemo kar s psevdokodo:

- vsak primer naj tvori svojo skupino, $C_i = \{x^{(i)}\}$, $x^{(i)} \in \mathcal{U}$
- ponavljaj, dokler ne ostane ena sama skupina
 - poišči najbližji si skupini C_a in C_b , $d(C_a, C_b) = \min_{u,v} d(C_u, C_v)$
 - združi skupini C_a in C_b v skupino $C_{ab} = C_a \cup C_b$

- nadomesti skupini C_a in C_b s skupino C_{ab}
- izmeri razdaljo med novo skupino C_{ab} in ostalimi skupinami

Prostorska kompleksnost tega algoritma je $O(m^2)$, kjer je m število primerov oziroma velikost učne množice. Časovna kompleksnost pa je $O(m^3)$ saj se algoritem izvede v m korakih, v katerih mora osvežiti in uporabiti matriko razdalj velikosti m^2 . Z malo truda se da postopek izračunavanja novih razdalj spisati tako, da ima manjšo zahtevnost in je potem zahtevnost celotnega algoritma $O(m^2 \log(m))$. Tudi to ni malo. Predstavljajte si, da morate algoritem pognati na vseh uporabnikih nekega večjega mobilnega operaterja. Ali pa na vseh uporabnikih družabnega omrežja. Kam shranite matriko razdalj med pari primerov? Je opisani postopek tudi časovno zahteven?

1.5.2 Dendrogram

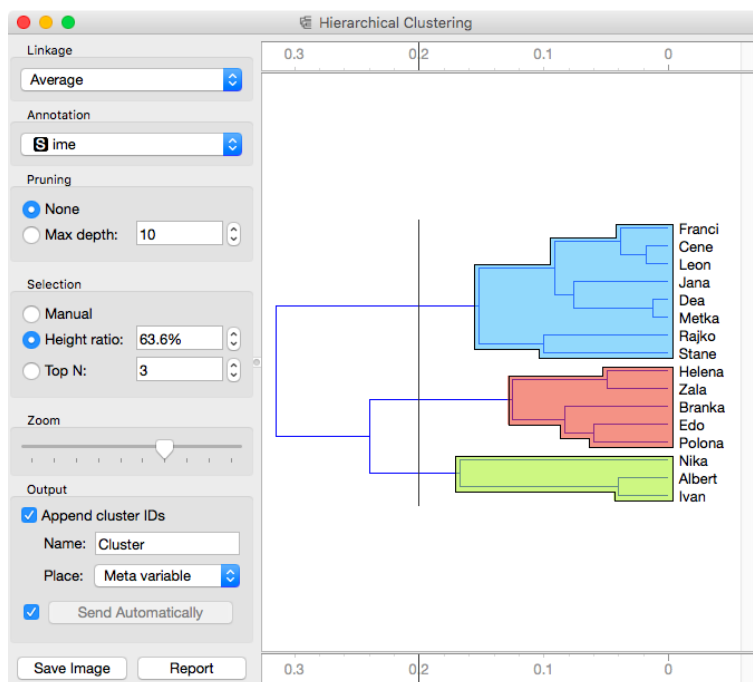
Postopek združevanja v skupine in rezultat tega postopka — hierarhijo skupin, lahko ponazorimo v drevesnem izrisu ali dendrogramu (gr. *dendron* pomeni drevo, *gramma* pa risba). Dendrogram hierarhičnega razvrščanja v skupine podatkov s tabele 1.1 prikazuje slika 1.2. Dendrogram je izrisan od leve proti desni. Stičišča skupin so od desnega roba odmaknjena skladno z razdaljo med skupinami. Pred izvedbo postopka razvrščanja v skupine orodja podatke tipično normalizirajo, tako da so po normalizaciji povprečne vrednosti atributov enake nič in njihove standardne deviacije enake 1.

1.5.3 Razlaga skupin

Dendrogram s slike 1.2 nakazuje na tri skupine, ki smo jih v odkrili v podatkih. Zanima nas, kaj je značilnega za posamezne skupine. Preprosta tehnika, ki jo lahko uporabimo je, da za vsako skupino primerjamo povprečno vrednost posameznega atributa s povprečno vrednostjo tega atributa v celotni učni množici. Naj bo Albert v skupini, ki jo označimo z vrstnim številom 1, Branka v skupini 2, Cene pa v skupini 3. Povprečne vrednosti učne množice prikazuje tabela 1.2.

Tabela 1.2: Povprečne vrednosti percentilov pri posameznih predmetih v učni množici in odkritih skupinah.

	slo	ang	zgo	geo	mat	bio	fiz	kem	tel
\mathcal{U}	54	78	40	47	62	52	62	61	47
skupina 1	41	70	36	29	33	23	31	30	98
skupina 2	92	96	80	95	45	58	45	42	44
skupina 3	35	69	16	24	83	58	84	85	29



Slika 1.2: Primer dendrograma, kot ga izriše ustrezna komponenta v programu Orange. Uporabnik se je tu odločil, da dendrogram odreže v točki, ki primere razdeli v tri skupine. Primerna razdelitev v tem primeru bi lahko bila ta, ki uporabi dve skupine. Zakaj?

Zanima nas pravzaprav odstopanje od povprečnih vrednosti atributov učne množice. Tu bi se sicer morali poigrati s statistiko, in ugotoviti, katera odstopanja so značilna in kako daleč so od takih, ki bi jih dobili iz naključne razvrstitve. Zaradi enostavnosti, ki pa bo prav tako čisto primerna za naš primer, se tu raje zatečemo k veliko preprostejši rešitvi. Za vsako skupino označimo odstopanja navzdol za več kot 10 odstotnih točk z “-”, in podobna odstopanja navzgor s “+”.

Tabela 1.3: Odstopanja (± 10 točk) od povprečnih vrednosti v učni množici.

	slo	ang	zgo	geo	mat	bio	fiz	kem	tel
skupina 1	-			-	-	-	-	-	+
skupina 2	+	+	+	+	-		-	-	
skupina 3	-		-	-	+		+	+	-

Rezultat prikazuje tabela 1.3. Albert, Ivan in Nika so kot kaže športniki. Njihovo udejevanje s športom jim vzame veliko časa, morda bi jim bilo potrebno pomagati pri naravoslovnih predmetih, kjer jim malce škripa. Branka, Edo in ostali iz skupine 2 imajo rajši družboslovne predmete. Skupina s Cenetom, Deo in Metko pa zanima naravoslovje. Ne bi bilo narobe, če bi se ti vpisali v kakšen športni krožek.

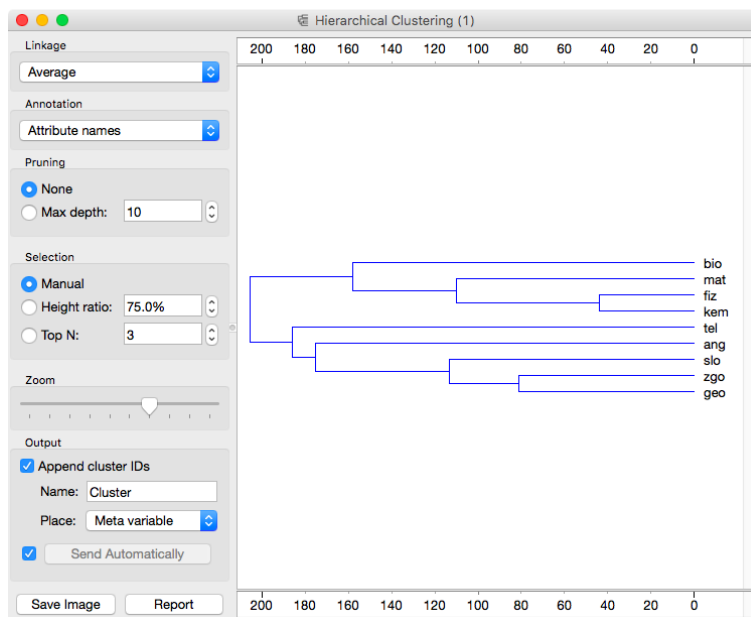
1.5.4 Stvari pa lahko tudi obrnemo

Namesto skupin učencev nas bi lahko zanimale tudi skupine predmetov. Kako? Tabelo podatkov enostavno zasukamo oziroma transponiramo. Vse ostalo ostane isto. Rezultat je podan na sliki 1.3.

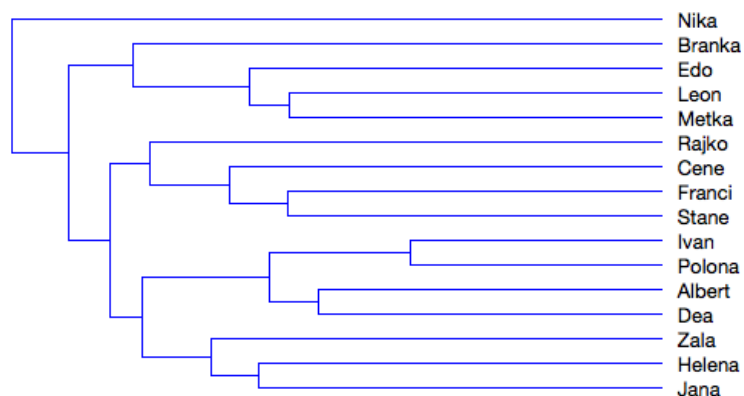
1.5.5 Kaj pa, ko ni skupin?

Hierarhično razvrščanje v skupine bo vedno našlo skupine. Postopek bo vedno razvil dendrogram, ne glede na to, ali skupine dejansko obstajajo v podatkih ali ne. Pravzaprav, kaj pa so sploh skupine? Kako lahko sploh ocenimo, ali te dejansko obstajajo? Tole se v tem trenutku precej težka vprašanja in se bomo z njimi še ukvarjali. A vseeno, zaokus, naredimo naslednji poskus. Naše podatke o ocenah učencev 8.A razreda uničimo tako, da naključno premešamo števila v vsaki od kolon, za vsako kolono posebej. Dendrogram na takih podatkih kaže slika 1.4. Razdalje med posameznimi skupinami so tu večje, stičišča povezav v dendrogramu so se premaknila proti levi strani. Stukture, iz katere bi bile jasno razvidne skupine, ki bi se potem združevale pri opazno večjih razdaljah kot se združujejo primeri znotraj posameznih skupin, ni več.

Če imamo prave podatke, te seveda ne premešamo in potem izrisujemo “pokvarjene” dendrograme (ali pač? a o pomenu postopkov, ki temeljijo na ponaključenih podatkih, kdaj



Slika 1.3: Dendrogram skupin predmetov. Telovadba je nekakšen osamelec, samosvoj predmet precej različen od ostalih. Kako je to vidno iz dendrograma?



Slika 1.4: Dendrogram na “ponaključenih” podatkih. Struktura, ki bi nakazovala jasne skupine v podatkih, je izginila.

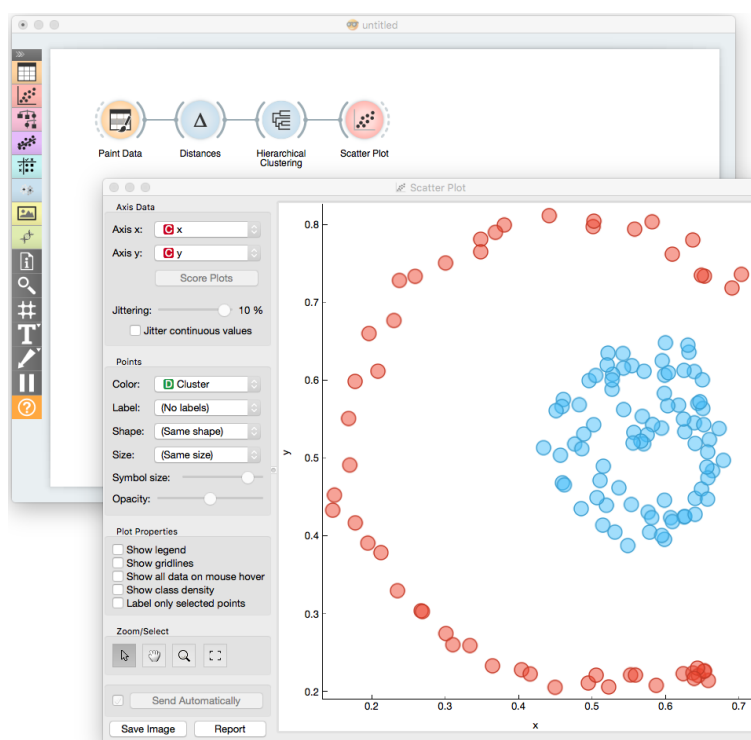
drugič). A je vseeno dobro vedeti, kakšni dendrogrami so taki, kjer skupin pač ni. Torej, če dobimo kaj podobnega, kot je dendrogram na sliki 1.4, je zaključek tak, da iz danih podatkov pri dani meri razdalje in pri dani metodi za ocenjevanje razdalj med skupinami postopek hierarhičnega razvrščanja v skupine ni našel značilnih skupin. Prejšnji stavek je precej dolg. Krajši bi recimo lahko samo povedal, da v podatkih ni skupin. A taka ugotovitev ne bi bila nujno resnična. Iz naših poskusov lahko samo ugotovimo, da če morda skupino so, jih mi pač nismo uspeli najti. Lahko pa, seveda, da jih sploh ni.

1.6 O izboru mer razdalje

Metoda hierarhičnega gručenja ima pravzaprav dva parametra: prvi je metoda merjenja razdalj med primeri, drugi pa način določanja razdalj med skupinami. Ko imamo podatke predstavljene atributno, torej v tabeli, kjer je vsak primer predstavljen z vektorjem atributnih vrednosti, je evklidska razdalja čisto primerna mera. Če atributi izvirajo na primer iz tekstovnih podatkov in je teh veliko, se izkaže, da je pomembna ne toliko velikost posameznega vektorja kot njegova smer. Prava razdalja za take podatke je tako imenovana kosinusna razdalja. O uporabi te več v naslednjih poglavjih. Na področju biomedicine, kjer so atributi istega tipa in je bolj kot njihova vrednost pomemben vrstni red (tipa: kateri atribut je zavzel največjo vrednost, drugo največjo, ipd.) je mnogokrat uporabljena razdalja Spearmanova korelacija, ki jo izračunamo na rangi. V tem odstavku nam ni namen formalno uvesti vse te različne mere, ampak samo poudariti, da je izbor mere razdalje med primeri odvisen od problemske domene in jo določimo skladno z vedenjem oziroma intuicijo o tem, kaj res najbolj primerno določa razdaljo med primeri.

Malce drugače je z izborom pristopov merjenja razdalje med skupinami. Kot smo že zapisali, ti pristopi (npr. *single linkage*, *complete linkage*) agregirajo pare razdalj med primeri v dveh različnih skupinah. V splošnem, če ne poznamo podatkov ali pa njihovih projekcij v nižje dimenzije, bo primerna izbira povprečne razdalje (angl. *average linkage*), mnogokrat pa presenetljivo dobro deluje Wardova razdalja. Po drugi strani je pristop z minimalno razdaljo (angl. *single linkage*) v splošnem neuporaben, razen za res posebne primere (slika 1.5).

Recepta, katere mere razdalj uporabiti, v zgodnjih dveh odstavkih nismo zapisali. Ker tega ne znamo. Namreč, vse je odvisno od podatkov. Ker na področju razvrščanja v skupine nimam prav dobrih mer o tem, kako dober je rezultat razvrščanja, se avtomatizacija iskanja najbolj ustreznih parametrov ne obnese najbolje. Z drugimi besedami: v splošnem ne znamo spisati enačbe, s katero bi numerično ocenili kvaliteto nastalih skupin. Ker te enačbe ni, ne moremo strojno primerjati rešitve med sabo. Ostane nam, da se zanesemo na intuicijo in na pregled rešitve s strani domenskega eksperta. Gručenje, ki je uporabniku koristno (za karkoli že), je potem tisto, za katero se na koncu odločimo.



Slika 1.5: Primer dvodimenzionalnih podatkov in njihove razvrstitve, kjer je ustrezna metoda minimalne razdalje za merjenje podobnosti med skupinami, in kjer ostale metode merjenja razdalj odpovedo (za merjenje razdalj med primeri smo uporabili Evklidsko razdaljo).

