Eksploracja danych – przegląd dostępnych metod i dziedzin zastosowań

Mikołaj Morzy
Instytut Informatyki Politechniki Poznańskiej
e-mail: Mikolaj.Morzy@cs.put.poznan.pl

Abstrakt. Wiedza zawarta w dużych wolumenach danych jest ukryta pod postacią wzorców, trendów, regularności i osobliwości. Stosowane od wielu lat techniki statystycznej analizy danych nie są w stanie efektywnie przetwarzać wolumenów danych charakteryzujących współczesne bazy danych. Eksploracja danych (ang. *data mining*) to nowa dziedzina naukowa, której celem jest odkrywanie nowych, nieznanych, użytecznych i prawidłowych wzorców w bardzo dużych repozytoriach danych. Eksploracja danych jest dziedziną interdyscyplinarną, łączącą elementy systemów baz danych, statystyki, systemów wspomagania decyzji, sztucznej inteligencji, uczenia maszynowego, i wielu innych. Spośród technik i algorytmów wykorzystywanych podczas eksploracji danych wymienić należy klasyfikację, regresję i predykcję, określanie ważności atrybutów, analizę skupień, znajdowanie reguł asocjacyjnych, czy eksplorację dokumentów tekstowych. W artykule przedstawiono wprowadzenie do technik eksploracji danych i zaprezentowano szeroką gamę algorytmów i metod wykorzystywanych do odkrywania wiedzy w bazach danych. Omówiono podstawowe modele wiedzy i przedstawiono przykłady praktycznych zastosowań każdej techniki eksploracji danych.

1. Wprowadzenie

Powszechne wykorzystanie systemów baz danych w praktycznie każdej dziedzinie ludzkiej działalności doprowadziło do gwałtownego wzrostu ilości danych, które są gromadzone i zapisywane w postaci cyfrowej. Trudno jest dziś wskazać dziedzinę, której informatyzacja nie wymaga zastosowania systemu bazy danych. Handel detaliczny i hurtowy, bankowość, finanse, ubezpieczenia, medycyna, edukacja, handel elektroniczny, we wszystkich tych dziedzinach systemy baz danych stanowią niezbędny element infrastruktury informatycznej. Od lat jesteśmy świadkami nieustającej ewolucji systemów baz danych. Począwszy od prostych systemów plikowych, poprzez systemy sieciowe i hierarchiczne, aż po systemy relacyjne, obiektowe i semistrukturalne, bazy danych nieustannie podlegały rozwojowi. Równolegle z wprowadzaniem nowych modeli danych powstawały nowe modele przetwarzania i nowe architektury systemów baz danych. Ewolucja systemów baz danych była podyktowana, z jednej strony, rosnącymi wymaganiami dotyczącymi funkcjonalności, z drugiej strony, koniecznością obsługiwania coraz większych kolekcji danych.

Przed współczesnymi systemami baz danych stoją liczne wyzwania. Skalowalność, efektywność, bogata funkcjonalność, pojemność, bez tych cech nie sposób mówić o nowoczesnym systemie zarządzania bazą danych. Według corocznego raportu Winter Corporation [Wint05] rozmiar największej operacyjnej bazy danych w roku 2005 osiągnął 23 TB (Land Registry for England and Wales), podczas gdy rozmiar największej hurtowni danych przekroczył 100 TB (Yahoo!). W najbliższym czasie należy spodziewać się dalszego gwałtownego wzrostu rozmiarów baz danych. Na potrzeby budowanego w laboratorium CERN akceleratora wiązek protonowych LHC stworzono bazę danych zdolną do składowania niemal exabajta danych (1 EB = 1024 PB = 10^{18} B) [LHC05]. Akcelerator LHC rozpocznie pracę w 2007 roku i corocznie będzie generował około 15 petabajtów danych z oszałamiającą prędkością do 1,5 GB/sek. Eksperymenty zaplanowano na 15 lat, co daje w efekcie astronomiczną ilość 225 petabajtów danych. Inne przykłady gwałtownie rosnących baz danych obejmują bazy danych informacji naukowych (projekt poznania ludzkiego genomu, bazy danych informacji astronomicznych), dane strategiczne (informacje związane z bezpieczeństwem narodowym), oraz komercyjne kolekcje danych (dane POS, dane o ruchu internetowym, dane o transakcjach elektronicznych). Nieustanny wzrost rozmiarów baz danych jest skutkiem postępu w technikach pozyskiwania i składowania informacji. Niestety, postęp ten nie jest równoważony przez rosnącą zdolność do analizy pozyskanych danych.

Bardzo duże rozmiary gromadzonych danych z góry wykluczają możliwość ręcznej analizy pozyskiwanych informacji. Techniki analizy statystycznej również zawodzą w obliczu ilości danych zapisanych w bazach danych i nie są w stanie zapewnić zadowalającej szybkości przetwarzania i analizy. Dane gromadzone przez współczesne systemy informatyczne zawierają w sobie użyteczną wiedzę ukrytą pod postacią trendów, regularności, korelacji, czy osobliwości. Metody automatycznego i półautomatycznego pozyskiwania wiedzy z ogromnych wolumenów danych określa się mianem eksploracji danych (ang. *data mining*) lub odkrywania wiedzy w bazach danych (ang. *knowledge discovery in databases*). Wiedza odkryta w procesie eksploracji danych jest wykorzystywana do wspomagania procesu podejmowania decyzji, predykcji przyszłych zdarzeń, czy określania efektywnych strategii biznesowych [BL97]. W niniejszym artykule zaprezentowano podstawowe techniki eksploracji danych oraz opisano najczęściej wykorzystywane modele wiedzy.

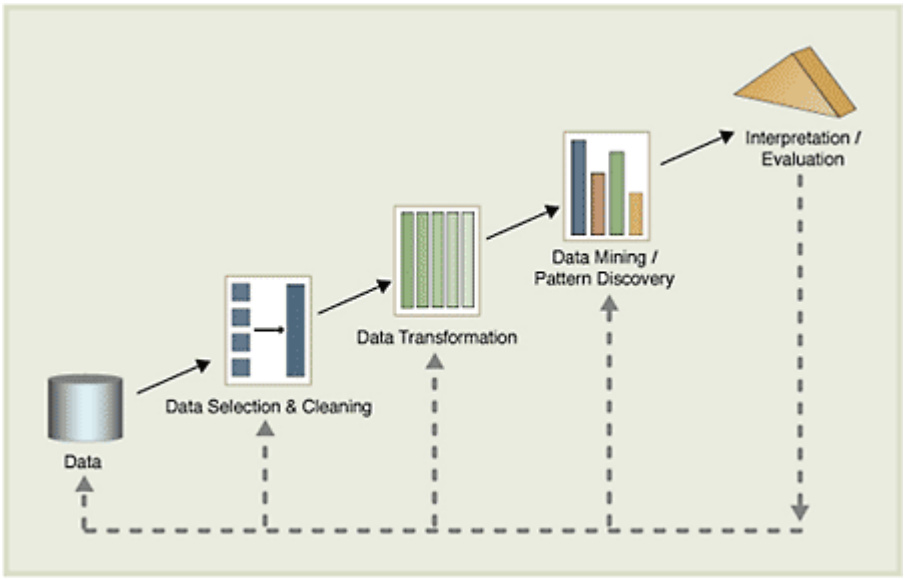
2. Techniki eksploracji danych

Eksploracja danych to „...proces odkrywania nowych, wcześniej nieznanych, potencjalnie użytecznych, zrozumiałych i poprawnych wzorców w bardzo dużych wolumenach danych" [FPSU96]. Eksploracja danych jest dziedziną interdyscyplinarną. Czerpie z systemów baz danych, statystyki, systemów wspomagania decyzji, sztucznej inteligencji, uczenia maszynowego, wizualizacji danych, przetwarzania równoległego, i wielu innych. Sposób prezentacji wiedzy odkrytej z danych nazywa się modelem wiedzy. Eksploracja danych wykorzystuje różne modele wiedzy do reprezentowania wzorców obecnych w danych. Modele te obejmują, między innymi, reguły asocjacyjne [AIS93], reguły cykliczne i okresowe [ORS98], reguły dyskryminacyjne i charakterystyczne [Cen87], klasyfikatory bayesowskie [LIT92], drzewa decyzyjne [Qui86,Qui93], wzorce sekwencji [AS95], skupienia obiektów [ELL01], przebiegi czasowe, osobliwości i wyjątki. Wiedza odkryta w danych może być postrzegana jako wartość dodana, podnosząca jakość danych i znacząco polepszająca jakość decyzji podejmowanych na podstawie danych.

Techniki eksploracji danych można ogólnie podzielić na dwie kategorie [WF00]. Techniki predykcyjne starają się, na podstawie odkrytych wzorców, dokonać uogólnienia i przewidywania (np. wartości nieznanego atrybutu, zachowania i cech nowego obiektu, itp.). Przykłady zastosowania technik predykcyjnych obejmują, między innymi, ocenę ryzyka ubezpieczeniowego związanego z klientem lub oszacowanie prawdopodobieństwa przejścia klienta do konkurencyjnego usługodawcy. Techniki deskrypcyjne mają na celu wykorzystanie odkrytej wiedzy do opisu danych i uchwycenia ogólnych cech opisywanych obiektów. Przykłady technik deskrypcyjnych to odkrywanie grup podobnych klientów, znajdowanie zbiorów produktów często kupowanych razem, lub identyfikacja osobliwości występujących w danych.

Inny podział technik eksploracji danych jest związany z charakterystyką danych wejściowych. W przypadku technik uczenia nadzorowanego (ang. *supervised learning*) dane wejściowe zawierają tzw. zbiór uczący, w którym każdy obiekt posiada etykietę przypisującą obiekt do pewnej klasy. Na podstawie zbioru uczącego dana technika potrafi „nauczyć się" odróżniać przykłady należące do różnych klas, a zdobyta w ten sposób wiedza może być wykorzystana do formułowania uogólnień dotyczących przyszłych obiektów. Oczywiście, podczas tworzenia zbioru uczącego musi być znane prawdziwe przypisanie każdego obiektu do klasy. Zbiory uczące są najczęściej budowane na podstawie danych historycznych, w których zapisywane jest rozpoznane przypisanie obiektu do klasy. Najczęściej spotykanymi technikami uczenia nadzorowanego są techniki klasyfikacji (drzewa decyzyjne [Qui86, Qui93], algorytmy bazujące na *n* najbliższych sąsiadach [Aha92], sieci neuronowe [MI94], statystyka bayesowska [Bol04]), oraz techniki regresji. Drugą klasą technik eksploracji danych są techniki uczenia bez nadzoru (ang. *unsupervised learning*). W przypadku technik uczenia bez nadzoru algorytm odkrywania wiedzy nie dysponuje zbiorem uczącym. Algorytm eksploracji danych stara się sformułować model najlepiej pasujący do obserwowanych danych. Przykłady technik uczenia bez nadzoru obejmują techniki analizy skupień [ELL01] (ang. *clustering*), samoorganizujące się mapy [Koh00], oraz algorytmy maksymalizacji wartości oczekiwanej [DLR77] (ang. *expectation-maximization*).

Terminy „eksploracja danych” i „odkrywanie wiedzy w bazach danych” są często stosowane wymiennie, choć w rzeczywistości drugi termin posiada dużo szersze znaczenie. Odkrywanie wiedzy obejmuje cały proces akwizycji wiedzy, począwszy od selekcji danych źródłowych, poprzez czyszczenie, transformację, kompresję danych, odkrywanie wzorców, a skończywszy na ocenie odkrytych wzorców. Zgodnie z tą definicją eksploracja danych oznacza zastosowanie konkretnego algorytmu odkrywania wzorców na wybranych danych źródłowych i stanowi jeden z etapów składowych całego procesu odkrywania wiedzy. Na cały proces składają się [HK00]: sformułowanie problemu, wybór danych, czyszczenie danych, integracja danych, transformacja danych, eksploracja danych, wizualizacja i ocena odkrytych wzorców, i wreszcie zastosowanie wzorców (rysunek 1). Postać uzyskanych wzorców zależy od zastosowanej techniki eksploracji danych. Poniżej przedstawiono opisy najpopularniejszych technik eksploracji. Z konieczności nie jest to lista wyczerpująca, uwzględniono metody eksploracji danych spotykane najczęściej w komercyjnych systemach eksploracji danych.



Rysunek 1. Proces odkrywania wiedzy w bazach danych[1]

2.1. Reguły asocjacyjne

Pojęcie reguł asocjacyjnych (ang. *association rules*) zostało po raz pierwszy wprowadzone w [AIS93]. Odkrywanie reguł asocjacyjnych polega na znalezieniu korelacji wiążącej współwystępowanie podzbiorów elementów w dużej kolekcji zbiorów. Znalezione korelacje są prezentowane jako reguły postaci $X \Rightarrow Y$ (*wsparcie*, *ufność*), gdzie X i Y są rozłącznymi zbiorami elementów, *wsparcie* oznacza częstotliwość występowania zbioru $X \cup Y$ w kolekcji zbiorów, zaś *ufność* reprezentuje prawdopodobieństwo warunkowe P(Y|X). Na gruncie analizy ekonomicznej reguły asocjacyjne są najczęściej stosowane do analizy koszyka zakupów. W takim przypadku wejściowa kolekcja zbiorów odpowiada bazie danych koszyków zakupów klientów, a odkryte reguły asocjacyjne reprezentują zbiory produktów, które są często nabywane wspólnie. Przykładowo, reguła asocjacyjna odkryta w bazie danych transakcji sklepowych mogłaby mieć postać `{chleb,kiełbasa}⇒{musztarda} (3%,75%)` a jej interpretacja byłaby następująca: 3% klientów sklepu kupiło chleb, kiełbasę i musztardę w trakcie pojedynczej transakcji, przy czym 75% transakcji zawierających chleb i kiełbasę, zawierało również musztardę. Odkryte reguły asocjacyjne mogą być wykorzystane do organizowania promocji i sprzedaży wiązanej, do konstruowania katalogów wysyłkowych, ustalania rozmieszczenia towarów na półkach, itp. Warto zaznaczyć, że stosowalność reguł asocjacyjnych nie ogranicza się tylko do analizy koszyka zakupów. Mimo, że

[1] źródło: Automated Learning Group, D2K documentation

jest to bez wątpienia najpopularniejsze zastosowanie tego modelu wiedzy, reguły asocjacyjne mogą być wykorzystane wszędzie tam, gdzie dane wejściowe stanowią kolekcję zbiorów. Przykładowo, jeśli informacje o połączeniach telefonicznych wykonanych przez abonenta w trakcie miesiąca przechowywać w postaci zbioru obiektów, gdzie każdy obiekt reprezentuje pojedyncze połączenie (np. scharakteryzowane przez czas trwania, koszt, rodzaj abonamentu), to reguły asocjacyjne mogą być wykorzystane do znalezienia korelacji między typami połączeń. Taka wiedza może być użyta, przykładowo, do zaproponowania abonentom bardziej korzystnych planów taryfowych lub pakietów usług wiązanych.

Reguły asocjacyjne doczekały się wielu rozwinięć i modyfikacji. W [SA96a] zaproponowano algorytm służący do znajdowania ilościowych reguł asocjacyjnych (ang. *quantitative association rules*), reprezentujących korelacje między wartościami różnych atrybutów. Model ten umożliwiał także włączenie do eksploracji atrybutów numerycznych, które jednak musiały być uprzednio dyskretyzowane. Przykładem ilościowej reguły asocjacyjnej, która mogłaby być odkryta w bazie danych, jest reguła: `wiek∈(20,30)∧zawod='student'⇒dochod='niski' (2%,60%)`. Modyfikacją oryginalnego sformułowania była propozycja przedstawiona w [SA95]. Celem było uwzględnienie taksonomii elementów wchodzących w skład reguł i umożliwienie odkrywania uogólnionych reguł asocjacyjnych (ang. *generalized association rules*), zawierających elementy z różnych poziomów taksonomii. Dalsze propozycje obejmowały reguły cykliczne [ORS98], czasowo-przestrzenne reguły asocjacyjne [GP05], i wiele innych. Duży wysiłek badawczy włożono w opracowywanie efektywnych algorytmów odkrywania reguł asocjacyjnych. Najbardziej znane algorytmy to Apriori [AS94], FreeSpan [HP+00] oraz Eclat [ZP+97].

2.2. Wzorce sekwencji

Sekwencja jest to uporządkowany ciąg zbiorów elementów, w którym każdy zbiór posiada znacznik czasowy. Sekwencja może reprezentować zbiory produktów kupowanych przez klientów podczas kolejnych wizyt w sklepie, filmy wypożyczane podczas kolejnych wizyt w wypożyczalni wideo, czy rozmowy telefoniczne wykonywane w określonych przedziałach czasu. Problem znajdowania wzorców sekwencji został po raz pierwszy sformułowany w [AS95] i polega na znalezieniu, w bazie danych sekwencji, podsekwencji występujących częściej niż zadany przez użytkownika próg częstości, zwany progiem minimalnego wsparcia (ang. *minsup*). Przykładem wzorca sekwencji znalezionego w bazie danych księgarni może być następujący wzorzec: `{'Ogniem i mieczem'}⇒{'Potop'}⇒{'Pan Wołodyjowski'} (1,5%)`. Dodatkowo, użytkownik może sformułować ograniczenia dotyczące maksymalnych interwałów czasowych między kolejnymi wystąpieniami elementów sekwencji. Podobnie jak w przypadku reguł asocjacyjnych, także wzorce sekwencji doczekały się rozwinięć (np. uogólnione wzorce sekwencji [SA96b]) oraz efektywnych algorytmów eksploracji, takich jak GSP. Domeny potencjalnego zastosowania wzorców sekwencji praktycznie pokrywają się z regułami asocjacyjnymi i obejmują, między innymi: telekomunikację, handel detaliczny i hurtowy, bankowość, ubezpieczenia, analizę dzienników serwerów WWW, i wiele innych.

2.3. Klasyfikacja

Klasyfikacja (ang. *classification*) jest jedną z najpopularniejszych technik eksploracji danych. Zadanie klasyfikacji polega na stworzeniu modelu, który umożliwia przypisanie nowego, wcześniej niewidzianego obiektu, do jednej ze zbioru predefiniowanych klas. Model umożliwiający takie przypisanie nazywa się klasyfikatorem. Klasyfikator dokonuje przypisania na podstawie doświadczenia nabytego podczas trenowania na zbiorze uczącym. W trakcie wieloletnich prac prowadzonych nad klasyfikatorami i ich zastosowaniem w statystyce, uczeniu maszynowym, czy sztucznej inteligencji, zaproponowano bardzo wiele metod klasyfikacji. Najczęściej stosowane techniki to klasyfikacja bayesowska [LIT92], klasyfikacja na podstawie k najbliższych sąsiadów [Aha92], drzewa decyzyjne [BF+84,Qui86,Qui93], sieci neuronowe [Big96], sieci bayesowskie [HGC95], czy algorytmy SVM [Bur98,Vap95] (ang. *support vector machines*). Techniką podobną do klasyfikacji jest regresja (ang. *regression*). Różnica między dwiema technikami polega na tym,

że w przypadku klasyfikacji przewidywana wartość jest kategoryczna, podczas gdy w regresji celem modelu jest przewidzenie wartości numerycznej. Poniżej pokrótce opisano wybrane techniki klasyfikacji.

Naiwny klasyfikator Bayesa jest bardzo prostym, a jednocześnie efektywnym w praktyce klasyfikatorem. Podstawą działania klasyfikatora jest twierdzenie Bayesa, które określa prawdopodobieństwo warunkowe hipotezy h_i przy zaobserwowaniu danych D jako $P(h_i|D)=P(D|h_i)*P(h_i)/P(D)$. Jeśli przyjąć, że h_i reprezentuje przypisanie do *i*-tej klasy, wówczas prawdopodobieństwo przypisania obiektu D do *i*-tej klasy można znaleźć na podstawie prawdopodobieństwa *a posteriori* $P(D|h_i)$, reprezentującego prawdopodobieństwo posiadania przez D pewnych cech jeśli D rzeczywiście należy do *i*-tej klasy. Prawdopodobieństwo to określa się na podstawie danych zawartych w zbiorze trenującym poprzez analizę cech obiektów rzeczywiście należących do *i*-tej klasy, zaś dodatkowym uproszczeniem jest założenie o warunkowej niezależności atrybutów (tzn. założenie, że w ramach danej klasy rozkład wartości każdego atrybutu jest niezależny od pozostałych atrybutów). W zastosowaniach praktycznych to założenie jest często niespełnione, jednak okazuje się, że fakt ten nie ma znacząco ujemnego wpływu na jakość i dokładność klasyfikacji. Podstawową zaletą naiwnego klasyfikatora Bayesa jest prostota i szybkość, natomiast główną wadą jest brak jakiegokolwiek wyjaśnienia decyzji podjętej przez klasyfikator (klasyfikator zachowuje się jak „czarna skrzynka").

Adaptatywna sieć Bayesa to algorytm probabilistyczny, który generuje model klasyfikacji w postaci zbioru połączonych cech (ang. *network feature*). W zależności od wybranego trybu algorytm może wyprodukować płaski model stanowiący odpowiednik naiwnego klasyfikatora Bayesa (w takim modelu każda cecha połączona będzie zawierać jeden atrybut-predyktor i jedną klasę docelową), model składający się z jednej cechy połączonej (w ramach cechy znajdzie się wiele związanych ze sobą atrybutów-predyktorów, taki model odpowiada drzewu decyzyjnemu), lub model składający się z wielu cech połączonych. Przy wykorzystaniu modelu z jedną cechą połączoną algorytm może zaprezentować model w postaci prostych reguł klasyfikacyjnych. Stanowi to o atrakcyjności metody, ponieważ zwiększa czytelność wyniku procesu eksploracji.

Algorytm indukcji drzew decyzyjnych buduje model w postaci drzewa, którego węzły odpowiadają testom przeprowadzanym na wartościach atrybutów, gałęzie odpowiadają wynikom testów, a liście reprezentują przypisanie obiektów do klas. Algorytm tworzy drzewo decyzyjne w czasie liniowo zależnym od liczby atrybutów-predyktorów. O kształcie drzewa decydują takie parametry jak: kryterium wyboru punktu podziału drzewa, kryterium zakończenia podziałów, czy stopień scalania drzewa. Istotną cechą odróżniającą algorytmy indukcji drzew decyzyjnych jest przyjęta miara „czystości" węzła. Najczęściej stosowanymi miarami jest wskaźnik Gini oraz stopień redukcji entropii. Wielką zaletą drzew decyzyjnych jest fakt, że wygenerowany model można łatwo przedstawić w postaci zbioru reguł, co pomaga analitykom zrozumieć zasady działania klasyfikatora i nabrać zaufania do jego decyzji.

Algorytm SVM (ang. *Support Vector Machines*) może być wykorzystany zarówno do klasyfikacji, jak i regresji. Algorytm SVM dokonuje transformacji oryginalnej przestrzeni w której zdefiniowano problem klasyfikacji, do przestrzeni o większej liczbie wymiarów. Transformacja jest dokonywana w taki sposób, że po jej wykonaniu w nowej przestrzeni obiekty są separowalne za pomocą hiperpłaszczyzny (taka separacja jest najczęściej niemożliwa w oryginalnej przestrzeni). Głównym elementem transformacji jest wybór funkcji jądra (ang. *kernel function*) odpowiedzialnej za odwzorowanie punktów do nowej przestrzeni. W przypadku regresji algorytm SVM znajduje w nowej przestrzeni ciągłą funkcję, w ε-sąsiedztwie której mieści się największa możliwa liczba obiektów. Algorytmy SVM wymagają starannego doboru funkcji jądra i jej parametrów. Doświadczenia wskazują, że algorytmy te bardzo dobrze się sprawdzają w praktycznych zastosowaniach, takich jak: rozpoznawanie pisma odręcznego, klasyfikacja obrazów i tekstu, czy analiza danych biomedycznych. Algorytm SVM może także zostać wykorzystany do wykrywania osobliwości. Stosuje się wówczas specjalną wersję algorytmu, tzw. SVM z jedną klasą docelową, która pozwala identyfikować nietypowe obiekty.

Podstawowym narzędziem do oceny dokładności klasyfikacji jest macierz pomyłek (ang. *confusion matrix*). Pozwala ona na łatwe porównanie decyzji klasyfikatora z „poprawnym" przypisaniem obiektów. W trakcie oceny wykorzystuje się tzw. zbiór testujący, w którym znane jest *a priori* rzeczywiste przypisanie obiektów do klas, a jednocześnie zbiór ten nie był wykorzystany do uczenia klasyfikatora. Dzięki macierzy pomyłek można łatwo zauważyć fenomen nadmiernego dopasowania (ang. *overfitting*), w którym klasyfikator przejawia nadmierną skłonność do generalizowania wiedzy uzyskanej ze zbioru uczącego. Innym narzędziem do oceny jakości klasyfikacji jest wyznaczanie krzywych lift. Polega to na porównaniu kwantyli zawierających klasyfikowane obiekty posortowane według pewności klasyfikacji z losowymi kwantylami obiektów. Stosunek liczby obiektów należących do docelowej klasy w każdej parze kwantyli wyznacza kolejne wartości lift. Mechanizmem podobnym do krzywych lift jest mechanizm krzywych ROC [PF97] (ang. *Receiver Operating Characteristics*). W tym przypadku krzywa reprezentuje stosunek liczby poprawnych przewidywań klasy docelowej do liczby niepoprawnych przewidywań klasy.

Popularność technik klasyfikacji wynika przede wszystkim z szerokiej stosowalności tego modelu wiedzy. Klasyfikatory mogą być wykorzystane do oceny ryzyka związanego z udzieleniem klientowi kredytu, wyznaczeniem prawdopodobieństwa przejścia klienta do konkurencji, czy znalezienia zbioru klientów, którzy z największym prawdopodobieństwem odpowiedzą na ofertę promocyjną. Podstawową wadą praktycznie wszystkich technik klasyfikacji jest konieczność starannego wytrenowania klasyfikatora i trafnego wyboru rodzaju klasyfikatora w zależności od charakterystyki przetwarzanych danych. Te czynności mogą wymagać od użytkownika wiedzy technicznej, zazwyczaj wykraczającej poza sferę kompetencji analityków i decydentów.

2.4. Analiza skupień

Analiza skupień (ang. *clustering*) to popularna technika eksploracji danych polegająca na dokonaniu takiego partycjonowania zbioru danych wejściowych, które maksymalizuje podobieństwo między obiektami przydzielonymi do jednej grupy i, jednocześnie, minimalizuje podobieństwo między obiektami przypisanymi do różnych grup. Sformułowanie problemu przypomina problem klasyfikacji, jednak należy podkreślić istotne różnice. Analiza skupień jest techniką uczenia bez nadzoru, stąd nieznane jest „poprawne" przypisanie obiektów do grup, często nie jest znana nawet „poprawna" liczba grup. Jeśli porównywane obiekty leżą w przestrzeni metrycznej, wówczas do określenia stopnia podobieństwa między obiektami wykorzystuje się funkcję odległości zdefiniowaną w danej przestrzeni [SJ99]. Zaproponowano wiele różnych funkcji odległości, do najpopularniejszych należy rodzina odległości Minkowskiego (odległość blokowa, odległość euklidesowa, odległość Czebyszewa), odległość Hamminga (wykorzystywana dla zmiennych zakodowanych binarnie), odległość Levenshteina [Lev65] (zwana odległością edycji), czy popularna w statystyce odległość Mahalanobisa. W przypadku, gdy porównywane obiekty nie leżą w przestrzeni metrycznej, zazwyczaj definiuje się specjalne funkcje określające stopień podobieństwa między obiektami. Specjalizowane funkcje podobieństwa istnieją dla wielu typowych dziedzin zastosowań, takich jak porównywanie stron internetowych, porównywanie sekwencji DNA, czy porównywanie danych opisanych przez atrybuty kategoryczne. Metody analizy skupień najczęściej dzieli się na metody hierarchiczne i metody partycjonujące. Pierwsza klasa metod dokonuje iteracyjnego przeglądania przestrzeni i w każdej iteracji buduje grupy obiektów podobnych na podstawie wcześniej znalezionych grup. Rozróżnia się tutaj metody aglomeracyjne (w każdej iteracji dokonują złączenia mniejszych grup) i metody podziałowe (w każdej iteracji dokonują podziału wybranej grupy na mniejsze podgrupy). Druga klasa metod analizy skupień to metody partycjonujące, które od razu znajdują docelowe grupy obiektów. Do najbardziej znanych algorytmów analizy skupień należą algorytmy k-średnich [Har75], samoorganizujące się mapy [Koh00], CURE [GRS98] (ang. *Clustering Using REpresentatives*), Chameleon [KHK99], Cobweb [Fis87], i wiele innych.

Aby bardziej przybliżyć czytelnikowi koncepcję analizy skupień, poniżej opisano dwa algorytmy hierarchiczne, k-średnich i O-Cluster. Algorytm k-średnich dokonuje hierarchicznego

partycjonowania zbioru danych wejściowych. W każdym kroku następuje podział wybranego węzła (węzła o największym rozmiarze lub węzła o największej wariancji) na dwa podwęzły. Po podziale następuje ponowne wyznaczenie centroidów dla wszystkich węzłów. Algorytm zatrzymuje się po uzyskaniu *k* węzłów, które reprezentują docelowe grupy obiektów podobnych. Dla każdej grupy wyznaczany jest centroid grupy, histogramy wszystkich atrybutów wewnątrz grupy, oraz reguła opisująca grupę w postaci zbioru hiperpłaszczyzn. Po wygenerowaniu modelu nowe obiekty mogą być za jego pomocą przypisywane do grup, ponieważ na podstawie uzyskanych grup tworzony jest naiwny klasyfikator bayesowski. Zaletą modelu jest fakt, że przypisanie obiektu do grupy ma charakter probabilistyczny. Podstawową wadą algorytmu k-średnich jest to, że jakość uzyskanego modelu zależy przede wszystkim od wybranej liczby *k* docelowych grup, a określenie poprawnej liczby grup *a priori* jest trudne, a czasem niemożliwe. Drugim przykładem algorytmu analizy skupień jest algorytm ortogonalnego partycjonowania O-Cluster. Algorytm ten dokonuje rzutowania wszystkich obiektów na ortogonalne osie odpowiadające atrybutom wejściowym. Dla każdego wymiaru wyznaczane są histogramy, które następnie są analizowane w poszukiwaniu obszarów charakteryzujących się mniejszą gęstością. Dane są partycjonowane za pomocą hiperpłaszczyzn przecinających osie atrybutów w punktach o niskiej gęstości. Docelowa liczba grup wyznaczana jest automatycznie na podstawie charakterystyki danych. W przeciwieństwie do algorytmu k-średnich, algorytm O-Cluster nie tworzy sztucznych grup w obszarach o jednostajnej gęstości. W obu algorytmach obecność osobliwości może znacznie pogorszyć wynikowy model, zaleca się więc wstępne usunięcie osobliwości przed rozpoczęciem analizy skupień.

2.5. Odkrywanie cech

Wiele przetwarzanych zbiorów danych charakteryzuje się bardzo dużą liczbą wymiarów (atrybutów). Niczyjego zdziwienia nie budzą tabele z danymi wejściowymi zawierające setki atrybutów kategorycznych i numerycznych. Niestety, efektywność większości metod eksploracji danych gwałtownie spada wraz z rosnącą liczbą przetwarzanych wymiarów. Jednym z rozwiązań tego problemu jest wybór cech (ang. *feature selection*) lub odkrywanie cech (ang. *feature extraction*) [AD92,Kit78,LM98,YP97]. Pierwsza metoda polega na wyselekcjonowaniu z dużej liczby atrybutów tylko tych atrybutów, które posiadają istotną wartość informacyjną. Druga metoda polega na połączeniu aktualnie dostępnych atrybutów i stworzeniu ich liniowych kombinacji w celu zmniejszenia liczby wymiarów i uzyskania nowych źródeł danych. Wybór i generacja nowych atrybutów może odbywać się w sposób nadzorowany (wówczas wybierane są atrybuty, które umożliwiają dyskryminację między wartościami atrybutu decyzyjnego), lub też bez nadzoru (wówczas najczęściej wybiera się atrybuty powodujące najmniejszą utratę informacji).

Jak wspomniano wyżej, czas tworzenia modelu klasyfikacji najczęściej zależy liniowo od liczby atrybutów. Jest również możliwe, że duża liczba atrybutów wpłynie ujemnie na efektywność i dokładność modelu poprzez wprowadzenie niepożądanego szumu informacyjnego. Algorytm wyboru cech umożliwia wybór, spośród wielu atrybutów, podzbioru atrybutów które są najbardziej odpowiednie do przewidywania klas docelowych. Wybór cech jest więc często wykorzystywany jako technika wstępnego przetworzenia i przygotowania danych, przed rozpoczęciem trenowania klasyfikatora. Najczęściej algorytm wyboru cech bazuje na pojęciu ważności atrybutów (ang. *attribute importance*) i wykorzystuje zasadę minimalizacji długości opisu [Ris85] (ang. *minimum description length*). W dużym uproszczeniu, metoda ta traktuje każdy atrybut wejściowy jako możliwy predyktor klasy docelowej, a następnie bada liczbę bitów potrzebną do przesłania łącznej informacji o wybranym zbiorze atrybutów i przypisaniach klas docelowych w zbiorze treningowym, wraz z informacją o wszystkich popełnionych błędach klasyfikacji. Wiadomo, że najkrótszym kodowaniem sekwencji symboli jest takie kodowanie, które najbardziej odpowiada prawdziwym prawdopodobieństwom wystąpienia każdego symbolu. Stąd, zasada minimalizacji długości opisu faworyzuje te podzbiory atrybutów, które nie są nadmiarowe, i jednocześnie pozwalają dobrze przewidzieć wartości atrybutów docelowych.

Przykładem algorytmu ekstrakcji cech jest algorytm NNMF (ang. *Non-Negative Matrix Factorization*). Polega on na przybliżeniu macierzy V (zawierającej obiekty i wartości atrybutów)

za pomocą dwóch macierzy niższego stopnia W i H w taki sposób, że V≈W*H. Macierz W zawiera nowe cechy będące liniową kombinacją oryginalnych cech (atrybutów) zapisanych w macierzy V, przy czym współczynniki liniowych kombinacji są dodatnie. NNMF dokonuje przybliżenia macierzy V za pomocą macierzy W i H w sposób iteracyjny, w każdym kroku modyfikując wyznaczone współczynniki. Procedura kończy się po osiągnięciu pożądanego stopnia przybliżenia lub po zadanej liczbie iteracji. Algorytm NNMF szczególnie dobrze sprawdza się w przetwarzaniu dokumentów tekstowych, gdzie znalezione liniowe kombinacje atrybutów (słów) odpowiadają zbiorom semantycznie powiązanych słów. Zastosowanie algorytmu NNMF prowadzi do zmniejszenia liczby wymiarów analizowanego problemu i często skutkuje zwiększeniem dokładności i jakości generowanych modeli.

3. Podsumowanie

Eksploracja danych to nowa i niezwykle prężnie rozwijająca się dziedzina. Wiedza odkryta w dużych wolumenach danych może być traktowana jako metadane, oferujące wzbogacony wgląd w dane. Metody eksploracji danych wymagają specjalizowanych narzędzi umożliwiających budowanie modeli, testowanie modeli, stosowanie modeli do nowych danych. Ścisła integracja technik eksploracji danych z bazą danych umożliwia wykorzystanie technik eksploracji w aplikacjach, ułatwia pielęgnację aplikacji, oferuje ogromnie wzbogaconą funkcjonalność aplikacji. W artykule przedstawiono podstawowe metody eksploracji danych. Z konieczności, opisy mają charakter wybitnie skrótowy, zainteresowany czytelnik jest kierowany do pozycji wymienionych w spisie literatury.

Bibliografia

[AD92] Almuallin H., Dietterich T.G.: Efficient algorithms for identifying relevant features, in Proc. of 9th Canadian Conference on Artificial Intelligence, pp.38-45, Vancouver BC, 1992

[Aha92] Aha D.: Tolerating noisy, irrelevant, and novel attributes in instance-based learning algorithms. International Journal of Man-Machine Studies 36(2), pp.267-287

[AIS93] Agrawal R., Imielinski T., Swami A.: Mining association rules between sets of items in large databases, Proc. of 1993 ACM SIGMOD International Conference on Management of Data, Washington D.C., May 26-28 1993, pp. 207-216, ACM Press, 1993

[AS94] Agrawal R., Srikant R.: Fast Algorithms for Mining Association Rules, Proc. of 1994 International Conference on Very Large Databases VLDB, Santiago de Chile, September 12-15, pp.487-499. Morgan Kaufman, 1994

[AS95] Agrawal R., Srikant R.: Mining sequential patterns, In Proc. of the 11th International Conference on Data Engineering, Taipei, Taiwan, 1995

[BF+84] Breiman L., Friedman J.H., Olshen R.A., Stone C.J.: Classification and regression trees, Wadsworth, 1984

[Big96] Bigus J.P.: Data mining with neutral networks, McGraw Hill, 1996

[BL97] Berry M.J.A., Linoff G.: Data mining techniques for marketing, sales, and customer support, John Wiley, 1997

[Bol04] Bolstad W.M.: Introduction to Bayesian statistics. Wiley-Interscience, 2004

[Bur98] Burges C.J.C.: A tutorial on support vector machines for pattern recognition, Data Mining and Knowledge Discovery 2(2)

[Cen87] Cendrowska J.: PRISM: An algorithm for inducing modular rules. International Journal of Man-Machine Studies 27(4), pp.25-32, 1987

[DLR77] Dempster A., Laird N., Rubin, D.: Maximum likelihood from incomplete data via the EM algorithm. Journal of the Royal Statistical Society, Series B, 39(1):pp.1-38, 1977

[ELL01] Everitt B.S., Landau S., Leese M.: Cluster analysis, Arnold Publishers, 2001

[Fis87] Fisher D.: Knowledge acquisition via incremental conceptual clustering, Machine Learning 2(2): pp.139-172

[FPSU96] Fayyad U.M., Piatetsky-Shapiro G., Smyth P., Uthurusamy R.: Advances in Knowledge Discovery and Data Mining, AAAI/MIT Press, 1996

[GP05] Gidofalvi G., Pedersen T.B.: Spatio-temporal Rule Mining: Issues and Techniques, in Proc. of the 7th International Conference on Data Warehousing and Knowledge Discovery DaWaK 2005, Copenhagen, Denmark, 2005

[GRS98] Guha S., Rastogi R., Shim K.: CURE: An Efficient Clustering Algorithm for Large Databases, In Proceedings of ACM SIGMOD International Conference on Management of Data, pp. 73-84, New York, 1998

[Har75] Hartigan J.A.: Clustering algorithms, John Wiley, 1975

[HGC95] Heckerman D., Geiger D., Chickering D.M.: Learning Bayesian networks: the combination of knowledge and statistical data, Machine Learning 20(3): pp.197-243, 1995

[HK00] Han J., Kamber M.: Data Mining: Concepts and Techniques. Morgan Kaufmann, 2000

[HP+00] Han J., Pei J. et al: FreeSpan: frequent pattern-projected sequential pattern mining. Proceedings of the sixth ACM SIGKDD International conference on Knowledge discovery and data mining, Boston, Massachusetts, United States, pp355-359 , 2000

[KHK99] Karypis G., Han E.-H., Kumar V.: CHAMELEON: A Hierarchical Clustering Algorithm Using Dynamic Modeling, Technical Report, Department of Computer Science, University of Minnesota, Minneapolis, 1999

[Kit78] Kittler J.: Feature set search algorithms, Pattern recognition and signal processing, Sijthoff an Noordhoff, 1978

[Koh00] Kohonen T.: Self-organizing maps, Springer Verlag, 2000

[Lev65] Levenshtein V.I.: Binary codes capable of correcting deletions, insertions and reversals. Doklady Akademia Nauk SSSR, 163(4):845–848, 1965

[LHC05] LHC Computing Grid, http://lcg.web.cern.ch/LCG/index.html

[LIT92] Langey P., Iba W., Thompson K.: An analysis of Bayesian classifiers. In Proc. of 10th National Conference on Artificial Intelligence, San Jose, CA, AAAI Press, pp.223-228, 1992

[LM98] Liu H., Motoda H.: Feature extraction for knowledge discovery and data mining, Springer Verlag, 1998

[MI94] McCord Nelson M., Illingworth W.T.: Practical guide to neural nets, Addison-Wesley, 1994

[ORS98] Ozden B., Ramaswamy S., Silberschatz A.: Cyclic Association Rules, In Proc. 1998 International Conference on Data Engineering (ICDE'98), pp.412-421, Orlando, FL, 1998

[PF97] Provost F., Fawcett T.: Analysis and visualization of classifier performance: comparison under imprecise class and cost distributions, in Proc. of the 3rd International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, Huntington Beach, CA, 1997

[Qui86] Quinlan J.R.: Induction of decision trees. Machine Learning 1(1),pp.81-106

[Qui93] Quinlan J.R.: C4.5: Programs for machine learning. Morgan Kaufman, 1993

[Ris85] Rissanen J.: The minimum description length principle, Encyclopedia of Statistical Sciences vol.5, pp.523-527, John Wiley, 1985

[SA95] Srikant R., Agrawal R.: Mining Generalized Association Rules, In Proc. of the 21st Int'l Conference on Very Large Databases, Zurich, Switzerland, 1995

[SA96a] Srikant R., Agrawal R.: Mining Quantitative Association Rules in Large Relational Tables, In Proc. of the ACM SIGMOD Conference on Management of Data, Montreal, Canada, 1996

[SA96b] Srikant R., Agrawal R.: Mining Sequential Patterns: Generalizations and Performance Improvements, in Proc. of the 5th International Conference on Extending Database Technology, pp.3-17, Avignon, France, 1996

[SJ99] Santini S., Jain R.: Similarity Measures, IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 21(9), pp.871-883, 1999

[Vap95] Vapnik V.: The nature of statistical learning theory, Springer Verlag, 1995

[Wint05] Winter Corporation TopTen Program, http://www.wintercorp.com

[WF00] Witten I.H., Frank E.: Data Mining. Practical Machine Learning Tools and Techniques with Java Implementations. Morgan Kaufmann, 2000

[YP97] Yang Y., Pedersen J.O.: A Comparative Study on Feature Selection in Text Categorization, in Proc. of the 14th International Conference on Machine Learning ICML97, pp.412-420, 1997

[ZP+97] Zaki M.J., Parthasarathy S., Ogihara M., Li W.: New Algorithms for Fast Discovery of Association Rules, in Proc. of 3rd International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD-97), Newport Beach, California, USA, 1997