Adatbányászat: Adatok

2. fejezet

Tan, Steinbach, Kumar

Bevezetés az adatbányászatba

előadás-fóliák

fordította

Ispány Márton

Az adatelemzés csővezetéke

- Az adatbányászat nem az egyetlen lépés a folyamatban

- Előfeldolgozás: a valós adatok zajosak, hiányosak és inkonzisztensek. Adat tisztítás is szükséges az adatok megértéshez
  - Módszerek: Mintavétel, Dimenzió csökkentés, Jellemző szelektálás.
  - Piszkos munka de gyakran a legfontosabb lépés az elemzésben.

- Utófeldolgozás: Make the data actionable and useful to the user
  - A kapott eredmény fontosságának statisztikai vizsgálata
  - Vizualizáció.

– Az elő- és utófeldolgozás gyakran maga is egy adatbányászati feladat

Az adatbányászat módszertana

- Többféle (gyártótól is függő) módszertan:

  CRISP-DM (SPSS-Clementine) http://www.crisp-dm.org/

  SEMMA (SAS) http://www.sas.com/

- Az 5 lépcsős folyamat
  - Mintavétel: az adatok előkészítése az adattárházból.
  - Feltárás: új összefüggések, mintázatok keresése.
  - Módosítás: attribútumok, rekordok, mezők módosítása, kitöltése.
  - Modellezés: analítikus modellek illesztése.
  - Kiértékelés: a modell(ek) jóságának, hasznosságának mérése.

Mit értünk adat alatt?

- Objektumok attribútumainak numerikusan jellemzett összessége.
- Attribútum: egy objektum tulajdonsága, jellemzője.
  - Példák: hajszín, hőmérséklet, stb.
  - Az attribútumot nevezik változónak, jellemzőnek (feature).
- Attribútumok értékeinek egy összessége ír le egy objektumot.
  - Az objektumot nevezik rekordnak, pontnak, esetnek, mintaelemnek, egyednek, entitásnak.

Attribútumok

Objektumok

Tid	Vissza-térítés	Családi állapot	Jöve-delem	Csalás
1	Igen	Nőtlen	125K	Nem
2	Nem	Házas	100K	Nem
3	Nem	Nőtlen	70K	Nem
4	Igen	Házas	120K	Nem
5	Nem	Elvált	95K	Igen
6	Nem	Házas	60K	Nem
7	Igen	Elvált	220K	Nem
8	Nem	Nőtlen	85K	Igen
9	Nem	Házas	75K	Nem
10	Nem	Nőtlen	90K	Igen

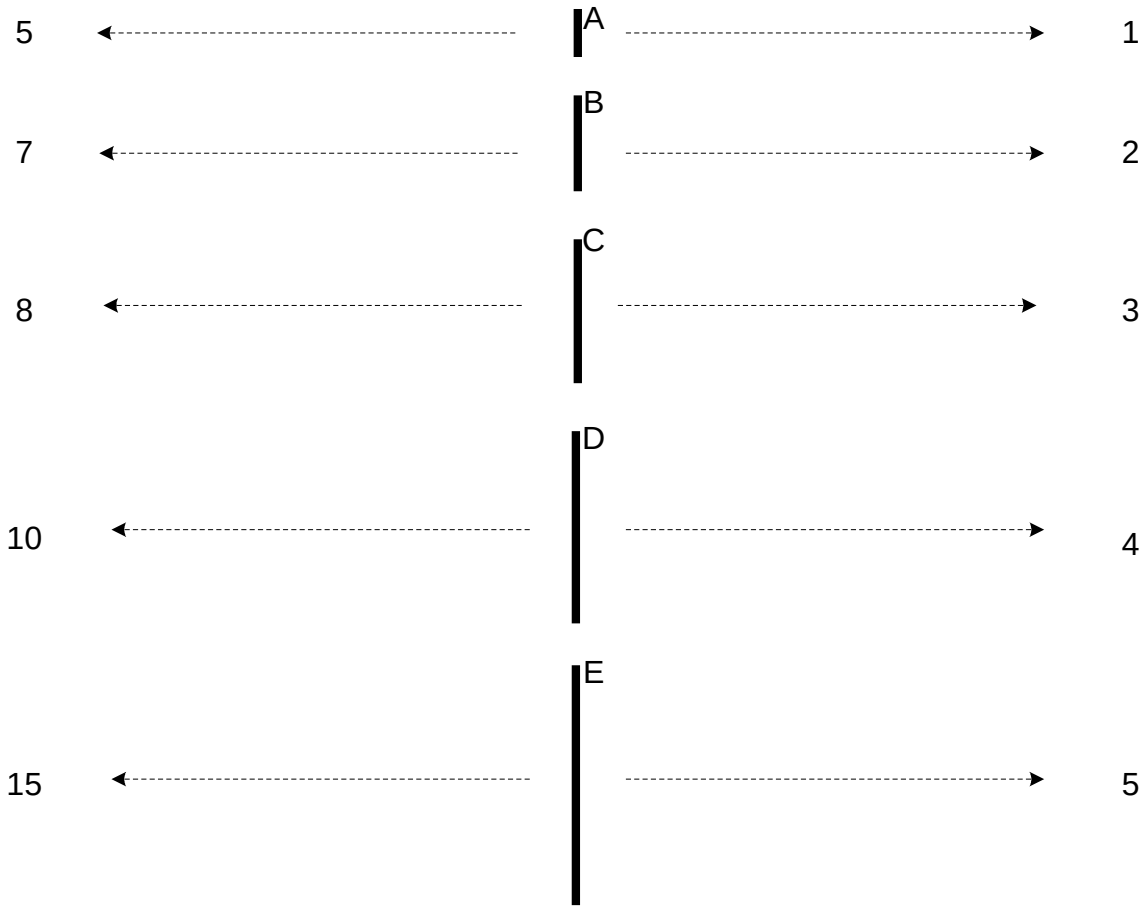
Attribútum értékek

- Attribútum értékek alatt az attribútumhoz rendelt számokat vagy szimbólumokat értjük.

- Különbség az attribútumok és az attribútum értékek között:
  - Ugyanazt az attribútumot attribútum értékek különböző tartományaira képezhetjük le.
    - Példa: a magasságot méterben és lábban is mérhetjük.
  - Különböző attribútumokat attribútum értékek ugyanazon tartományára is le képezhetjük.
    - Példa: az ID és KOR változók attribútum értékei egészek.
    - Azonban az attribútum értékek tulajdonságai különfélék lehetnek:
      - ID-re nincs korlát, a KOR-nak van maximuma és minimuma.

Hosszúság mérése

- **A mód, ahogy egy attribútumot mérünk részben eltérhet az attribútum tulajdonságaitól.**



Attribútumok típusai

- A következő attribútum típusokat különböztetjük meg
  - Névleges (nominális)
    - Példák: ID, szemszín, irányítószám.
  - Sorrendi (ordinális)
    - Példák: rangsorolás (pl. a burgonyaszirom íze egy 1-10 skálán), fokozat, magasság mint {magas, átlagos, alacsony}.
  - Intervallum
    - Példák: dátum, hőmérséklet Celsiusban vagy Fahrenheitben.
  - Hányados
    - Példák: abszolút hőmérséklet (Kelvin), hosszúság, idő.

Attribútum értékek tulajdonságai

- Egy attribútum típusa attól függ, hogy milyen tulajdonságokkal rendelkezik.
  - Egyezőség, különbözőség: $= \neq$
  - Rendezés: $< >$
  - Összeadás, kivonás: $+ -$
  - Szorzás, osztás: $* /$

  - Névleges attribútum: egyezőség
  - Sorrendi attribútum: egyezőség és rendezés
  - Intervallum attribútum: egyezőség, rendezés és összeadás
  - Hányados attribútum: mind a 4 tulajdonság

Attribútum értékek tulajdonságai

Attribútum típusa	Leírás	Példák	Műveletek
Névleges (nominális)	Egy névleges attribútum értékei csak különböző nevek, azaz csak ahhoz nyújt elegendő információt, hogy egy objektumot megkülönböztessünk egy másiktól. (=, ≠)	irányítószám, dolgozó azonosító, szemszín, nem: {*férfi*, *nő*}	módusz, entropia, kontingencia korreláció, χ^2 érték
Sorrendi (ordinális)	Egy rendezett attribútum értékei ahhoz nyújtanak elegendő információt, hogy rendezzük az objektumokat. (<, >)	ásványok keménysége {*jó*, *jobb*, *legjobb*}, fokozat, házszám	medián, percentilis, rang korreláció, széria próba, előjel ill. előjeles rangösszeg próba
Intervallum	Egy intervallum attribútumnál az értékek közötti különbségek is jelentéssel bírnak. (+, -)	naptári dátumok, hőmérséklet Celsiusban ill. Fahrenheitben	átlag, szórás, Pearson féle korreláció, *t* és *F* próba
Hányados	Hányados változónál a különbségnek és a hányadosnak egyaránt van értelme. (*, /)	abszolút hőmérséklet, pénzügyi mennyiség, kor, tömeg, hossz, elektromos áram	mértani és harmónikus közép, százalék variáció

Attribútum értékek tulajdonságai

Attribútum szintje	Transzformáció	Megjegyzés
Névleges (nominális)	Az értékek bármilyen permutációja	Okoz-e bármilyen különbséget ha az alkalmazottak azonosítóit átrendezzük?
Sorrendi (ordinális)	Az értékek rendezés tartó transzformációja, azaz *új_érték = f(régi_érték)*, ahol *f* egy monoton függvény.	Egy attribútum melyet a jó, jobb és legjobb fokokkal írhatunk le egyaránt reprezentálható az {1, 2, 3} vagy a {0.5, 1, 10} számokkal.
Intervallum	*új_érték =a * régi_érték + b* ahol a és b konstansok	Így a Fahrenheit és Celsius skálák abban különböznek hogy hol van a zéró érték és mekkora az egység (fok).
Hányados	*új_érték = a * régi_érték*	A hosszúság méterben és lábban is mérhető.

Diszkrét és folytonos attribútumok

- Diszkrét attribútumok
  - Véges vagy megszámlálható végtelen sok értéke lehet.
  - Példák: irányítószám, darabszám, szavak száma dokumentumokban.
  - Gyakran egész értékű változókkal reprezentáljuk.
  - Megjegyzés: a bináris attribútumok a diszkrét attribútumok egy speciális esete.

- Folytonos attribútumok
  - Az attribútum értékek valós számok.
  - Példák: hőmérséklet, magasság, súly.
  - Gyakorlatban a valós értékek csak véges sok tizedesjegyig mérhetőek és ábrázolhatóak.
  - A folytonos attribútumokat általában lebegőpontos változókkal reprezentáljuk.

Adatállományok típusai

- Rekord
  - Adatmátrix (adatbázisok)
  - Dokumentum mátrix (szövegbányászat)
  - Tranzakciós adatok
- Gráf
  - World Wide Web (webgráf)
  - Molekula szerkezetek
- Rendezett
  - Térbeli adatok
  - Időbeli adatok
  - Szekvenciális adatok
  - Génszekvenciák adatai

Strukturált adatok fontos jellemzői

- Dimenzió
  - Dimenzió probléma
- Ritkaság
  - Csak az előforduló esetek elemezhetőek
- Felbontás
  - A mintázat függ a skálától

Rekordokból álló adatok

- Olyan adatok, amelyek rekordok egy halmazából állnak, ahol mindegyik rekord attribútum értékek egy adott halmazából áll.

Tid	Vissza-térítés	Családi állapot	Jöve-delem	Csalás
1	Igen	Nőtlen	125K	**Nem**
2	Nem	Házas	100K	**Nem**
3	Nem	Nőtlen	70K	**Nem**
4	Igen	Házas	120K	**Nem**
5	Nem	Elvált	95K	**Igen**
6	Nem	Házas	60K	**Nem**
7	Igen	Elvált	220K	**Nem**
8	Nem	Nőtlen	85K	**Igen**
9	Nem	Házas	75K	**Nem**
10	Nem	Nőtlen	90K	**Igen**

Adatmátrix

- Ha az objektumokat leíró adatok numerikus attribútumok egy adott halmazából állnak, akkor gondolhatunk rájuk úgy, mint pontokra a többdimenziós térben, ahol minden egyes dimenzió egy attribútumot reprezentál.

- Az ilyen adatokat egy n x p –es mátrixszal reprezentálhatjuk, amelynek n sora az objektumoknak, p oszlopa pedig az attribútumoknak felel meg.

X vetület	Y vetület	Távolság	Súly	Vastagság
10.23	5.27	15.22	2.7	1.2
12.65	6.25	16.22	2.2	1.1

Documentum mátrix

- Minden dokumentumot kifejezések egy vektorával írunk le.
  - Minden kifejezés egy attribútuma a vektornak.
  - Minden attribútum érték annak a száma, hogy az attribútumhoz tartozó kifejezés hányszor fordul elő a dokumentumban.

	csapat	edző	meccs	labda	pont	játék	győzelem	vereség	szezon
1. Doc	3	0	5	0	2	6	0	2	2
2. Doc	0	7	0	2	1	0	0	3	0
3. Doc	0	1	0	0	1	2	2	0	0

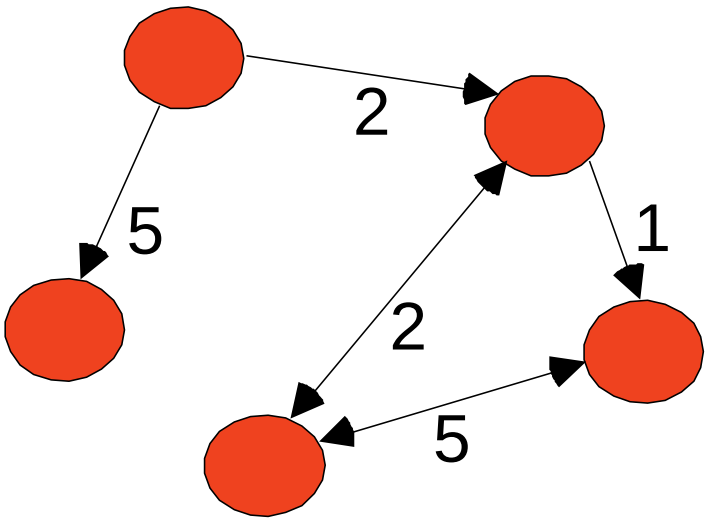
Tranzakciós adatok

- Speciális rekord típusú adatok, ahol
  - minden rekord (tranzakció) tételek egy halmazát tartalmazza.
  - Pl.: tekintsünk egy élelmiszerboltot. A tranzakció azon árucikkekből áll, amelyeket a vásárló vesz egy vásárlás során, míg a tételek a vásárolt árucikkek.

TID	*Tételek*
1	Kenyér, Kóla, Tej
2	Sör, Kenyér
3	Sör, Kóla, Pelenka, Tej
4	Sör, Kenyér, Pelenka, Tej
5	Kóla, Pelenka, Tej

Gráf adatok

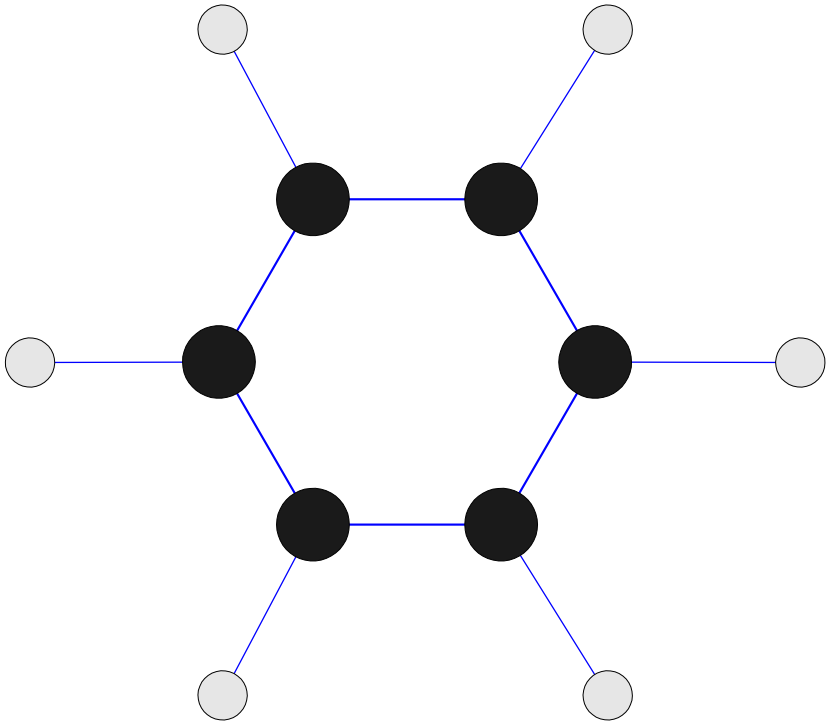
- Példák: általános gráf, HTML linkek




```
<a href="papers/papers.html#bbbb">
Data Mining </a>
<li>
<a href="papers/papers.html#aaaa">
Graph Partitioning </a>
<li>
<a href="papers/papers.html#aaaa">
Parallel Solution of Sparse Linear System of Equations </a>
<li>
<a href="papers/papers.html#ffff">
N-Body Computation and Dense Linear System Solvers
```

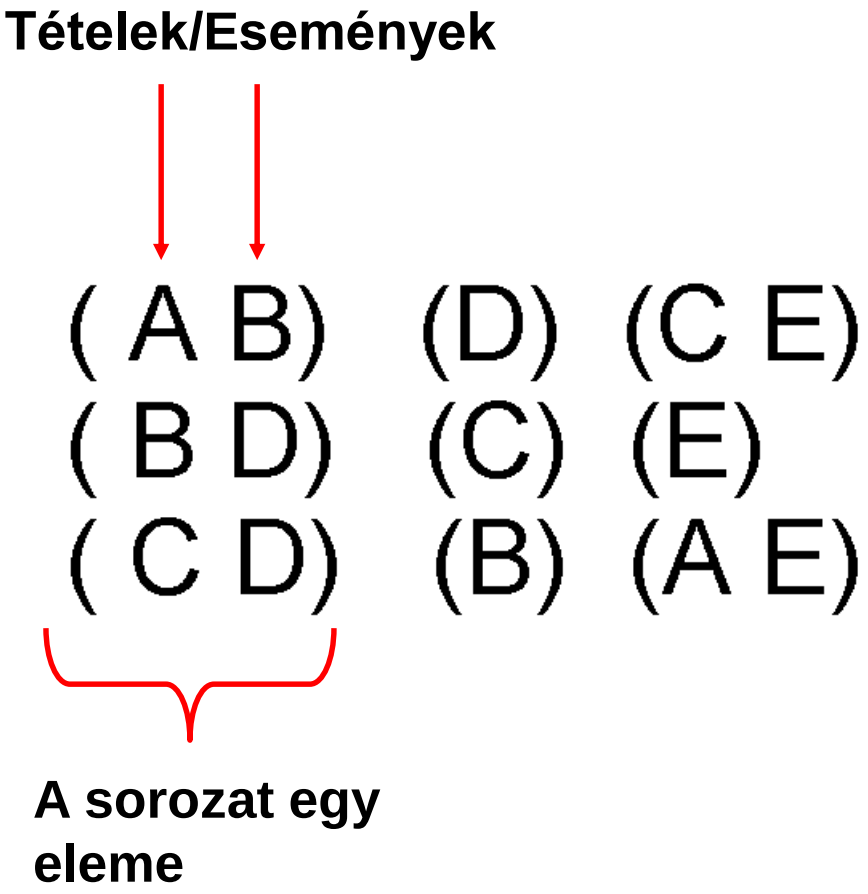
Kémiai adatok

- Benzin molekula: C_6H_6



Rendezett adatok

- Tranzakciók sorozatai



Rendezett adatok

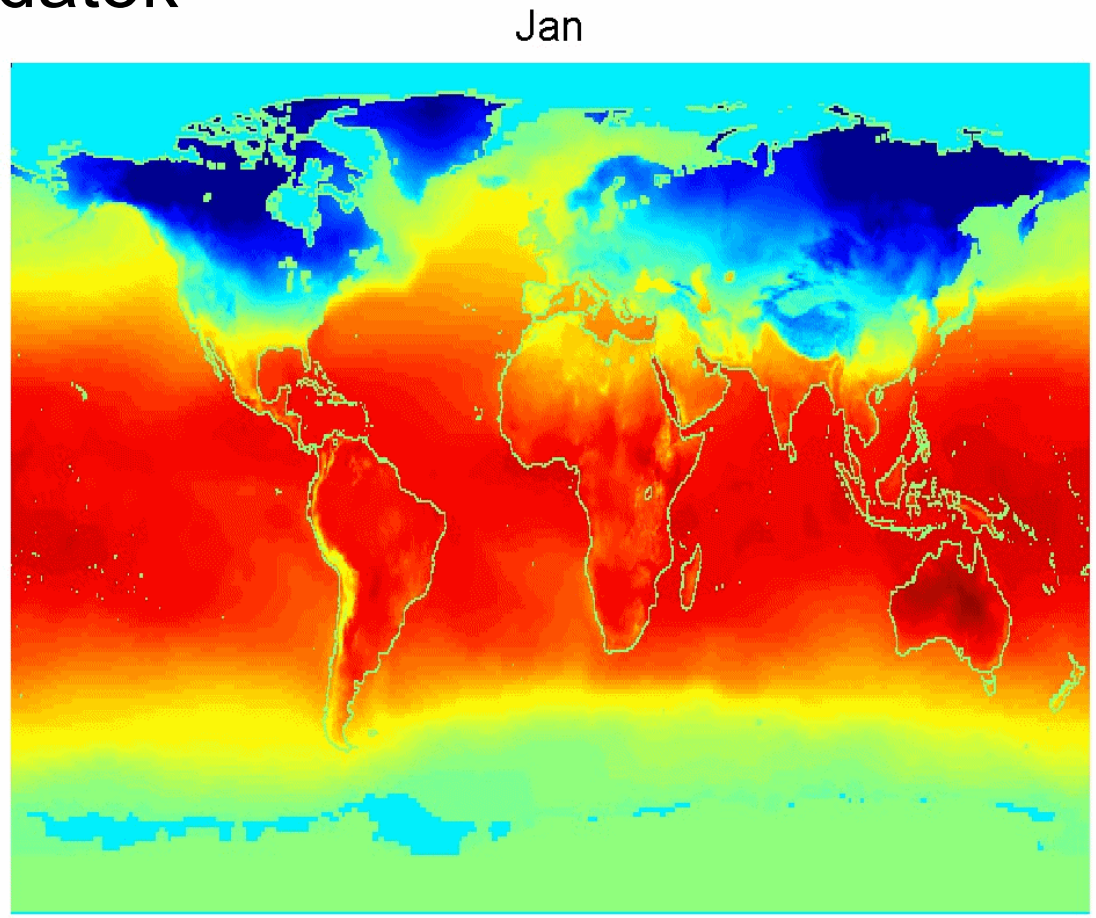
- Génszekvenciák

```
GGTTCCGCCTTCAGCCCCGCGCC
CGCAGGGCCCGCCCCGCGCCGTC
GAGAAGGGCCCGCCTGGCGGGCG
GGGGGAGGCGGGGCCGCCCGAGC
CCAACCGAGTCCGACCAGGTGCC
CCCTCTGCTCGGCCTAGACCTGA
GCTCATTAGGCGGCAGCGGACAG
GCCAAGTAGAACACGCGAAGCGC
TGGGCTGCCTGCTGCGACCAGGG
```

Rendezett adatok

- Tér és időbeli adatok

A földrészek és óceánok átlagos havi középhőmérséklete



Adatminőség

- Milyen adatminőségi problémák léphetnek fel?
- Hogyan ismerhetjük fel ezeket a problémákat az adatainkon?
- Hogyan kezelhetjük ezeket a problémákat?

- Példák adatminőségi problémákra:
  - zaj (hiba) és kiugró adatok
  - hiányzó adatok
  - duplikált adatok

Adatminőség

- Példák adatminőségi problémákra:
  - zaj (hiba) és kiugró adatok
  - hiányzó adatok
  - duplikált adatok

Tid	Refund	Marital Status	Taxable Income	Cheat
1	Yes	Single	125K	No
2	No	Married	100K	No
3	No	Single	70K	No
4	Yes	Married	120K	No
5	No	Divorced	10000K	Yes
6	No	NULL	60K	No
7	Yes	Divorced	220K	NULL
8	No	Single	85K	Yes
9	No	Married	90K	No
9	No	Single	90K	No

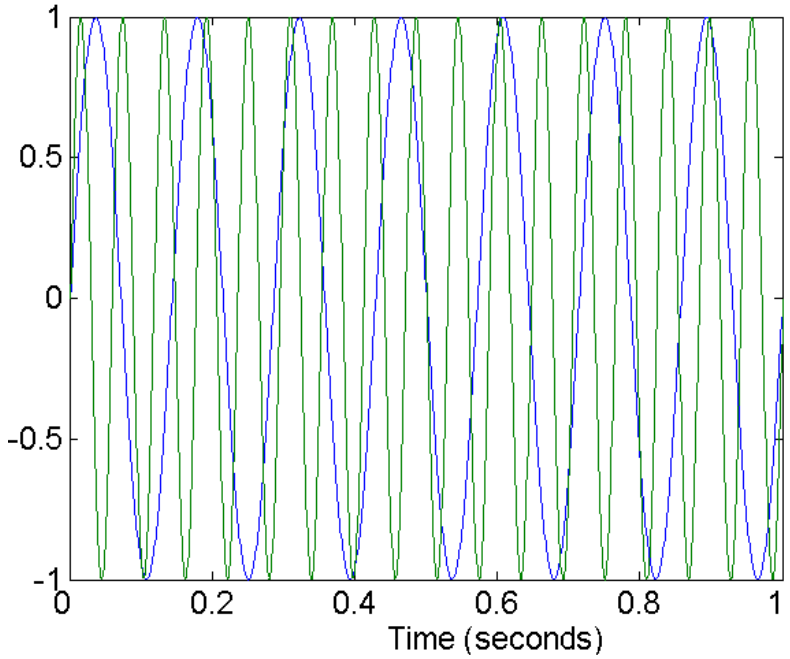
Hiba vagy milliomos?

Hiányzó érték (NULL)

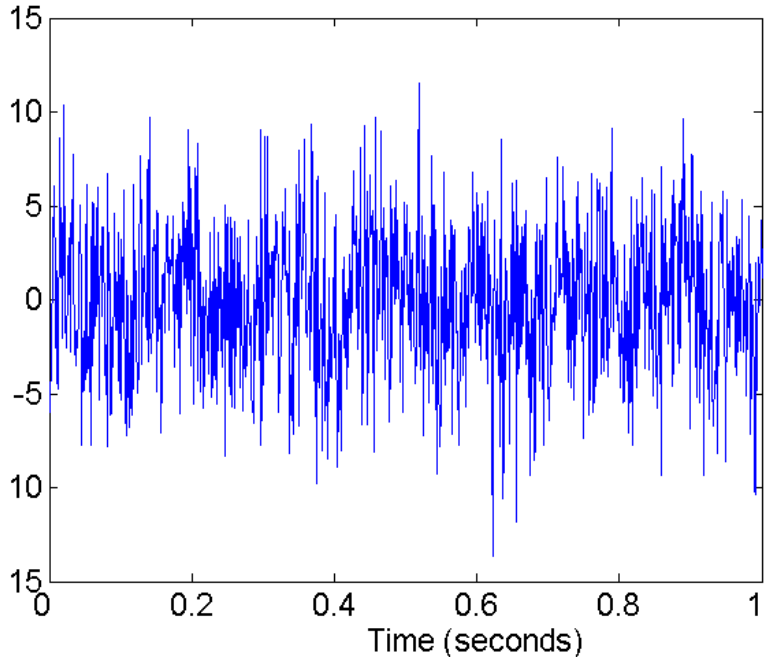
Inkonzisztens duplikátumok

Zajos adatok

- Zaj alatt az eredeti (igazi) érték módosulását értjük
  - Példák: az emberi hang torzulása ha rossz telefonon beszélünk, szemcsésedés a képernyőn.



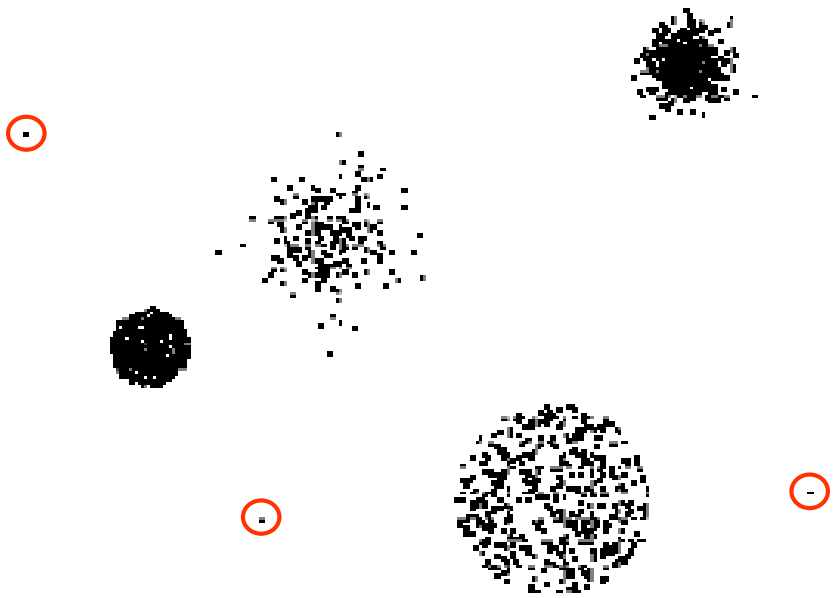
Két szinusz hullám



Két szinusz hullám + Zaj

Kiugró adatok

- A kiugró adatok olyan objektumok adatai, amelynek jellemzői jelentősen eltérnek az adatállományban lévő más objektumok adataitól.



Hiányzó adatok

- Hiányzó adatok okai:
- Az információt nem gyűjtöttük össze (pl. az emberek visszautasították a koruk és súlyuk megadását).
  - Egyes attribútumok nem alkalmazhatóak minden esetben (pl. a gyerekeknek nincs jövedelme).
- Hiányzó adatok kezelése:
  - Objektumok (rekordok) törlése.
  - Hiányzó adatok becslése.
  - A hiányzó értékek figyelmen kívül hagyása az elemzésnél.
  - Helyettesítés az összes lehetséges értékkel (a valószínűségek alapján).

Duplikált adatok

- Az adatállomány tartalmazhat olyan rekordokat, amelyek más rekordok pontos ill. kevésbé pontos ismétlődései.
  - Főként akkor merül fel ha heterogén forrásokból egyesítjük az adatokat.
- Példa:
  - Ugyanaz az ember többféle e-mail vagy lakcímmel.
- Adattisztítás
  - Az a folyamat, mely során az ismétlődő adatokat kezeljük.

Adatok előfeldolgozása

- Aggregálás
- Mintavétel
- Dimenzió csökkentés
- Jellemzők (features) részhalmazainak szelekciója
- Új jellemzők, attribútumok létrehozása
- Diszkretizáció és binarizálás
- Attribútum transzformáció

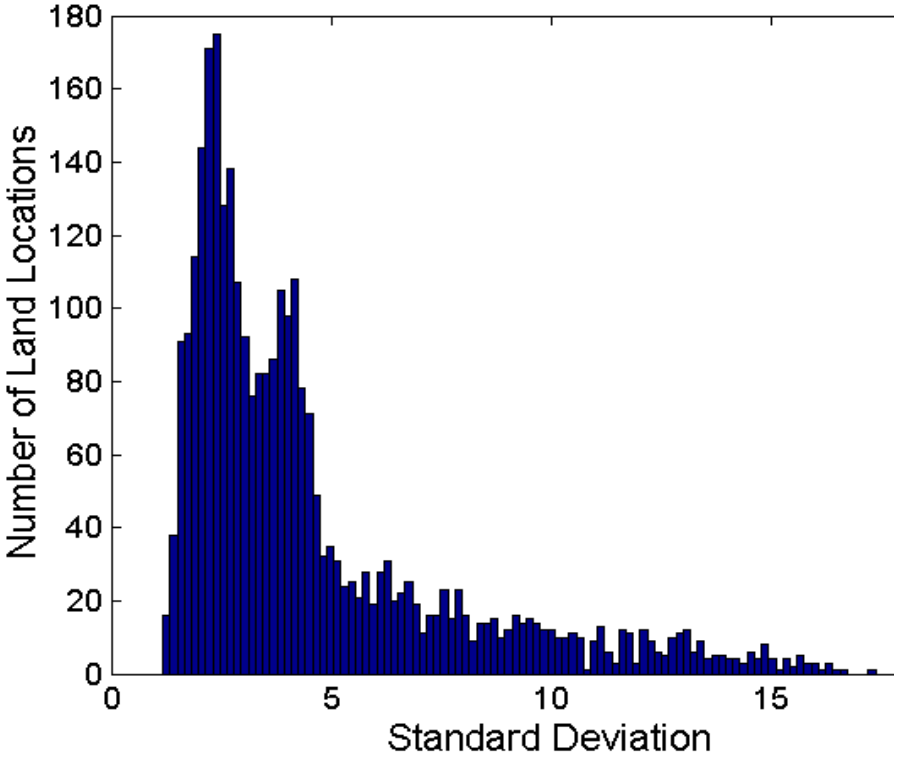
Aggregálás

- Kettő vagy több attribútum (objektum) kombinálása egy attribútummá (objektummá).

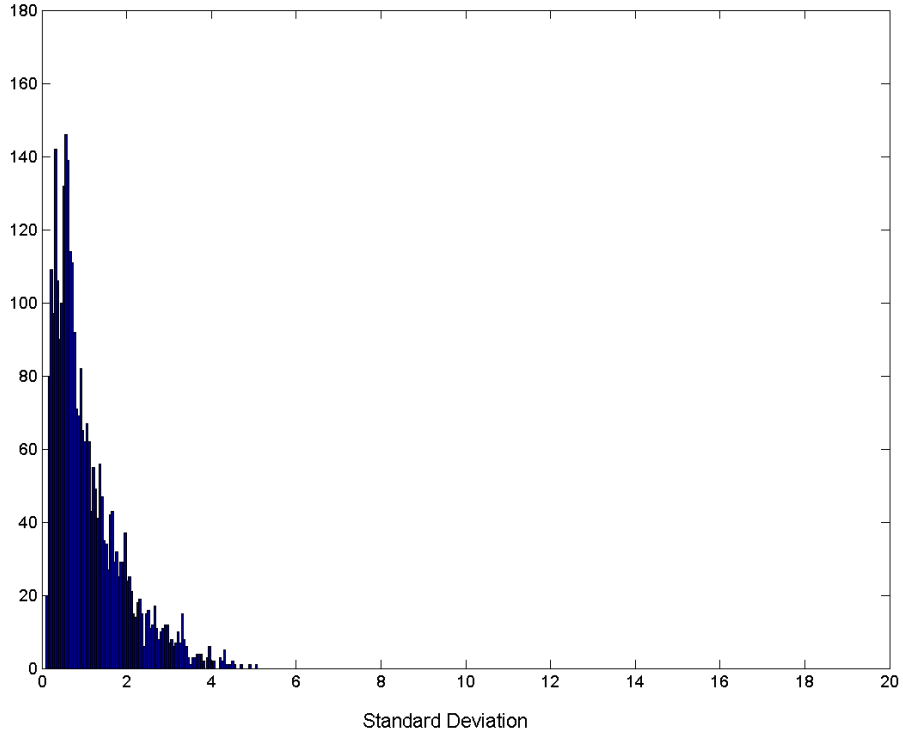
- Cél:
  - Adatcsökkentés
    - Csökkentsük az attribútumok vagy az objektumok számát.
  - A skála megváltoztatása
    - A városokat régiókba, megyékbe, országokba fogjuk össze.
  - Az adatok stabilitásának növelése
    - Az aggregált adatok ingadozása csökken (simítás).

Aggregálás

A csapadék szórása Ausztráliában



Havi átlagos csapadék szórása



Évi átlagos csapadék szórása

Mintavétel

- Az adatszelekció fő módszere
  - Egyaránt használatos az adatok előzetes vizsgálatánál és a végső adatelemzésnél.
- A statisztikusok azért használnak mintavételezést mivel a teljes populáció megfigyelése túl drága vagy túl időigényes.
- Az adatbányászok azért használnak mintavételezést mivel a teljes adatállomány (adattárház) feldolgozása túl drága vagy túl időigényes.

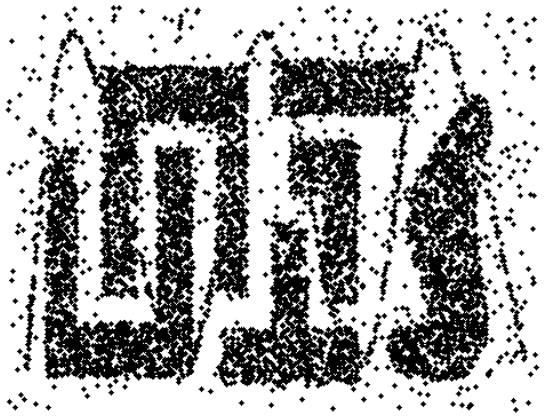
Mintavétel

- A hatékony mintavétel alapelve:
  - A mintával ugyanolyan jól tudunk dolgozni mint a teljes adatállománnyal, amennyiben a minta reprezentatív.
  - A minta akkor reprezentatív ha a számunkra fontos tulajdonságok szempontjából ugyanúgy viselkedik mint a teljes adatállomány.

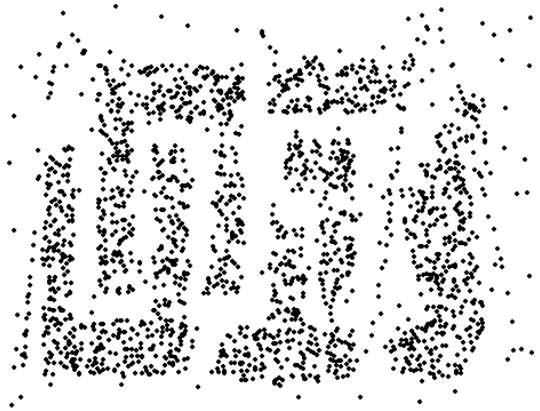
Mintavételi módok

- Egyszerű véletlen minta
  - Ugyanakkora valószínűséggel választunk ki minden objektumot.
- Visszatevés nélküli mintavétel
  - Ha egy objektumot már kiválasztottunk, akkor azt töröljük az adatállományból.
- Visszatevéses mintavétel
  - Az objektumot nem töröljük az adatállományból akkor sem ha a mintavétel kiválasztotta.
    - Ekkor egy objektumot többször is kiválaszthatunk.
- Rétegzett mintavétel
  - Osszuk fel az adatállományt részekre, majd vegyünk véletlen mintákat minden részből.

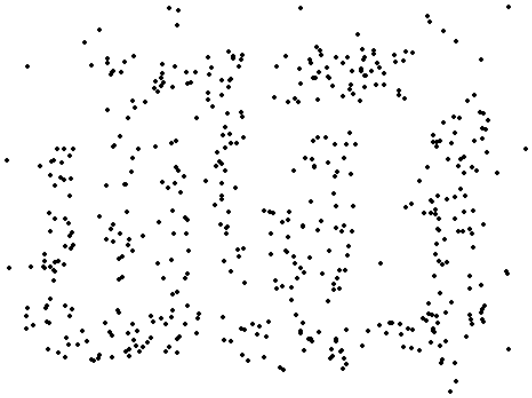
Mintanagyság



8000 pont



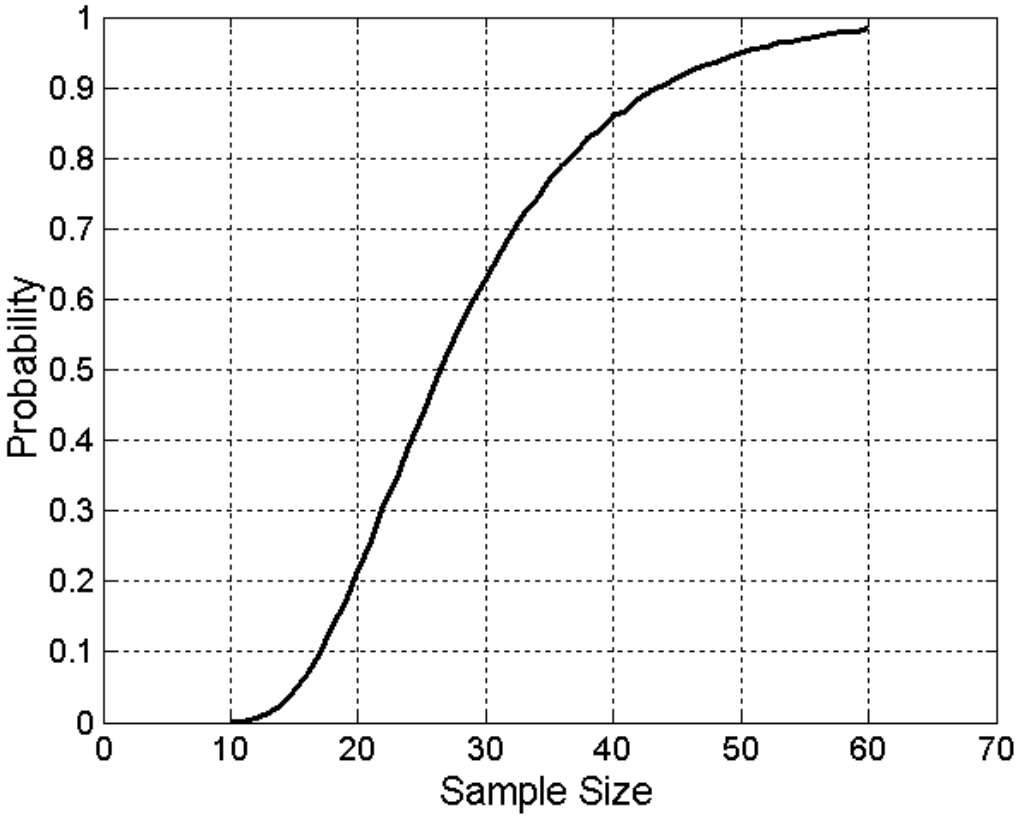
2000 pont



500 pont

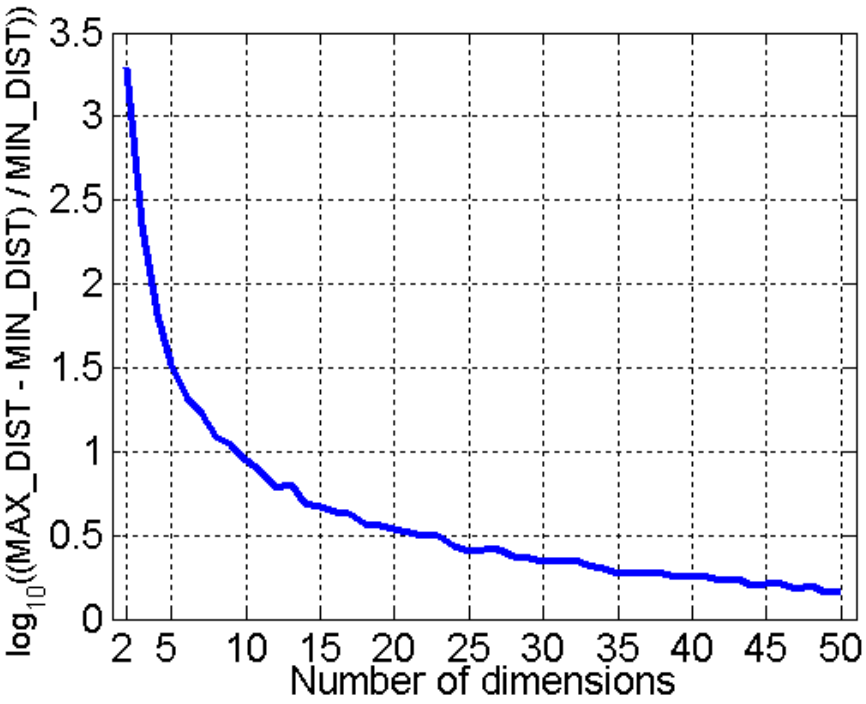
Mintanagyság

- Mekkora mintanagyság szükséges, hogy 10 csoport mindegyikéből kiválasszunk legalább egy objektumot?



Dimenzió probléma

- Amikor a dimenzió nő a rekordok (pontok) egyre ritkábbak lesznek a térben, ahol elhelyezkednek.
- A rekordok (pontok) közötti távolság és sűrűség, melyek alapvetőek csoportosításnál és kiugró adatok meghatározásánál, fontossága csökken.



- **Generáljunk 500 véletlen pontot**
- **Számítsuk ki az összes pontpár közötti távolság maximuma és minimuma különbségét**

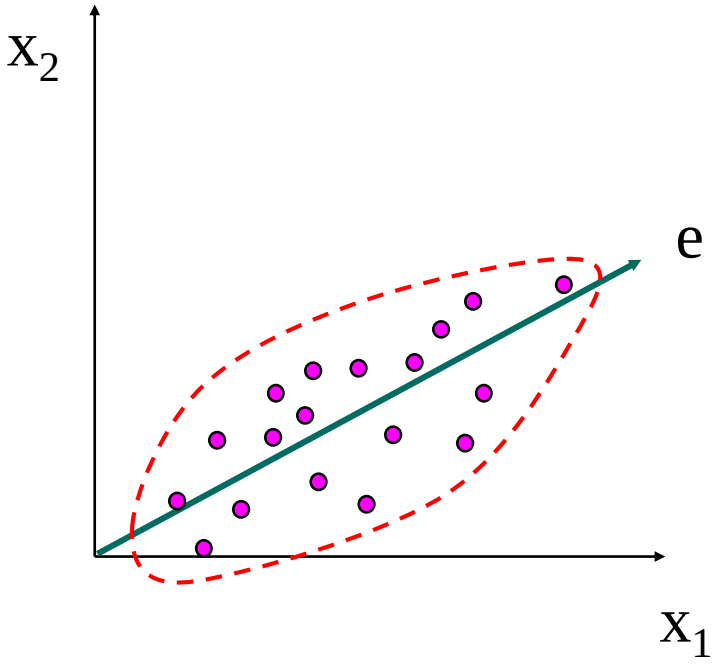
Dimenzió csökkentés

- Cél:
  - Elkerülni a dimenzió problémát.
  - Csökkenteni az adatbányászati algoritmusokhoz. szükséges időt és memóriát.
  - Segíteni az adatok könnyebb megjelenítését.
  - Segíteni a hiba csökkentését és a lényegtelen jellemzők meghatározását majd elhagyását.

- Módszerek
  - Főkomponens analízis (PCA)
  - Szinguláris felbontás (SVD)
  - Egyéb felügyelt és nemlineáris módszerek, pl. többdimenziós skálázás (MDS)

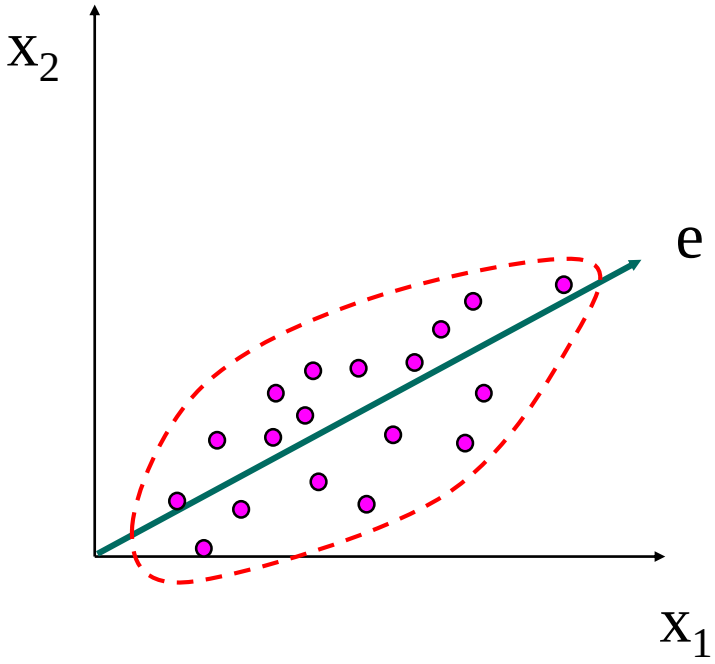
Dimenzió csökkentés: PCA

- Célja olyan vetítés (projekció) meghatározása, amely leginkább megőrzi az adatokban lévő variációt, sokszínűséget.



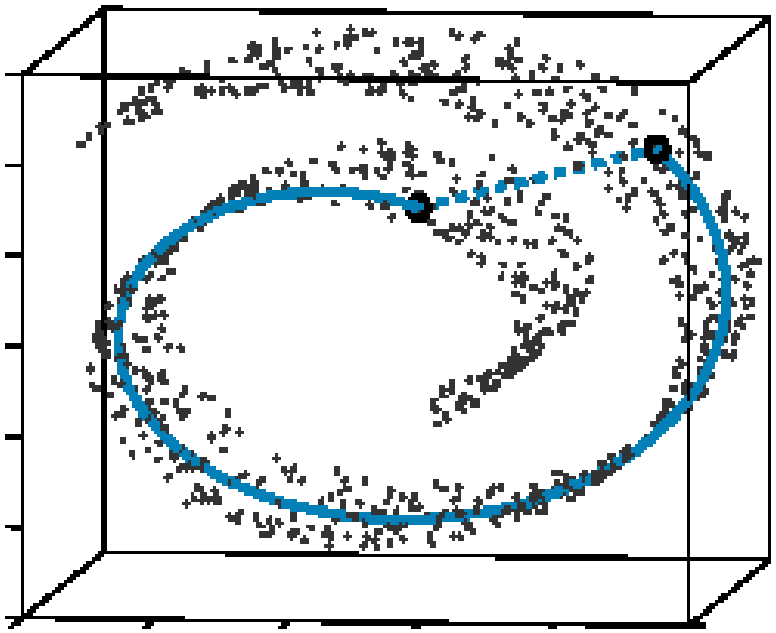
Dimenzió csökkentés: PCA

- Határozzuk meg a kovariancia mátrix sajátvektorait.
- Az új teret (koordinátatengelyeit) ezek a sajátvektorok határozzák meg.



Dimenzió csökkentés: ISOMAP

Tenenbaum, de Silva, Langford (2000) Science



- Állítsuk elő a szomszédsági gráfot.
- A gráf minden pontpárára számoljuk ki a legrövidebb út hosszát – geodetikus távolság.
- Erre a távolság mátrixra alkalmazzuk az MDSt.

Dimenzió csökkentés: PCA

Dimensions = 206

Jellemzők részhalmazainak szelekciója

- A dimenzió csökkentés egy másik útja.
- Felesleges jellemzők
  - Egy vagy több attribútum által hordozott információt részben vagy teljesen megismétel.
  - Példa: egy termék vételára és az utána fizetendő adó.
- Lényegtelen jellemzők
  - Nem tartalmaznak az aktuális adatbányászati feladat számára hasznos információt.
  - Példa: a hallgató NEPTUN kódja többnyire nem befolyásolja a tanulmányi eredményt.

Jellemzők részhalmazainak szelekciója

- Módszerek:
  - Nyers erő (brute force) megközelítés
    - Próbáljuk ki a jellemzők összes részhalmazát az adatbányászati algoritmus inputjaként.
  - Beágyazott megközelítés
    - A jellemzők szelekciója az adatbányászati feladat szerves részét alkotja.
  - Szűrő megközelítés
    - A jellemzőket az adatbányászati algoritmus futása előtt szelektáljuk.
  - Borító (wrapper) megközelítés
    - Az adatbányászati algoritmust fekete dobozként használjuk a legjobb attribútum részhalmaz megtalálására.

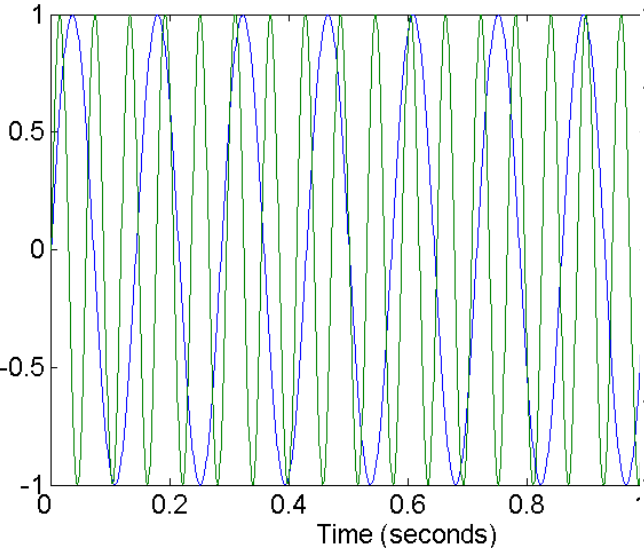
Új jellemzők (attribútumok) létrehozása

- Olyan új attribútumok létrehozása, amelyek az adatállományban lévő lényeges információkat használhatóbb formában tartalmazzák mint az eredeti attribútumok.

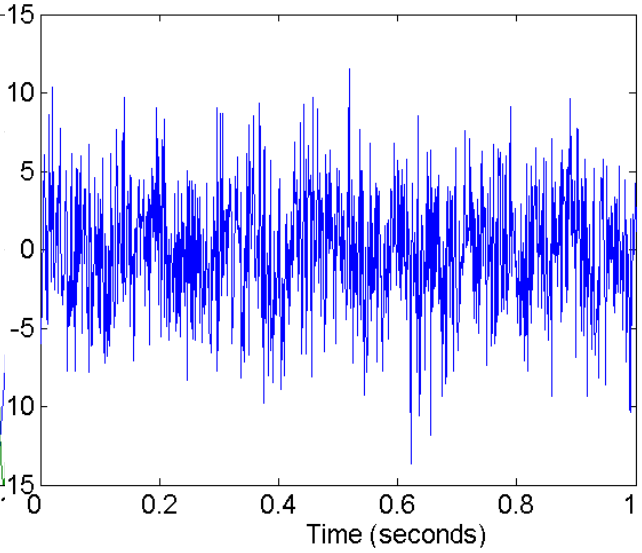
- Három általános módszer
  - Jellemző kinyerés (feature extraction)
    - terület függő (pl. képfeldolgozás, földrajz)
  - Új térre való leképezés
  - Jellemző szerkesztés
    - jellemzők kombinálása

Új térre való leképezés

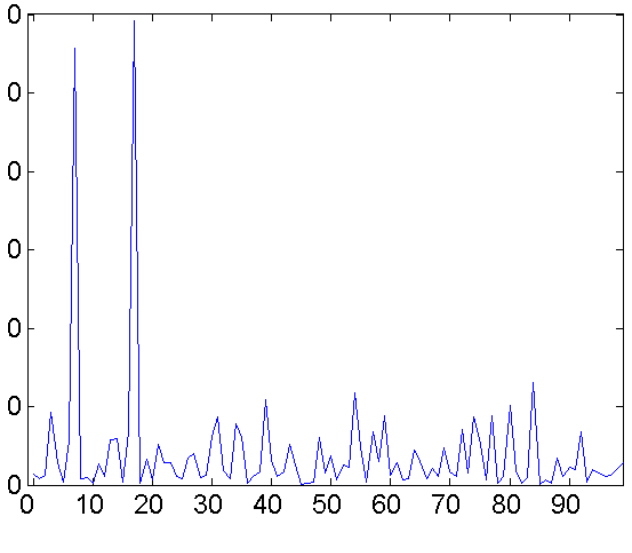
- Fourier transzformáció
- Wavelet (hullám) transzformáció



Két szinusz hullám



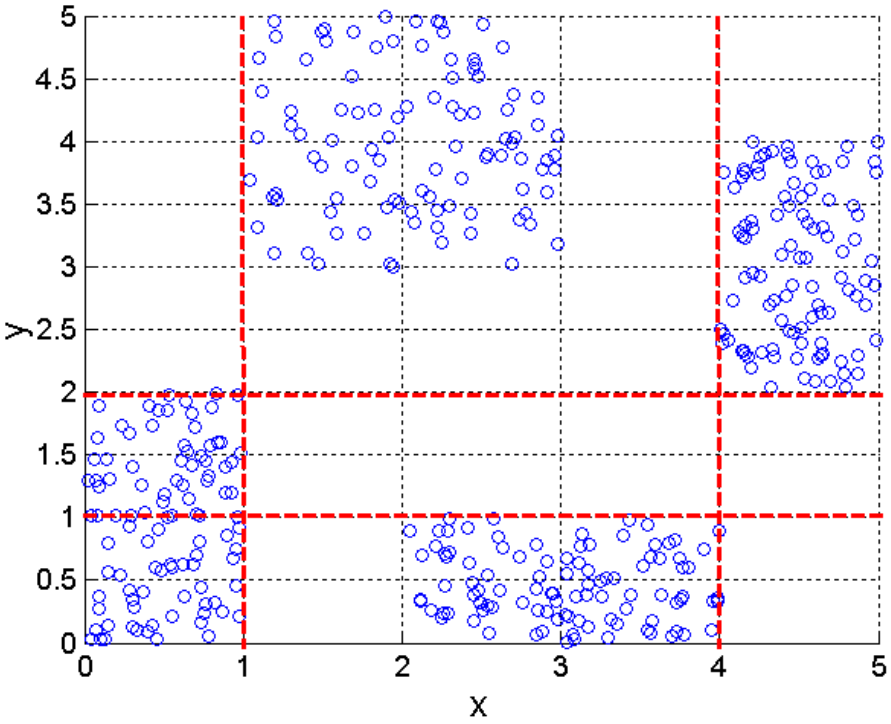
Két szinusz hullám + Zaj



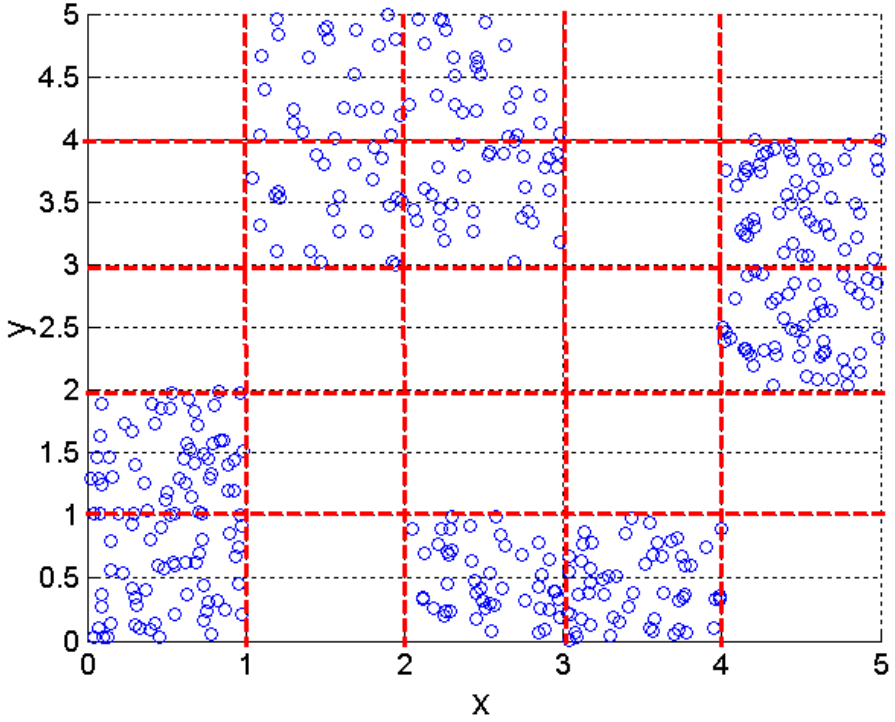
Frekvencia

Felügyelt diszkretizálás

- **Entrópia alapú megközelítés**

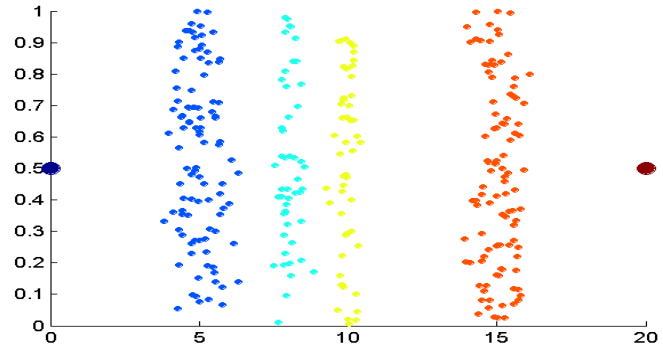


3 osztály x és y mentén

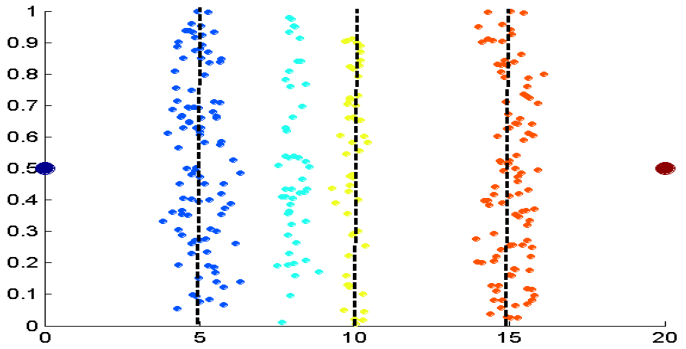


5 osztály x és y mentén

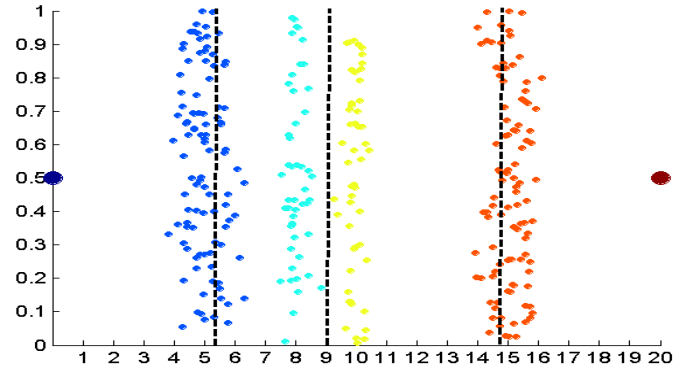
Nem-felügyelt diszkretizálás



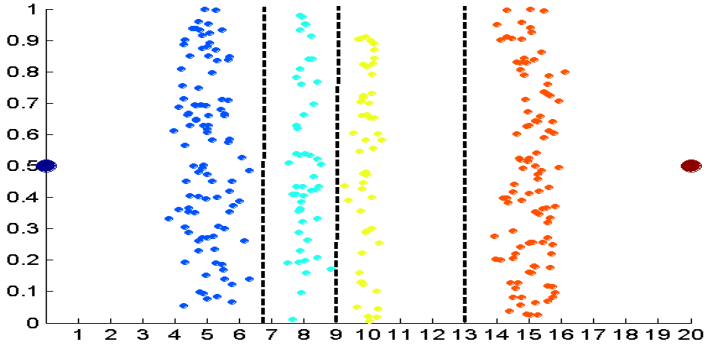
Adatok



Egyenlő szélességű intervallumok



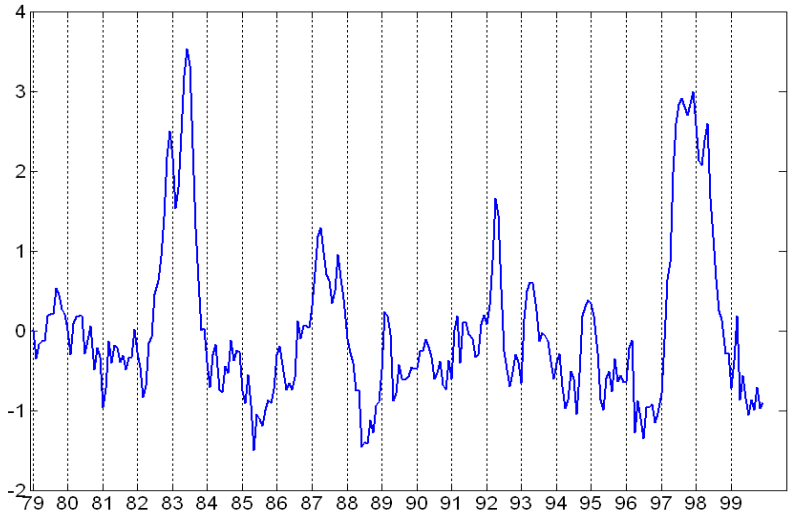
Egyenlő gyakoriságok



K-közép módszer

Attribútumok transzformációja

- Olyan függvény, amely adott attribútum értékeinek halmazát képezi le helyettesítő értékek egy új halmazára úgy, hogy minden régi érték egy új értékkel azonosítható.
  - Elemi függvények: x^k, log(x), e^x, |x|
  - Standardizálás és normalizálás



Hasonlóság és távolság

- Hasonlóság
  - Két objektum (rekord) hasonlóságát méri.
  - Minél nagyobb az értéke annál nagyobb a hasonlóság.
  - Általában a [0,1] intervallumban veszi fel az értékeit.
- Távolság
  - Két objektum (rekord) különbözőségét méri.
  - Minél kisebb annál nagyobb a hasonlóság.
  - A minimális távolság általában 0.
  - A felső korlát változó.
- A szomszédság fogalma egyaránt utalhat hasonlóságra és távolságra.

Hasonlóság/távolság egyszerű attribútumnál

p és *q* jelöli két objektum attribútum értékét.

Attribute Type	Dissimilarity	Similarity
Nominal	$d = \begin{cases} 0 & \text{if } p = q \\ 1 & \text{if } p \neq q \end{cases}$	$s = \begin{cases} 1 & \text{if } p = q \\ 0 & \text{if } p \neq q \end{cases}$
Ordinal	$d = \frac{\lvert p-q \rvert}{n-1}$ (values mapped to integers 0 to $n-1$, where n is the number of values)	$s = 1 - \frac{\lvert p-q \rvert}{n-1}$
Interval or Ratio	$d = \lvert p - q \rvert$	$s = -d$, $s = \frac{1}{1+d}$ or $s = 1 - \frac{d - min\_d}{max\_d - min\_d}$

Table 5.1. Similarity and dissimilarity for simple attributes

Euklideszi távolság

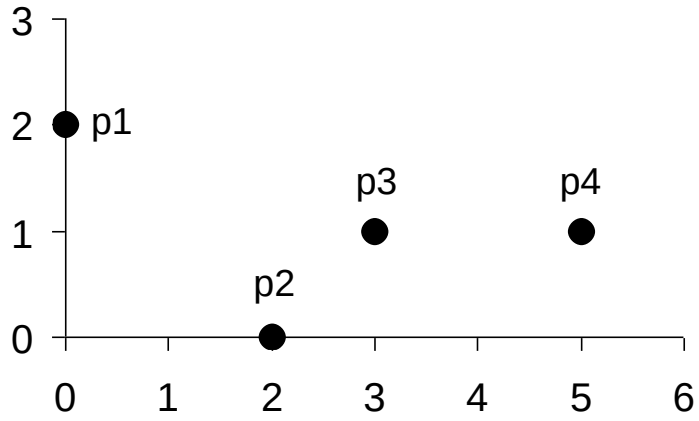
- Euklideszi távolság:

$$dist(p,q) = \sqrt{\sum_{k=1}^{n}(p_k - q_k)^2}$$

A képletben n jelöli a dimenziót (attribútumok száma), p_k és q_k pedig a k-adik attribútum értéke (koordinátája) a p és q objektumoknak (rekordoknak).

- Ha a skálák különbözőek, akkor előbb standardizálni kell.

Euklideszi távolság



pont	x	y
p1	0	2
p2	2	0
p3	3	1
p4	5	1

	p1	p2	p3	p4
p1	0	2.828	3.162	5.099
p2	2.828	0	1.414	3.162
p3	3.162	1.414	0	2
p4	5.099	3.162	2	0

Távolság mátrix

Minkowski távolság

- Az euklideszi távolság általánosítása

$$dist(p,q) = \left(\sum_{k=1}^{n} | p_k - q_k |^r\right)^{\frac{1}{r}}$$

A képletben r paraméter, n a dimenzió (attribútumok száma) p_k és q_k pedig a k-adik attribútum értéke (koordinátája) a p és q objektumoknak (rekordoknak).

Példák Minkowski távolságra

- $r = 1$: háztömb (Manhattan, taxi, L_1 norma) távolság.
  - Egy ismert példa az ún. Hamming távolság, amely éppen a különböző bitek száma két bináris vektorban.
- $r = 2$: euklideszi távolság
- $r \to \infty$: „szupremum” (L_{max} norma, L_∞ norma) távolság.
  - Két vektor koordinátái közötti különbségek abszolút értékének maximuma.
- Ne tévesszük össze *r* és *n* szerepét, ezek a távolságok minden dimenzió, azaz *n* mellett értelmezhetőek.

Minkowski távolság

point	x	y
p1	0	2
p2	2	0
p3	3	1
p4	5	1

L1	p1	p2	p3	p4
p1	0	4	4	6
p2	4	0	2	4
p3	4	2	0	2
p4	6	4	2	0

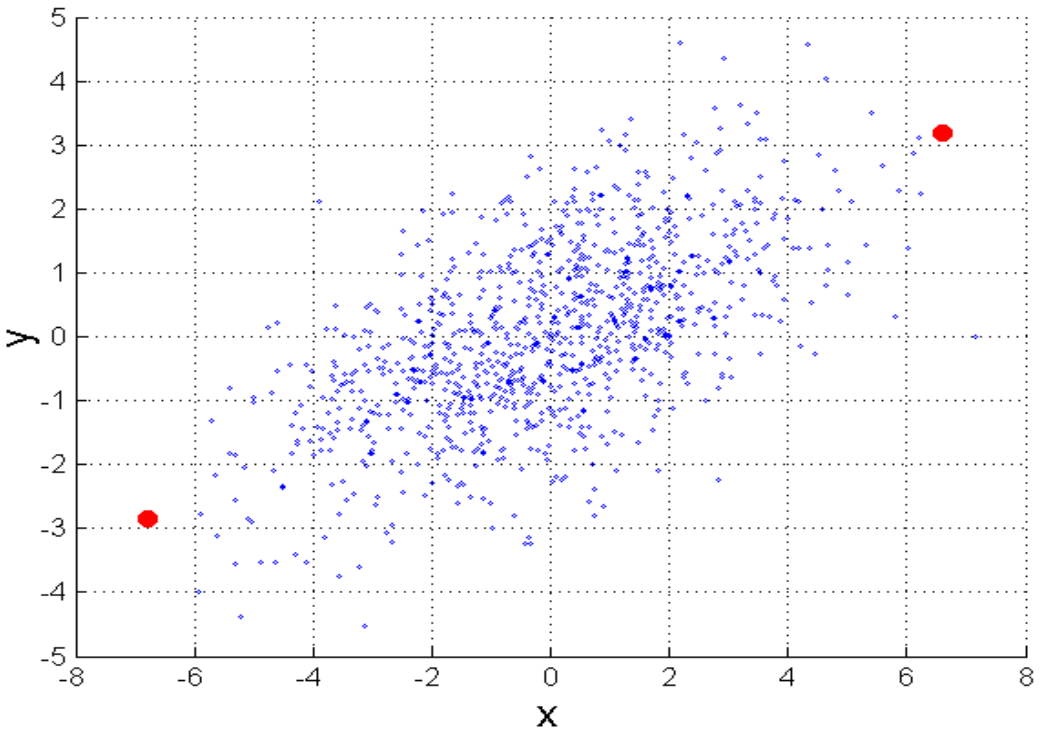
L2	p1	p2	p3	p4
p1	0	2.828	3.162	5.099
p2	2.828	0	1.414	3.162
p3	3.162	1.414	0	2
p4	5.099	3.162	2	0

L_∞	p1	p2	p3	p4
p1	0	2	3	5
p2	2	0	1	3
p3	3	1	0	2
p4	5	3	2	0

Távolság mátrix

Mahalanobis távolság

$$mahalanobis(p,q) = (p-q)\Sigma^{-1}(p-q)^T$$

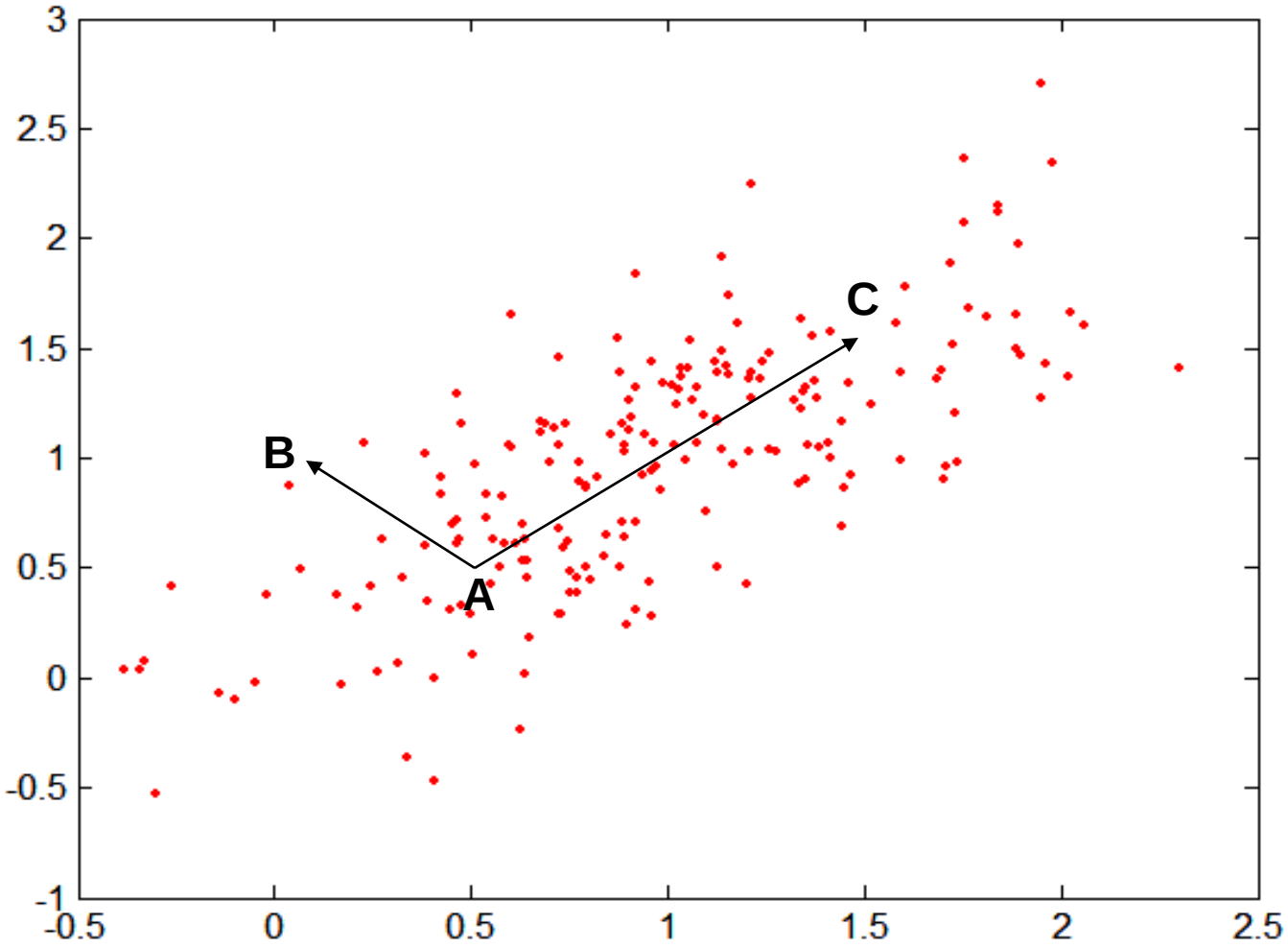


Σ az *X* input adatok kovariancia mátrixa

$$\Sigma_{j,k} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(X_{ij} - \overline{X}_j)(X_{ik} - \overline{X}_k)$$

A vörös pontok euklideszi távolsága 14.7, míg a Mahalanobis távolságuk 6.

Mahalanobis távolság



Kovariancia mátrix:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 0.3 & 0.2 \\ 0.2 & 0.3 \end{bmatrix}$$

A: (0.5, 0.5)

B: (0, 1)

C: (1.5, 1.5)

Mahal(A,B) = 5

Mahal(A,C) = 4

A távolság általános jellemzői

- A különböző távolság fogalmak, pl. euklideszi, néhány jól ismert jellemzővel bír.

  1. $d(p, q) \geq 0$ minden p és q esetén, továbbá $d(p, q) = 0$ akkor és csak akkor ha $p = q$ (nemnegativitás),
  2. $d(p, q) = d(q, p)$ minden p és q esetén (szimmetria),
  3. $d(p, r) \leq d(p, q) + d(q, r)$ minden p, q, és r pontra (háromszög egyenlőtlenség),

  ahol $d(p, q)$ a p és q pontok (objektumok) közötti távolságot jelöli.

- Az olyan távolságot, amely eleget tesz a fenti tulajdonságoknak metrikának nevezzük.

A hasonlóság általános jellemzői

- A hasonlóságoknak szintén van néhány jól ismert tulajdonsága.

1. $s(p, q) = 1$ (vagy a maximális hasonlóság) akkor és csak akkor ha $p = q$,

2. $s(p, q) = s(q, p)$ minden p és q esetén (szimmetria),

ahol $s(p, q)$ jelöli a p és q pontok (objektumok) közötti hasonlóságot.

Bináris vektorok hasonlósága

- Gyakran előfordul, hogy objektumoknak, *p* és *q*, csak bináris attribútumai vannak.
- Hasonlóságokat a következő mennyiségek révén definiálhatunk:

  M_{01} = azon attribútumok száma, ahol p=0 és q=1,

  M_{10} = azon attribútumok száma, ahol p=1 és q=0,

  M_{00} = azon attribútumok száma, ahol p=0 és q=0,

  M_{11} = azon attribútumok száma, ahol p=1 és q=1.

- Egyszerű egyezés és Jaccard együttható:

  SMC = egyezők száma / attribútumok száma

  $= (M_{11} + M_{00}) / (M_{01} + M_{10} + M_{11} + M_{00})$

  J = az 11 egyezések száma / a nem mindkettő 0 attribútumok száma

  $= (M_{11}) / (M_{01} + M_{10} + M_{11})$

Példa SMC és Jaccard hasonlóságra

p = 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0

q = 0 0 0 0 0 0 1 0 0 1

M_{01} = 2 (azon attribútumok száma, ahol p=0 és q=1)

M_{10} = 1 (azon attribútumok száma, ahol p=1 és q=0)

M_{00} = 7 (azon attribútumok száma, ahol p=0 és q=0)

M_{11} = 0 (azon attribútumok száma, ahol p=1 és q=1)

$SMC = (M_{11} + M_{00})/(M_{01} + M_{10} + M_{11} + M_{00}) = (0+7) / (2+1+0+7) = 0.7$

$J = (M_{11}) / (M_{01} + M_{10} + M_{11}) = 0 / (2 + 1 + 0) = 0$

Koszinusz hasonlóság

- Ha d_1 és d_2 két dokumentumot leíró vektor (nemnegatív egész koordinátájúak), akkor

$$\cos(d_1, d_2) = (d_1 \bullet d_2) / \|d_1\| \|d_2\| ,$$

ahol • jelöli a skaláris szorzatot || *d* || pedig a *d* vektor hossza.

- Példa:

d_1 = **3 2 0 5 0 0 0 2 0 0**

d_2 = **1 0 0 0 0 0 0 1 0 2**

$d_1 \bullet d_2 = 3*1 + 2*0 + 0*0 + 5*0 + 0*0 + 0*0 + 0*0 + 2*1 + 0*0 + 0*2 = 5$

$\|d_1\| = (3*3+2*2+0*0+5*5+0*0+0*0+0*0+2*2+0*0+0*0)^{0.5} = (42)^{0.5} = 6.481$

$\|d_2\| = (1*1+0*0+0*0+0*0+0*0+0*0+0*0+1*1+0*0+2*2)^{0.5} = (6)^{0.5} = 2.245$

$$\cos(d_1, d_2) = .3150$$

A Jaccard együttható általánosítása

- Tanimoto együttható
- A Jaccard együttható módosítása azért, hogy alkalmazható legyen folytonos illetve egész értékű attribútumokra.
  - Bináris attribútumok esetén a Jaccard együtthatót kapjuk vissza

$$T(p,q) = \frac{p \bullet q}{\|p\|^2 + \|q\|^2 - p \bullet q}$$

Korreláció

- Az objektumok vagy attribútumok közötti lineáris kapcsolat erősségét méri.
- Két objektum (attribútum), *p* és *q*, közötti korreláció kiszámításához először standardizáljuk őket, majd skaláris szorzatot veszünk

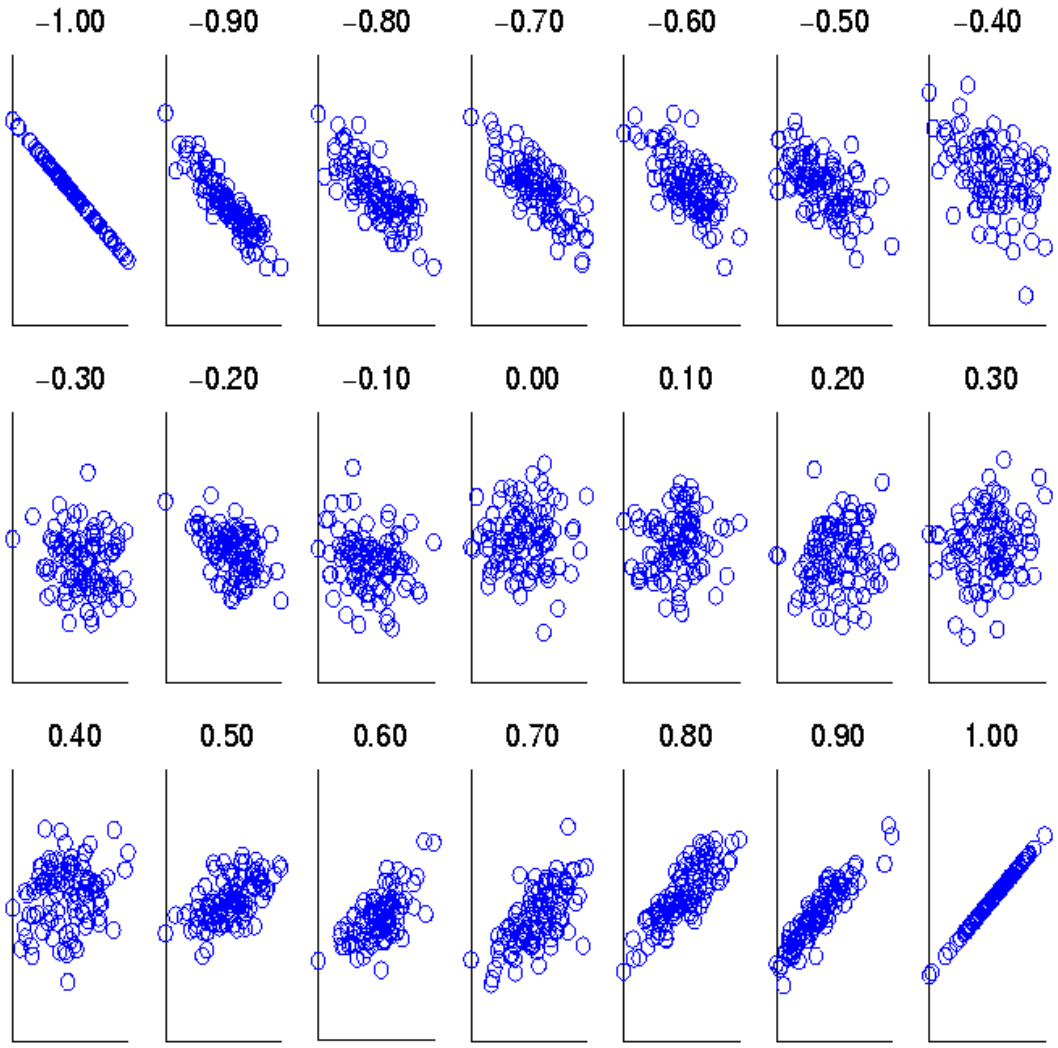
$$p'_k = (p_k - \overline{p}) / s(p)$$

$$q'_k = (q_k - \overline{q}) / s(q)$$

$$korreláció(p,q) = p' \bullet q'$$

ahol $\overline{p}$ az átlag, *s(p)* pedig a szórás.

A korreláció szemléltetése



A pontdiagramok szemléltetik a –1-től 1-ig terjedő hasonlóságot.

Hasonlóságok összekapcsolása

- Előfordul, hogy az attribútumok nagyon különböző típusúak viszont egy átfogó hasonlóságra van szükségünk.

1. For the k^{th} attribute, compute a similarity, s_k, in the range $[0, 1]$.
2. Define an indicator variable, δ_k, for the k_{th} attribute as follows:

$$\delta_k = \begin{cases} 0 & \text{if the } k^{th} \text{ attribute is a binary asymmetric attribute and both objects have a value of 0, or if one of the objects has a missing values for the } k^{th} \text{ attribute} \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

3. Compute the overall similarity between the two objects using the following formula:

$$similarity(p, q) = \frac{\sum_{k=1}^{n} \delta_k s_k}{\sum_{k=1}^{n} \delta_k}$$

Hasonlóságok összekapcsolása súlyokkal

- Nem mindig akarjuk az összes attribútumot ugyanúgy kezelni.
  - Használjunk w_k súlyokat, melyek 0 és 1 közé esnek úgy, hogy az összegük 1.

$$similarity(p,q) = \frac{\sum_{k=1}^{n} w_k \delta_k s_k}{\sum_{k=1}^{n} \delta_k}$$

$$distance(p,q) = \left(\sum_{k=1}^{n} w_k |p_k - q_k|^r \right)^{1/r}$$

Sűrűség

- A sűrűség alapú csoportosításhoz szükséges a sűrűség fogalmának tisztázása.

- Példák:
  - Euklideszi sűrűség
    - Euklideszi sűrűség = egységnyi térfogatba eső pontok száma
  - Valószínűségi sűrűség
  - Gráf alapú sűrűség

Cella alapú euklideszi sűrűség

- Osszuk egyenlő térfogatú téglalap alakú cellákra a tartományt és definiáljuk a sűrűséget úgy, mint amely arányos a cellákba eső pontok számával.

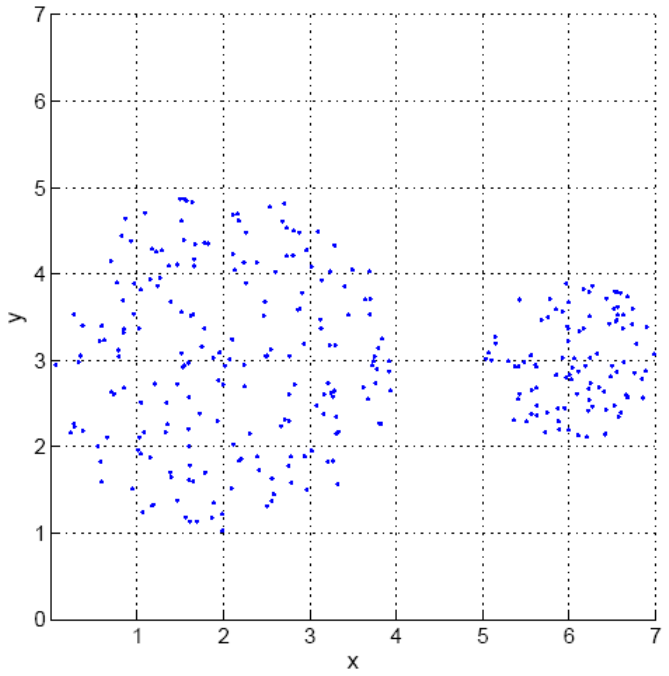


Figure 7.13. Cell-based density.

0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0
4	17	18	6	0	0	0
14	14	13	13	0	18	27
11	18	10	21	0	24	31
3	20	14	4	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0

Table 7.6. Point counts for each grid cell.

Középpont alapú euklideszi sűrűség

- A sűrűség egy pontban arányos a pont körüli adott sugarú környezetbe eső pontok számával.

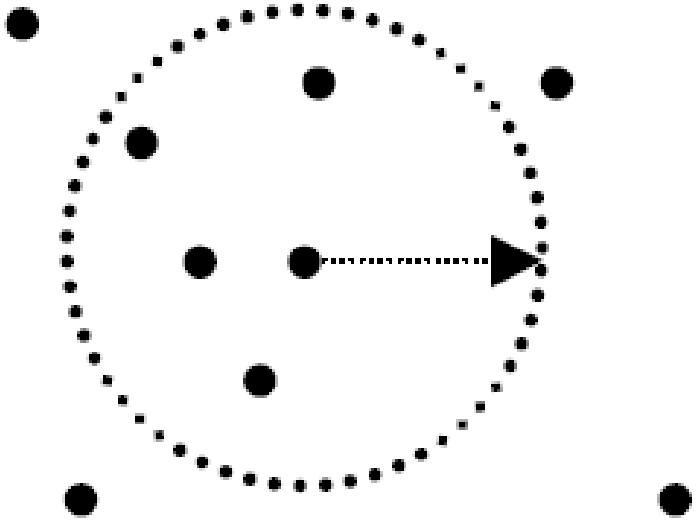


Figure 7.14. Illustration of center-based density.