Analisi di Raggruppamento

Gianluca Amato

Corso di Laurea Specialistica in Economia Informatica
Università “G. D'Annunzio” di Chieti-Pescara
anno accademico 2005-2006
ultimo aggiornamento: 12/05/06

Cosa è l'analisi di raggruppamento?

Cosa è la analisi di raggruppamento?

- Un gruppo (cluster) è una collezione di istanze tali che:
  - le istanze dello stesso cluster sono simili tra loro
    - alta somiglianza intra-classe
  - le istanze di cluster diversi sono dissimili
    - bassa somiglianza inter-classe
- Analisi di raggruppamento (cluster analysis)
  - il processo di raggruppamento delle istanze in cluster.
  - si tratta di apprendimento non supervisionato
    - le istanze di addestramento non hanno una classe nota a priori
  - la qualità di una analisi di raggruppamento dipenderà
    - dal parametro scelto per misurare la somiglianza inter e intra-classe
    - dall'algoritmo utilizzato per l'implementazione dell'analisi.

Applicazioni dell'analisi di raggruppamento

- Varie possibilità di utilizzo:
  - come analisi stand-alone,
  - come processo preliminare ad altre analisi di dati
    - ad esempio, assegnare una etichetta ad ognuno, e poi utilizzare un algoritmo di classificazione.
  - come componente integrato di algoritmi per altri tipi di analisi:
    - ad esempio le regole associative quantitative “basate sulla distanza” (che non abbiamo visto, ma che si basano su algortimi di raggruppamento)
  - nella fase di pre-elaborazione dati
    - eliminazione degli outlier
    - riduzione della numerosità

Esempi di analisi di raggruppamento

- Marketing. Aiuta gli esperti di marketing a individuare gruppi distinti tra i propri clienti, sulla base delle abitudini di acquisto (la cosiddetta analisi di segmentazione)
- Assicurazioni. Identifica gruppi di assicurati con notevoli richieste di rimborso.
- Studi sui terremoti. Gli epicentri dei terremoti dovrebbero essere agglomerati lungo le faglie continentali.
- Motori di ricerca. I risultati di un motore di ricerca possono essere sottoposti ad analisi di raggruppamento in modo da mettere in un unico gruppo le risposte tra loro simili
  - quindi presentare meno alternative all'utente

Distanza tra istanze

Strutture Dati

- Gli algoritmi di raggruppamento usano di solito rappresentare i dati in uno di questi due modi:
  - Matrice dati
    - x_{ij} = attributo *i* della istanza *j*
    - Tipica visione relazionale

$$\begin{pmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1f} & \cdots & x_{1p} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_{1p} & \cdots & \cdots & \cdots & x_{ip} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{nf} & \cdots & x_{np} \end{pmatrix}$$

  - Matrice delle distanze
    - *d(i,j)*=distanza tra l'istanza *i* e l'istanza *j*
    - *d(j,i)=d(i,j)* per cui si rappresenta solo metà matrice.

$$\begin{pmatrix} 0 & & & & \\ d(2,1) & 0 & & & \\ d(3,1) & d(3,2) & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ d(n,1) & d(n,2) & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

Distanze e tipi di dati

- *d(i,j)* misura la "dissimilarità" o "distanza" tra le istanze *i* e *j*.
- La definizione di *d* cambia molto a seconda del tipo di dato degli attributi
  - Intervallo
  - Nominali (e in particolare binari)
  - Ordinali
- ... e ovviamente si possono avere situazioni in cui attributi diversi hanno tipo diverso!

Dati di tipo intervallo e normalizzazione

- Il primo passo per definire una misura di distanza su dati di tipo intervallo, è normalizzare i dati.
- Quasi sempre, si vuole che i vari attributi pesino in maniera uguale.
  - Esempio : una serie di istanze che rappresentano città
    - Attributi: temperatura media (gradi centigradi) e popolazione (numero di abitanti)
    - Il range di valori della popolazione è molto più ampio, ma si vuole che questo attributi non conti proporzionalmente di più
- Ci sono vari modi per normalizzare i dati.

Normalizzazione (1)

- Zero-score normalization
  - Per ogni attributo f, calcolo la media m_f delle x_{if}

$$m_f = \frac{1}{n}(x_{1f} + x_{2f} + \cdots + x_{nf})$$

  - Calcolo lo scarto assoluto medio

$$s_f = \frac{1}{n}|x_{1f} - m_f| + |x_{2f} - m_f| + \cdots + |x_{nf} - m_f|$$

  - Ottengo il valore z_{if} normalizzato come

$$z_{if} = \frac{x_{if} - m_f}{s_f}$$

- In alternativa,
  - s_f = squarto quadratico medio
    - più sensibile ad outliers

Normalizzazione (2)

- Mix-man normalization

$$v_{if} = \frac{x_{if} - min_i\, x_{if}}{max_f\, x_{if} - min_f\, x_{if}}$$

  - ancora più sensibile ad outliers
- Si vuole sempre normalizzare?
  - non sempre..
  - ...e anche quando si vuole normalizzare, può essere desiderabile dare a un attributo peso maggiore che a un altro.

Distanza su dati di tipo intervallo

- Distanza di Manhattan

$$d_m(i,j) = |x_{i1} - x_{j1}| + |x_{i2} - x_{j2}| + \cdots + |x_{ip} - x_{jp}|$$

- Distanza euclidea

$$d_e(i,j) = \sqrt{(x_{i1} - x_{j1})^2 + (x_{i2} - x_{j2})^2 + \cdots + (x_{ip} - x_{jp})^2}$$

- Comunque si definisca una distanze, è bene che abbia alcune proprietà generali:
  - $d(i,j) \geq 0$
  - $d(i,i) = 0$
  - $d(i,j) = d(j,i)$ (simmetria)
  - $d(i,j) \leq d(i,k) + d(k,j)$ (disuguaglianza triangolare)

Distanza su dati di tipo binario (1)

- Per calcolare la distanza tra l'istanza i e j, sia data la seguente tabella di contingenza
  - In riga *h*, colonna *k* sta il numero di attributi per cui l'istanza *i* ha valore *h* e l'istanza *j* ha valore *k*

		Object *j*	
		1	0
Object *i*	1	*a*	*b*
	0	*c*	*d*

Distanza su dati di tipo binario (2)

- Attributi simmetrici
  - quando valori positivi e negativi contano allo stesso modo
- Attributi asimmetrici
  - quando valori positivi sono più importanti di valori negativi
  - ad esempio il risultato di un test su una malattia
- Indice di Russel-Sao (simple matching coefficient) per attributi simmetrici

$$d(i,j)=\frac{b+c}{a+b+c+d}$$

- Indice di Jaccard per attributi asimmetrici

$$d(i,j)=\frac{b+c}{a+b+c}$$

Distanza su dati di tipo binario (3)

- Esempio

Name	Gender	Fever	Cough	Test-1	Test-2	Test-3	Test-4
Jack	M	Y	N	P	N	N	N
Mary	F	Y	N	P	N	P	N
Jim	M	Y	P	N	N	N	N

- Gender è un attributo simmetrico, gli altri sono asimmetrici.
- Supponiamo di calcolare la distanza solo sulla base degli attributi asimmetrici
  - Se Y e P equivalgono a 1 e N equivale a 0, abbiamo

$$d(jack, mary) = \frac{0+1}{2+0+1} = 0.33$$

$$d(jack, jim) = \frac{1+1}{1+1+1} = 0.67$$

$$d(jim, mary) = \frac{1+2}{1+1+2} = 0.75$$

Distanza su dati di tipo nominale

- Una semplice estensione del caso binario
  - l'attributo può assumere più di due valori.
- Metodo 1: matching semplice
  - m: numero di attributi che corrispondono
  - p: numero totale di attributi
  - distanza: $d(i, j) = \frac{p - m}{p}$
- Metodo 2 : trasformazione in attributi binari
  - Si trasforma una variabile nominale con N valori possibili in una serie di N variabili binarie asimmetriche.
  - La variabili binaria numero *i* è a 1 se la variabile nominale corrispondente assume il valore *i*, altrimenti è a 0.

Distanza su dati di tipo ordinale

- Una variabile nominale in cui è presente un ordine tra i valori
- Può essere trattata come un variabile di tipo intervallo
  - Si rimpiazza x_{if} con la sua posizione posizione r_{if} nella relazione di ordinamento.
    - I possibili valori di r_{if} vanno da 1 a M_f, il numero di possibili valori di x_{if}.
  - Si normalizza r_{if} con il metodo min-max ottenendo

$$z_{if} = \frac{r_{if} - 1}{M_f - 1}$$

  - Si calcola la distanza con i metodi visti per gli attributi di tipo intervallo.

Distanza su valori di tipo misto

- In generale una istanza può contenere valori di vario tipo.
- La dissimilarità tra due istanze è allora ottenuta combinando i metodi visti prima
  - Non esiste un metodo che vada sempre bene per effettuare la combinazione
  - In generale, non appena si ha più di un attributo ci sono varie possibili scelte, riguardanti il peso che ogni attributo può avere nel calcolo complessivo della dissimilarità
  - Il tutto è fondamentalmente un processo soggettivo.

Classificazione degli algoritmi di raggruppamento

Principali approcci al clustering (1)

- Algoritmi di partizionamento: dati un insieme di n istanze e un numero k, divide le istanze in k partizioni.
  - Usa tecniche di rilocazione iterativa per spostare le istanze da una partizione all'altra allo scopo di migliorare la qualità dei cluster.
- Algoritmi gerarchici: crea una decomposizione gerarchica dell'insieme di tutte le istanza.
  - Simile agli alberi zoologici
  - Si dividono in agglomerativi (se partono da cluster piccoli che fondono tra di loro) o scissori (se partono da un unico grosso cluster che dividono in sotto-cluster).
- Algoritmi basati sulla densità: piuttosto che utilizzare la distanza tra oggetti, usano il concetto di densità.
  - Partono da un cluster minimale lo espandono purché la densità (numero di istanze) nelle vicinanze ecceda una specifica soglia.

Principali approcci al clustering (2)

- Algoritmi basati su griglie: prima di iniziare, discretizzano i valori di input in un numero finito di celle che costituiscono una struttura a griglia. Le operazioni successive operano solo su questa griglia.
  - molto veloci
- Algoritmi basati su modelli: ipotizzano l'esistenza di un modello per ognuno dei cluster e trovano la miglior disposizione dei cluster che soddisfi il modello.
- Molti algoritmi “reali” integrano più di uno schema base.

Metodi basati sulle partizioni

Metodi basati sulle partizioni

- Date *n* istanze e un numero *k*, partiziona le istanze in *k* insiemi.
  - Obiettivo: massimizzare la qualità del raggruppamento
    - Qualità definita di solito in base alle distanze inter- e intra-cluster.
- Soluzione ottimale: può essere ottenuta enumerando tutte le possibili partizioni.. non è praticabile.
- Soluzione euristica: basata sulla ricerca di minimi locali.
  - Usa tecniche di rilocazione iterativa per spostare le istanze da una partizione all'altra allo scopo di migliorare la qualità dei cluster.
  - Di solito, un punto viene scelto come "centro di gravità" di un cluster, e le varie misure di similarità vengono riferite a questo punto.
  - Due sono i metodi più famosi
    - *k*-means (MacQueen 67)
    - *k*-medoids (Kaufman & Rousseeuw'87)

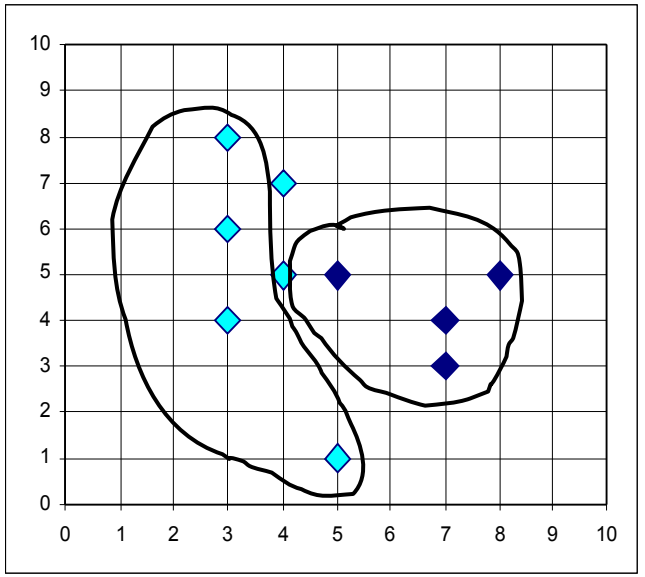
Metodo k-means

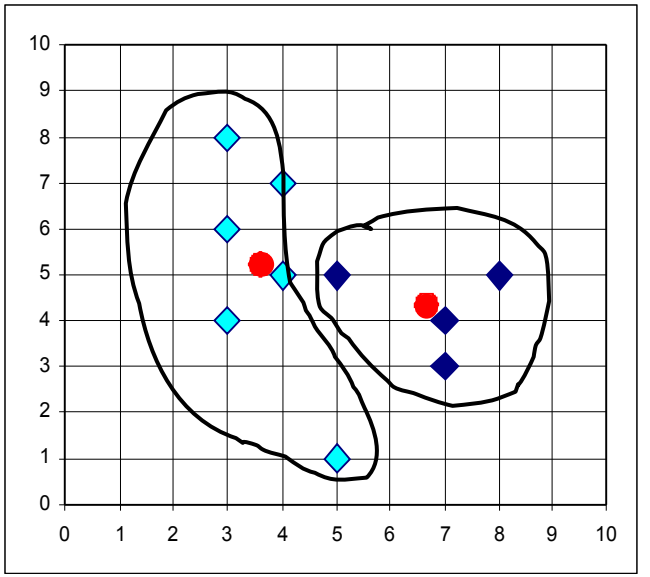
- Il metodo k-means adotta come centro di gravità di un cluster il suo punto medio.
- Si tenta di minimizzare l'errore quadratico:

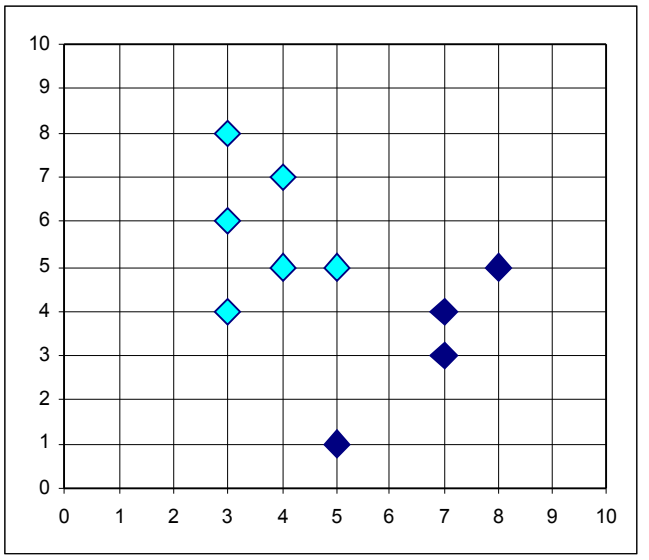
$$Err = \sum_{i=1}^{k} \sum_{p \in C_i} d_e(p, m_i)^2$$

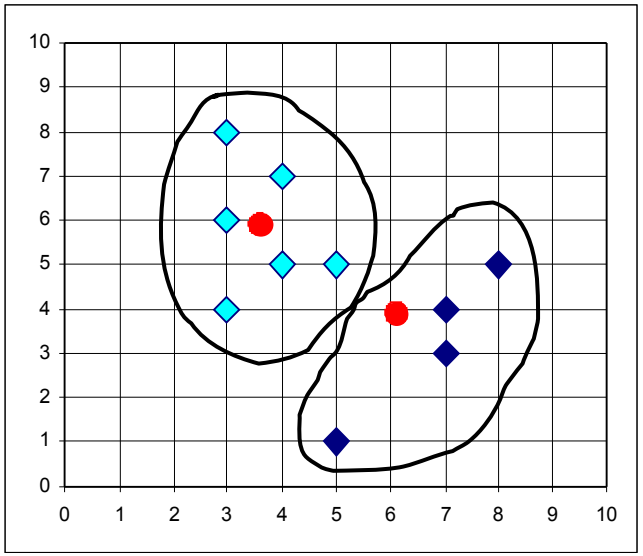
  dove m_i è il punto medio del cluster C_i.

- In effetti l'errore non viene mai calcolato esplicitamente, ma l'algoritmo procede come segue:
  - Scegli k oggetti come centri dei vari cluster
    - come avviene la scelta? varie alternative sono state proposte
  - Ripeti
    - Assegna ogni oggetto al cluster il cui centro è più vicino
    - Ricalcola i nuovi centri dei cluster
  - Finché non c'è nessun cambiamento









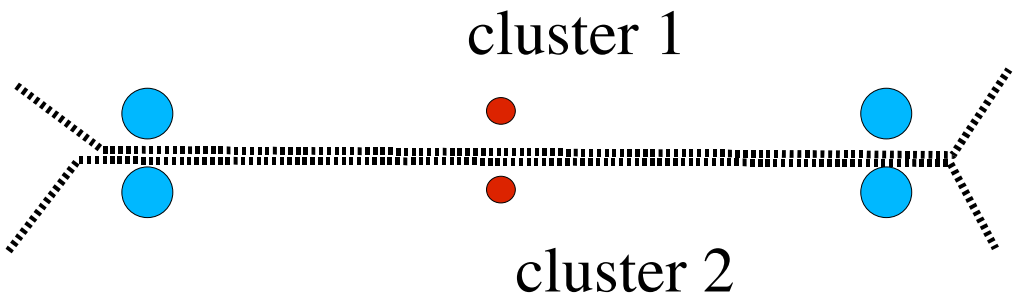
Metodo k-means : esempio

Pregi e difetti del metodo k-means

- Pregi
  - Relativamente efficiente: O(*tnk*) dove *t* è il numero di iterazioni. Di solito *t* e *k* sono molto minori di *n*, per cui la complessità si può considerare O(*n*)
  - Spesso termina in un ottimo locale. L'ottimo globale si può rincorrere con tecniche standard come annealing simulato o algoritmi genetici.
- Difetti
  - Applicabile solo se è possibile definire il centro. Non adatto per dati di tipo categoriale.
  - Necessità di specificare *k* in anticipo.
  - Molto sensibile a rumore e ad outliers
  - Non adatto per cluster con forme non convesse.

Esempio di ottimo locale in k-means

- I cerchi blu sono le istanze da raggruppare, i cerchi rossi i punti iniziali dei due cluster.
  - le istanze sono ai 4 vertici di un rettangolo, con un lato corso e uno lungo
  - i centri iniziali sono i punti medi dei due lati lunghi
  - la suddivisione ottimale sarebbero costituite da un gruppo con i punti a sinistra e uno con i punti a destra
  - la soluzione iniziale è un ottimo locale, quindi l'algoritmo termina con un gruppo con i punti in basso, uno con i punti in alto.



Metodo k-medoids (1)

- Usa come centro di gravità di un cluster l'istanza "più centrale" del cluster stesso.
  - riduce l'effetto degli outliers
  - funziona anche con dati categoriali
- Dato *k*, l'algoritmo consta dei seguenti passi
  - Scegli k oggetti come medoidi iniziali
  - Ripeti
    - Assegna ogni oggetto al cluster il cui medoide è più vicino
    - Considera di sostituire ognuno dei medoidi con un non-medoide. Effettua la sostituzione se questa migliora la qualità del cluster, altrimenti lascia invariato.
  - Finché non c'è nessun cambiamento

Metodo k-medoids (2)

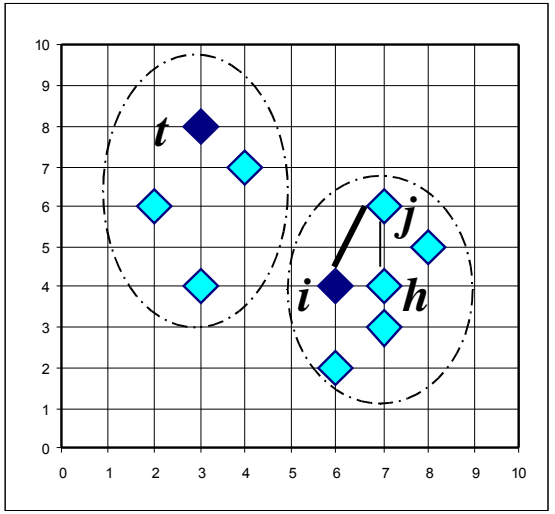
- Come qualità del cluster si adotta spesso l'errore assoluto
  - $Err = \sum_{i=1}^{k} \sum_{p \in C_i} d(p, m_i)$
  - C_i cluster i-esimo
  - m_i medoide rappresentativo per C_i
  - d è una opportuna distanza
- Se l'istanza i è un medoide che viene sostituito col medoide h, l'errore cambia. La variazione dell'errore è

$$T_{ih} = \sum_{j=1}^{n} C_{jih}$$

dove n è il numero di istanze è C_{jih} la componente dell'errore relativo alla istanza *j*

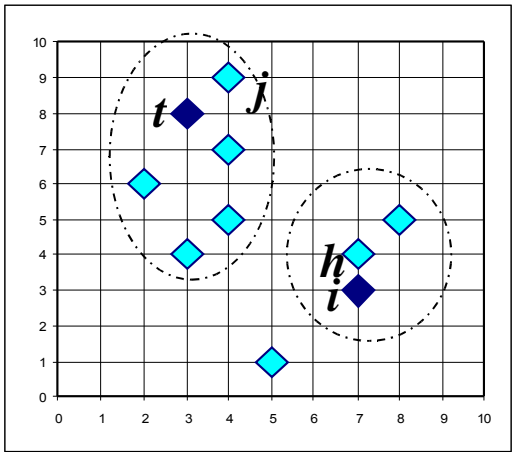
Metodo k-medoids (3)

1° caso: j passa dal medoide i ad h



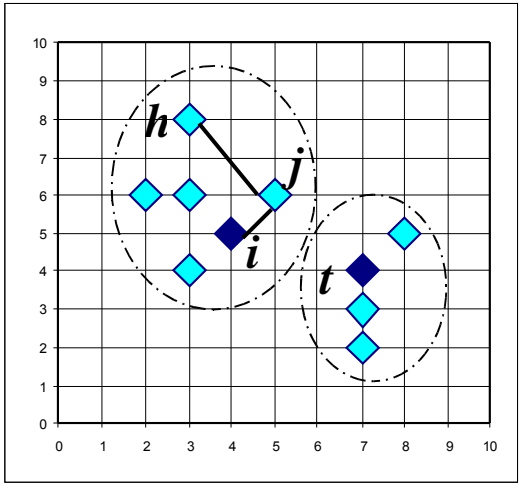
$C_{jih} = d(j, h) - d(j, i)$

2° caso: j era e rimane assegnato ad un altro medoide



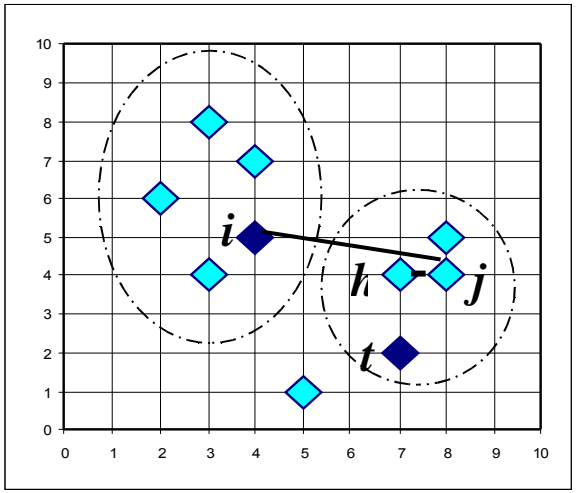
$C_{jih} = 0$

3° caso: j passa dal medoide i a t≠h



$C_{jih} = d(j, t) - d(j, i)$

4° caso: j passa dal medoide t≠i ad h



$C_{jih} = d(j, h) - d(j, t)$

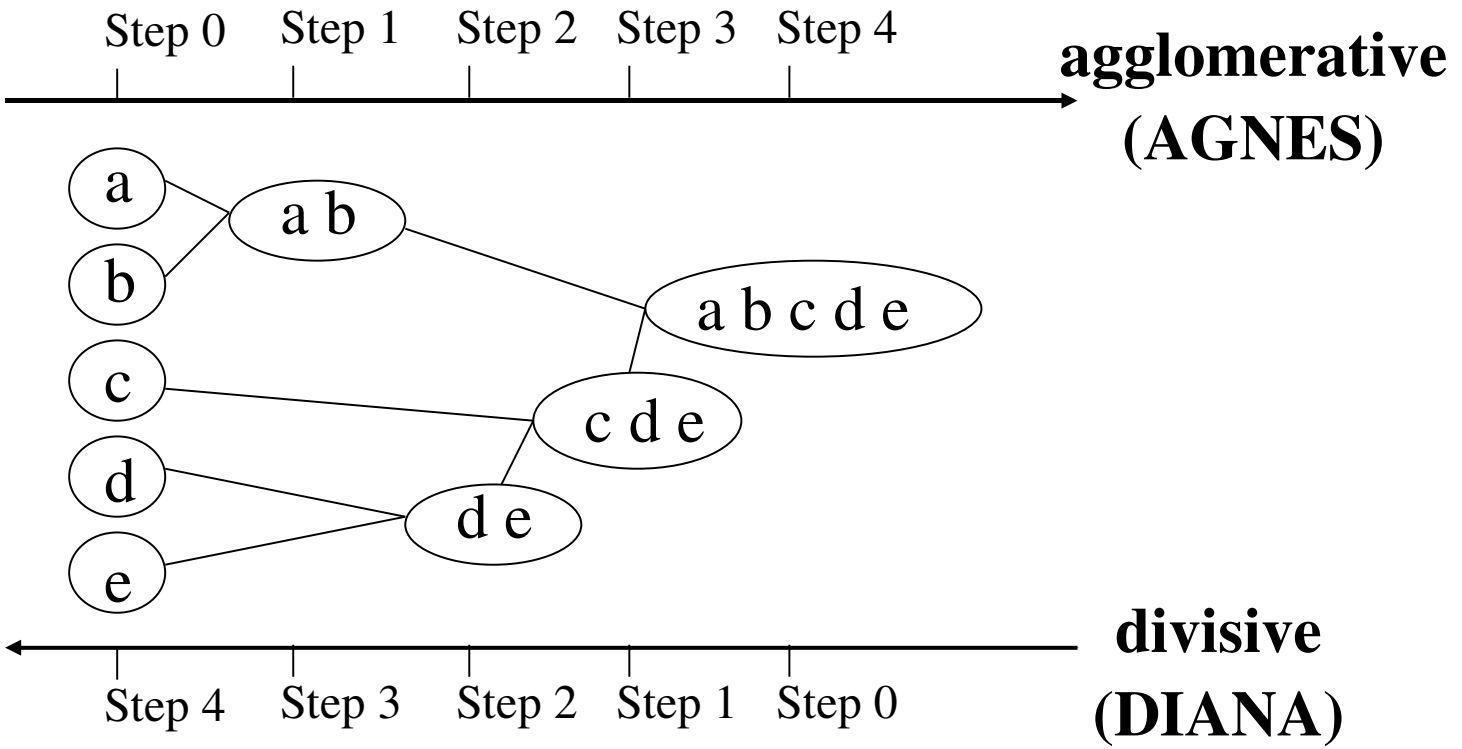
Algoritmi “veri”

- Il primo algoritmo a sfruttare l'idea dei medoidi fu PAM (Partitioning Around Medoids) pubblicato in (Kaufman & Rousseeuw’87)
  - ad ogni iterazione, vengono esaminate tutte le possibili coppie costituite da un vecchio medoide e un non-medoide
  - a causa della sua natura sistematica, PAM non è scalabile
- Algoritmi successivi
  - Basati sull'idea di campionare uno o più sottoinsiemi dall'insieme di tutte le istanze
    - CLARA (Kaufmann & Rousseeuw, 1990)
      - CLARA = Clustering LARge Applications
    - CLARANS (Ng & Han, 1994)
      - CLARANS = Clustering Large Applications based upon RANdomized Search

Metodi gerarchici

Il metodo gerarchico

- Raggruppa i dati in un albero di cluster.



- Due approcci:
  - agglomerativi (partono da cluster piccoli che fondono tra di loro)
  - scissori (partono da un unico cluster che dividono in sottocluster)

Distanza tra cluster

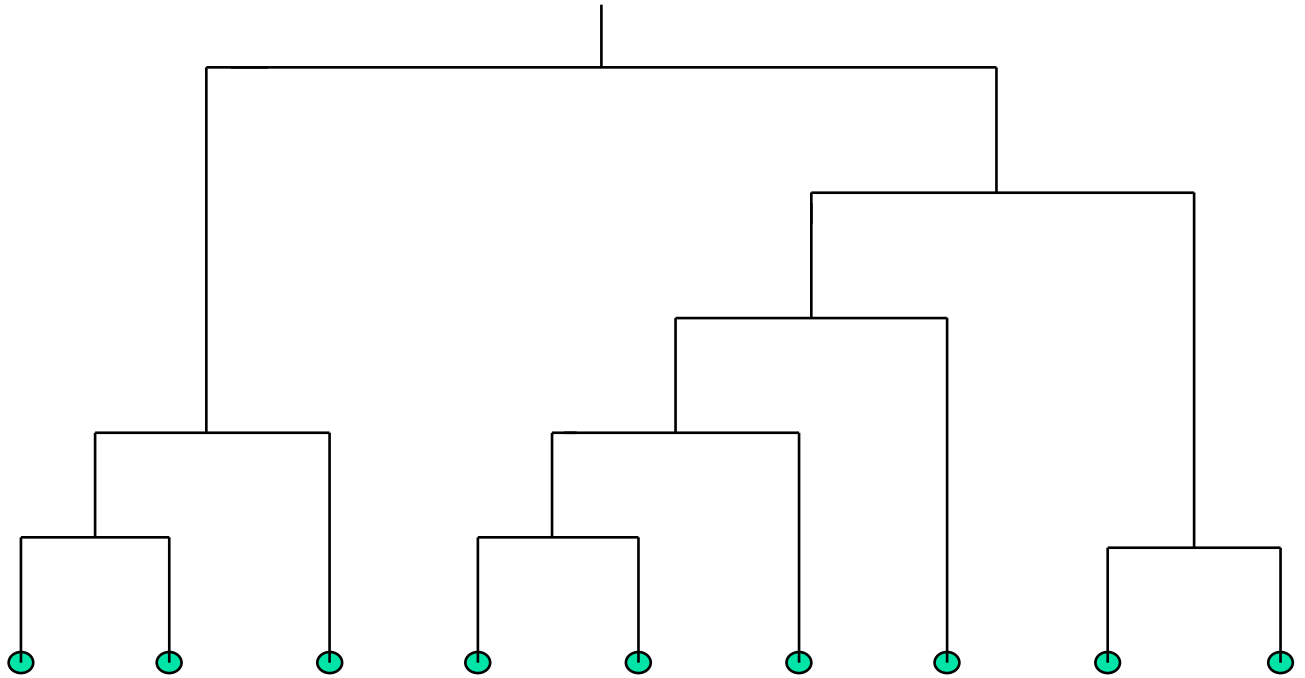
- Serve una nozione di distanza tra cluster, analoga a quella di distanza tra istanze.
- Siano C_i, C_j cluster, m_i punto medio del cluster C_i e n_i numero di oggetti del cluster C_i. Definiamo varie distanze:
  - distanza minima: $d_{min}(C_i, C_j) = min_{x \in C_i, x' \in C_j} d(x, x')$
  - distanza massima: $d_{max}(C_i, C_j) = max_{x \in C_i, x' \in C_j} d(x, x')$
  - distanza media: $d_{avg}(C_i, C_j) = \frac{1}{n_i n_j} \sum_{x \in C_i} \sum_{x' \in C_j} d(x, x')$
- Anche la distanza dei centroidi, che però necessita pure della matrice dati:
  - distanza dei centroidi: $d_{mean}(C_i, C_j) = d(m_i, m_j)$

Schema di un metodo agglomerativo

- Inizializzazione: tutte le n istanze rappresentano un cluster
- Ripeti n-1 volte:
  - Selezione: vengono selezionate le istanze più vicine rispetto alla misura di distanza preferita
  - Aggiornamento: si aggiorna il numero dei cluster tramite l'unione, in un unico cluster, dei due selezionati. Nella matrice delle distanze si sostituiscono le righe e colonne relative ai due cluster con una nuova riga e colonna relativa al nuovo cluster.
- La procedura si arresta quando tutti gli elementi appartengono ad un unico cluster.
- Algoritmo AGNES (agglomerative nesting)
  - introdotto in Kaufmann and Rousseeuw (1990)
  - implementato nei software statistici come S-plus ed R
  - usa la distanza minima

Dendogramma

- Il risultato di AGNES è un dendogramma:



- Le foglie sono le istanze, i nodi interni i vari cluster.
- Una partizione dell'insieme delle istanze in cluster disgiunti è ottenibile tagliando il dendogramma ad un determinato livello e considerando le componenti connesse.

Un algoritmo scissorio: DIANA

- DIANA: divisive analysis
- Introdotto in Kaufmann and Rousseeuw (1990)
- Implementato in prodotti statistici come S-plus ed R
- Ordine inverso rispetto ad AGNES
  - si parte con tutte le istanze in un unico cluster
  - ad ogni passo si divide un cluster
  - ci si ferma quando tutti le istanze stanno in un cluster da sole.

Pregi e difetti dei metodi gerarchici

- Pregi
  - non c'è la necessità di specificare *k*, il numero di partizioni
- Difetti
  - non è scalabile. La complessità è almeno $O(n^2)$.
    - Ad esempio, in AGNES, ad ogni passo si richiede di confrontare le distanze tra tutte le coppie di cluster.
  - la qualità dei raggruppamenti soffre del fatto che, una volta effettuata una divisione o un raggruppamento, non è possibile disfarla.
- Soluzioni
  - integrazione dei metodi gerarchici con metodi basati su istanze.
    - BIRCH, CURE, ROCK, Chameleon

BIRCH e Clustering Features (1)

- Birch: Balanced Iterative Reducing and Clustering using Hierarchies, by Zhang, Ramakrishnan, Livny (SIGMOD'96)
- Si basa sul concetto di clustering feature (CF) e di clustering feature tree (CF tree)
  - un CF è una rappresentazione compatta di un insieme di punti che costituiscono un sotto-cluster
  - CF=(N, **LS**, SS) dove
    - N = numero di punti nel sotto-cluster
    - $\boldsymbol{LS} = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{X}_i$
      - **LS**/N è il punto centrale del cluster
    - $SS = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{X}_i^2$
      - è la somma dei quadrati modulo dei punti componenti il cluster
  - sono i momenti di ordine 0, 1 e 2 del sotto-cluster

BIRCH e Clustering Features (2)

- Ad esempio,
  - date le istanze in S={(3,4) (2,6) (4,5) (4,7) (3,8)}
  - otteniamo CF=(5,(16,30),242)
- I CF possono essere usati al posto dei dati corrispondenti, e da essi è possibile definire alcune distanze tra cluster.
- Siano (N_1,$\mathbf{LS}_1$,SS_1) ed (N_2, $\mathbf{LS}_2$,SS_2) i CF di due cluster:
  - la distanza dei centroidi è semplicemente il modulo di $\mathbf{LS}_2 - \mathbf{LS}_1$
  - la distanza Euclidea media non è calcolabile direttamente, ma lo è la radice della distanza quadratica media:

$$d(C_i, C_j) = \sqrt{\frac{1}{n_i n_j} \sum_{x \in C_i} \sum_{x' \in C_j} d_e(x, x')^2}$$

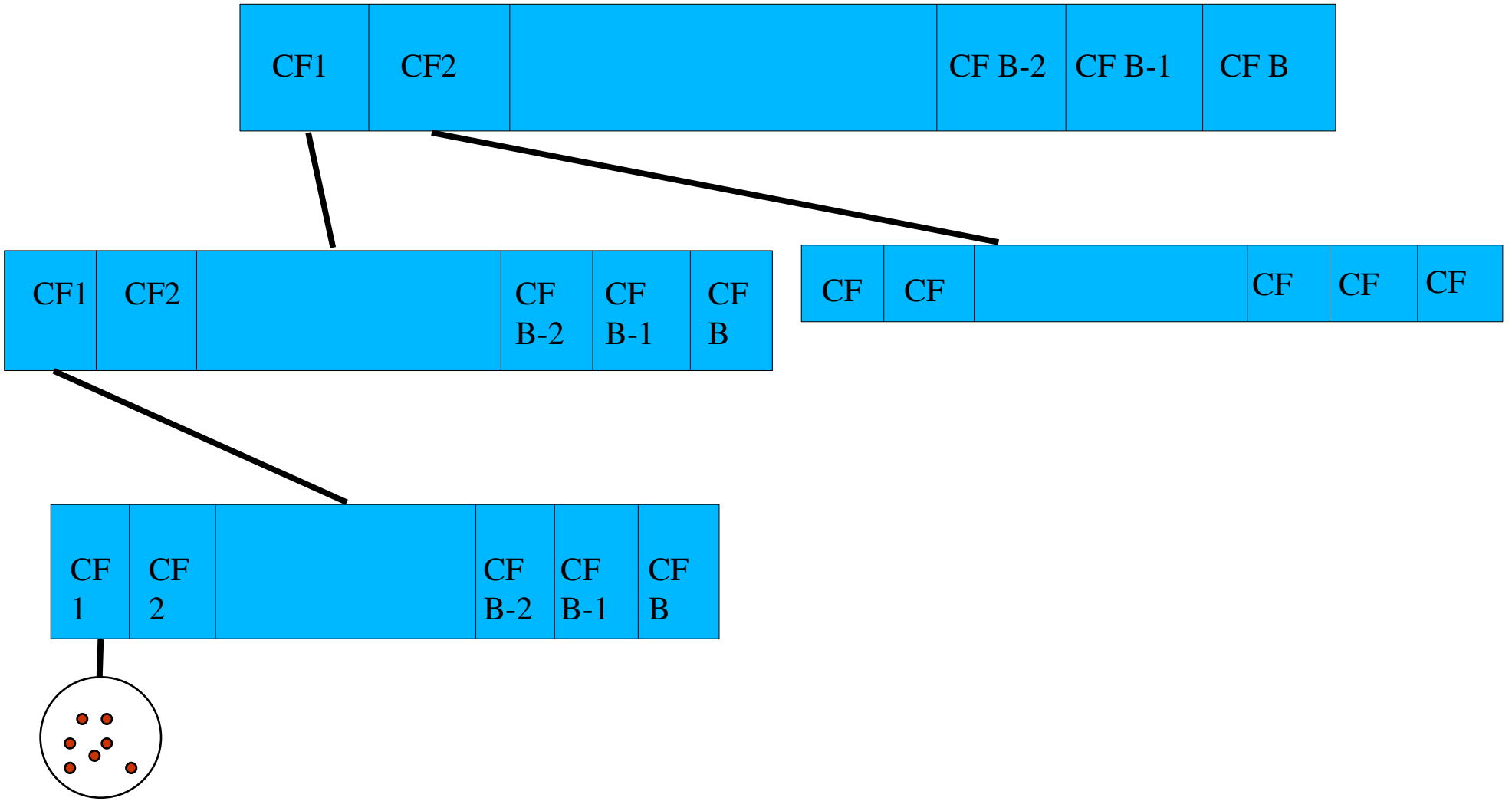
Distanza quadratica media

- Mostriamo che la distanza quadratica media tra due cluster C_1 e C_2 è definibile a partire da due CF: $(N_1, \mathbf{LS}_1, SS_1)$ e $(N_2, \mathbf{LS}_2, SS_2)$.

$$\begin{aligned}
\sum_{i_1 \in C_1} \sum_{i_2 \in C_2} d_e(i_1, i_2)^2 &= \sum_{i_1 \in C_1} \sum_{i_2 \in C_2} \left\langle \boldsymbol{X}_{i_1} - \boldsymbol{X}_{i_2}, \boldsymbol{X}_{i_1} - \boldsymbol{X}_{i_2} \right\rangle \\
&= \sum_{i_1 \in C_1} \sum_{i_2 \in C_2} \left\langle \boldsymbol{X}_{i_1}, \boldsymbol{X}_{i_1} \right\rangle + \left\langle \boldsymbol{X}_{i_2}, \boldsymbol{X}_{i_2} \right\rangle - 2 \left\langle \boldsymbol{X}_{i_1}, \boldsymbol{X}_{i_2} \right\rangle \\
&= N_2 \cdot SS_1 + N_1 \cdot SS_2 - 2 \sum_{i_1 \in C_1} \sum_{i_2 \in C_2} \left\langle \boldsymbol{X}_{i_1}, \boldsymbol{X}_{i_2} \right\rangle \\
&= N_2 \cdot SS_1 + N_1 \cdot SS_2 - 2 \left\langle \boldsymbol{LS}_1, \boldsymbol{LS}_2 \right\rangle
\end{aligned}$$

CF tree (1)

- Un CF tree è un albero bilanciato per la memorizzazione di CF



CF tree (2)

- I CF nelle foglie rappresentano dei cluster formati da un certo numero di istanze
- I CF a livello più alto rappresentano dei cluster formati da tutti i CF figli
  - o, meglio, da tutte le istanze associate ai CF figli
- Un CF Tree è caratterizzato da due parametri
  - B: fattore di diramazione (branching factor)
    - il numero massimo di figli per ogni nodo
  - T: soglia (threshold)
    - il massimo diametro dei sotto-cluster memorizzati al livello delle foglie

$$\mathrm{diam}(C)=\sqrt{\frac{\sum_{i\in C}\sum_{j\in C} d_e(i,j)^2}{N(N-1)}}=\sqrt{\frac{2\mathrm{N}\cdot SS^2-2\langle \boldsymbol{LS},\boldsymbol{LS}\rangle}{N(N-1)}}$$

Funzionamento di BIRCH

- È diviso in due fasi
  - fase 1: BIRCH scandisce il database per costruire un CF-tree iniziale
    - può essere visto come una compressione dei dati che tenta di preservare i raggruppamenti presenti al loro interno
  - fase 2: BIRCH applica un algoritmo di raggruppamento qualsiasi (tipicamente basato sulle partizioni) alle foglie del CF-tree

Creazione dell'albero iniziale

- Notare che la costruzione dell'albero della fase 1 avviene con una sola scansione dei dati:
  - ogni istanza viene aggiunta nel nodo foglia più vicino
    - le modifiche apportate al CF foglia si ripercuotono fino alla radice
  - se il diametro del nodo foglia supera T, esso viene scisso in due nodi
    - questo può portare alla scissione di nodi al livello superiore
  - se a un certo punto la memoria non basta più a contenere il CF-tree, la soglia T viene aumentata e si ricostruisce il CF-tree con la nuova soglia
    - partendo dai nodi foglia e senza riscandire il database

Vantaggi e svantaggi

- Vantaggi:
  - efficiente, ha complessita O(n) ed è altamente scalabile, in quanto fa una sola scansione del database
- Svantaggi:
  - tratta solo dati numerici (per poter definire i CF)
  - è molto sensibile all'ordine con cui vengono scandite le istanze nel database
  - non si adatta bene a cluster che non siano di natura sferica
    - visto che usa il concetto di raggio e diametro per raggruppare gli elementi

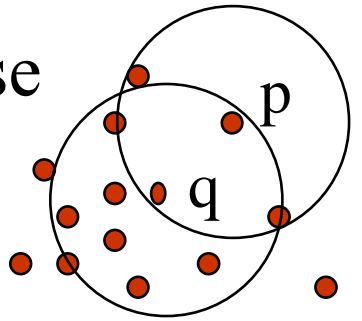
Metodi basati sulla densità

Principi dei metodi basati sulla densità (1)

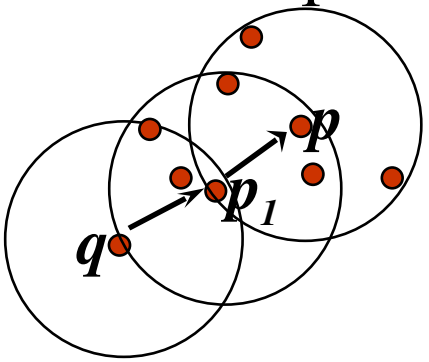
- Piuttosto che basarsi sul concetto di distanza si basano sul concetto di densità
  - un cluster è una zona densa di istanze nello spazio dei dati, separato dagli altri cluster da zone povere di istanze.
- Molti metodi basati sulle densità si basano su due parametri:
  - ε e *MinPts*.
- Alcune definizioni:
  - ε-intorno di un oggetto: l'insieme nello spazio dei dati che sta in un cerchio di raggio ε centrato nella istanza;
  - se l'ε-intorno di una oggetto contiene un numero di altri oggetti maggiore di *MinPts*, l'oggetto è chiamo "core object".

Principi dei metodi basati sulla densità (2)

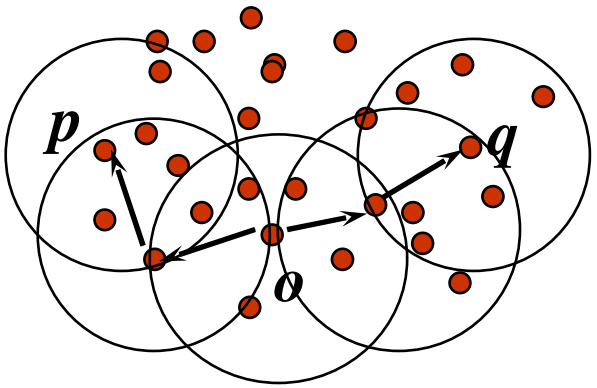
- un oggetto p è direttamente raggiungibile da q se
  - p sta nell'ε-intorno di q
  - q è un core object



- un oggetto p è raggiungibile da q se c'è una catena di punti p_1, ..., p_n con
  - p_1=p, p_n=q
  - p_{i+1} è direttamente ragg. da p_i



- due oggetti p e q sono connessi quando c'è un punto o tale che p e q sono raggiungibili da o



DBSCAN

- Introdotto in Ester et al. (KDD 1999)
- Un cluster è un insieme di oggetti connessi massimale
  - ovvero è un insieme connesso tale che non esiste un insieme connesso più grande
- Algoritmo:
  - genera un cluster per ogni punto p che è un core object
  - iterativamente, per ogni cluster C, considera i punti che sono direttamente raggiungibili da uno dei punti di C
    - inserisci questi punti nel cluster C
    - eventualmente fondi insieme due cluster
- Complessità: O(n log n) usando opportuni indici.

Algoritmi basati su modelli

Algoritmi basati su modelli

- Questo tipo di algoritmi assumono un modello matematico (quasi sempre di natura statistica) dell'insieme dei dati, e determinano il raggruppamento che migliora la verosimiglianza dei dati
- Due approcci interessanti
  - conceptual clustering
    - una forma di raggruppamento nella quale non sono vengono divise le istanze in gruppi, ma per ogni gruppo viene prodotta una descrizione delle caratteristiche rilevanti
    - è quindi una specie di integrazione tra algoritmi di raggruppamento e caratterizzazione
    - nel decidere i gruppi, si tiene conto della semplicità e generalità della sua descrizione
    - COBWEB (l'algoritmo da studiare per l'esame) ricade in questa categoria.
  - mixture model

Mixture model (1)

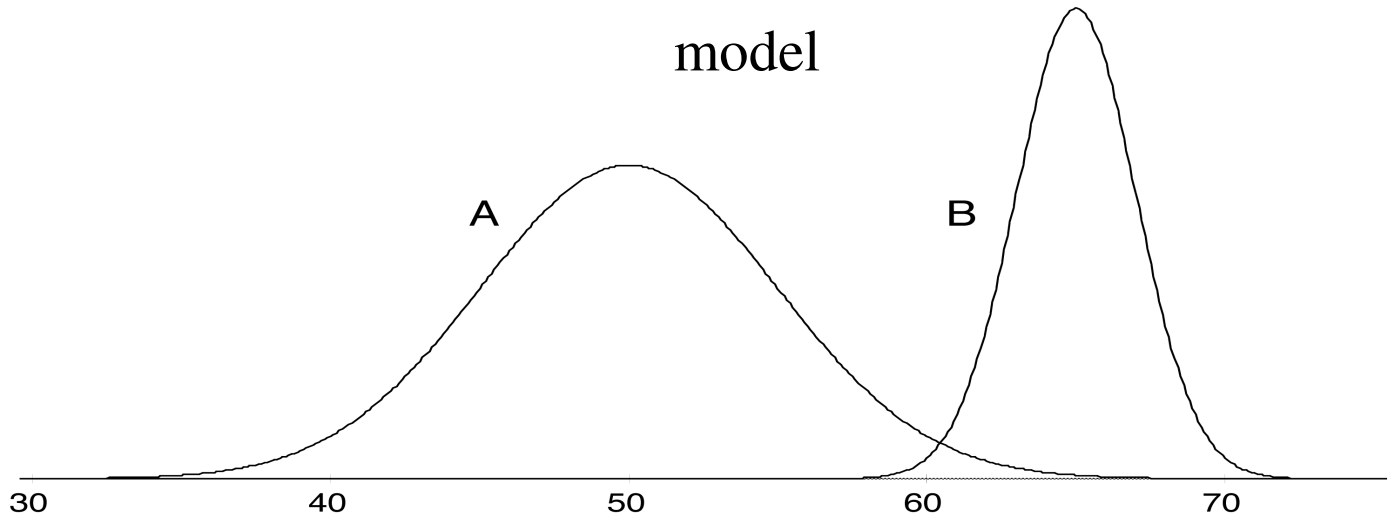
- Una mistura è un insieme di *k* distribuzioni di probabilità, che rappresentano *k* cluster.
  - ogni distribuzione ci da la probabilità che una determinata istanza abbia un determinato insieme di valori per gli attributi, **se fosse noto** che tale istanza appartiene a quella distribuzione.
  - ogni istanza appartiene ad un unico cluster, ma non è noto a priori quale.
  - le *k* distribuzioni non sono equiprobabili, ma c'è una distribuzione di probabilità che riflette la relativa popolazione.
- Il più semplice modello di questo tipo si ha quando c'è un solo attributo numerico e varie distribuzioni di probabilità gaussiane.

Mixture model (2)

data

A	51	B	62	B	64	A	48	A	39	A	51
A	43	A	47	A	51	B	64	B	62	A	48
B	62	A	52	A	52	A	51	B	64	B	64
B	64	B	64	B	62	B	63	A	52	A	42
A	45	A	51	A	49	A	43	B	63	A	48
A	42	B	65	A	48	B	65	B	64	A	41
A	46	A	48	B	62	B	66	A	48		
A	45	A	49	A	43	B	65	B	64		
A	45	A	46	A	40	A	46	A	48		

model



μ_A=50, σ_A =5, p_A=0.6 μ_B=65, σ_B =2, p_B=0.4

Mixture model (3)

- Dato l'insieme di tutte le istanze e un numero specificato di distribuzioni, il problema di raggruppamento consiste nello
  - stimare i parametri (media e scarto quadratico medio) di ogni distribuzione;
  - associare ogni istanza ad una determinata distribuzione.
- Come si fa?
- Se conoscessimo il cluster a cui appartiene ogni istanza:
  - si determinano media, s.q.m. e prob. a priorio al solito modo

$$\mu_A = \frac{\sum_{i=1}^{n_A} x_i^A}{n_A} \qquad \sigma^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n_A} (x_i^A - \mu)^2}{n_A} \qquad p_A = n_A / n$$

dove x_i^A è il valore dell'attributo x per l'i-esima istanza del cluster A, n_A il numero di istanze di A ed n il numero di istanze totali.

Mixture model (4)

- Se conoscessimo i parametri delle distribuzioni e le loro probabilità a priori
  - data una istanza x, si ha

$$P\{A|x\} = \frac{P\{x|A\} \cdot P\{A\}}{P\{x\}}$$

  - sostituendo le probabilità su insiemi continui con la densità di probabilità, ed eliminando il denominatore, si ottiene la verosimiglianza che x appartenga ad A

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_A} e^{\frac{-(x-\mu_A)^2}{2\sigma_A^2}} p_A$$

dove μ_A e σ_A sono i parametri della distribuzione A, e p_A la sua probabilità a priori.

Algoritmo EM (1)

- Noi non conosciamo né l'uno né l'altro
  - adoperiamo una procedura simile all'algoritmo *k*-means:
    - partiamo con una stima iniziale dei parametri delle distribuzioni
    - li utilizziamo per determinare l'assegnamento delle istanze ai cluster
    - utilizziamo l'assegnamento per ricalcolare i parametri delle distribuzioni
    - iteriamo il procedimento
  - però, le assegnazioni ai cluster non sono secche
    - per ogni istanza i c'è una distribuzione di probabilità sui cluster
      - w_i^A è la probabilità che l'istanza i appartenga al cluster A
    - le w_i^A giocano il ruolo di pesi nel determinare i parametri delle distrib.

$$\mu_A = \frac{\sum_{i=1}^{n} w_i^A x_i}{\sum_{i=1}^{n} w_i^A} \qquad \sigma_A^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} w_i^A (x_i - \mu)^2}{\sum_{i=1}^{n} w_i^A} \qquad p_A = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} w_i^A$$

Algoritmo EM (2)

- Questo algoritmo si chiama EM (Expectation Maximization)
  - Expectation è la fase di calcolo dei wesi w
    - che sono le aspettative sull'appartenenza delle istanze ai cluster
  - Maximization è la fase di stima dei parametri delle distribuzioni
    - fase che massimizza la verosimiglianza totale dell'insieme di dati
- La verosimiglianza totale è data da

$$\prod_{i=1}^{n} \sum_{C=1}^{k} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_C} e^{\frac{-(x-\mu_C)^2}{2\sigma_C^2}} p_C$$

e aumenta ad ogni passo dell'algoritmo

Algoritmo EM (3)

- L'algoritmo EM converge sicuramente a un massimo locale
  - può non coincidere col massimo globale
- La convergenza è con un numero infinito di passi: quando fermarsi?
  - la verosimiglianza cresce velocemente nei primi passi, poi sempre più lentamente
  - fermarsi quando la crescita nella verosimiglianza è sotto una certa soglia

Generalizzazione di EM

- Alcuni modi in cui generalizzare l'algoritmo EM
  - istanze con più di un attributo
    - distribuzioni gaussiane multivariate
  - vari tipi di distribuzioni per i vari cluster
    - gaussiane, uniformi, esponenziali, etc..
  - trattamento di attributi nominali

Clustering: frontiere di ricerca

- Scalabilità
- Abilità di gestire tipi differenti di attributi
- Identificazione di cluster con forma arbitraria
- Minime conoscenze del dominio per determinare i parametri di input.
- Capacità di gestire rumore e outliers
- Insensibilità all'ordine delle istanze
- Trattamento di dati ad alta dimensionalità
- Capacità di incorporare vincoli definiti dall'utente
- Interpretabilità dei risultati

Ricerca di outlier

Cosa è un outlier?

- Outlier: una istanza che è completamente differente dal restante insieme di dati o con esso inconsistente.
- Origine degli outlier:
  - errori
  - inerente variabilità dei dati
  - situazioni anomale (ad esempio tentativi di frode)
- La maggior parte dei metodi di datamining tentano di minimizzare l'influenza degli outlier o di eliminarla.
- Tuttavia, talvolta ci interessa proprio individuare gli outlier! Si parla di outlier mining.
  - riconoscimento di frodi telefoniche;
  - riconoscimento di attacchi ad un sistema informatico;
  - riconoscimento di comportamento anomali a farmaci.

Outlier Mining

- Problema: date *n* istanze e il numero *k*, determinare le *k* istanze più dissimili dalle altre.
  - definire cosa si intender per dissimile
  - progettare un algoritmo efficiente per determinare gli elementi dissimili.
- In alcuni casi stabilire cosa è “strano” è difficile
  - nelle serie temporali, un abbassamento improvviso delle vendite a marzo potrebbe sembrare strano, mentre magari è solo il risultato di trend di tipo stagionale.
- Si può usare un metodo di visualizzazione grafica per evidenziare gli outlier, e lasciare il compito all'uomo?
  - solo per dati con poche dimensioni e con attributi prevalentemente numerici

Metodi statistici

- Si assume che i dati siano generati secondo una certa distribuzione di probabilità.
- Si sviluppa un test per validare questa ipotesi
  - si tratta di calcolare qualche statistica dell'insieme di dati e di confrontare questa statistica con i vari oggetti
  - ad esempio, si può considerare outlier qualunque oggetto che dista più di 3 volte lo scarto quadratico medio dalla media.
  - esempi di test famosi: test t di Student, test del χ^2, etc..
- Svantaggi
  - la maggior parte dei test riguardano un singolo attributo, mentre nei casi tipici del data mining un outlier è riconoscibile solo guardando molti attributi contemporaneamente.
  - è necessario avere una idea della distribuzione dei dati

Metodi basati sulle distanze

- Un oggetto *o* in un insieme di dati S è un outlier basato sulle distanze con parametri *p* e *d* se almeno *p*% degli oggetti in *S* è più lontano di *d* da *o*.
- Generalizza i metodi statistici
  - non è necessario conoscere il tipo di distribuzione
  - adatto per analisi multi-dimensionale
- Richiede di settare i parametri *p* e *d*
  - trovare i parametri giusti può richiedere vari tentativi

Riferimenti bibliografici

Bibliografia

- Jaiwei Han, Micheline Kamber. *Data Mining: Concepts and Techniques*. Morgan Kaufmann
  - capitolo 8
- Ian H. Witten, Eibe Frank. *Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques with Java Implementations*. Morgan Kaufmann.
  - sezione 6.6