Curs 7:

Gruparea datelor (I)

Structura

- Gruparea datelor
 - Concepte de bază
 - Evaluarea calităţii grupării
- Algoritmi partiţionali
 - kMeans
 - Fuzzy cMeans
- Algoritmi ierarhici
 - Algoritmi aglomerativi
 - Algoritmi divizivi
- Algoritmi bazați pe estimarea densității datelor Curs 8
- Algoritmi bazaţi pe modele probabiliste Curs 8

Scopul grupării datelor (reminder)

Ce se cunoaște?

- un set de date (nu neapărat structurate)
- o măsură de similaritate/disimilaritate între date (măsura e specifică problemei de rezolvat) pe baza căreia se construieşte o matrice de similaritate/disimilaritate

Ce se dorește?

 un model care descrie modul în care se grupează datele în clustere (grupuri) astfel încât datele care aparţin aceluiaşi cluster să fie mai similare între ele decât cele care aparţin unor clustere diferite

Care este scopul final?

- Să se poată verifica dacă două date aparţin aceluiaşi cluster
- Să se determine clusterul de care aparţine o dată
- Să se identifice date atipice (care nu aparțin nici unui cluster)

Scopul grupării datelor (reminder)

Exemple:

- Customer segmentation = identificarea grupurilor de clienţi care au comportamente similare
- User profiles extraction = identificarea grupurilor de utilizatori ai unui serviciu web caracterizaţi prin comportamente similare
- Document clustering = identificarea unor grupuri de documente similare din punct de vedere al conţinutului
- Image segmentation = identificarea unor regiuni omogene într-o imagine
- Gene expression analysis = gruparea genelor cu roluri similare

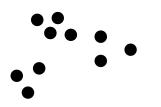
Gruparea permite:

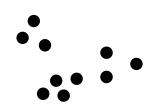
 sumarizarea şi/sau vizualizarea datelor cu scopul de a le înţelege mai Data mining - Curs 7

Particularități ale grupării datelor

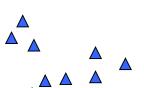
Este un proces nesupervizat:

- Setul de antrenare conţine doar valori ale atributelor
- Eticheta clasei nu e cunoscută





Câte clustere?



Două clustere

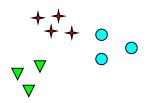
[Kumar, 2004]



patru clustere

Problema grupării este "rău-definită":

- Identificarea grupurilor este dificilă
- Decizia poate avea caracter subjectiv





Şase clustere



Concepte de bază

- Cluster = grup de date care sunt similare
- Matrice de (di)similaritate pt un set de n date = matrice nxn în care pe linia i coloana j se află valoarea similarităţii/disimilarităţii între data i şi data j
- Clustering (grupare) = proces de identificare a clusterelor
- Prototip (reprezentant)= "obiect" reprezentativ pentru datele dintr-un cluster
 - Centroid = media datelor dintr-un cluster centroidul nu este neapărat un element din setul de date
 - Medoid = data din cluster care este cea mai apropiată de media clusterului
 medoidul aparţine setului de date
- Raza clusterului = media distanţelor dintre datele din cluster şi prototipul acestuia
- Diametrul clusterului = distanţa (disimilaritatea) maximă dintre oricare două date ale clusterului

Tipuri de clustering

Crisp vs fuzzy clustering

- Crisp clustering = fiecare dată aparţine unui singur cluster
- Fuzzy clustering = o dată poate aparţine mai multor clustere (poate fi caracterizată prin grad diferit de apartenenţă pentru fiecare cluster)

Flat vs hierarchical clustering

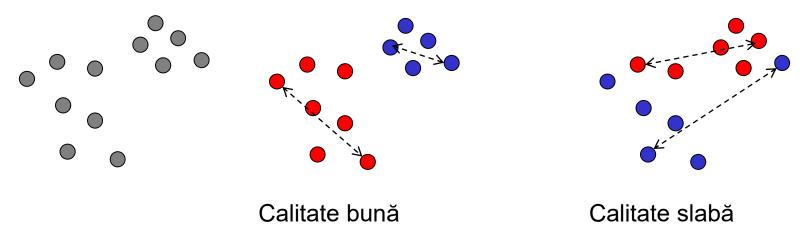
- Flat (partitional) clustering = rezultatul este un set de clustere (o partiţie)
- Hierarchical clustering = rezultatul este o ierarhie de partiţii

Variante de algoritmi

- Algoritmi partiţionali (ex: kMeans, Fuzzy cMeans)
- Algoritmi hierarhici (alg. aglomerativi, alg. divizivi)
- Algoritmi bazaţi pe densitate (ex: DBSCAN, OPTICS, HDBSCAN)
- Algoritmi bazaţi pe modele probabiliste (ex: EM = Expectation Maximization)
- Algoritmi bazaţi pe analiza spectrului (valori şi vectori proprii) ai grafului de similaritate asociat datelor

Măsuri de calitate

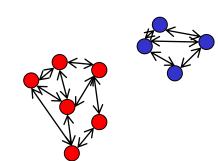
- Nu există un indicator unic pentru evaluarea calităţii unei grupări
- Cea mai comună abordare constă în estimarea:
 - Compacităţii clusterelor (variabilitate intra-cluster ar trebui să fie mică)
 - Gradului de separare dintre datele aparţinând unor clustere diferite (variabilitate inter-cluster – ar trebui să fie mare)



Măsuri de calitate

Notații:

- P: setul de perechi de date ce aparţin aceluiaşi cluster
- Q=DxD-P (restul perechilor: o dată din pereche aparţine unui cluster iar cealaltă unui alt cluster)



$$Intra = \sum_{(x_i, x_j) \in P} d(x_i, x_j) / card(P)$$

$$Inter = \sum_{(x_i, x_j) \in Q} d(x_i, x_j) / card(Q)$$

Exemple de perechi de date utilizate în calculul distanţelor intra-cluster

Exemple de perechi de date utilizate în calculul distanţelor inter-cluster

 Intra-cluster to inter-cluster distance ratio = Intra-cluster/Inter-cluster (valori mici corespund unei calități mai bune)

Măsuri de calitate

Silhouette coefficient

(N = numărul de date din set)

Obs:

- S ia valori în (-1,1)
- Valori mai mari indică o grupare mai bună

$$S = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} S_i$$

$$S_i = \frac{D \min_{i}^{out} - Davg_i^{in}}{\max\{D \min_{i}^{out}, Davg_i^{in}\}}$$

 $Davg_i^{in} = \text{media distantelor dintre } x_i \text{ si celelalte date din clusterul lui } x_i$

 $Davg_i^j = \text{media distantelor dintre } x_i \text{ si datele din clusterul j } (j \neq \text{clusterul lui } x_i)$

$$D \min_{i}^{out} = \min_{j} D avg_{i}^{j}$$

Algoritmi partiționali

- Input: set de date $D=\{x_1,x_2,...,x_N\}$, K= nr de clustere
- Output: partiţie P={C₁,C₂,...,C_K} a setului de date D
- Cel mai popular algoritm partițional: kMeans (varianta Lloyd)
- Folosește ideea că prototipul fiecărui cluster este media aritmetică a elementelor din clusterul respectiv (denumit centroid)
- Este un algoritm euristic (bazat pe principiul greedy) având ca scop minimizarea distanțelor dintre date și centroizii corespunzători (varianța intra-cluster) și care constă într-o prelucrare iterativă care repetă doi pași:
 - Pas 1: (re)asignează datele la clustere pe criteriul celui mai apropiat centroid – în general se utilizează distanța euclidiană
 - Pas 2: recalculează centroizii folosind datele asignate la fiecare cluster

- Input: set de date $D=\{x_1,x_2,...,x_N\}$, K=nr de clustere
- Output: partiţie P={C₁,C₂,...,C_K} a setului de date D

kMeans (D,k)

Initializare centroizi C_1 , C_2 , ..., C_K (prin selecție aleatoare din setul de date sau folosind o strategie euristică)

repeat

- asignează fiecare dată din D la clusterul corespunzător celui mai apropiat centroid (în raport cu măsura de similaritate/disimilaritate folosită)
- actualizează fiecare centroid prin calculul mediei elementelor asignate clusterului

until <partiția este stabilă (la ultima iterație nu s-a modificat asignarea datelor la
clustere) >

Obs:

 condiția de oprire poate fi bazată pe utilizarea unei măsuri de calitate (de exemplu varianța intra-cluster este suficient de mică)

Caracteristici

 kMeans este o metodă bazată pe prototipuri care are ca scop minimizarea sumei pătratelor erorilor (SSE) – distanţele dintre date şi centroizii corespunzători

$$SSE(X,C) = \sum_{k=1}^{K} \sum_{x \in C_k} d^2(x, c_k) = \sum_{k=1}^{K} \sum_{x \in C_k} \sum_{j=1}^{n} (x_j - c_{kj})^2$$

(în cazul distanței euclidiene)

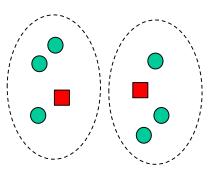
- Complexitate: O(n*N*K*iteraţii) (n=nr de atribute, N=nr de date, K=nr de clustere)
- Pre-procesare utilă: normalizare (eventual reducerea dimensiunii ex: PCA)
- Post-procesare utilă:
 - Eliminarea clusterelor mici (sunt considerate excepţii)
 - Fragmentarea clusterelor caracterizate prin variabilitate mare
 - Reunirea clusterelor apropiate

Iniţializarea centroizilor

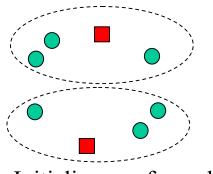
- Performanţa algoritmului kMeans este influenţată de iniţializarea centroizilor
- In varianta bazată pe selecție aleatoare, o strategie de a determina o inițializare adecvată este de a aplica algoritmul repetat pornind de la valori diferite ale seedului corespunzător generatorului de valori aleatoare

kMeans++:

- Primul centru se alege aleator din setul de date
- Al doilea centru se alege folosind o distribuţie de probabilitate care favorizează datele îndepărtate de primul centroid
- Al treilea centru se alege folosind o distribuţie de probabilitate care favorizează datele îndepărtate de primii doi centroizi
- Se continuă procesul până la alegerea tuturor celor K centroizi



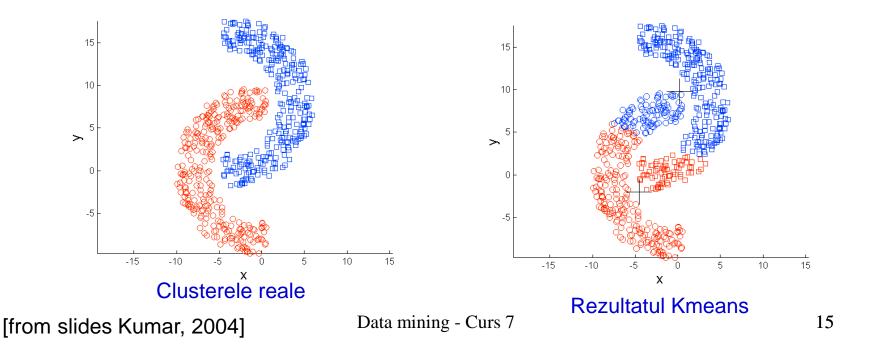
Inițializare favorabilă



Inițializare nefavorabilă

Limite:

- Nu funcţionează bine dacă datele nu sunt "sferice" sau bine separate (distribuţiile de probabilitate corespunzătoare clusterelor nu sunt neapărat normale)
 - Soluţie: utilizarea altor abordări (e.g. clustering bazat pe densitate)



Limite:

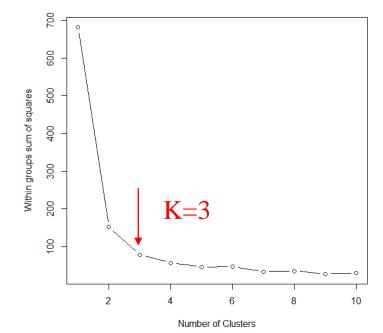
- Rezultatul poate fi ușor influențat de erorile din date sau de datele atipice
 - Soluţie: utilizarea medianei în locul mediei în construirea centroizilor (reprezentanţii clusterilor)
 - kMedian se determină mediana la nivel de componentă (corespunde cazului în care se utilizează distanța Manhattan în criteriul de optimizat)
 - kMedoid se determină elementul din setul de date care este cel mai apropiat de media clusterului (sau elementul din cluster care minimizează suma distanțelor dintre celelalte elemente ale clusterului și acel element); cel mai reprezentativ algoritm este Partitioning around Medoids – PAM (mai puțin eficient decât kMeans)
- Varianta bazată pe calculul mediei poate fi aplicată doar datelor numerice; pentru date ordinale se poate utiliza varianta bazată pe mediană (kMedian) iar pentru cele nominale se poate utiliza moda (cea mai frecventă componentă – kMode)

Limite: necesită cunoașterea apriori a numărului de clustere

Soluţii:

aplică algoritmul pt diferite valori ale lui K şi se selectează varianta care corespunde celor mai bune valori ale criteriilor de calitate (un exemplu de metodă este cea cunoscută sub denumirea de "elbow": se calculează varianța intra-cluster pentru diferite valori ale lui K şi se alege valoarea lui K pentru care se schimbă modul în care descreşte varianta = punct de cotitură)

Set date: Iris → K=3



ISODATA

Post-procesarea rezultatelor procesului de clustering prin partiţionarea clusterelor cu variabilitate mare şi reunirea clusterelor apropiate (ex: alg. ISODATA)

Idei principlale ale alg ISODATA

- Dacă dimensiunea unui cluster este mai mică decât Nmin (un parametru care specifică numărul minim de date dintr-un cluster) atunci clusterul ar trebui reunit cu cel mai apropiat alt cluster
- Dacă distanţa dintre două clustere (de exemplu distanţa dintre prototipurile clusterelor) este mai mică decât Dmin (un parametru care specifică distanţa minimă dintre clustere) atunci clusterele ar trebui reunite
- Dacă varianța unui cluster este mai mare decât Vmax şi numărul de date conţinute este mai mare decât 2*Nmin atunci clusterul poate fi divizat în două alte clustere:
 - Identifică atributul j pt care varianţa este maxmă
 - Din prototipul c_k sunt construite două alte prototipuri c' şi c" prin înlocuirea valorii atributului j din c_k cu c_k(j)-b respectiv c_k(j)+b, (b este un parametru setat de către utilizator)

Fuzzy cMeans

Ideea grupării fuzzy (soft):

- O dată nu aparţine unui singur cluster ci poate aparţine mai multor clustere (cu un anumit grad de apartenenţă pentru fiecare cluster)
- Rezultatul unei grupări fuzzy este o matrice de apartenență M de dimensiune NxK

(N= nr date, K= nr clustere);

M(i,j) = o valoare din [0,1] care corespunde gradului de apartenenţă a datei i la clusterul j

Obs: Fuzzy cMeans poate fi utilizată în segmentarea imaginilor, prelucrarea datelor în geostatistică, gruparea datelor din metabolomică etc.

Fuzzy cMeans

Algoritm

- Initializare matrice de apartenență (M)
- Repeat
 - Calcul centroizi (c_k, k=1,...K)
 - Actualizare valori matrice de apartenență (m_{ii}, i=1,...,N, j=1,...,K

until <matricea de apartenență nu se mai modifică>

Obs: pentru a obține o partiție, la finalul prelucrării fiecare dată este asignată la clusterul ce corespunde celui mai mare grad de apartenență

Calculul centroizilor

$$c_j = \frac{\sum_{i=1}^n M_{ij}^p x_i}{\sum_{i=1}^n M_{ij}^p}, \qquad j = \overline{1, K}$$

p>1 este un parametru (de exemplu, p=2)

Calculul gradului de apartenență

$$M_{ij} = \frac{1/\left\|x_i - c_j\right\|^{2/(p-1)}}{\sum_{k=1}^{K} 1/\left\|x_i - c_k\right\|^{2/(p-1)}}$$

$$i = \overline{1, N}, j = \overline{1, K}$$

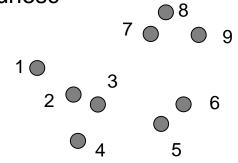
Algoritmi ierarhici

Obs: una dintre principalele limite ale algoritmilor partiționali e faptul că necesită cunoașterea numărului de clustere.

Altă abordare: se construiește o ierarhie de partiţii – conduce la o structură arborescentă numită dendrogramă

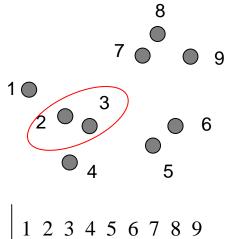
- In varianta bottom-up (metoda aglomerativă)
 - Se porneşte cu o partiţie de clustere ce conţin fiecare câte o singură dată (reprezintă frunze în structura arborescentă)
 - Se reunesc clusterele care sunt suficient de similare între ele procesul de reunire se repetă până se ajunge la un singur cluster (reprezintă rădăcina arborelui)
- In varianta top-down (metoda divizivă)
 - Se porneşte cu o partiţie ce conţine un singur cluster (cu toate datele)
 - Se partiţionează clusterii mari aplicând o tehnica partiţională (ex: kMeans) – procesul continuă până când se ajunge la clustere ce conţin câte o singură dată.

Idee: se identifică la fiecare etapă care sunt cele mai similare clustere şi se reunesc



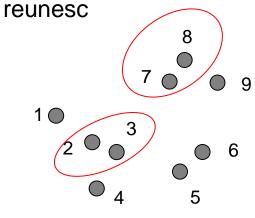
Matrice de disimilaritate

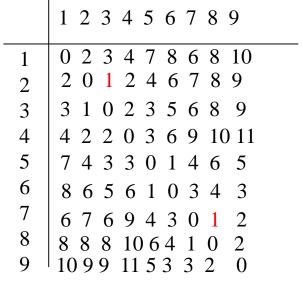
	1 2 3 4 5 6 7 8 9										
1	0 2 3 4 7 8 6 8 10										
2	201246789										
3	3 1 0 2 3 5 6 8 9										
4	4 2 2 0 3 6 9 10 11		1	2	3	4	5	6	7	8	9
5	7 4 3 3 0 1 4 6 5										
6	8 6 5 6 1 0 3 4 3										
7	676943012										
8	8 8 8 10 6 4 1 0 2	Data mining - Curs 7 22									
9	1099 115 3 3 2 0										



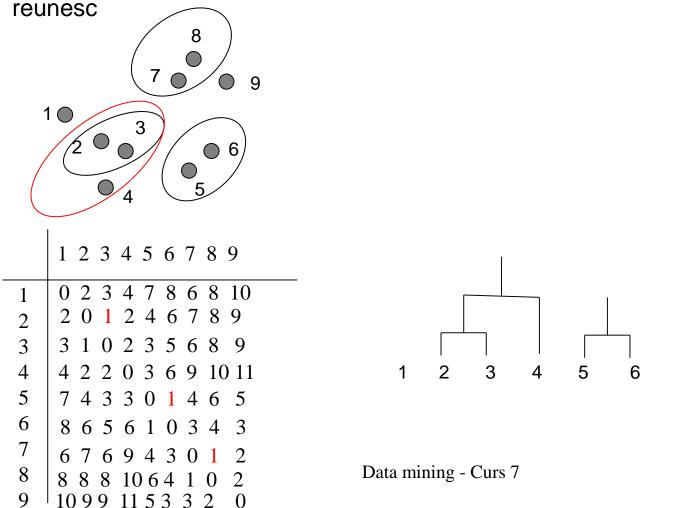
	1 2 3 4 5 6 7 8 9
1	0 2 3 4 7 8 6 8 10
2	201246789
3	3 1 0 2 3 5 6 8 9
4	4 2 2 0 3 6 9 10 11
5	7 4 3 3 0 1 4 6 5
6	8 6 5 6 1 0 3 4 3
7	676943012
8	8 8 8 10 6 4 1 0 2
9	1099 1153 3 2 0

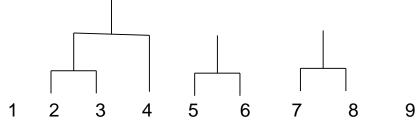


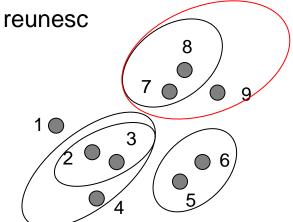


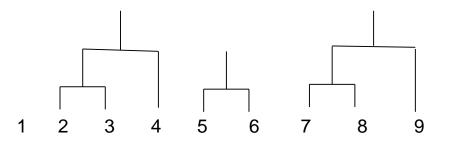


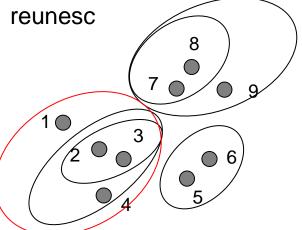


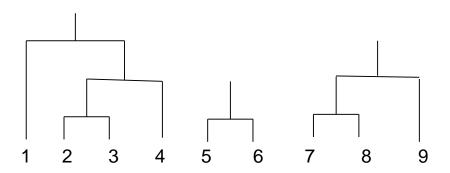


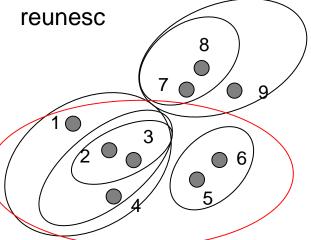


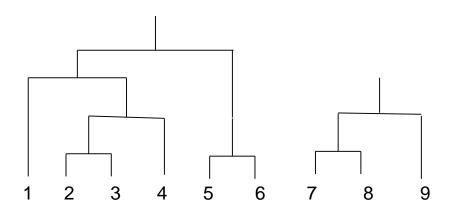




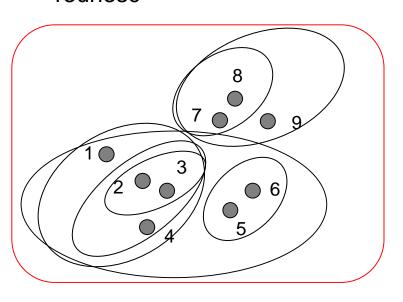




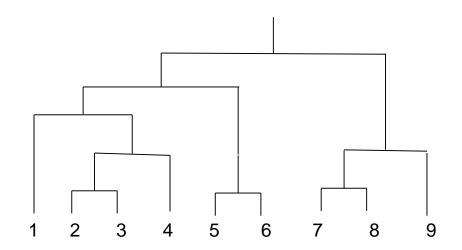




Idee: se identifică la fiecare etapă care sunt cele mai similare clustere şi se reunesc



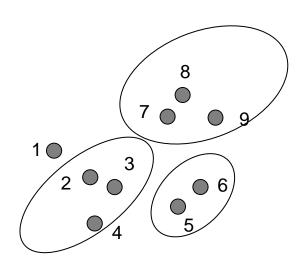
Dendrograma rezultată



Reprezentarea unei dendrograme: ca set de triplete ordonate

(nivel, nr de clustere, clustere)

```
\{(0,9,\{\{1\},\{2\},...,\{9\}\}),(1,6,\{\{1\},\{2,3\},\{4\},\{5,6\},\{7,8\},\{9\}\}),(2,4,\{\{1\},\{2,3,4\},\{5,6\},\{7,8,9\}\}),(3,3,\{\{1,2,3,4\},\{\{5,6\},\{7,8,9\}\}),(4,2,\{\{1,2,3,4,5,6\},\{7,8,9\}),(5,1,\{\{1,2,3,4,5,6,7,8,9\}\})\}
```



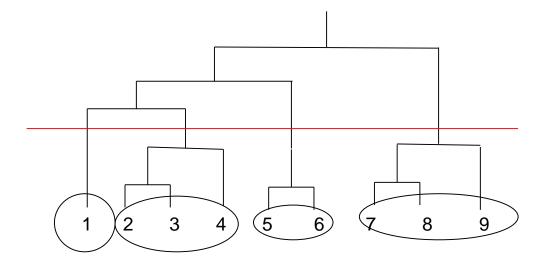
 Pentru a obţine o partiţie dendrograma trebuie secţionată

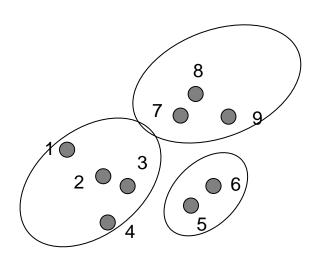
Partiţie:

$$C2=\{2,3,4\}$$

$$C3=\{5,6\}$$

$$C4=\{7,8,9\}$$



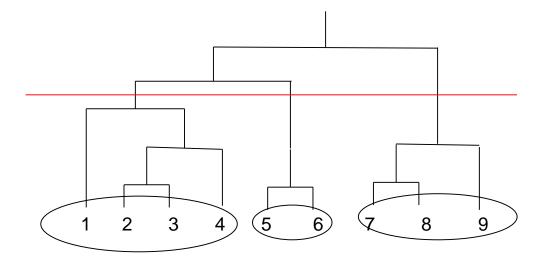


 Schimbând nivelul de secţionare se obţine o altă partiţie

Partiție:

$$C2=\{5,6\}$$

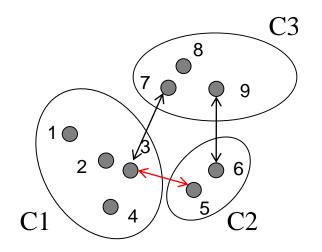
$$C3=\{7,8,9\}$$



Problema: care e criteriul de selecţie a clusterelor care se reunesc?

Răspuns: se folosește o măsură de disimilaritate între clustere; sunt mai multe moduri de a calcula această măsură:

 Single-linkage: cea mai mică disimilaritate (distanţă) între datele aparţinând unor clustere diferite



$$D_{SL}(C_i, C_j) = \min_{x \in C_i, y \in C_j} d(x, y)$$

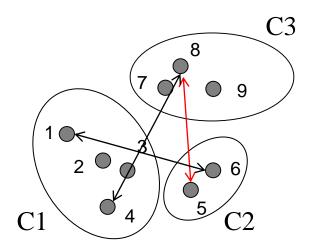
Obs:

- Single linkage permite identificarea unor clustere care nu au neapărat formă elipsoidală
- Este sensibil la erori şi date atipice

Problema: care e criteriul de selecţie a clusterelor care se reunesc?

Răspuns: se folosește o măsură de disimilaritate între clustere; sunt mai multe moduri de a calcula această măsură

 Complete-linkage: cea mai mare disimilaritate (distanţă) între datele aparţinând unor clustere diferite

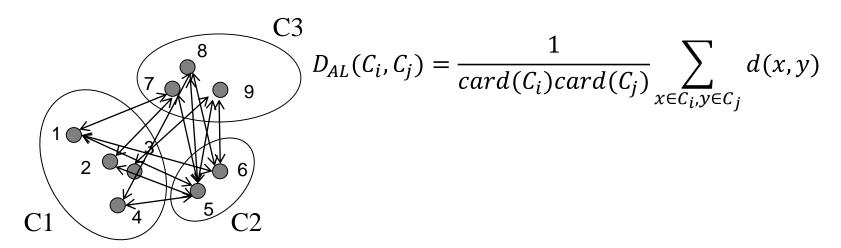


$$D_{CL}(C_i, C_j) = \max_{x \in C_i, y \in C_j} d(x, y)$$

Problema: care e criteriul de selecţie a clusterelor care se reunesc?

Răspuns: se folosește o măsură de disimilaritate între clustere; sunt mai multe moduri de a calcula această măsură

Average-linkage: media distanţelor dintre datele aparţinând unor clustere diferite

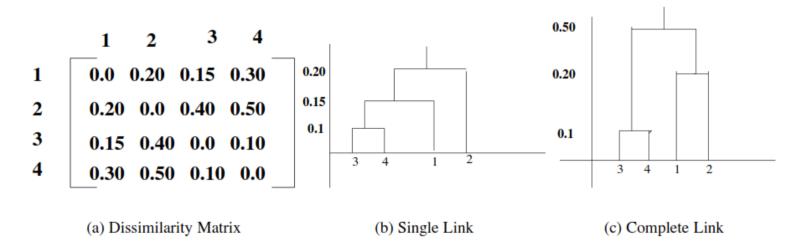


Problema: care e criteriul de selecţie a clusterelor care se reunesc?

Răspuns: se folosește o măsură de disimilaritate între clustere; sunt mai multe moduri de a calcula această măsură

 Criteriul Ward: se alege perechea de clustere a căror reuniune conduce la cea mai mică creștere în varianța intra-cluster (SSE(X,C))

Măsura de disimilaritate între clustere (criteriul de reunire a clusterelor) influențează rezultatul grupării:



[Data Clustering: Algorithms and Applications, 2014]

Algoritm

```
Input: set de date cu N instanţe

X={x<sub>1</sub>,x<sub>2</sub>,...,x<sub>N</sub>} + matrice disimilaritate D

Output: dendrograma (set de triplete)
```

```
agglomerative(X,D)
level=0; k=N
C = \{\{x_1\}, \{x_2\}, ..., \{x_N\}\}\}; DE = \{\{(level, k, C)\}\}
repeat
 oldk=k
 level=level+1
 (k,C) = mergeClusters(k,C,D)
 D(k) = recompute (D(oldK), C)
 DE = union (DE, (level,k,C))
 k = k-1
until k=1
```

Obs

- Funcţia mergeClusters identifică cele mai apropiate clustere şi le reuneşte
- Funcția recompute recalculează matricea de similaritate corespunzătoare setului curent de clustere (folosind single/complete/average linkage)

Dezavantaje

- Complexitate implementare bazată pe abordare greedy: O(N³) – nr operaţii, O(N²) – spaţiu memorie
- Variantele de implementare care utilizează cozi de priorități au ordin de complexitate O(N²log N)
- Este un algoritm determinist dar este senzitiv la erorile din date

37

Metoda divizivă

Structura generică

Input: set de date cu N instanțe $X=\{x_1,x_2,...,x_N\}$

Output: dendrograma (tree) T

divisive(X,D)

Initializează arborele T cu nodul rădăcină (corespunde întregului set de date)

Repeat

Selectează un nod frunză L din T

Utilizează un algoritm partițional de clustering pentru a descompune L in $L_1, L_2, ... L_k$

Adaugă $L_1, L_2, ... L_k$ ca fii ai lui L în arborele T

until <a stopping criterion>

Obs: algoritmul partiţional poate fi kMeans; un caz particular este bisecting kMeans care se bazează pe partiţionarea unui cluster în două alte clustere (aplicând la fiecare etapa kMeans pt k=2)

Eficientizarea algoritmilor ierarhici

- Algoritmii ierarhici tradiţionali au ordin cubic/pătratic de complexitate (în raport cu numărul de date din set) – construirea dendrogramei devine costisitoare în cazul prelucrării unui volum mare de date
- Variante mai eficiente:
 - BIRCH Balanced Iterative Reducing and Clustering using Hierarchies (Zhang et al, 1996) constă în două etape:
 - Se construiește o structura arborescentă care reprezintă o variantă comprimată a datelor inițiale
 - Se aplică o strategie de grupare pe datele corespunzătoare nodurilor frunză ale structurii arborescente construite în prima etapă
 - CURE Clustering using Representatives (Guho et al, 1998)
 - Fiecare cluster este specificat prin mai mulți reprezentanți
 - Gruparea este constituită folosind eșantioane aleatoare din setul inițial de date

Sumar

Algoritm kMeans

- E algoritm partiţional → o singură partiţie
- Necesită specificarea numărului de clustere
- Este specific pentru date numerice
 necesită acces la date
- Generează clustere "sferice" adecvat pentru clustere cu distribuție apropiată de cea normală
- Cost computațional mic
- Fiecare cluster are un centroid → datele pot fi asignate la clustere pe baza distanței față de centroid (algoritm de tip inductiv)
 Data m

Algoritm aglomerativ

- E algoritm ierarhic → ierarhie de partiţii
- Nu necesită specificarea numărului de clustere
- Este suficient să se cunoască matricea de (di)similaritate
- Cost computațional mare
- Nu se bazează pe prototipuri → nu oferă un criteriu de asignare a datelor noi la clustere (algoritm de tip transductiv)

Cursul următor

- Algoritmi bazați pe analiza densității datelor
 - DBSCAN
 - DENCLUE
- Algoritmi bazaţi pe modele probabiliste
 - EM (Expectation Maximization)