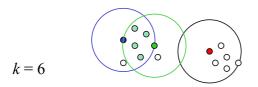
5.3 Dichtebasiertes Clustering

Shared Nearest Neighbor (SNN) Clustering

- DBSCAN
 - Erkennt Cluster unterschiedlicher Form und Größe
 - Hat Probleme bei Clustern mit unterschiedlicher Dichte
- Verbesserung: anderer Ähnlichkeitsbegriff
 - Ähnlichkeit zwischen zwei Objekten, wenn sie beide sehr nahe zu einer Referenzmenge R sind
 - Ähnlichkeit wird durch die Referenzmenge R "bestätigt"
 - Ähnlichkeit z.B. durch die Anzahl gemeinsamer nächster Nachbarn definieren (d.h. R ist die Menge der nächsten Nachbarn)
 - Shared Nearest Neighbor (SNN) Ähnlichkeit: $SNN_k\text{-similarity}(p,q) = |NN(p, k) \cap NN(q, k)|$ NN(o, k) = Menge der k-nächsten Nachbarn von Objekt o (vgl. Kap. 2.2)



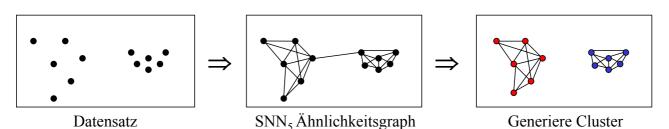
 SNN_6 -similarity(\bullet , \bullet) = 4 SNN_6 -similarity(\bullet , \bullet) = 0

222

5.3 Dichtebasiertes Clustering

Einfaches SNN-Clustering [Jarvis, Patrick 73]:

- 1. Berechnung der Ähnlichkeitsmatrix und des Ähnlichkeitsgraphen
 - für alle Objekt-Paare $p,q \in DB$: berechne SNN_k -similarity(p,q)
 - SNN_k-Ähnlichkeitsgraph:
 - Knoten = Objekten
 - Kante zwischen jedem Objektpaar p,q mit Gewicht SNN_k -similarity(p,q)
 - Keine Kanten mit Gewicht 0
- 2. Generiere Cluster
 - Lösche alle Kanten, deren Gewicht unterhalb eines Grenzwerts τ liegen
 - Cluster = verbundenen Komponenten im resultierenden Graphen



223

5.3 Dichtebasiertes Clustering

Problem:

- Threshold τ schwer zu bestimmen
- kleine Variationen führen zu stark unterschiedlichen Ergebnissen

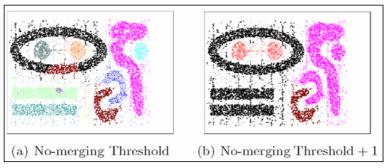


Bild aus: [Ertöz, Steinbach, Kumar 03]

Lösung [Ertöz, Steinbach, Kumar 03]

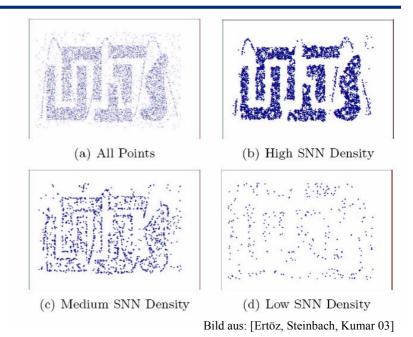
- Kombiniere SNN-Ähnlichkeit mit dichtebasierten Konzepten
- SNN-Dichte: Anzahl der Punkte innerhalb eines spezifizierten Radius ε bzgl. SNN-Ähnlichkeit $SNN_k\text{-density}(p,\varepsilon) = |\{q \mid SNN_k\text{-similarity}(p,q) \ge \varepsilon\}|$

224

5.3 Dichtebasiertes Clustering

SNN-Dichte

- Beispiel:
 - 10 000 Daten (Bild (a))
 - $-k = 50, \epsilon = 20$
 - Bild (b): "Kernpunkte"alle Punkte mit SNN-Dichte ≥ 34
 - Bild (c): "Randpunkte"alle Punkte mit SNN-Dichte ≥ 17
 - Bild (d): "Rauschen"alle Punkte mit SNN-Dichte < 17



Analogie zu DBSCAN: ε = 20, minPts = 34
 Kernpunkt p: mehr als minPts Punkte haben 20 oder mehr der 50 nächsten Nachbarn mit p gemeinsam

5.3 Dichtebasiertes Clustering

SNN-Clustering Algorithmus [Ertöz, Steinbach, Kumar 03]

Eingabe: k, ϵ , minPts

- 1. Berechne Ähnlichkeitsmatrix und -graph (siehe einfaches SNN-Clustering)
- 2. Berechne die SNN $_k$ -Dichte für jeden Punkt bzgl. ε
- 3. Bestimme Kernpunkte bzgl. minPts (alle Punkte mit einer SNN-Dichte $\geq minPts$)
- 4. Vereinige Kernpunkte p,q, wenn SNN_k -similarity $(p,q) \ge \varepsilon$
- 5. Ordne Nicht-Kernpunkt p einem Cluster zu, wenn es ein Kernpunkt q gibt, mit SNN_k -similarity $(q,p) \ge \varepsilon$
- 6. Alle anderen Nicht-Kernpunkte sind Rauschen

DBSCAN mit SNN-Ähnlichkeit

226

5.3 Dichtebasiertes Clustering

Diskussion

- Unterschied zu DBSCAN
 - DBSCAN mit Euklidischer Distanz: nur Cluster, die dichter sind als der Grenzwert (spezifiziert durch *minPts* und ε)
 - SNN-Dichte eines Punktes *p*: Anzahl der Punkte, die mind. ε nächste Nachbarn mit *p* gemeinsam haben
 - ⇒ unabhängig von der eigentlichen Dichte
- Parametrisierung
 - Wahl von *k* ist kritisch:
 - Zu klein: auch relativ gleichverteilte Cluster werden wegen lokalen Variationen gesplittet ⇒ viele kleine Cluster
 - Zu groß: wenige große, gut-separierte Cluster
 - $minPts, \varepsilon < k$

Grundlagen

Ziel

Konstruktion einer Hierarchie von Clustern (*Dendrogramm*), so dass immer die Cluster mit minimaler Distanz verschmolzen werden

Dendrogramm

ein Baum, dessen Knoten jeweils ein Cluster repräsentieren, mit folgenden Eigenschaften:

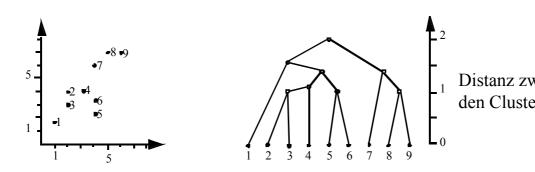
- die Wurzel repräsentiert die ganze DB
- die Blätter repräsentieren einzelne Objekte
- ein innerer Knoten repräsentiert einen Cluster bestehend aus allen Objekten des darunter liegenden Teilbaums

228

5.4 Hierarchische Verfahren

Grundlagen

Beispiel eines Dendrogramms



Typen von hierarchischen Verfahren

- Bottom-Up Konstruktion des Dendrogramms (agglomerative)
- Top-Down Konstruktion des Dendrogramms (divisive)

Algorithmus Single-Link [Jain & Dubes 1988]

Agglomeratives hierarchisches Clustering

- 1. Bilde initiale Cluster, die jeweils aus einem Objekt bestehen, und bestimme die Distanzen zwischen allen Paaren dieser Cluster.
- 2. Bilde einen neuen Cluster aus den zwei Clustern, welche die geringste Distanz zueinander haben.
- 3. Bestimme die Distanz zwischen dem neuen Cluster und allen anderen Clustern.
- 4. Wenn alle Objekte in einem einzigen Cluster befinden: Fertig, andernfalls wiederhole ab Schritt 2.

230

5.4 Hierarchische Verfahren

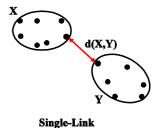
Distanzfunktionen für Cluster

- Die Verfahren unterscheiden sich anhand ihrer Distanzfunktionen für Cluster
 - Single Link
 - Complete Link
 - Average Link
- Sei eine Distanzfunktion dist(x,y) für Paare von Objekten gegeben
- Seien X, Y Cluster, d.h. Mengen von Objekten.

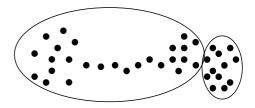
Single-Link Distanz

• Definition:

$$distSL(X,Y) = \min_{x \in X, y \in Y} dist(x,y)$$



- Eigenschaften:
 - Effiziente Implementierung (z.B. SLINK): O(n²)
 - Single-Link Effekt: "kettenförmige" Cluster, Cluster werden durch wenige, kettenförmig verteilte Objekte vereinigt
 - Cluster mit starker Streuung
 - Cluster mit langgezogener Struktur



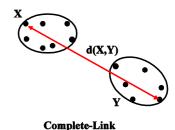
232

5.4 Hierarchische Verfahren

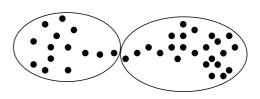
Complete-Link Distanz

• Definition:

$$distCL(X,Y) = \max_{x \in X, y \in Y} dist(x,y)$$



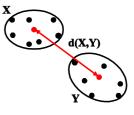
- Eigenschaften:
 - Effiziente Implementierung (z.B. CLINK): O(n²)
 - Complete-Link Effekt
 - Kleine, stark abgegrenzte Cluster
 - Gleichgroße, konvexe Cluster



Average-Link Distanz

• Definition:

$$distAL(X,Y) = \frac{1}{|X| \cdot |Y|} \cdot \sum_{x \in X, y \in Y} dist(x,y)$$



Average-Link

- Eigenschaften:
 - Keine effiziente Implementierung
 - Kompromiss zwischen Single- und Complete-Link Ansatz

234

5.4 Hierarchische Verfahren

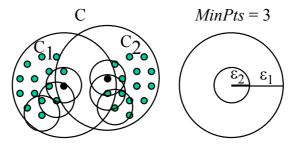
Diskussion

- + erfordert keine Kenntnis der Anzahl k der Cluster
- + findet nicht nur ein flaches Clustering, sondern eine ganze Hierarchie
- + ein einzelnes Clustering kann aus dem Dendrogramm gewonnen werden, z.B. mit Hilfe eines horizontalen Schnitts durch das Dendrogramm (erfordert aber wieder Anwendungswissen)
- Entscheidungen können nicht zurückgenommen werden
- Single-Link-Effekte, Complete-Link-Effekte
- Ineffizienz Laufzeitkomplexität von mindestens $O(n^2)$ für n Objekte

Dichtebasiertes hierarchisches Clustering

[Ankerst, Breunig, Kriegel & Sander 1999]

• für einen konstanten *MinPts*-Wert sind dichte-basierte Cluster bzgl. eines kleineren ε vollständig in Clustern bzgl. eines größeren ε enthalten



• in einem DBSCAN-ähnlichen Durchlauf gleichzeitig das Clustering für verschiedene Dichte-Parameter bestimmen

zuerst die dichteren Teil-Cluster, dann den dünneren Rest-Cluster

• kein Dendrogramm, sondern eine auch noch bei sehr großen Datenmengen übersichtliche Darstellung der Cluster-Hierarchie

5.4 Hierarchische Verfahren

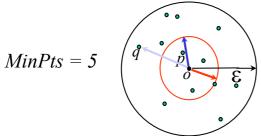
Grundbegriffe

Kerndistanz eines Objekts p bzgl. ε und MinPts

$$Kerndistanz_{\varepsilon,\mathit{MinPts}}(o) = \begin{cases} \mathit{UNDEFINIERT}, \mathit{wenn} \mid \mathit{RQ}(o,\varepsilon) \mid < \mathit{MinPts} \\ \mathit{MinPtsDistanz}(o), \mathit{sonst} \end{cases}$$

Erreichbarkeitsdistanz eines Objekts p relativ zu einem Objekt o

 $Erreichbarkeits distanz_{\varepsilon, \mathit{MinPts}}(p, o) = \begin{cases} \mathit{UNDEFINIERT}, \mathit{wenn} \mid \mathit{RQ}(o, \varepsilon) \mid < \mathit{MinPts} \\ \max\{\mathit{Kerndistanz}(o), \mathit{dist}(o, p)\}, \mathit{sonst} \end{cases}$



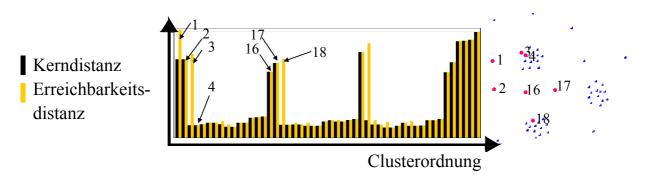
 \longrightarrow Kerndistanz(o)

 \longrightarrow Erreichbarkeitsdistanz(p,o)

 $\longrightarrow Erreichbarkeitsdistanz(q,o)$

Clusterordnung

- OPTICS liefert nicht direkt ein (hierarchisches) Clustering, sondern eine "Clusterordnung" bzgl. ε und *MinPts*
- Clusterordnung bzgl. ɛ und MinPts
 - beginnt mit einem beliebigen Objekt
 - als n\u00e4chstes wird das Objekt besucht, das zur Menge der bisher besuchten Objekte die minimale Erreichbarkeitsdistanz besitzt



238

5.4 Hierarchische Verfahren

Algorithmus OPTICS

- Datenstrukturen
 - SeedList
 - speichert Punkte mit "aktueller" Erreichbarkeitsdistanz aufsteigend sortiert
 - ClusterOrder
 - resultierende Clusterordnung wird schrittweise aufgebaut
- Hauptschleife:

SeedList = \emptyset ;

WHILE es gibt noch unmarkierte Objekte in DB DO

IF SeedList = \emptyset

THEN füge beliebiges noch unmarkiertes Objekt in ClusterOrder ein mit Erreichbarkeitsdistanz ∞; **ELSE** füge erstes Objekt aus der SeedList mit aktueller Erreichbarkeitsdistanz in ClusterOrder ein; // sei obj das zuletzt in ClusterOrder eingefügte Objekt

markiere obj als bearbeitet;

FOR ALL neighbor $\in RQ(obj, \varepsilon)$ **DO**

SeedList.update(neighbor, obj);

// insert/update neighbor in SeedList mit referenzobjekt obj;

Algorithmus OPTICS

- Einfügen/Updaten eines Objekts o in SeedList
 - Beachte: Für alle Objekte *p* in SeedList ist die "aktuelle" Erreichbarkeitsdistanz *p*.rdist gespeichert.
 - SeedList ist nach p.rdist aufsteigend sortiert (als Heap organisiert)
 - Referenzobjekt: *obj*

```
SeedList :: update(o, obj)

Berechne Erreichbarkeitsdistanz<sub>\varepsilon,MinPts</sub>(o, obj) =: rdistneu_o;

IF o ist bereits in SeedList THEN

IF rdistneu_o \le o.rdist THEN

o.rdist := rdistneu_o;

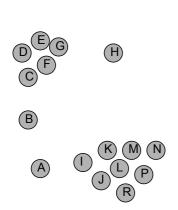
verschiebe o in SeedList (nach vorne); // aufsteigen im Heap

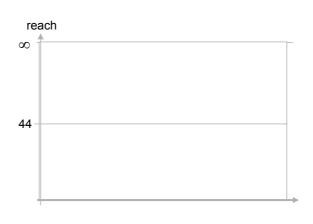
ELSE // o ist noch nicht in SeedList füge o mit o.rdist := rdistneu_o in SeedList ein; // normales Einfügen in Heap
```

240

5.4 Hierarchische Verfahren

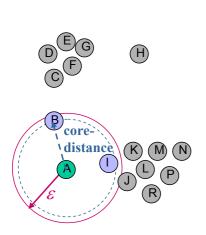
- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3





seed list:

- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3



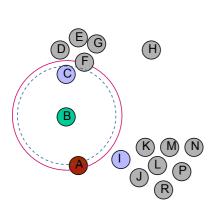


seed list: (B,40) (I, 40)

242

5.4 Hierarchische Verfahren

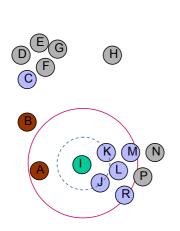
- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3

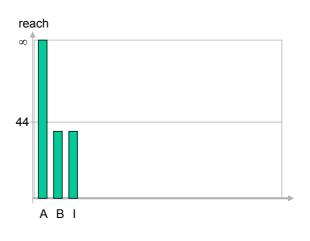




seed list: (I, 40) (C, 40)

- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3



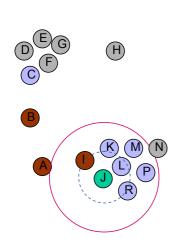


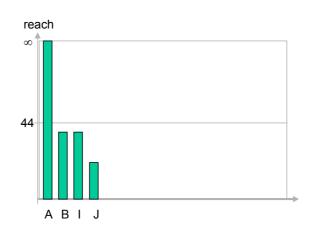
seed list: (J, 20) (K, 20) (L, 31) (C, 40) (M, 40) (R, 43)

244

5.4 Hierarchische Verfahren

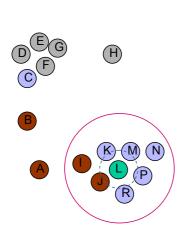
- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3

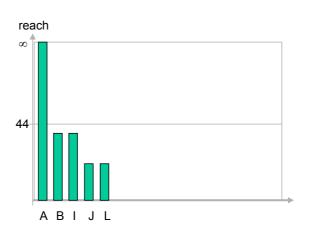




seed list: (L, 19) (K, 20) (R, 21) (M, 30) (P, 31) (C, 40)

- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3



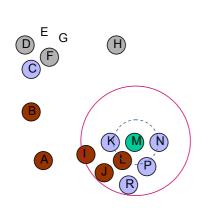


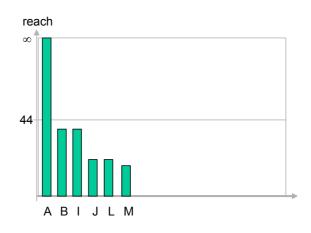
seed list: (M, 18) (K, 18) (R, 20) (P, 21) (N, 35) (C, 40)

246

5.4 Hierarchische Verfahren

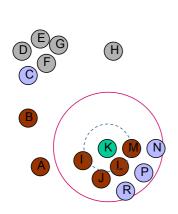
- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3

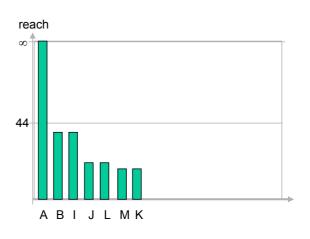




seed list: (K, 18) (N, 19) (R, 20) (P, 21) (C, 40)

- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3



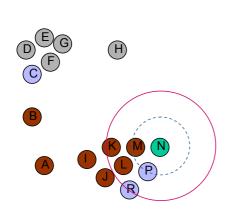


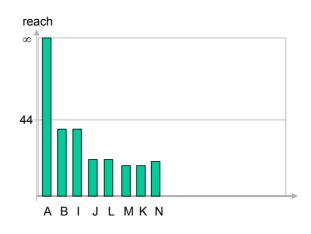
seed list: (N, 19) (R, 20) (P, 21) (C, 40)

248

5.4 Hierarchische Verfahren

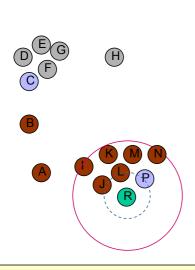
- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3

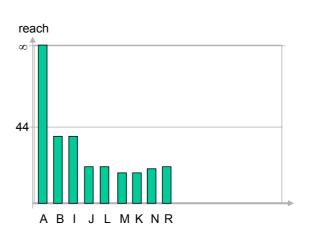




seed list: (R, 20) (P, 21) (C, 40)

- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3



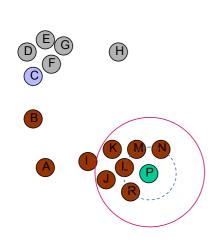


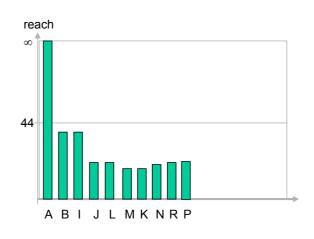
seed list: (P, 21) (C, 40)

250

5.4 Hierarchische Verfahren

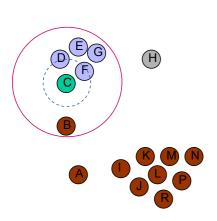
- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3

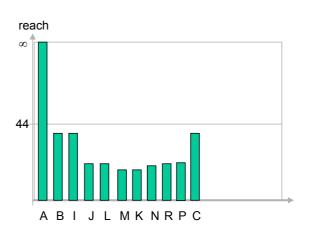




seed list: (C, 40)

- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3



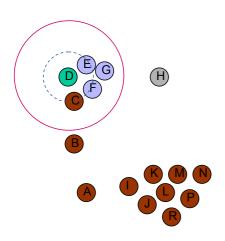


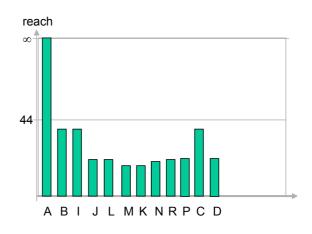
seed list: (D, 22) (F, 22) (E, 30) (G, 35)

252

5.4 Hierarchische Verfahren

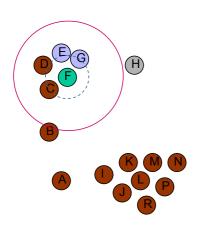
- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3

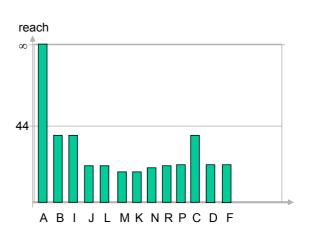




seed list: (F, 22) (E, 22) (G, 32)

- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3



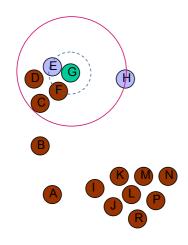


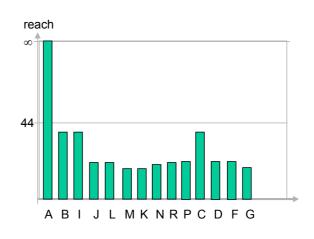
seed list: (G, 17) (E, 22)

254

5.4 Hierarchische Verfahren

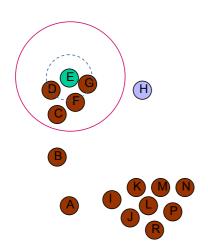
- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3

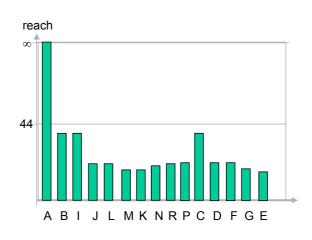




seed list: (E, 15) (H, 43)

- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3



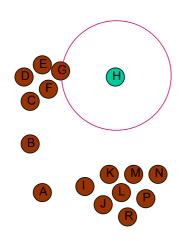


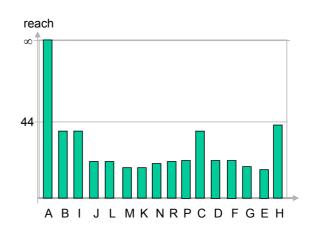
seed list: (H, 43)

256

5.4 Hierarchische Verfahren

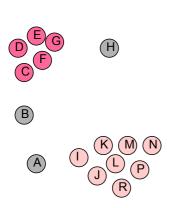
- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- $\varepsilon = 44$, MinPts = 3

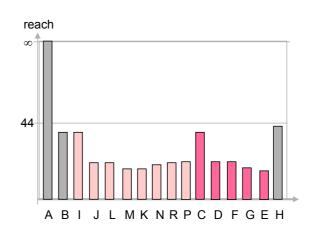




seed list: -

- Example Database (2-dimensional, 16 points)
- ε = 44, MinPts = 3



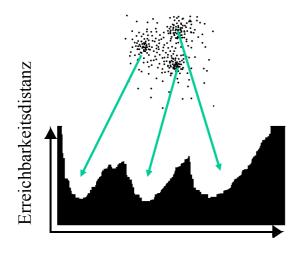


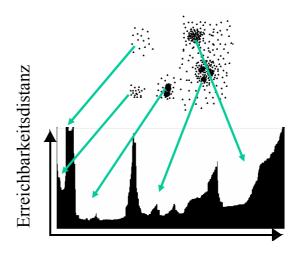
258

5.4 Hierarchische Verfahren

Erreichbarkeits-Diagramm

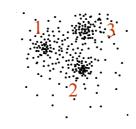
- Zeigt die Erreichbarkeitsdistanzen (bzgl. ε und *MinPts*) der Objekte als senkrechte, nebeneinanderliegende Balken
- in der durch die Clusterordnung der Objekte gegebenen Reihenfolge





Clusterordnung

Parameter-Sensitivität



 $MinPts = 10, \varepsilon = 10$



optimale Parameter

 $MinPts = 10, \, \epsilon = 5$



kleineres ε

 $MinPts = 2, \varepsilon = 10$



kleineres MinPts



Clusterordnung ist robust gegenüber den Parameterwerten gute Resultate wenn Parameterwerte "groß genug"

260

5.4 Hierarchische Verfahren

Heuristische Parameter-Bestimmung

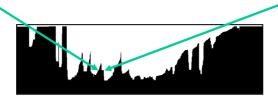
3

- wähle größte MinPts-Distanz aus einem Sample oder
- berechne durchschnittliche MinPts-Distanz für gleichverteilte Daten

MinPts

- glätte Erreichbarkeits-Diagramm
- vermeide "single-" bzw. "MinPts-link" Effekt



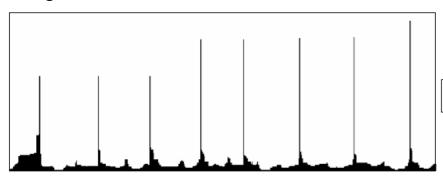




Manuelle Analyse der Cluster

Mit Erreichbarkeits-Diagramm

- gibt es Cluster?
- wieviele Cluster?
- sind die Cluster hierarchisch geschachtelt?
- wie groß sind die Cluster?



Erreichbarkeits-Diagramm

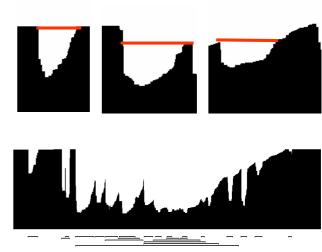
262

5.4 Hierarchische Verfahren

Automatisches Entdecken von Clustern

ξ-Cluster [Ankerst, Breunig, Kriegel, Sander 99]

- Teilsequenz der Clusterordnung
- beginnt in einem Gebiet ξ-steil *abfallender* Erreichbarkeitsdistanzen
- endet in einem Gebiet ξ-steil *steigender* Erreichbarkeitsdistanzen bei etwa demselben absoluten Wert
- enthält mindestens MinPts Punkte

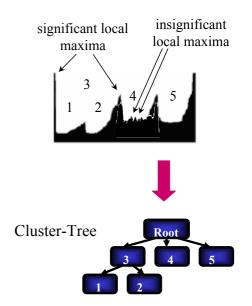


Automatisches Entdecken von Clustern

ClusterTree [Sander, Qin, Lu, Niu, Kovarsky 02]

- Cluster sind geteilt durch "signifikante" lokale Maxima:
 - Minimale Anzahl der Punkte zwischen 2 Maxima Richtwert: 0.5 % der Datenbank
 - Verhältnis zwischen Erreichbarkeitsdistanz des lokalen Maximas und der durchschnittlichen Erreichbarkeitsdistanzen links und rechts des Maximas in der Clusterordnung

Richtwert: 0.75



264

5.4 Hierarchische Verfahren

Automatisches Entdecken von Clustern

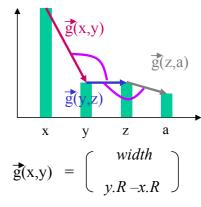
GradientClustering

[Brecheisen, Kriegel, Kröger, Pfeifle 04]

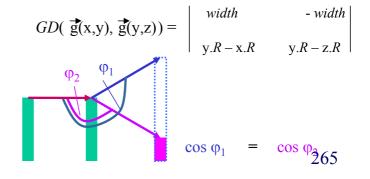
- Teilsequenzen der Clusterordnung
- beginnt/endet mit "Inflexion Point"
 - Gradientvektor
 - Inflexion Index
 - Inflexion Point, wenn II(o) > t
 - Gradient Determinante
 - Fallunterscheidung:

II(o) > t and GD(o) > 0 \Rightarrow Startpunkt oder erster Punkt außerhalb des Clusters

II(o) > t and GD(o) < 0 \Rightarrow Endpunkt oder zweiter Punkt innerhalb des Clusters



$$H(y) = \cos \varphi(\vec{g}(x,y), \vec{g}(y,z))$$



5.5 Besondere Anwendungen

Übersicht

- 5.5.1 Clustering mit kategorischer Attribute Grundlagen, Algorithmus *k*-modes
- 5.5.2 Verallgemeinertes dichtebasiertes Clustering Grundlagen, Algorithmus GDBSCAN, Beispiele

266

5.5.1 Clustering mit kategorischen Attributen

Grundlagen [Huang 1997]

- k-medoid-Algorithmus wesentlich langsamer als k-means- Algorithmus
- k-means-Verfahren nicht direkt für kategorische Attribute anwendbar



- Numerische Attribute Centroid \bar{x} einer Menge C von Objekten minimiert $TD(C,\bar{x}) = \sum_{p \in C} dist(p,\bar{x})$
- Kategorische Attribute Mode m einer einer Menge C von Objekten minimiert $TD(C,m) = \sum_{p \in C} dist(p,m)$ (m ist nicht unbedingt ein Element der Menge C)

 $m = (m_1, ..., m_d)$, dist eine Distanzfunktion für kategorische Attribute, z.B.

$$dist(x,y) = \sum_{i=1}^{d} \delta(x_i, y_i) \ mit \ \delta(x_i, y_i) = \begin{cases} 0 \ falls \ x_i = y_i \\ 1 \ sonst \end{cases}$$

5.5.1 Clustering mit kategorischen Attributen

Bestimmung des Modes

- Die Funktion $TD(C,m) = \sum_{p \in C} dist(p,m)$ wird minimiert genau dann, wenn für $m = (m_1, ..., m_d)$ und für alle Attribute A_i , i = 1,..., d, gilt: es gibt in A_i keinen häufigeren Attributwert als m_i
- Der Mode einer Menge von Objekten ist nicht eindeutig bestimmt.
- Beispiel

```
Objektmenge {(a, b), (a,c), (c, b), (b,c)}
(a, b) ist ein Mode
```

(a, c) ist ein Mode

268

5.5.1 Clustering mit kategorischen Attributen

Algorithmus k-modes

• Initialisierung

keine zufällige Partitionierung sondern k Objekte aus der Datenmenge als initiale Modes

• Cluster-Repräsentanten

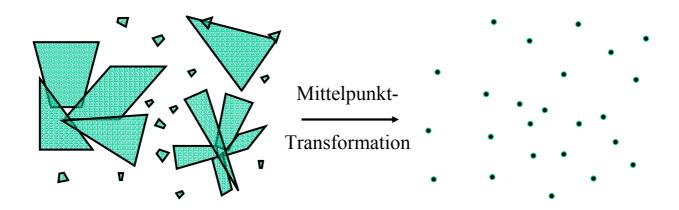
Mode anstelle des Centroids

• Distanzfunktion

anstelle der quadrierten euklidischen Distanz

Distanzfunktion für Datensätze mit kategorischen Attributen

Clustering ausgedehnter Objekte

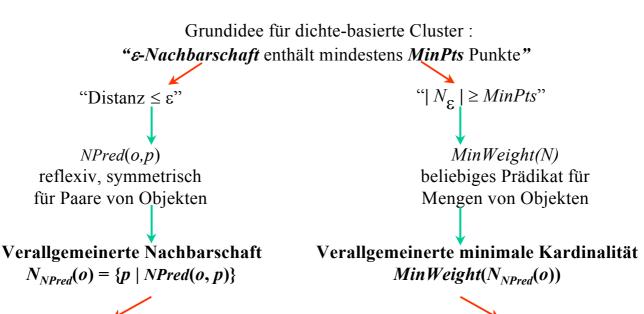


Berücksichtigung der Fläche und nicht-räumlicher Attribute natürlicher Begriff der Verbundenheit

270

5.5.2 Verallgemeinertes dichtebasiertes Clustering

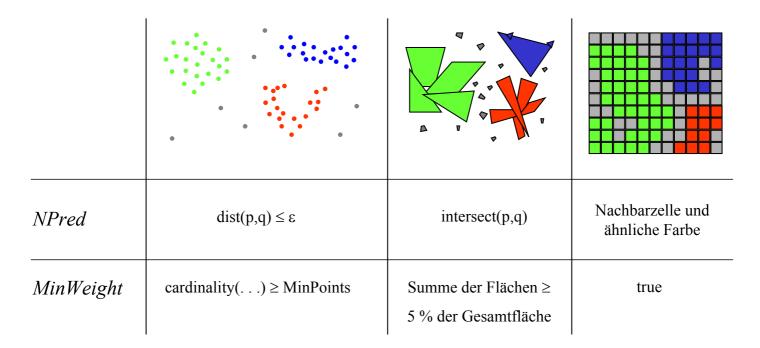
Algorithmus GDBSCAN [Sander, Ester, Kriegel & Xu 1998]



"NPred-Nachbarschaft hat mindestens das "Gewicht" MinWeight"

5.5.2 Verallgemeinertes dichtebasiertes Clustering

Beispiele



272

5.5.2 Verallgemeinertes dichtebasiertes Clustering

Algorithmus GDBSCAN

- dasselbe algorithmische Schema wie DBSCAN
- anstelle einer $RQ(o,\varepsilon)$ -Anfrage eine N_{NPred} -Anfrage
- anstelle der Bedingung $|RQ(o,\varepsilon)| \ge MinPts$ das MinWeight-Prädikat auswerten
- Laufzeitkomplexität $O(n \log n)$ bei geeigneter Unterstützung der N_{NPred} -Anfrage
- Beliebige Nachbarschaftsprädikate denkbar