Cluster Analysis: Metodi non gerarchici

Analisi Esplorativa

Aldo Solari

1. Cluster Analysis

2. Metodo delle K-medie

Outline

1. Cluster Analysis

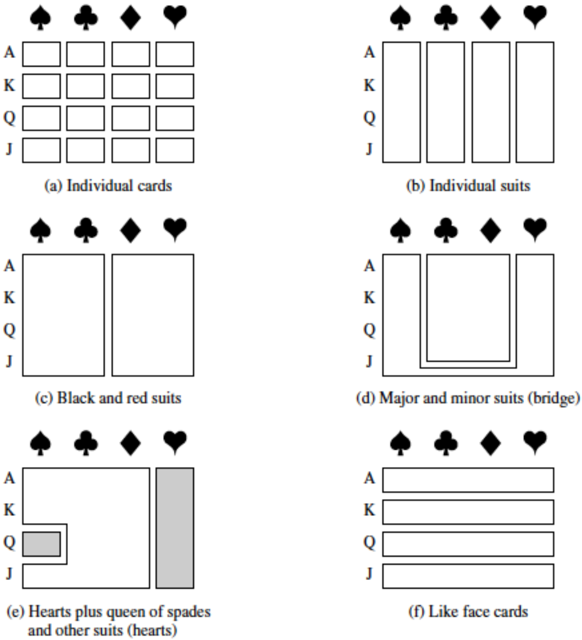
2. Metodo delle K-medie

Perchè raggruppare

- Suddividere le unità in gruppi è un modo naturale e, si può dire, imprescindibile, di ragionare per comprendere i fenomeni
- Si ragiona per gruppi perchè è più facile dominare mentalmente pochi gruppi che tante unità
- Uno stesso insieme di unità consente diversi raggruppamenti, nessuno è ‘giusto’, semmai può essere utile (o inutile o anche dannoso)
- Raggruppare utilmente: mettere insieme unità simili e separare unità dissimili, in altre parole creare gruppi
    - omogenei al loro interno (*internal cohesion*)
    - disomogenei tra di loro (*external isolation*)

Cluster analysis

- Nell'analisi di raggruppamento (o *cluster analysis*) la domanda cui si vuol rispondere è se esistono e quanti sono dei gruppi sensati (naturali) in cui suddividere le unità sulla base delle variabili osservate
- Se si ha una conoscenza approfondita del fenomeno in esame, si è in grado di distinguere tra 'buoni' raggruppamenti e 'cattivi' raggruppamenti
- Perchè non semplicemente considerare tutti i possibili raggruppamenti (*partizioni* di n unità in K gruppi) e sceglierne il 'migliore'?



(a) Individual cards

(b) Individual suits

(c) Black and red suits

(d) Major and minor suits (bridge)

(e) Hearts plus queen of spades and other suits (hearts)

(f) Like face cards

Numero di partizioni possibili

Per l'esempio delle $n = 16$ carte:

- 1 modo di formare 1 singolo gruppo $K = 1$
- 32767 modi di formare 2 gruppi $K = 2$
- 7141686 modi di formare 3 gruppi $K = 3$
- etc.
- 1 modo di formare n gruppi $K = n = 16$

per un totale di 10480142147 partizioni possibili

Numero di partizioni possibili

Il numero di tutte le possibili partizioni di n unità in K gruppi è

$$S(n,K) = \frac{1}{K!}\sum_{k=0}^{K}(-1)^{K-k}\binom{K}{k}k^n$$

dove $S(n,K)$ è il numero di Stirling (di seconda specie), quindi si dovrebbero considerare

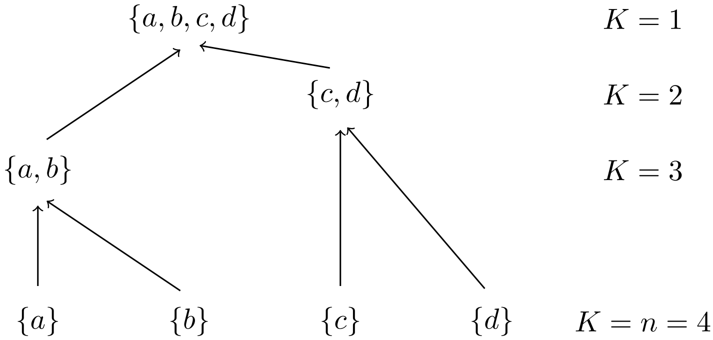
$$\sum_{K=1}^{n} S(n,K)$$

possibilità in tutto. Data la scarsa percorribilità dell'esplorazione di tutte le possibili partizioni, si procede usando dei metodi (algoritmi) che non esplorano l'intero spazio di tutte le possibili partizioni ma solo una parte di esse: non v'è perciò garanzia di ottenere la soluzione ottima in senso assoluto.

Metodi (algoritmi) gerarchici e non

- Nei *metodi gerarchici* si individua una sequenza di partizioni nidificate: la partizione in $K + 1$ gruppi si ottiene dalla partizione in K gruppi facendo di due degli elementi di questa un elemento di quella (AGNES), o viceversa (DIANA)
    - Algoritmo Agglomerativo (AGNES, AGGlomerative NESting)
    - Algoritmo Scissorio (DIANA, DIvisive ANAlysis)
- Nei *metodi non gerarchici*: il numero di gruppi K è deciso a priori
    - Metodo delle K-medie

AGNES



Outline

1 Cluster Analysis

2 Metodo delle K-medie

Scomposizione della distanza totale

- K è il numero dei gruppi (fissato a priori)
- Come scegliere i K gruppi in maniera 'ottimale'?
- Distanza totale

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} d(u_i, u_l)$$

- $d(u_i, u_l)$ è la distanza Euclidea tra due unità statistiche $\underset{1\times p}{u_i'}$ e $\underset{1\times p}{u_l'}$:

$$d(u_i, u_l) = \sqrt{(\underset{1\times p}{u_i - u_l})'(\underset{p\times 1}{u_i - u_l})} = \sqrt{\sum_{j=1}^{p} (x_{ij} - x_{lj})^2}$$

- Fissati i gruppi $G_1, \ldots, G_K$, possiamo scomporre T in

$$T = W + B$$

dove

- W è la distanza entro i gruppi (*within*)
- B è la distanza tra i gruppi (*between*)

Scomposizione della distanza totale

- Distanza entro i gruppi

$$W = \sum_{k=1}^{K} \left(\frac{1}{n_k} \sum_{i:u_i \in G_k} \sum_{l:u_l \in G_k} d(u_i, u_l) \right)$$

  dove n_k è la numerosità del gruppo G_k

- Distanza tra i gruppi

$$B = T - W$$

Problema di minimo

- Vogliamo determinare i gruppi $G_1^*, \ldots, G_K^*$ tali che

$$W^* \leq W$$

ovvero risolvere il problema di minimo

$$\min_{G_1, \ldots, G_K} W$$

- Si noti che determinare $G_1^*, \ldots, G_K^*$ che minimizza W comporta anche la massimizzazione di B poichè T è costante (non dipende dai $G_1, \ldots, G_K$)

$$T = W^* + B^*$$

Esempio con $K = 2$, $n = 3$ e $p = 2$

$u'_1 = (0,0)$, $u'_2 = (0,3)$, $u_3 = (4,3)$

Matrice delle distanze

$$\underset{3\times 3}{D} = \{d(u_i, u_l)\} = \begin{array}{c|ccc} i\backslash l & 1 & 2 & 3 \\ \hline 1 & 0 & 3 & 5 \\ 2 & 3 & 0 & 4 \\ 3 & 5 & 4 & 0 \end{array}$$

G_1, G_2	W	B	T
{1}, {2,3}	4	8	12
{1,2}, **{3}**	3	9	12
{1,3}, {2}	5	7	12

Numero di partizioni $S(n, K)$

Il numero di tutte le possibili partizioni di n unità in K gruppi è

$$S(n, K) = \frac{1}{K!} \sum_{k=0}^{K} (-1)^{K-k} \binom{K}{k} k^n$$

dove $S(n, K)$ è il numero di Stirling (di seconda specie)

n	K	$S(n, K)$
15	3	2375101
20	4	45232115901
25	8	690223721118368580
100	5	10^{68}

Per la distanza Euclidea al quadrato

- Solo variabili quantitative
- Consideriamo la distanza Euclidea al quadrato d^2
- Possiamo riscrivere

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2}W &= \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{K}\left(\frac{1}{n_k}\sum_{i:u_i\in G_k}\sum_{l:u_l\in G_k} d^2(u_i,u_l)\right)\\
&= \sum_{k=1}^{K}\left(\sum_{i:u_i\in G_k} d^2(u_i,\bar{x}_k)\right)
\end{aligned}
$$

dove

$$
\underset{p\times 1}{\bar{x}_k} = \begin{bmatrix} \frac{1}{n_k}\sum_{i:u_i\in G_k} x_{i1} \\ \cdots \\ \frac{1}{n_k}\sum_{i:u_i\in G_k} x_{ip} \end{bmatrix}
$$

è il k-simo *centroide* (vettore delle medie del gruppo G_k)

Problema di minimo

Bisogna minimizzare

$$\sum_{k=1}^{K} \sum_{i:u_i \in G_k} d^2(u_i, \bar{x}_k)$$

rispetto ai gruppi $G_1, \ldots, G_K$ e ai centrodi $\bar{x}_1, \ldots, \bar{x}_k$, congiuntamente

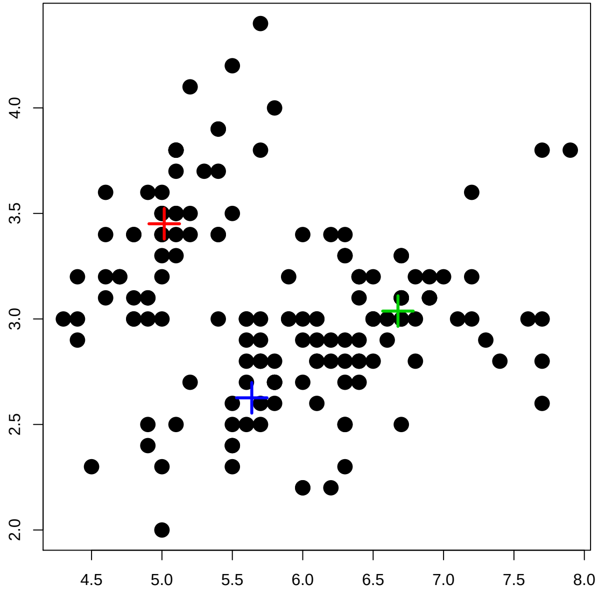
L'algoritmo delle K medie minimizza <u>localmente</u> la quantità sopra indicata (non è garantito il minimo globale) minimizzando <u>in alternanza</u> rispetto ai gruppi e rispetto ai centrodi

Algoritmo delle K-medie

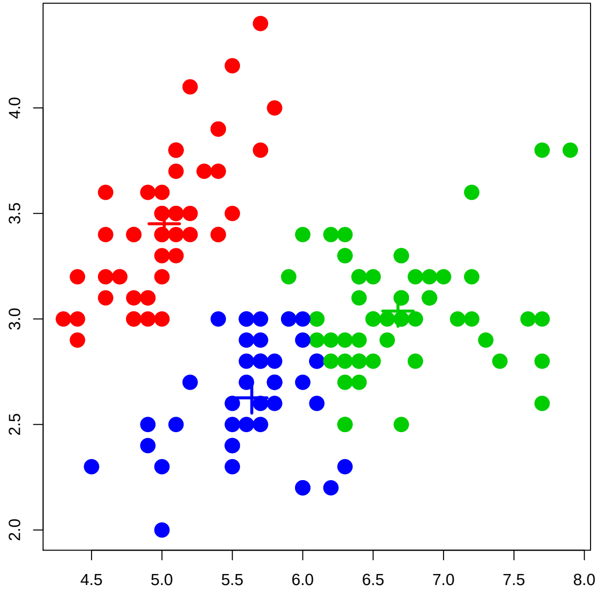
1. Si parte con una attribuzione iniziale per $\bar{x}_1, \ldots, \bar{x}_k$ (e.g. considerando K unità statistiche).
   Si procede iterando ② e ③ fino alla convergenza:
2. Minimizzazione rispetto ai gruppi:
   per $i = 1, \ldots, n$, si individua il centroide più vicino (secondo d^2) all'unità u_i e la si attribuisce al gruppo corrispondente G_k
3. Minimizzazione rispetto ai centroidi:
   per $k = 1, \ldots, K$, si aggiorna il valore del k-simo centroide con la media delle unità del gruppo G_k

Si arresta l'algoritmo quando W non cambia rispetto al passo precedente (convergenza)

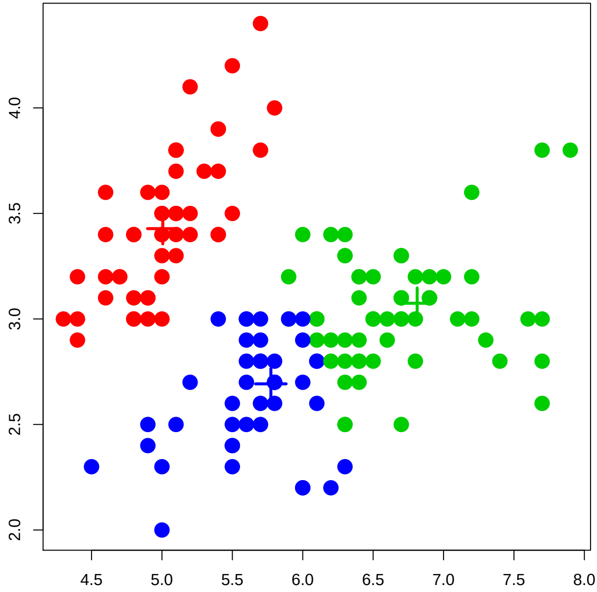
① Inizializzo i centrodi



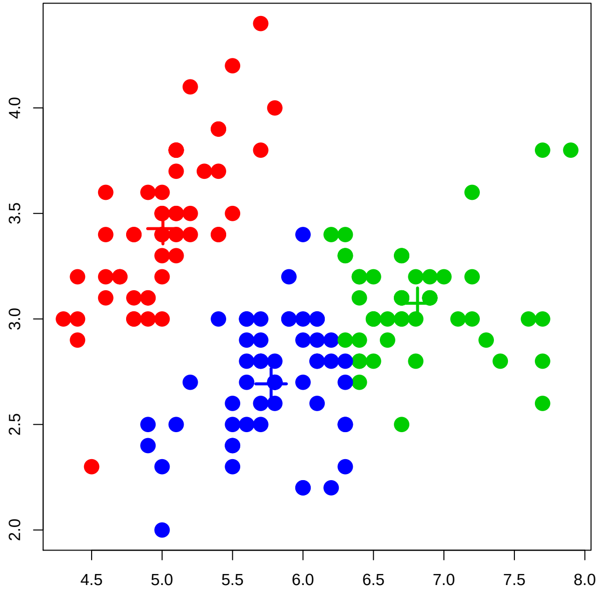
② Attribuzione unità ai gruppi



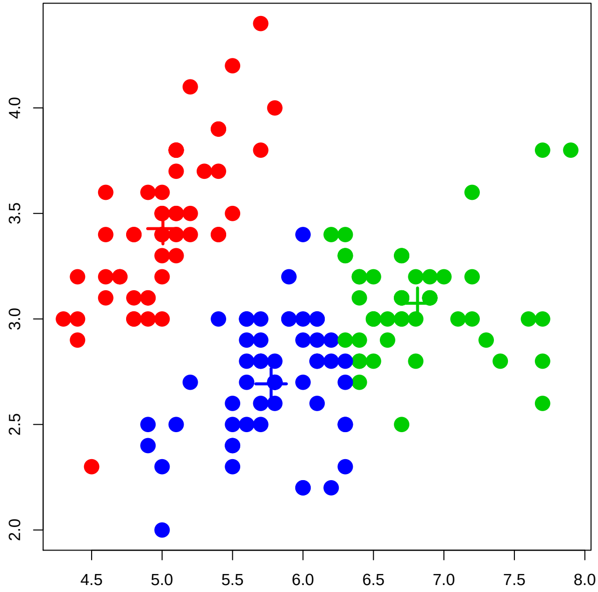
③ Aggiorno i centroidi



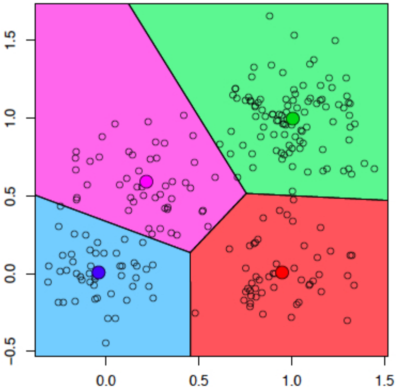
② iterazione 1



③ iterazione 1: STOP



Tassellazione di Voronoi



L'algoritmo definisce una tassellazione di Voronoi in $\mathbb{R}^p$

$$V_k = \{x \in \mathbb{R}^p : d^2(x - \bar{x}_k) \leq d^2(x - \bar{x}_h), h = 1, \ldots, K\}$$

che sono poliedri convessi

Proprietà dell'algoritmo delle K-medie

- W decresce ad ogni iterazione dell'algoritmo: $W_{i+1} \leq W_i$, dove W_i è W all'iterazione i-sima
- L'algoritmo converge sempre, indipendentemente dall'attribuzione iniziale dei centroidi.
  Ci mette $\leq K^n$ iterazioni
- I gruppi finali dipendono dall'attribuzione iniziale dei centrodi.
  Tipicamente si fa girare l'algoritmo più volte inizializzando i centrodi casualmente, e si sceglie il risultato con W minimo
- L'algoritmo non garantisce di minimizzare globalmente W

Ripetere più volte K-medie

Fonte: Gareth et al. (2015) Chapter 10 Figure 7

Proprietà del metodo delle K-medie

- Adatto a scoprire gruppi di forma convessa
- Inadatto per gruppi di forma concava;
- Il risultato è sensibile alla presenza di valori anomali
- Non è invariate a trasformazioni di scala

Algoritmo di Lloyd

L'algoritmo K-medie è spesso chiamato algoritmo di Lloyd in computer science e ingegneria, e viene utilizzato per la compressione di immagini (*vector quantization*)

Immagine originale, compressione 23.9%, compressione 6.25%

Quanti gruppi? L'indice CH

- Determinare il numero K di gruppi è un problema molto difficile!
- Una possibilità è calcolare l'indice CH (Calinski and Harabasz, 1974)

$$\mathrm{CH}(K) = \frac{B(K)/(K-1)}{W(K)/(n-K)}$$

per K che va da 2 a un pre-fissato $K_{\max}$ e si sceglie

$$\hat{K} = \arg \max_{K \in \{2,\ldots,K_{\max}\}} \mathrm{CH}(K)$$

La *silhouette*

- Determinato, in qualunque modo (non solo con il metodo delle K-medie), un raggruppamento di n unità in K gruppi $G_1, \ldots, G_K$ la *silhouette* è uno strumento per verificare la 'bontà' (coesione interna e separazione esterna) di tale raggruppamento
- Si confronta, per ciascuna osservazione, quanto essa sia vicina al suo gruppo e agli altri.
- La distanza dell'osservazione u_i^* dal gruppo G_k è definita come

$$d(u_i^*, G_k) = \frac{1}{n_k} \sum_{l: u_l \in G_k} d(u_i^*, u_l).$$

La *silhouette*

- Sia poi G_{k^*} il gruppo in cui è inclusa l'osservazione u_i^* e sia

$$d_0 = \min_{k \neq k^*} d(u_i^*, G_k),$$

d_0 è la distanza di u_i^* dal gruppo più vicino diverso da quello cui appartiene

- Si confronta d_0 con la distanza dal suo gruppo mediante

$$S(u_{i^*}) = \frac{d_0 - d(u_{i^*}, G_{k^*})}{\max\{d_0, d(u_{i^*}, G_{k^*})\}}.$$

- $S(u_{i^*}) \leq 1$
- $S(u_{i^*})$ è tanto più grande quanto più u_{i^*} è vicino al suo gruppo e distante dagli altri gruppi.
- $S(u_{i^*}) < 0$ indica che u_{i^*} è più vicino a un altro gruppo che non al suo.

Forza lavoro nei paesi europei

Si considerano le composizioni della forza lavoro per settore produttivo negli stati europei nel 1970

Country	Agr	Min	Man	Pow	Con	Ser	Fin	SPS	TC	blocco
Belgium	3.3	0.9	27.6	0.9	8.2	19.1	6.2	26.6	7.2	w
Denmark	9.2	0.1	21.8	0.6	8.3	14.6	6.5	32.2	7.1	w
France	10.8	0.8	27.5	0.9	8.9	16.8	6.0	22.6	5.7	w
W. Germany	6.7	1.3	35.8	0.9	7.3	14.4	5.0	22.3	6.1	w
Ireland	23.2	1.0	20.7	1.3	7.5	16.8	2.8	20.8	6.1	w
Italy	15.9	0.6	27.6	0.5	10.0	18.1	1.6	20.1	5.7	w
Luxembourg	7.7	3.1	30.8	0.8	9.2	18.5	4.6	19.2	6.2	w
Netherlands	6.3	0.1	22.5	1.0	9.9	18.0	6.8	28.5	6.8	w
United Kingdom	2.7	1.4	30.2	1.4	6.9	16.9	5.7	28.3	6.4	w
Austria	12.7	1.1	30.2	1.4	9.0	16.8	4.9	16.8	7.0	w
Finland	13.0	0.4	25.9	1.3	7.4	14.7	5.5	24.3	7.6	w
Greece	41.4	0.6	17.6	0.6	8.1	11.5	2.4	11.0	6.7	w
Norway	9.0	0.5	22.4	0.8	8.6	16.9	4.7	27.6	9.4	w
Portugal	27.8	0.3	24.5	0.6	8.4	13.3	2.7	16.7	5.7	w
Spain	22.9	0.8	28.5	0.7	11.5	9.7	8.5	11.8	5.5	w
Sweden	6.1	0.4	25.9	0.8	7.2	14.4	6.0	32.4	6.8	w
Switzerland	7.7	0.2	37.8	0.8	9.5	17.5	5.3	15.4	5.7	n
Turkey	66.8	0.7	7.9	0.1	2.8	5.2	1.1	11.9	3.2	n
Bulgaria	23.6	1.9	32.3	0.6	7.9	8.0	0.7	18.2	6.7	e
Czechoslovakia	16.5	2.9	35.5	1.2	8.7	9.2	0.9	17.9	7.0	e
E. Germany	4.2	2.9	41.2	1.3	7.6	11.2	1.2	22.1	8.4	e
Hungary	21.7	3.1	29.6	1.9	8.2	9.4	0.9	17.2	8.0	e
Poland	31.1	2.5	25.7	0.9	8.4	7.5	0.9	16.1	6.9	e
Rumania	34.7	2.1	30.1	0.6	8.7	5.9	1.3	11.7	5.0	e
USSR	23.7	1.4	25.8	0.6	9.2	6.1	0.5	23.6	9.3	e
Yugoslavia	48.7	1.5	16.8	1.1	4.9	6.4	11.3	5.3	4.0	n

Forza lavoro nei paesi europei

Consideriamo una suddivisione in 3 gruppi, basata sul metodo delle K-medie

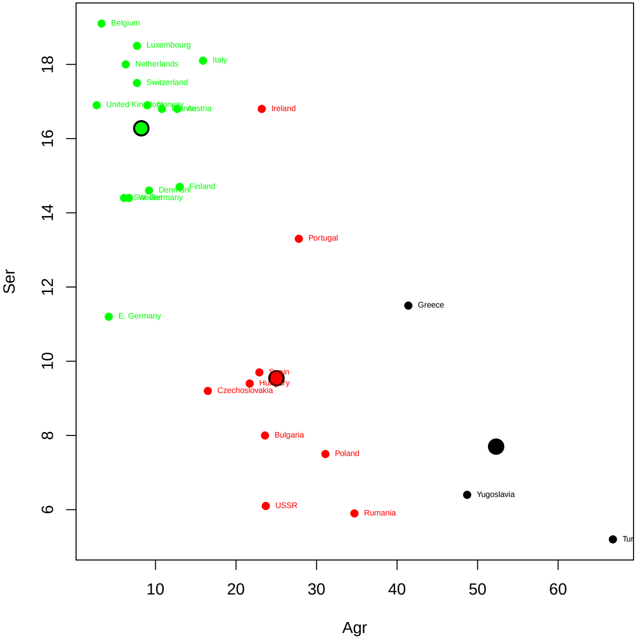
I tre gruppi che si ottengono hanno centroidi

	Agr	Min	Man	Pow	Con	Ser	Fin	SPS	TC
1	52.30	0.93	14.10	0.60	5.27	7.70	4.93	9.40	4.63
2	25.02	1.78	28.08	0.93	8.72	9.54	2.13	17.11	6.69
3	8.24	0.99	29.09	0.96	8.43	16.28	5.00	24.17	6.86

Forza lavoro nei paesi europei

	Agr	Min	Man	Pow	Con	Ser	Fin	SPS	TC	blocco
Greece	41.40	0.60	17.60	0.60	8.10	11.50	2.40	11.00	6.70	w
Turkey	66.80	0.70	7.90	0.10	2.80	5.20	1.10	11.90	3.20	n
Yugoslavia	48.70	1.50	16.80	1.10	4.90	6.40	11.30	5.30	4.00	n
Ireland	23.20	1.00	20.70	1.30	7.50	16.80	2.80	20.80	6.10	w
Portugal	27.80	0.30	24.50	0.60	8.40	13.30	2.70	16.70	5.70	w
Spain	22.90	0.80	28.50	0.70	11.50	9.70	8.50	11.80	5.50	w
Bulgaria	23.60	1.90	32.30	0.60	7.90	8.00	0.70	18.20	6.70	e
Czechoslovakia	16.50	2.90	35.50	1.20	8.70	9.20	0.90	17.90	7.00	e
Hungary	21.70	3.10	29.60	1.90	8.20	9.40	0.90	17.20	8.00	e
Poland	31.10	2.50	25.70	0.90	8.40	7.50	0.90	16.10	6.90	e
Rumania	34.70	2.10	30.10	0.60	8.70	5.90	1.30	11.70	5.00	e
USSR	23.70	1.40	25.80	0.60	9.20	6.10	0.50	23.60	9.30	e
Belgium	3.30	0.90	27.60	0.90	8.20	19.10	6.20	26.60	7.20	w
Denmark	9.20	0.10	21.80	0.60	8.30	14.60	6.50	32.20	7.10	w
France	10.80	0.80	27.50	0.90	8.90	16.80	6.00	22.60	5.70	w
W. Germany	6.70	1.30	35.80	0.90	7.30	14.40	5.00	22.30	6.10	w
Italy	15.90	0.60	27.60	0.50	10.00	18.10	1.60	20.10	5.70	w
Luxembourg	7.70	3.10	30.80	0.80	9.20	18.50	4.60	19.20	6.20	w
Netherlands	6.30	0.10	22.50	1.00	9.90	18.00	6.80	28.50	6.80	w
United Kingdom	2.70	1.40	30.20	1.40	6.90	16.90	5.70	28.30	6.40	w
Austria	12.70	1.10	30.20	1.40	9.00	16.80	4.90	16.80	7.00	w
Finland	13.00	0.40	25.90	1.30	7.40	14.70	5.50	24.30	7.60	w
Norway	9.00	0.50	22.40	0.80	8.60	16.90	4.70	27.60	9.40	w
Sweden	6.10	0.40	25.90	0.80	7.20	14.40	6.00	32.40	6.80	w
Switzerland	7.70	0.20	37.80	0.80	9.50	17.50	5.30	15.40	5.70	n
E. Germany	4.20	2.90	41.20	1.30	7.60	11.20	1.20	22.10	8.40	e

Forza lavoro nei paesi europei



Forza lavoro nei paesi europei: la *silhouette*