Soft Clustering e Rough K-Means

Elia Mercatanti

Università degli Studi di Firenze
Scuola di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali
Corso di Laurea Magistrale in Informatica - Data Science

Progetto MASL, Gennaio 2021

Cluster Analysis

- È uno degli strumenti più utilizzati nell'analisi dei dati.
- Negli ultimi decenni c'è stato un crescente interesse verso tali tecniche, in particolare il **soft clustering**.

Cluster Analysis

- Mira a determinare un piccolo numero k di gruppi omogenei da un insieme di n oggetti secondo un data misura della dissomiglianza basata su p variabili osservate $X_1, \ldots, X_p$.
- Ha il compito di suddividere un set di dati in gruppi (**clusters**) in modo significativo ed utile.

Soft Clustering

- Esistono però oggetti che hanno caratteristiche intermedie tra i cluster, spesso non possono essere chiaramente assegnati.
- L'approccio classico (*hard*) al raggruppamento porta ad un'assegnazione non realistica, gli oggetti sono costretti ad appartenere a un solo cluster.

Soft Clustering

- L'approccio **soft** nasce per superare questo inconveniente.
- Idea: ogni dato può appartenere a più di un cluster.
- Esistono almeno quattro tipi di approcci di clustering *soft*: *fuzzy*, possibilistico, basato su modelli e *rough*.

Fuzzy Clustering - Fuzzy K-Means

- I dati vengono assegnati ai cluster in base ad un grado di appartenenza.
- Grado ≈ 1, oggetto simile al prototipo di quel cluster, grado 0 ne indica la non appartenenza, lontano dal relativo prototipo.
- Estensione dell'algoritmo *K-Means* al caso *fuzzy* (**FkM**).
- Ha lo scopo di determinare una partizione *fuzzy* di n oggetti in k cluster risolvendo il seguente problema di minimizzazione:

$$\min_{\mathrm{U},\mathrm{H}} J_{FkM} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{g=1}^{k} u_{ig}^{m} d^2(\mathrm{x}_i, \mathrm{h}_g),$$

$$\text{s.t.} \quad u_{ig} \in [0,1], \quad \sum_{g=1}^{k} u_{ig} = 1, \quad i = 1, \ldots, n, \quad g = 1, \ldots, k,$$

- $m > 1$ è il parametro di **fuzziness**, di solito fissato tra 1.5 e 2.
- La soluzione è ottenuta mediante un algoritmo iterativo. Con il metodo del moltiplicatore Lagrangiano.
- La soluzione iterativa è la seguente:

$$u_{ig} = \frac{1}{\sum_{g'=1}^{k} \left(\frac{d^2(\mathrm{x}_i, \mathrm{h}_g)}{d^2(\mathrm{x}_i, \mathrm{h}_{g'})} \right)^{\frac{1}{m-1}}} \qquad \mathrm{h}_g = \frac{\sum_{i=1}^{n} u_{ig}^m \mathrm{x}_i}{\sum_{i=1}^{n} u_{ig}^m}.$$

Possibilistic Clustering - Possibilistic K-Means

- Per cercare di superare l'inconveniente dei valori anomali.
- Rilassare i vincoli della somma unitaria sui *membership degrees*, aggiungendo un termine di penalizzazione.
- Gradi di appartenenza interpretati come gradi di compatibilità degli oggetti con i cluster.
- L'algoritmo di clustering possibilistico più noto è il metodo di clustering **PkM**, che può essere formalizzato come di seguito:

$$\min_{\mathrm{T,H}} J_{PkM} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{g=1}^{k} t_{ig}^{\eta} d^2(\mathrm{x}_i, \mathrm{h}_g) + \sum_{g=1}^{k} \gamma_g \sum_{i=1}^{n} (1 - t_{ig})^{\eta},$$

$$\text{s.t. } t_{ig} \in [0,1], \quad i = 1, \dots, n, \quad g = 1, \dots, k,$$

Possibilistic Clustering - Possibilistic K-Means

- γ_g è *cluster-specific*, regola l'importanza dei cluster:

$$\gamma_g = \gamma \frac{\sum_{i=1}^{n} u_{ig}^{m} d^2(\mathrm{x}_i, \mathrm{h}_g)}{\sum_{i=1}^{n} u_{ig}^{m}}, \quad g = 1, \ldots, k,$$

- $\gamma = 1$, h_g e i vari u_{ig} sono ottenuti dal FkM.
- I γ_g rappresentano il peso relativo del secondo termine della funzione obbiettivo rispetto al primo.
- η (> 1) è il **fuzzifier**.
- Il secondo termine evita inoltre la soluzione banale con $\mathrm{T} = 0$.
- Soluzione iterativa del PkM:

$$t_{ig} = \frac{1}{1 + \left(\frac{d^2(\mathrm{x}_i, \mathrm{h}_g)}{\gamma_g}\right)^{\frac{1}{\eta - 1}}} \qquad \mathrm{h}_g = \frac{\sum_{i=1}^{n} t_{ig}^{\eta} \mathrm{x}_i}{\sum_{i=1}^{n} t_{ig}^{\eta}}.$$

- Presuppone che i dati siano generati da un modello statistico.
- In questo contesto, i dati seguono una mistura di distribuzioni.
- Dato $\mathrm{x} = (\mathrm{x}_1, \mathrm{x}_2, \ldots, \mathrm{x}_n) \in \mathbb{R}_p$, si presume che x_i derivi da una mistura finita di funzioni di densità di probabilità:

$$f(\mathrm{x}_i;\ \mathbf{\Phi}) = \sum_{g=1}^{k} \pi_g f(\mathrm{x}_i|\theta_g),$$

$$\textit{dove} \quad \pi_g,\ g = 1, \ldots, k \quad s.t. \quad \pi_g > 0 \quad e \quad \sum_{g=1}^{k} \pi_g = 1$$

- Stima dei parametri $\mathbf{\Phi}$ con l'approccio della massima verosimiglianza, eseguita applicando l'algoritmo EM.
- La partizione *soft* dei dati ottenuta mediante le probabilità a posteriori, utilizzando la regola del massimo a posteriori.

Model-Based - Finite Mixture of Gaussian Densities

La mistura di distribuzione Gaussiane è la più utilizzata. La miscela finita di densità gaussiane (**FMG**) è quindi data da:

$$f(\mathrm{x}_i;\ \mathbf{\Phi}) = \sum_{g=1}^{k} \pi_g \phi(\mathrm{x}_i | \mu_g, \mathbf{\Sigma}_g),$$

- I cluster ellissoidali centrati sul vettore medio μ_g sono generati dal modello precedente.
- Il parametro $\mathbf{\Sigma}_g$ controlla le altre proprietà geometriche di ogni cluster.

Le FMG sono sensibili ai dati anomali.

Rough Clustering - Proprietà

Un **rough set** C_g è definito mediante la sua **lower approximation** (**LA**) e la sua **upper approximation** (**UA**), ovvero, $\underline{A}(C_g)$ e $\overline{A}(C_g)$. LA e UA di C_g devono soddisfare le seguenti proprietà:

(P1) Un oggetto x_i può far parte al massimo di una LA.

(P2) $x_i \in \underline{A}(C_g) \Rightarrow x_i \in \overline{A}(C_g)$.

(P3) x_i non fa parte di alcuna LA $\Leftrightarrow$ x_i appartiene a due o più UA.

- Lo scopo è determinare se un oggetto appartiene alla UA o LA di un cluster.

Rough Clustering - Regole di Assegnazione

Per ricavare le varie UA e LA sono utilizzate le seguenti regole:

1. Se $d(\mathrm{x}_i, \mathrm{h}_g)$ è il minimo, per $1 \leq g \leq k$ e $d(\mathrm{x}_i, \mathrm{h}_{g'})/d(\mathrm{x}_i, \mathrm{h}_g) \leq \psi$ per ogni coppia (g, g') allora $\mathrm{x}_i \in \overline{A}(C_g)$ e $\mathrm{x}_i \in \overline{A}(C_{g'})$.
   - La proprietà (P3) viene dunque soddisfatta.
2. Altrimenti, $\mathrm{x}_i \in \underline{A}(C_g)$ tale che $d(\mathrm{x}_i, \mathrm{h}_g)$ è il minimo per $1 \leq g \leq k$.
   - Per la proprietà (P2), $\mathrm{x}_i \in \overline{A}(C_g)$.
   - Segue che anche la proprietà (P1) è soddisfatta.

Rough Clustering - Rough K-Means

- Un cluster è descritto da due approssimazioni *hard*, una LA e una UA (o regione di confine).
- Un dato ha due gradi di appartenenza bivalenti al cluster g, uno per la sua LA e uno per la UA:

$$\mu_{ig}^{LA} \in \{0, 1\} \qquad \mu_{ig}^{UA} \in \{0, 1\}.$$

- LA: oggetti che appartengono al cluster. UA: oggetti che potrebbero appartenere al cluster o meno.
- Può essere considerato come un metodo *soft* a causa della regione di confine per gestire l'incertezza.
- I dati vengono assegnati alle LA o UA utilizzando le regole (1) o (2) precedenti.

Rough Clustering - Rough K-Means

I centroidi sono calcolati come segue. Se le cardinalità $|\underline{A}(c_g)|$ e $|\overline{A}(c_g) - \underline{A}(c_g)|$ non sono uguali a 0, avremo che:

$$h_g = w_l \times \frac{\sum_{x_i \in \underline{A}(c_g)} x_i}{|\underline{A}(c_g)|} + w_u \times \frac{\sum_{x_i \in \overline{A}(c_g) - \underline{A}(c_g)} x_i}{|\overline{A}(c_g) - \underline{A}(c_g)|},$$

con $w_l > 0$ e $w_u > 0$ tali che $w_l + w_u = 1$ (solitamente $w_l > w_u$).

Se $|\underline{A}(c_g)| = 0$ o $|\overline{A}(c_g) - \underline{A}(c_g)| = 0$ di conseguenza uno dei due rapporti viene annullato.

Implementazione in R - Ciclo Principale Rough K-Means

```r
while ( !identical(old_upper_approx_matrix, upper_approx_matrix)
        && iterations < max_iterations ) {

  # Lower Approximation (LA) Matrix and UA-LA matrix (boundary)
  lower_approx_matrix = assign_lower_approx(upper_approx_matrix)
  boundary_matrix = upper_approx_matrix - lower_approx_matrix

  # Calculate sums of observations in LA and boundary in every cluster
  means_matrix_lower = crossprod(lower_approx_matrix, dataset)
  means_matrix_boundary = crossprod(boundary_matrix, dataset)

  # Update means matrix
  for (i in 1:num_clusters) {

    # Dividers means calculation, cardinalities of LA and UA-LA (boundary)
    divider_lower_approx = sum(lower_approx_matrix[, i])
    divider_boundary = sum(boundary_matrix[, i])

    if (divider_lower_approx != 0 && divider_boundary != 0) {
      means_matrix_lower[i,] = means_matrix_lower[i,] /
                               divider_lower_approx
      means_matrix_boundary[i,] = means_matrix_boundary[i,] /
                                  divider_boundary
      means_matrix[i,] = weight_lower*means_matrix_lower[i,] +
                         (1-weight_lower)*means_matrix_boundary[i,]
    } else if (divider_boundary == 0) {
      means_matrix[i,] = means_matrix_lower[i,] / divider_lower_approx
    } else { # if(divider_lower_approx[,i]) == 0)
      means_matrix[i,] = means_matrix_boundary[i,] / divider_boundary
    }
  }
```

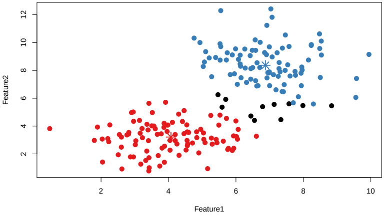
Verifiche Sperimentali

- Test su **FkM** (pacchetto R *fclust*), **PkM** (*ppclust*), **FMG** (*mclust*) e **RkM** (implementato).
- Valutazione delle prestazioni su 4 semplici dataset.
- 3 dataset sintetici 2d con 2 cluster: *DemoData*, *G2*, *Synth*.
- Dataset *Iris*, tre cluster, per sfruttarne le etichette di classe.

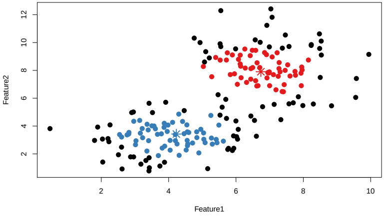
Indici Utilizzati:

- **Indici Interno**: *Fuzzy Silhouette Index*.
- **Indici Esterni**:
  - *Purity*.
  - *Adjusted Rand Index* (ARI).
- Tempi di esecuzione.

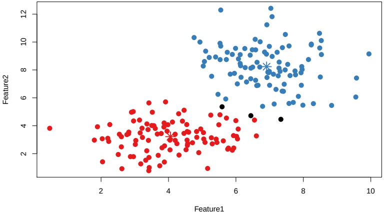
Risultati del Clustering sul Dataset DemoDataC2D2a



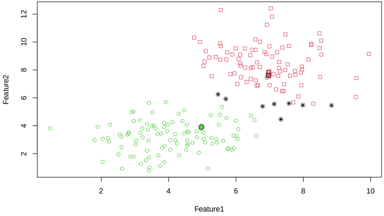
(a) **Fuzzy K-Means**



(b) **Possibilistic K-Means**

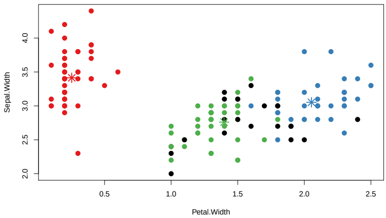


(c) **Finite Mixture Gaussian Model**

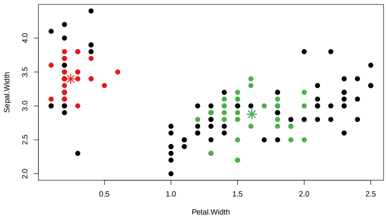


(d) **Rough K-Means**

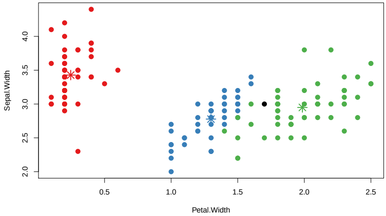
Risultati del Clustering sul Dataset *Iris*



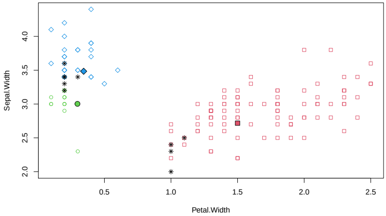
(a) **Fuzzy K-Means**



(b) **Possibilistic K-Means**



(c) **Finite Mixture Gaussian Model**



(d) **Rough K-Means**

Indici di Valutazione e Tempi di Esecuzione

- Fuzzy Silhouette Index -	DemoDataC2D2a	G2	Synth	Iris
Fuzzy K-Means	0.8476	0.8525	0.8223	0.8091
Possibilistic K-Means	**0.8564**	**0.8633**	**0.8230**	**0.9538**
Finite Mixture Gaussian Model	0.8280	0.8346	0.8038	0.6579
Rough K-Means	0.8370	0.8388	0.8118	0.7532

- External Indices -	Purity	ARI
Fuzzy K-Means	0.9667	0.9039
Possibilistic K-Means	0.6667	0.5681
Finite Mixture Gaussian Model	0.9667	0.9039
Rough K-Means	0.5200	0.4413

- Execution Times -	DemoDataC2D2a	G2	Synth	Iris
Fuzzy K-Means	**0.0070**	**0.3590**	**0.1940**	**0.0050**
Possibilistic K-Means	0.7640	5.2400	4.7044	1.3802
Finite Mixture Gaussian Model	0.0240	1.765	0.3060	0.0680
Rough K-Means	0.1170	0.5850	0.3500	0.0140

Grazie dell'Attenzione

Link Progetto GitHub:

`https://github.com/elia-mercatanti/soft-clustering-rough-kmeans`