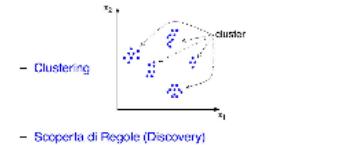


# Clustering

## Apprendimento non Supervisionato

- dato in insieme di esempi  $T_r = \{x^{(i)}\}$ , estrarre regolarità e/o pattern (validerli) su tutto il dominio di ingresso)
- non esiste nessun esperto (o maestro) che ci fornisca un aiuto



Esempio di applicazione: data mining su database strutturati

**K-Means**

L'idea di base

U l'algoritmo cerca di minimizzare l'errore di ricostruzione

$$f(\{m_i\}_{i=1}^k | X) = \sum_i \sum_j b_{ij}^2 \|x^j - m_i\|^2$$

Initialize  $m_i, i = 1, \dots, k$ , for example, to  $k$  random  $x^i$

Repeat

For all  $x^i \in X$

$b_{ij}^i = \begin{cases} 1 & \text{if } \|x^i - m_i\| < \|x^i - m_j\| \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$

For all  $m_i, i = 1, \dots, k$

$m_i = \frac{\sum_i b_{ij}^i x^j}{\sum_i b_{ij}^i}$

Until  $m$  converges

**"K-Means"...**

...usando le probabilità...

*esempio*

Ogni esempio è generata da una distribuzione con media la cui media è generata da una media a sua volta da un'altra media scalata

**"K-Means"...**

...usando le probabilità...

*algoritmo*

*calcolo*

**Altro esempio di clustering**

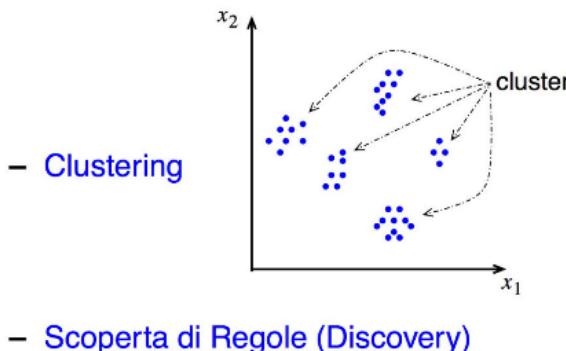
Hierarchical Clustering

1. Si considerano 12 punti di ingresso, secondo un criterio di similitudine si associano due dei 12 punti.

2. Alcuni dei risultati sono raggruppati in modo da formare 6 cluster.

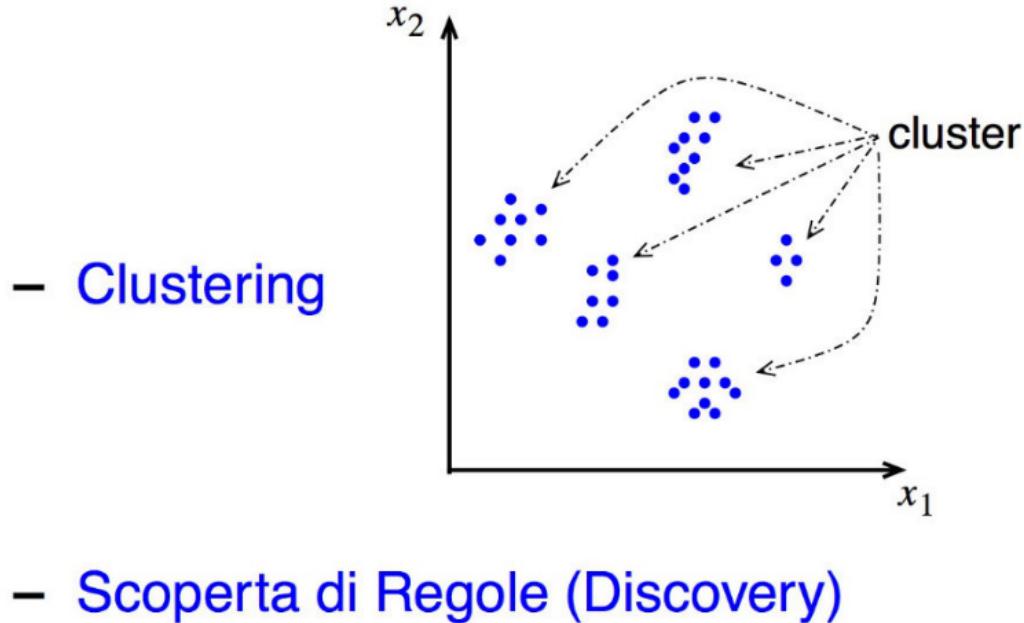
# Apprendimento non Supervisionato

- dato un insieme di esempi  $Tr = \{x^{(i)}\}$ , estrarre regolarità e/o pattern (valide(i) su tutto il dominio di ingresso)
- non esiste nessun esperto (o maestro) che ci fornisca un aiuto



Esempio di applicazione: data mining su database strutturati

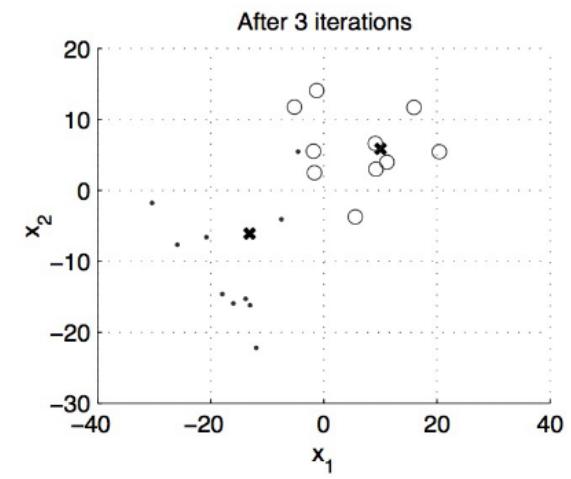
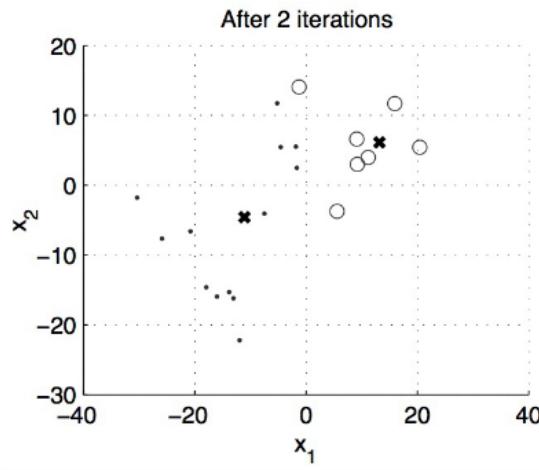
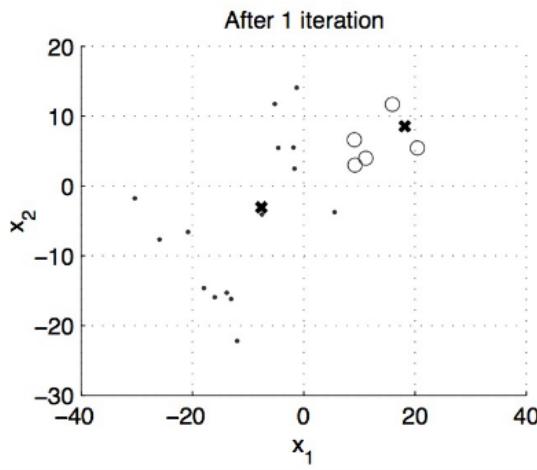
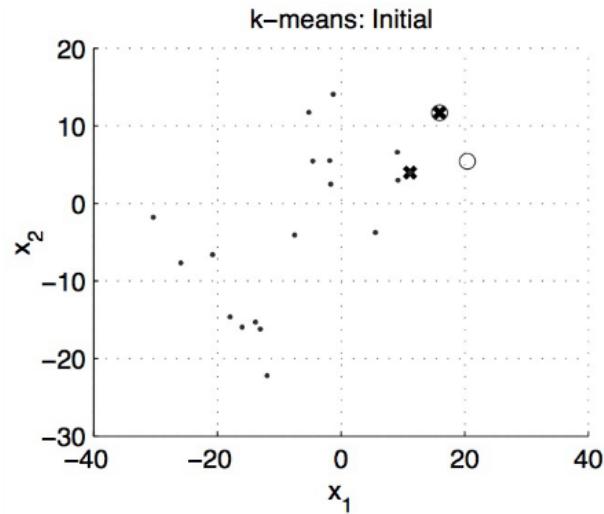
- dato in insieme di esempi  $Tr = \{x^{(i)}\}$ , estrarre regolarità e/o pattern (valide(i) su tutto il dominio di ingresso)
- non esiste nessun esperto (o maestro) che ci fornisca un aiuto



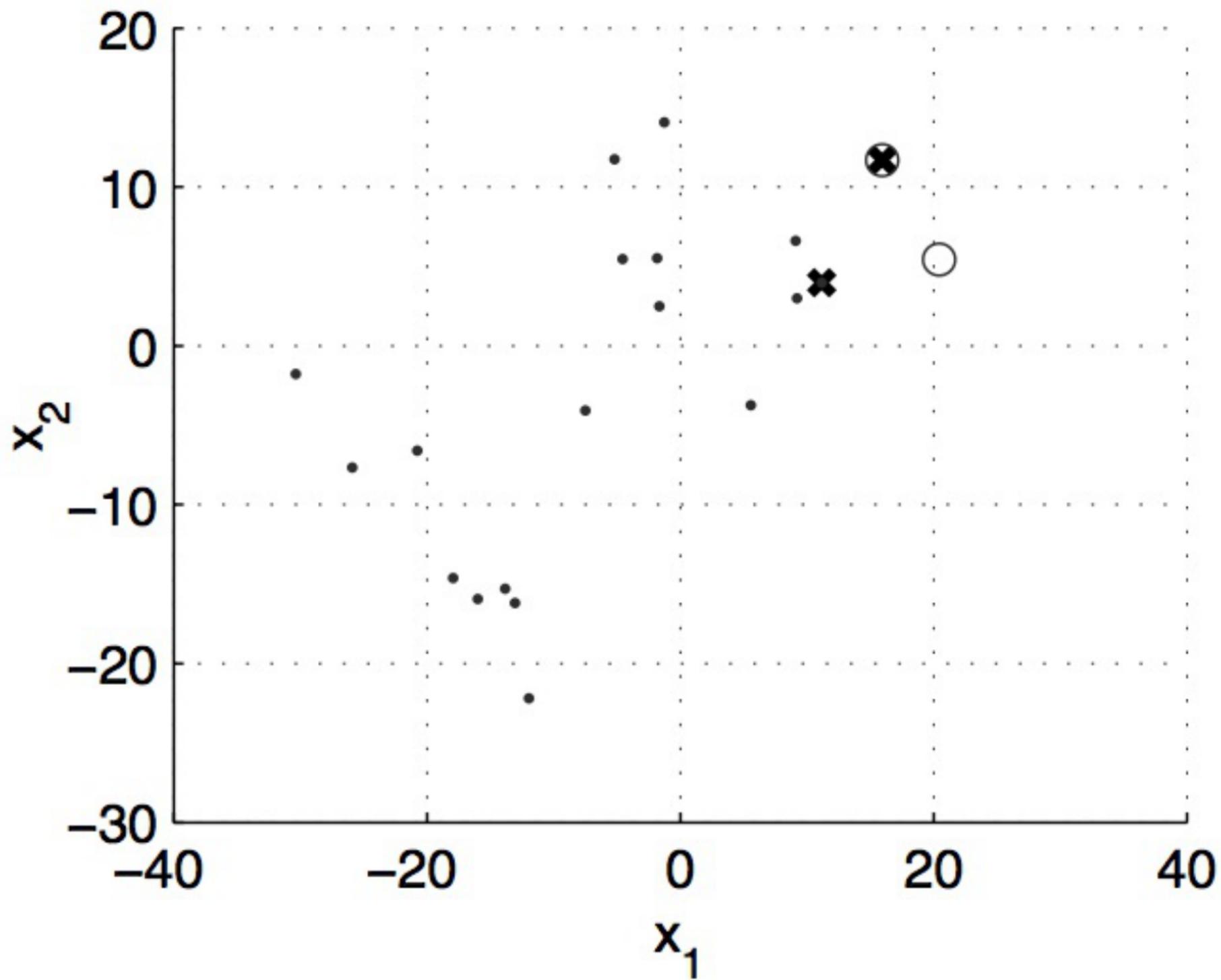
Esempio di applicazione: data mining su database strutturati

# K-Means

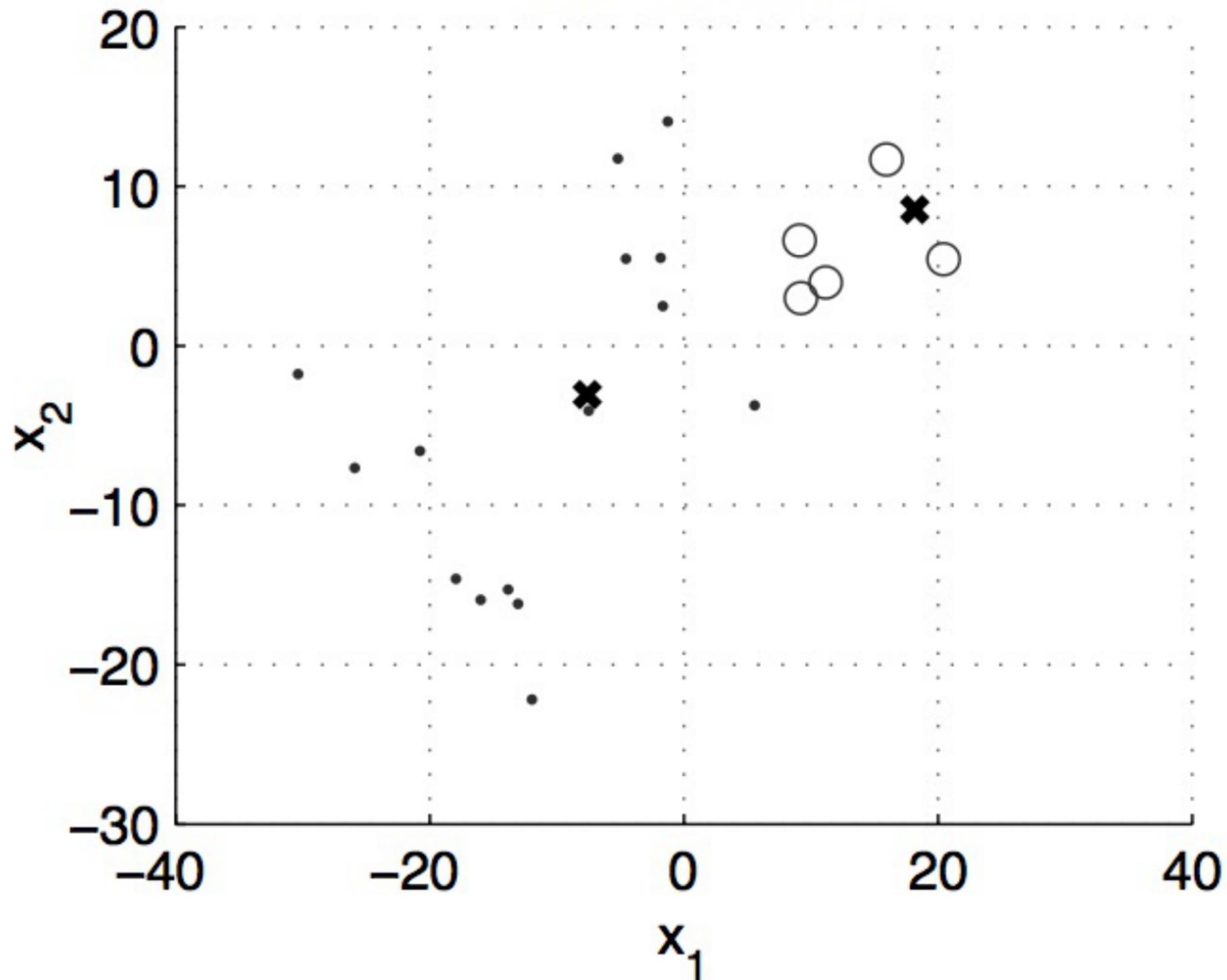
L'idea di base



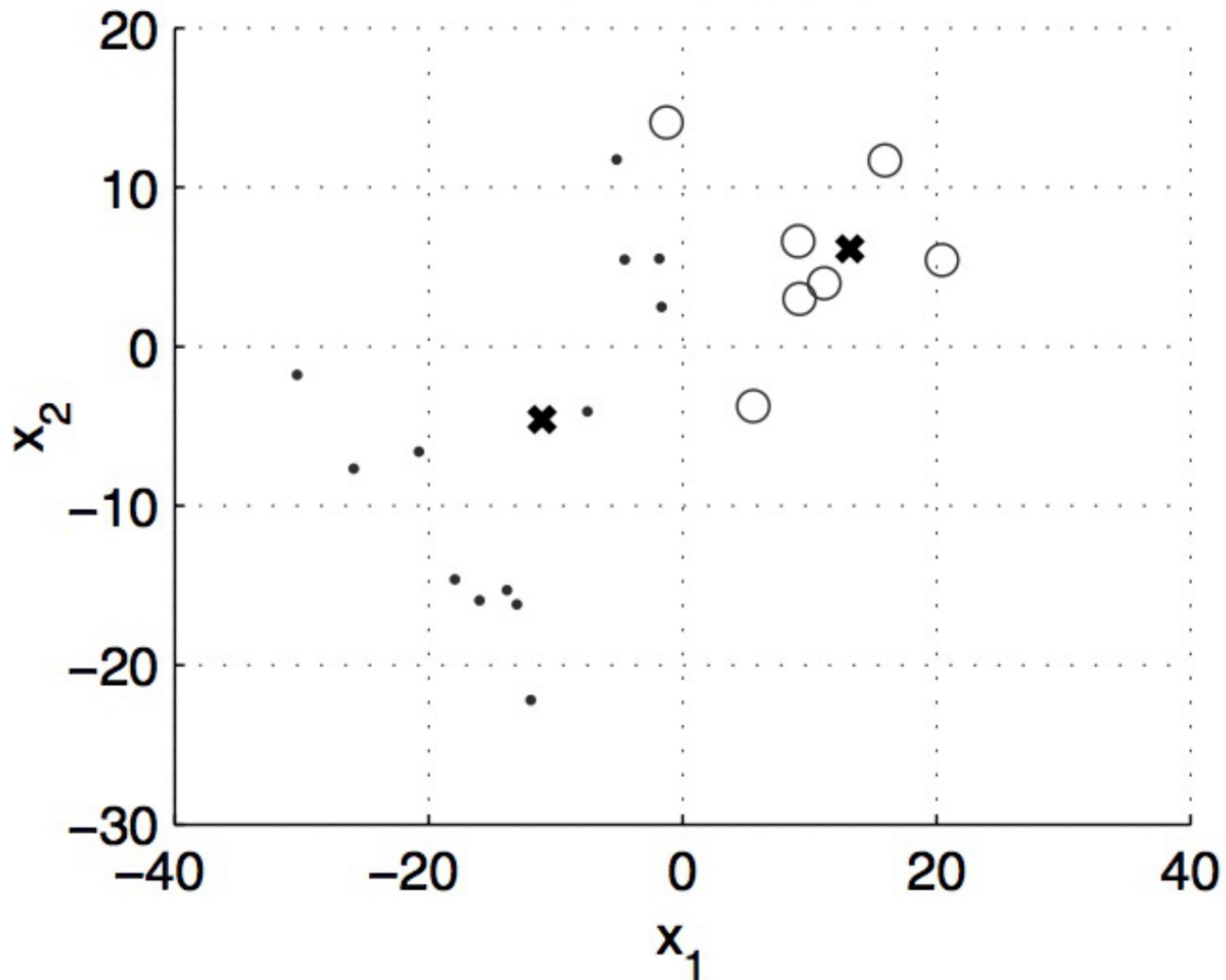
## k-means: Initial



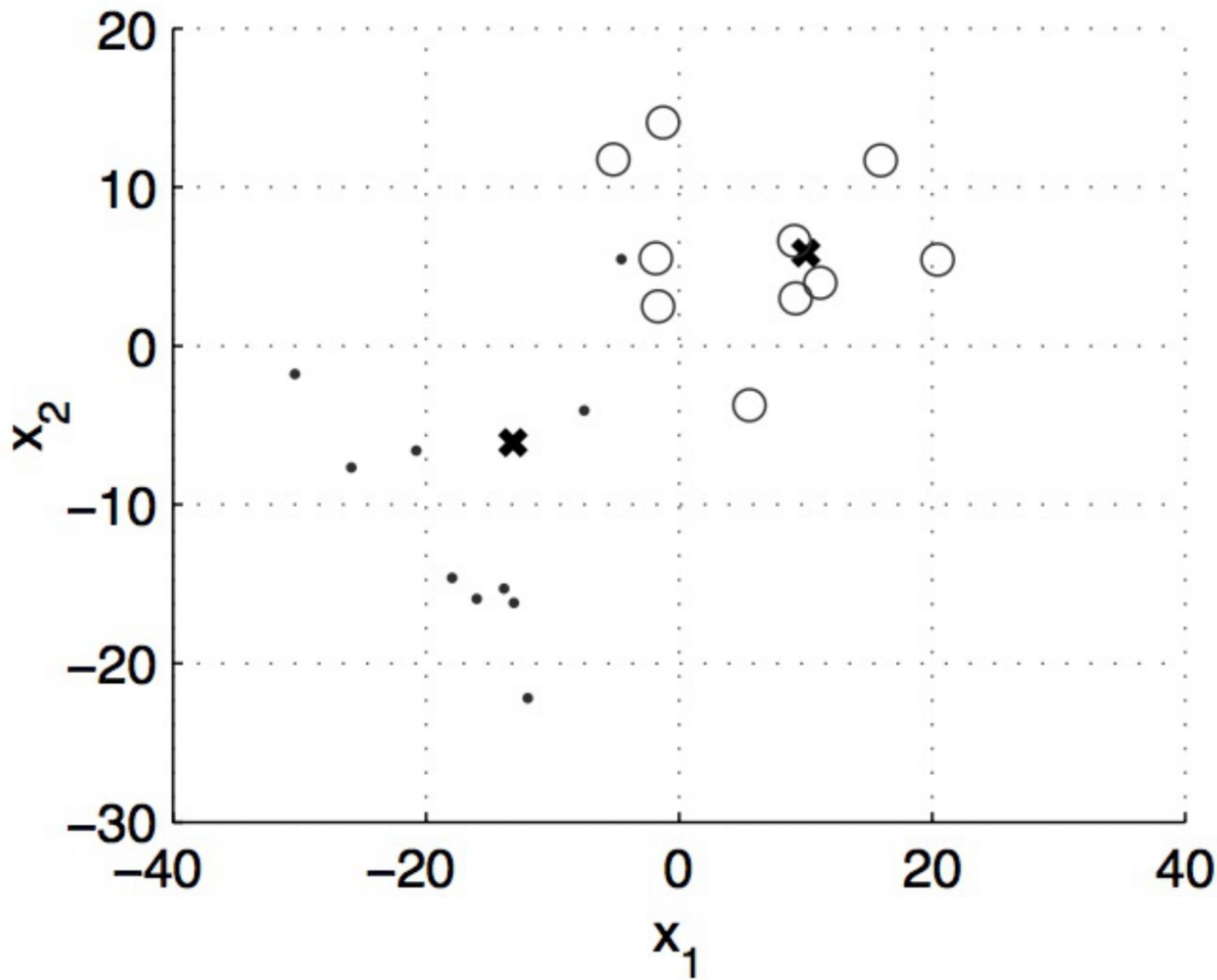
After 1 iteration



After 2 iterations



After 3 iterations



# K-Means

L'algoritmo cerca di minimizzare l'errore di ricostruzione

$$E(\{\mathbf{m}_i\}_{i=1}^k | \mathcal{X}) = \sum_t \sum_i b_i^t \|\mathbf{x}^t - \mathbf{m}_i\|^2$$

Initialize  $\mathbf{m}_i, i = 1, \dots, k$ , for example, to  $k$  random  $\mathbf{x}^t$

Repeat

For all  $\mathbf{x}^t \in \mathcal{X}$

$$b_i^t \leftarrow \begin{cases} 1 & \text{if } \|\mathbf{x}^t - \mathbf{m}_i\| = \min_j \|\mathbf{x}^t - \mathbf{m}_j\| \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

For all  $\mathbf{m}_i, i = 1, \dots, k$

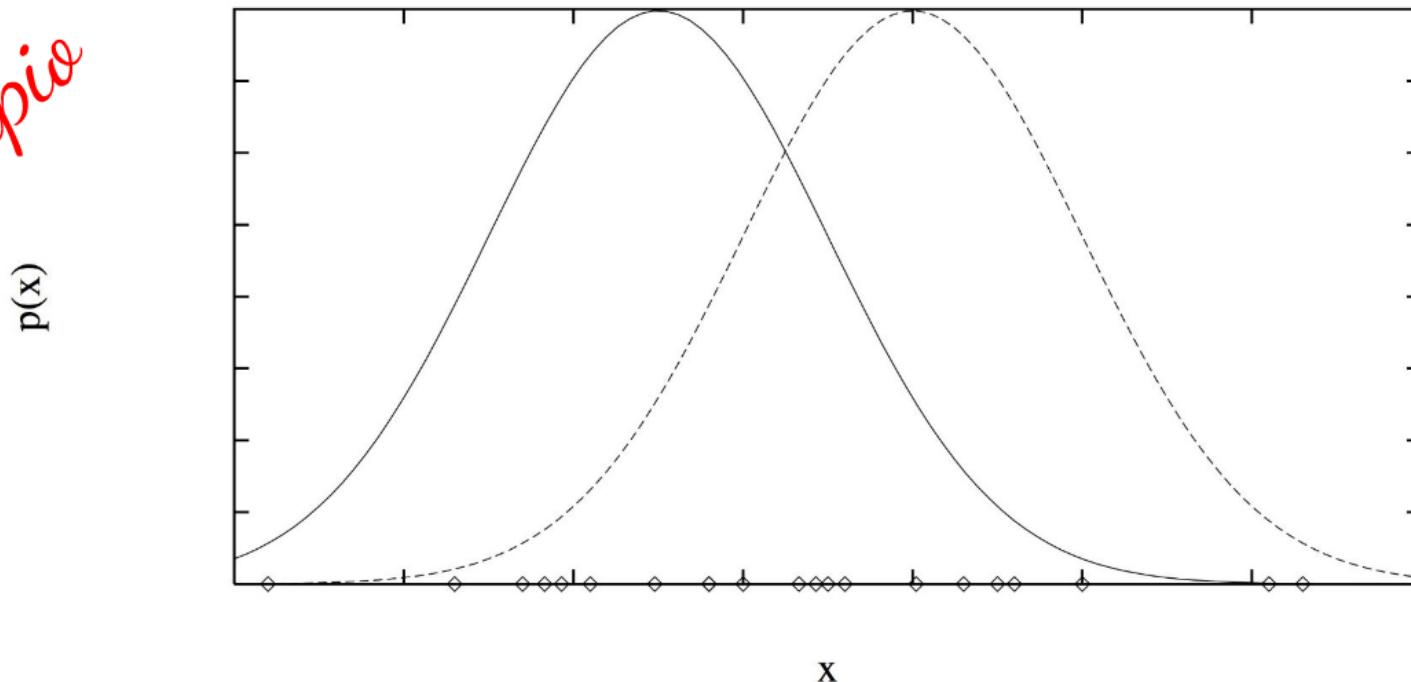
$$\mathbf{m}_i \leftarrow \sum_t b_i^t \mathbf{x}^t / \sum_t b_i^t$$

Until  $\mathbf{m}_i$  converge

# "K-Means"...

...usando le probabilità...

*esempio*



Ogni istanza  $x$  generata

1. scegliendo una delle Gaussiane con probabilità uniforme
2. generando una istanza a caso secondo la Gaussiana scelta

# "K-Means"...

...usando le probabilità...

## EM per stimare $k$ medie

Date:

- istanze da  $X$  generate da una mistura di  $k$  distribuzioni Gaussiane
- medie  $\langle \mu_1, \dots, \mu_k \rangle$  sconosciute delle  $k$  Gaussiane ( $\sigma^2$  conosciuto ed uguale per tutte le Gaussiane)
- non si sa quale istanza  $x_i$  è stata generata da quale Gaussiana

Determinare:

- stime maximum likelihood di  $\langle \mu_1, \dots, \mu_k \rangle$

ogni istanza può essere pensata nella forma  $y_i = \langle x_i, z_{i1}, z_{i2} \rangle$  (caso  $k = 2$ ), dove

- $z_{ij}$  è 1 se  $x_i$  è generata dalla  $j$ -esima Gaussiana
- $x_i$  osservabile
- $z_{ij}$  non osservabile

## EM per stimare $k$ medie

Algoritmo EM: scegliere a caso l'ipotesi iniziale  $h = \langle \mu_1, \mu_2 \rangle$ , poi ripetere

passo E: calcola il valore aspettato  $E[z_{ij}]$  di ogni variabile non osservabile  $z_{ij}$ , assumendo che valga l'ipotesi corrente  $h = \langle \mu_1, \mu_2 \rangle$

$$\begin{aligned} E[z_{ij}] &= \frac{p(x = x_i | \mu = \mu_j)}{\sum_{n=1}^2 p(x = x_i | \mu = \mu_n)} \\ &= \frac{e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i - \mu_j)^2}}{\sum_{n=1}^2 e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i - \mu_n)^2}} \end{aligned}$$

passo M: calcola la nuova ipotesi maximum likelihood  $h' = \langle \mu'_1, \mu'_2 \rangle$ , assumendo che il valore preso da ogni variabile non osservabile  $z_{ij}$  sia il suo valore aspettato  $E[z_{ij}]$  (calcolato sopra). Rimpiazza  $h = \langle \mu_1, \mu_2 \rangle$  con  $h' = \langle \mu'_1, \mu'_2 \rangle$ .

$$\mu_j \leftarrow \frac{\sum_{i=1}^m E[z_{ij}] x_i}{\sum_{i=1}^m E[z_{ij}]}$$

## Algoritmo EM

Converge alla ipotesi  $h_{ML}$  locale (massimo locale) fornendo stime per le variabili non osservabili  $z_{ij}$

Di fatto, trova un massimo locale di  $E[\ln P(Y|h)]$ , dove

- $Y$  rappresenta tutti i dati (variabili osservabili e non)
- il valore aspettato è preso sui possibili valori di variabili non osservabili in  $Y$

## EM per stimare $k$ medie

Date:

- istanze da  $X$  generate da una mistura di  $k$  distribuzioni Gaussiane
- medie  $\langle \mu_1, \dots, \mu_k \rangle$  sconosciute delle  $k$  Gaussiane ( $\sigma^2$  conosciuto ed uguale per tutte le Gaussiane)
- non si sa quale istanza  $x_i$  è stata generata da quale Gaussiana

Determinare:

- stime maximum likelihood di  $\langle \mu_1, \dots, \mu_k \rangle$

ogni istanza può essere pensata nella forma  $y_i = \langle x_i, z_{i1}, z_{i2} \rangle$  (caso  $k = 2$ ), dove

- $z_{ij}$  è 1 se  $x_i$  è generata dalla  $j$ -esima Gaussiana
- $x_i$  osservabile
- $z_{ij}$  non osservabile

## EM per stimare $k$ medie

Algoritmo EM: scegliere a caso l'ipotesi iniziale  $h = \langle \mu_1, \mu_2 \rangle$ , poi ripetere

passo E: calcola il valore aspettato  $E[z_{ij}]$  di ogni variabile non osservabile  $z_{ij}$ , assumendo che valga l'ipotesi corrente  $h = \langle \mu_1, \mu_2 \rangle$

$$\begin{aligned} E[z_{ij}] &= \frac{p(x = x_i | \mu = \mu_j)}{\sum_{n=1}^2 p(x = x_i | \mu = \mu_n)} \\ &= \frac{e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i - \mu_j)^2}}{\sum_{n=1}^2 e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i - \mu_n)^2}} \end{aligned}$$

passo M: calcola la nuova ipotesi maximum likelihood  $h' = \langle \mu'_1, \mu'_2 \rangle$ , assumendo che il valore preso da ogni variabile non osservabile  $z_{ij}$  sia il suo valore aspettato  $E[z_{ij}]$  (calcolato sopra). Rimpiazza  $h = \langle \mu_1, \mu_2 \rangle$  con  $h' = \langle \mu'_1, \mu'_2 \rangle$ .

$$\mu_j \leftarrow \frac{\sum_{i=1}^m E[z_{ij}] x_i}{\sum_{i=1}^m E[z_{ij}]}$$

## Algoritmo EM

Converge alla ipotesi  $h_{ML}$  locale (massimo locale) fornendo stime per le variabili non osservabili  $z_{ij}$

Di fatto, trova un massimo locale di  $E[\ln P(Y|h)]$ , dove

- $Y$  rappresenta tutti i dati (variabili osservabili e non)
- il valore aspettato è preso sui possibili valori di variabili non osservabili in  $Y$



## Problema EM in generale

Dati:

- dati osservati  $X = \{x_1, \dots, x_m\}$
- dati non osservabili  $Z = \{z_1, \dots, z_m\}$
- distribuzione di probabilità parametrizzata  $P(Y|h)$ , dove
  - $Y = \{y_1, \dots, y_m\}$  è tutto l'insieme dei dati  $y_i = x_i \cup z_i$
  - $h$  sono i parametri

Determinare:

- $h$  che massimizza (localmente)  $E[\ln P(Y|h)]$

## Metodo EM Generale

Definire la funzione di verosimiglianza (likelihood)  $Q(h'|h)$  che calcola  $Y = X \cup Z$  usando i dati osservati  $X$  ed i parametri correnti  $h$  per stimare  $Z$

$$Q(h'|h) \leftarrow E[\ln P(Y|h')|h, X]$$

Algoritmo EM:

*passo di stima (E):* calcolare  $Q(h'|h)$  usando l'ipotesi corrente  $h$  ed i dati osservati  $X$  per stimare la distribuzione di probabilità su  $Y$

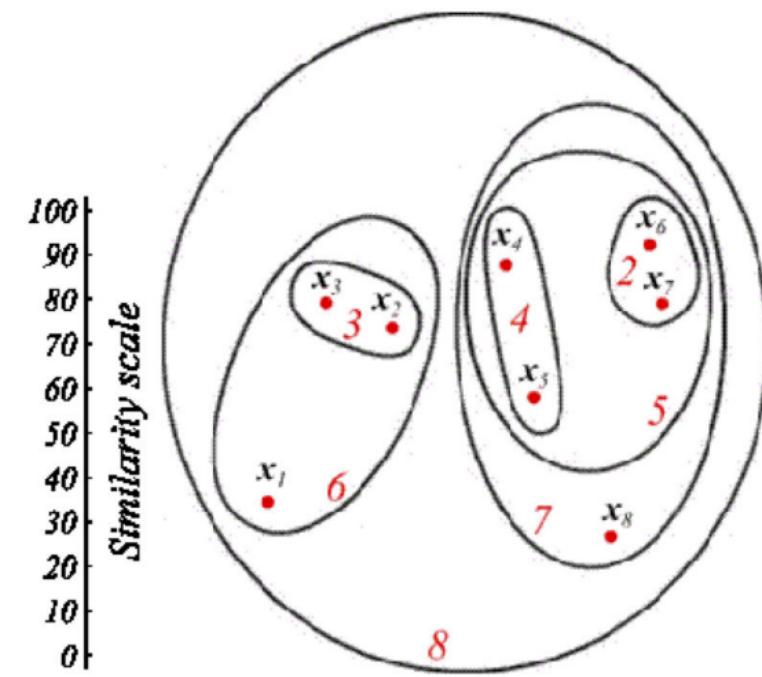
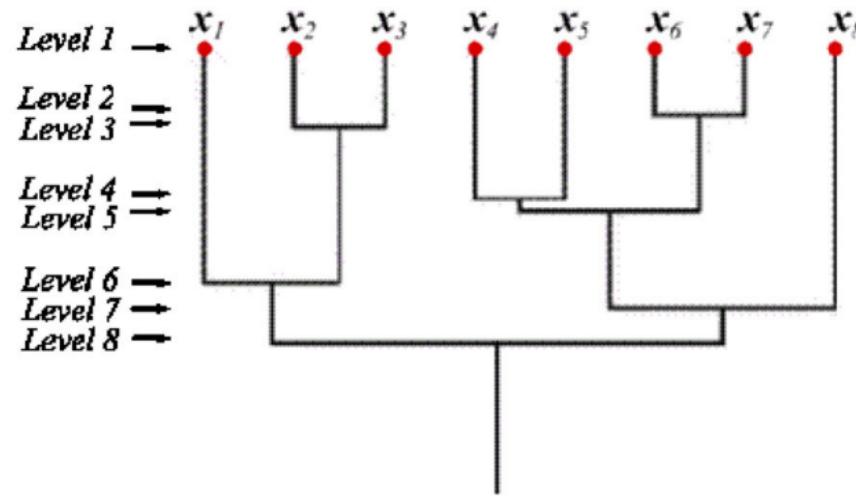
$$Q(h'|h) \leftarrow E[\ln P(Y|h')|h, X]$$

*passo di massimizzazione (M):* rimpiazza l'ipotesi  $h$  tramite l'ipotesi  $h'$  che massimizza la funzione  $Q$

$$h \leftarrow \arg \max_{h'} Q(h'|h)$$

# Altro esempio di clustering

## Hierarchical Clustering



1. si selezionano i 2 vettori più vicini (es., secondo la distanza euclidea) e si costruisce un sottoalbero con figli dati dai due vettori e padre il centroide (media) dei due vettori;
2. i due vettori vengono sostituiti nell'insieme dei vettori correnti dal centroide, e si torna al passo 1.