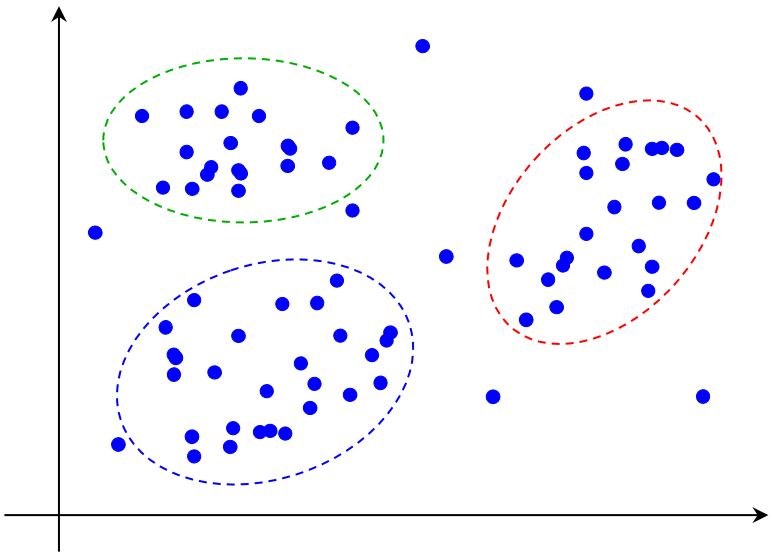
Clustering

- Introduzione
  - Definizioni
  - Criteri
  - Algoritmi
- Clustering Gerarchico
- Centroid-based Clustering
  - K-means
  - Fuzzy K-means
  - Expectation – Maximization (Gaussian Mixture)

Definizioni

Con il termine Clustering (in italiano «raggruppamento») si denota un famiglia di metodi *non supervisionati* in grado di individuare raggruppamenti intrinseci (cluster) di pattern nello spazio multidimensionale, e (opzionalmente) di definire in corrispondenza di tali raggruppamenti le classi (incognite).

Il clustering ha applicazioni in numerose discipline (*pattern recognition, machine learning, computer vision, data mining, data base, ...*) e pertanto ha sempre ricevuto un notevole interesse.



Il problema è molto complesso (NP hard): determinare la soluzione ottima con ricerca esaustiva è possibile solo nei casi semplici (pochi pattern).

Quante soluzioni?

- dati n pattern, assumendo di conoscere s, il numero di soluzioni è dell'ordine di $\frac{s^n}{s!}$ (approssimazione numero di Stirling di seconda specie).
  - https://it.wikipedia.org/wiki/Numeri_di_Stirling
  - Esempio: per n =100, s =5, il numero di soluzioni $\approx 10^{67}$.

- se s non è noto, il numero di soluzioni è dato dal numero di Bell, ottenibile sommando i casi precedenti per tutti i valori di s da 1 a n.
  - https://it.wikipedia.org/wiki/Numeri_di_Bell

- Nel caso $s = 2$ è molto semplice dimostrare che il numero di soluzioni è $2^{n-1} - 1$.
  - Esempio: dati i 4 pattern {A, B, C, D} e $s = 2$, le soluzioni di clustering sono 7:

    (A) (B,C,D)
    (B) (A,C,D)
    (C) (A,B,D)
    (D) (A,B,C)
    (A,B) (C,D)
    (A,C) (B,D)
    (A,D) (B,C)

Criteri di Clustering

- Criteri e algoritmi di clustering sono due cose ben distinte: i primi descrivono cosa si vuol ottenere specificando il grado di ottimalità di ogni soluzione ammissibile; i secondi, dato un criterio di clustering, forniscono una procedura algoritmica per determinare soluzioni che lo ottimizzano.
- La maggior parte dei criteri di clustering sono definiti sulla base delle due osservazioni seguenti:
  1) i pattern all'interno dello stesso cluster devono essere tra loro più simili rispetto a pattern appartenenti a cluster diversi
  2) i cluster sono costituiti da nuvole di punti a densità relativamente elevata separate da zone dove la densità e più bassa.

- Tra i diversi criteri possibili:
  - minimizzazione distanze dai centroidi: minimizza la somma dei quadrati delle distanze dei pattern $\mathbf{x}$ dai centroidi (i.e. baricentri) delle classi.

$$J_e = \sum_{i=1..s} \sum_{\mathbf{x} \in C_i} \|\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}_i\|^2 , \qquad \bar{\mathbf{x}}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{x} \in C_i} \mathbf{x}$$

    dove C_i è l'i-esimo cluster, n_i il numero di pattern che contiene e $\bar{\mathbf{x}}_i$ il suo centroide (media).

    È un buon criterio per cluster a simmetria radiale (i.e., circolari), ma penalizza forme allungate o cluster innestati (i.e. un cluster a forma di anello con all'interno un altro cluster).

Criteri di Clustering (2)

- minimizzazione distanze intra-classe:

$$J_e = \sum_{i=1..s} n_i \cdot \bar{s}_i, \qquad \bar{s}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{x} \in C_i} f_s(\mathbf{x}, C_i)$$

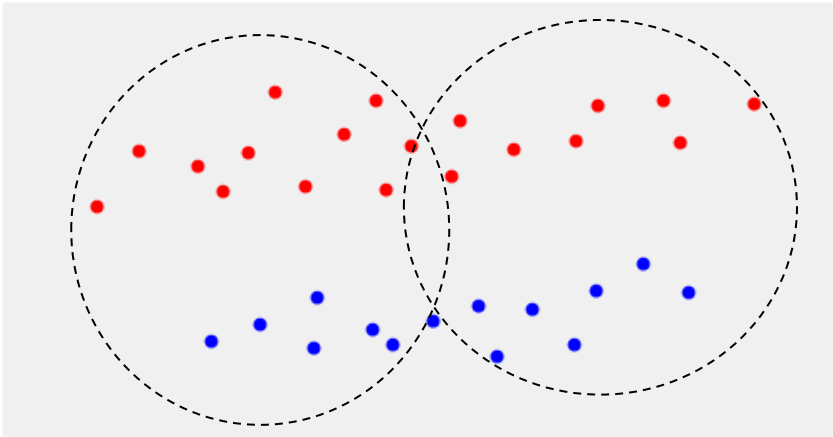
dove $f_s(\mathbf{x}, C_i)$ è una misura di distanza tra $\mathbf{x}$ e il cluster cui appartiene. Ad esempio:

1. $f_s(\mathbf{x}, C_i) = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{x}' \in C_i} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2$

   criterio simile alla minimizzazione distanze dai centroidi (slide precedente)

2. $f_s(\mathbf{x}, C_i) = \min_{\substack{\mathbf{x}' \in C_i \\ \mathbf{x}' \neq \mathbf{x}}} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2$

   non penalizza cluster allungati, infatti affinché $f_s(\mathbf{x}, C_i)$ assuma valore ridotto, non è necessario che tutti i (o gran parte dei) pattern di C_i siano vicini a $\mathbf{x}$, ma è sufficiente un vicino. Nell'esempio sotto, per $s = 2$, (1) favorirebbe l'aggregazione come da cerchi tratteggiati, mentre (2) come da colori (rosso e blu).



Algoritmi di Clustering

- Le principali famiglie di algoritmi sono:
  - Clustering gerarchico: attraverso operazioni tipicamente «bottom-up», che aggregano pattern in base a una misura di distanza, si organizzano i dati in struttura ad albero (dendogramma).
  - Clustering basato su centroidi: attraverso euristici (iterativi) si individuano i cluster cercando di minimizzare la distanza dei pattern dai centroidi dei cluster cui appartengono:
    - K-means
    - Fuzzy K-means
    - Expectation – Maximization (Gaussian Mixture)
  - Clustering basato sulla densità: i cluster individuati sono regioni connesse in aree ad elevata densità. L'approccio più noto è DBSCAN (*https://en.wikipedia.org/wiki/DBSCAN*)

- Distinguiamo inoltre:
  - Clustering hard (esclusivo): un pattern è assegnato (in modo esclusivo) a un solo cluster.
  - Clustering soft (fuzzy): i pattern appartengono ai diversi cluster con un certo grado di appartenenza (es. tra 0 e 1).

    È più efficace nel gestire pattern vicino al bordo di due o più clusters e outliers. L'assegnazione può diventare esclusiva scegliendo, per ogni pattern, il cluster verso cui il grado di appartenenza è massimo.

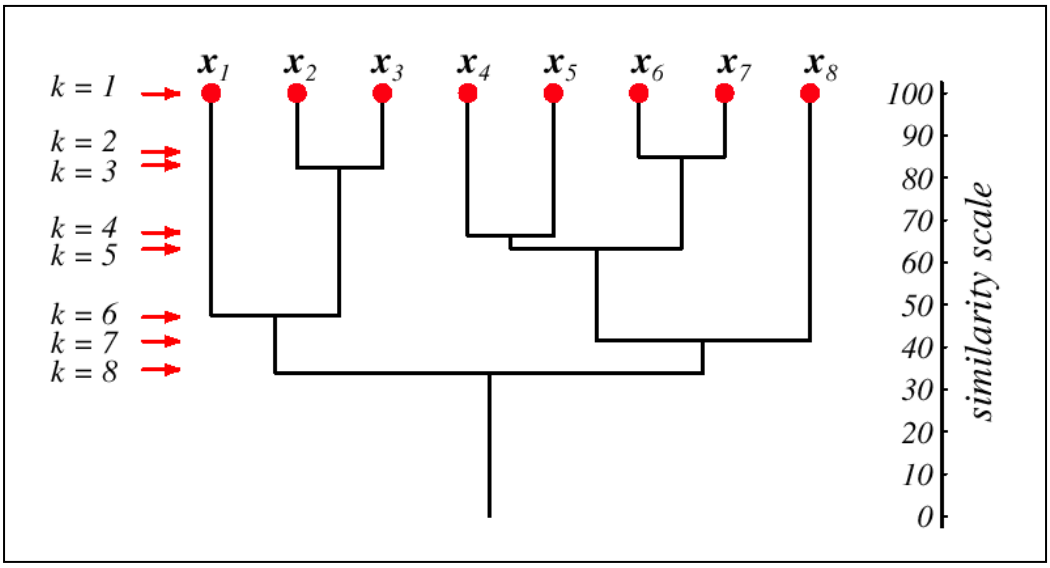
Clustering Gerarchico

Simile al modo di eseguire classificazione in tassonomia biologica:

- gli insetti sono gerarchicamente classificati specializzandone le specie a partire da famiglie molto ampie fino a famiglie più ridotte.

Gli algoritmi sono generalmente bottom-up (agglomerativi):

- si parte cercando di aggregare singoli elementi e ad ogni passo (livello) si aggregano (*pattern a pattern*, *pattern a cluster*, o *cluster a cluster*) gli elementi tra loro più simili (i.e. meno distanti) rispetto a una soglia (che dipende dal livello).
- Le principali differenze implementative dipendono dalla definizione utilizzata per calcolare le distanze tra cluster e cluster:
  - Single link: distanza minima tra due pattern dei cluster
  - Average link: distanza media tra i pattern dei due cluster
  - Complete link: distanza massima tra due pattern dei cluster



K-means

K-means (o C-means) è un metodo computazionalmente molto semplice e altrettanto semplice da implementare: per questo motivo è spesso la prima scelta per risolvere problemi di clustering.

- Minimizza «implicitamente» le distanze dai centroidi.
- Richiede in input il numero di cluster (s) e una soluzione iniziale. Produce buoni risultati a patto di fornire una ragionevole soluzione iniziale e un numero adeguato di classi.
- Il tipo di ottimizzazione è iterativa e locale; pertanto il metodo può convergere a massimi locali della soluzione. La convergenza si ottiene solitamente in pochi passi: < 10).
- Identifica cluster iper-sferici nel caso in cui venga utilizzata la distanza euclidea come misura di distanza tra i pattern o cluster iper-ellissoidali nel caso di distanza di Mahalanobis.
- Nella sua versione base, l'algoritmo può essere così descritto:

Inizializza n, s

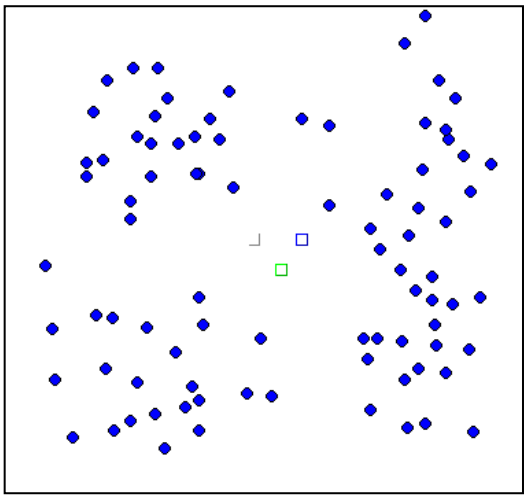
Scegli casualmente s pattern da utilizzare come centroidi iniziali

do { assegna ogni pattern al cluster per cui è minima la distanza
dal centroide.
calcola i centroidi dei cluster come media dei rispettivi pattern
} while (*i cluster sono stati modificati & iteration < max*)

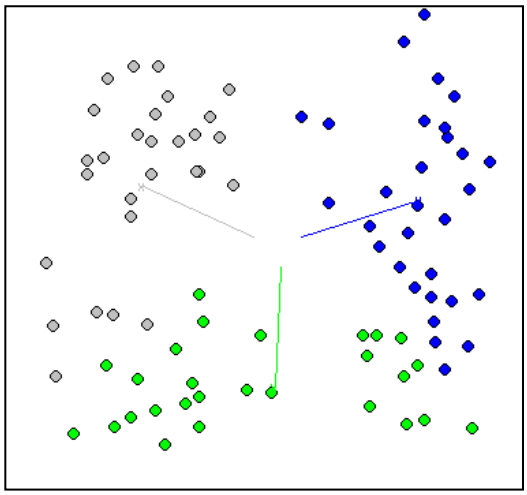
I cluster sono modificati iterativamente a seguito del ricalcolo del loro centroide. L'algoritmo termina (converge) quando i centroidi sono stabili e quindi le partizioni non cambiano.

K-means: esempio $(n = 86, s = 3)$

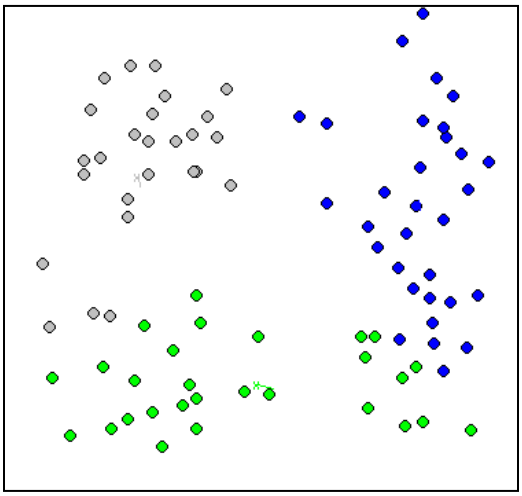
soluzione iniziale



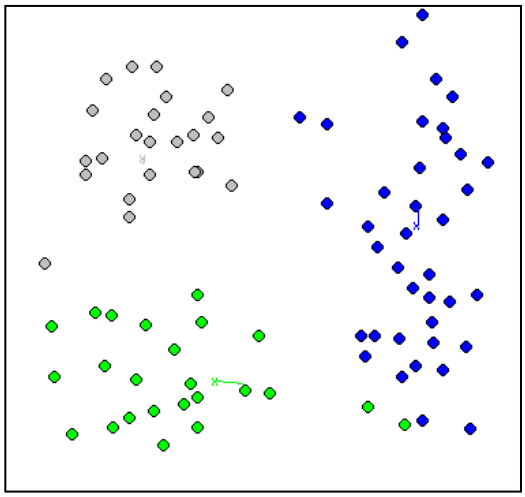
iterazione 1



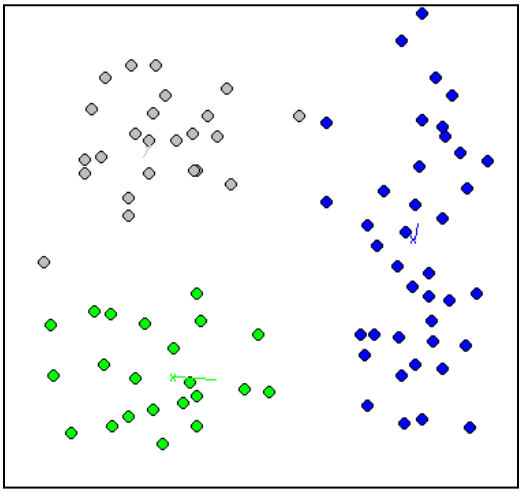
iterazione 2



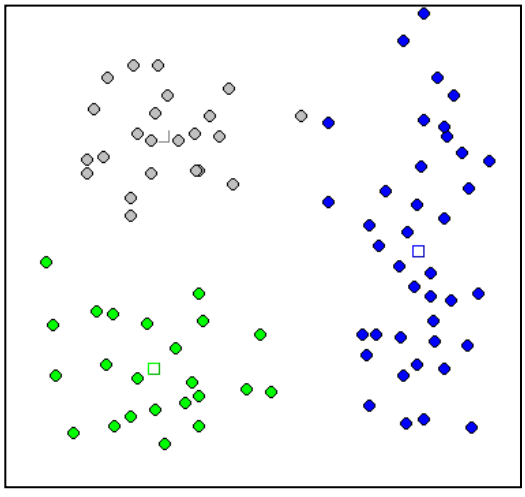
iterazione 4



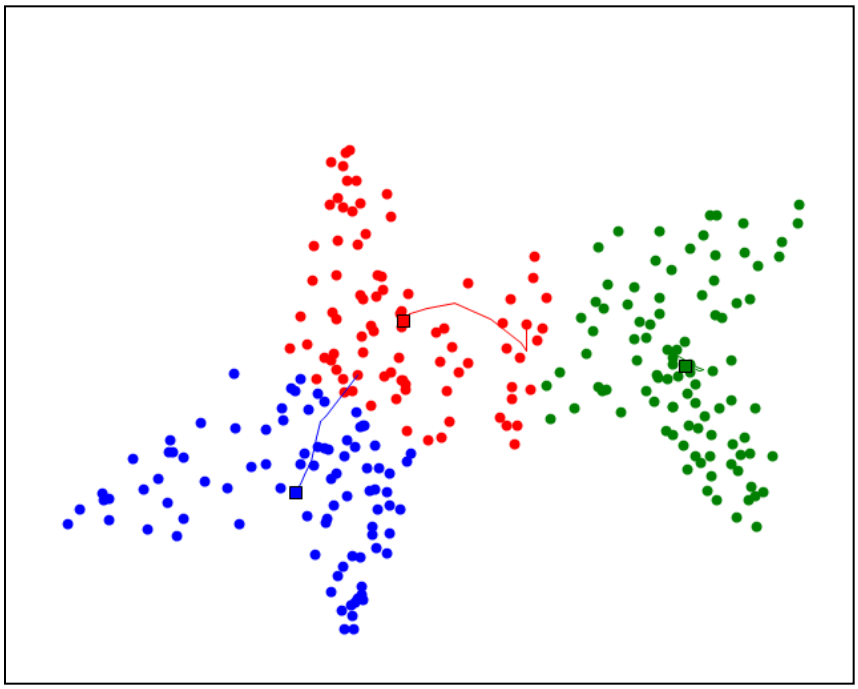
iterazione 6



iter. 7 (convergenza)

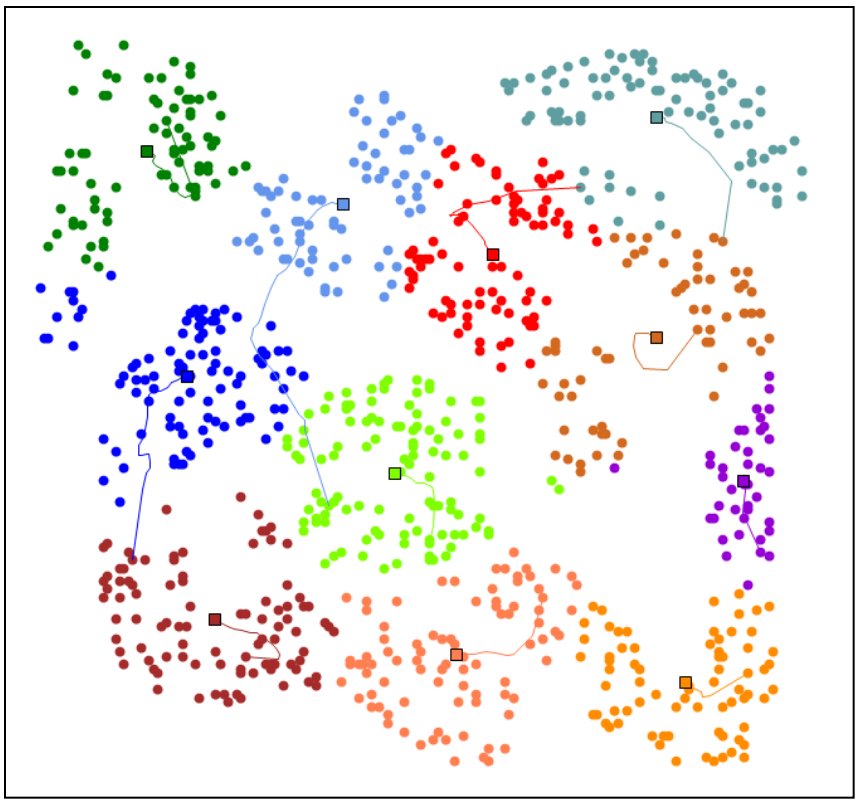


K-means: limitazioni



3 classi – 8 iterazioni

Minimizzando le distanze dai centroidi, K-means non è in grado di identificare cluster dalla forma non sferica.



11 classi, 31 iteraz.

anche in questo caso non tutti i cluster hanno forma sferica ...

K-means: soluzione iniziale e validazione

Diverse varianti sono state proposte per generare buone soluzioni iniziali e di determinare il numero di classi (clustering validation).

- Per minimizzare il rischio di convergenza verso minimi locali, l'algoritmo può essere eseguito più volte a partire da soluzioni iniziali diverse:
  - random
  - prodotte da un (diverso) euristico
  - o magari da un metodo evoluzionistico (algoritmo genetico).

Quanti cluster ?

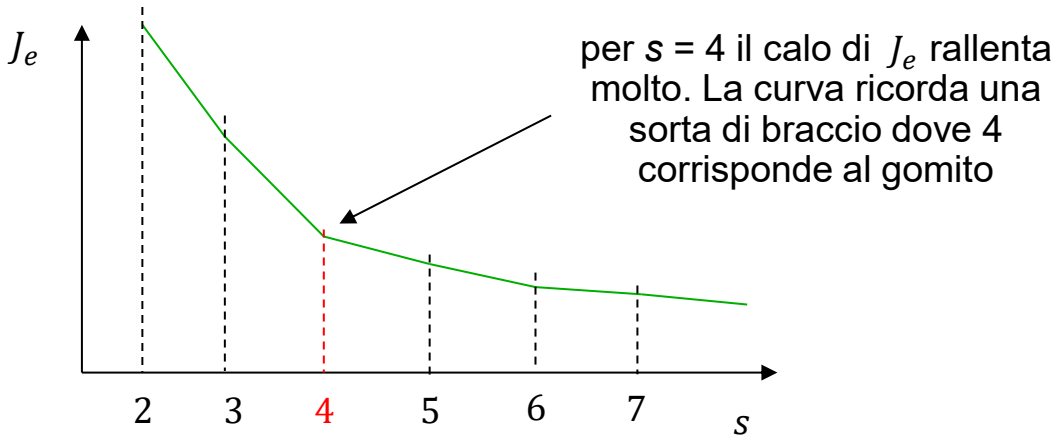
- Le tecniche di validazione tendono a valutare a posteriori la bontà delle soluzioni prodotte per diversi valori di s, e a sceglierne una sulla base di un criterio di validazione che tenga conto sia della bontà della soluzione sia della sua complessità:
  - Problema: considerando il criterio di «minimizzazione distanze dai centroidi» e lanciando K-means con diversi valori di s, è molto più facile ottenere valori ridotti di J_e per valori elevati di s. Quanto vale J_e per $s = n$ (ogni cluster un solo pattern) ?
  - Possibile soluzione: penalizzare le soluzioni con molti cluster; ad esempio:

$$J_e^* = J_e + penalty \cdot s$$

Di fatto però il problema si ribalta nella scelta di $penalty$

K-means: validazione (2)

Discontinuità nel grafico: un modo più efficace per determinare il numero ottimale di cluster è quello di cercare punti di inflessione (anche detti *elbow*) nel valore di J_e al variare di s. Infatti, se i pattern formano raggruppamenti evidenti e ben identificabili, scegliendo il corretto valore di s, dovremmo riscontrare una discontinuità nel grafico di J_e al variare di s.



Silhouette score: un criterio più oggettivo (che funziona per cluster sferici come quelli prodotti da k-means) e quello di calcolare il silhouette score come media dei *silhouette coefficient* di ciascun pattern e scegliere s che lo massimizza.

$$Silhouette\ cefficient = (b - a)/max(a, b)$$

dove a è la distanza media intra cluster del pattern e b la distanza tra il pattern e i pattern del cluster ad esso più vicino (escluso quello di appartenenza). È presente in scikit-learn la funzione *silhouette_score*() che calcola questa metrica. Risulta però computazionalmente pesante per grandi dataset.

Il *silhouette diagram* (vedi [A. Géron]) è una rappresentazione grafica degli score utile per la validation.

Fuzzy K-means

La variante Fuzzy del K-means consente a un pattern di appartenere con un certo grado di probabilità a diverse classi. Il criterio di ottimizzazione in questo caso è:

$$J_{fuz} = \sum_{i=1..s} \sum_{j=1..n} \left[P\left(C_i|\mathbf{x}_j, \Theta\right)\right]^m \cdot \left\|\mathbf{x}_j - \boldsymbol{\theta}_i\right\|^2$$

dove $P\left(C_i|\mathbf{x}_j, \Theta\right)$ è la probabilità che dato il pattern $\mathbf{x}_j$ e l'insieme $\Theta = \{\boldsymbol{\theta}_1 \ldots \boldsymbol{\theta}_s\}$ di centroidi che definiscono la soluzione attuale, il cluster di appartenenza sia C_i.

I centrodi invece che come semplice media dei pattern si calcolano come media pesata rispetto alle probabilità di appartenenza:

$$\boldsymbol{\theta}_i = \frac{\sum_{j=1..n} P\left(C_i|\mathbf{x}_j, \Theta\right) \cdot \mathbf{x}_j}{\sum_{j=1..n} P\left(C_i|\mathbf{x}_j, \Theta\right)} \qquad \text{Eq. (1)}$$

Le probabilità di appartenenza si calcolano come:

$$P\left(C_i|\mathbf{x}_j, \Theta\right) = \frac{1}{\sum_{k=1..s} \left(\frac{\left\|\mathbf{x}_j - \boldsymbol{\theta}_i\right\|}{\left\|\mathbf{x}_j - \boldsymbol{\theta}_k\right\|}\right)^{\frac{2}{m-1}}} \qquad \text{Eq. (2)}$$

$m > 1$ è un parametro che definisce quanto l'appartenenza ai diversi cluster debba essere sfumata. Valore tipico $m = 2$.

Fuzzy K-means (2)

Il pseudocodice dell'algoritmo è molto simile al K-means:

Inizializza n, s

Inizializza casualmente $P(C_i|\mathbf{x}_j, \Theta),\ i = 1 \dots s, j = 1 \dots n$

do { calcola i centroidi $\Theta = \{\boldsymbol{\theta}_1 \dots \boldsymbol{\theta}_s\}$ // *Eq. (1)*

calcola i gradi di appartenenza

$P(C_i|\mathbf{x}_j, \Theta),\ i = 1 \dots s, j = 1 \dots n$ // *Eq. (2)*

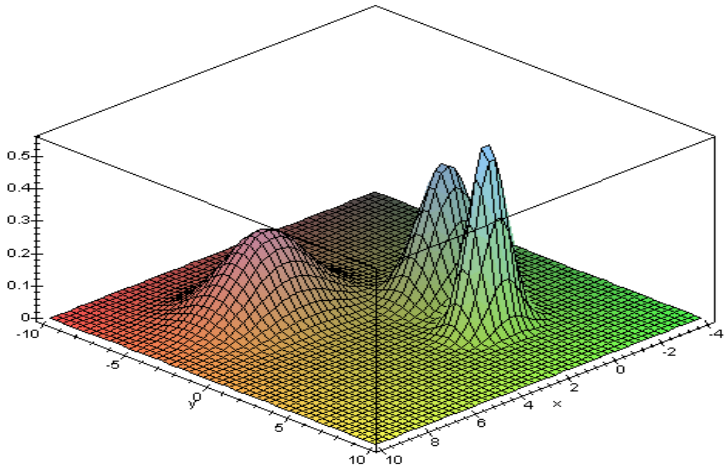
} while (riduzione J_{fuz} *significativa & iteration < max*)

Rispetto al K-means, questa variante fornisce a volte una convergenza più robusta verso la soluzione finale. D'altro canto uno svantaggio è legato al fatto che l'appartenenza di un pattern a un cluster dipende implicitamente dal numero di cluster, e se questo è specificato in modo incorretto si possono ottenere cattive soluzioni.

Expectation – Maximization (EM)

con Gaussian Mixture

Si ipotizza che i pattern siano stati generati da un *mix di distribuzioni* ("mixture" in inglese): ogni classe ha generato dati in accordo con una specifica distribuzione, ma al termine della generazione i pattern appaiono come prodotti da un'unica distribuzione multi-modale.



Obiettivo del clustering con EM è risalire (a partire dai pattern del training set) ai parametri delle singole distribuzioni che li hanno generati. A tal fine si ipotizza nota la forma delle distribuzioni e si assume, per semplicità, che esse siano tutte dello stesso tipo. Il caso più frequente è quello di *mix* di s distribuzioni *multinormali* (gaussiane), di cui si vogliono stimare i parametri di definizione (s vettori medi + s matrici di covarianza + s coefficienti α):

$$p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\Theta}) = \sum_{i=1..s} \alpha_i \cdot p_i(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_i) \qquad \boldsymbol{\theta}_i = \{\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i\}$$

dove $\boldsymbol{\Theta} = \{\alpha_1, \alpha_2 \ldots \alpha_s, \boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2 \ldots \boldsymbol{\theta}_s\}$ è il vettore di parametri che definisce il mix di distribuzioni, $p_i(\cdot\,|\boldsymbol{\theta}_i)$ è una multinormale con parametri $\boldsymbol{\theta}_i$

EM: Idea

La stima dei parametri avviene secondo il criterio generale del *maximum likelihood* (in italiano "massima verosimiglianza").

In generale il likelihood $\mathcal{L}$ dei parametri Θ dati i pattern $\mathcal{X}$ corrisponde alla probabilità (densità di probabilità nel continuo) di aver ottenuto i pattern dati i parametri (inversione):

$$\mathcal{L}(\Theta|\mathcal{X}) = p(\mathcal{X}|\Theta)$$

Per semplicità, al posto del likelihood, si massimiza il suo logaritmo. Considerando i pattern indipendenti la probabilità di avere ottenuto i pattern del training set è il prodotto delle probabilità delle singole generazioni:

$$log\, p(\mathcal{X}|\Theta) = log \prod_{j=1\ldots n} p(\mathbf{x}_j|\Theta) = \sum_{j=1\ldots n} log\left(\sum_{i=1\ldots s} \alpha_i \cdot p_i(\mathbf{x}_j|\boldsymbol{\theta}_i)\right)$$

Purtroppo questa massimizzazione è molto difficile a causa della sommatoria dentro al logaritmo. Per eliminare la sommatoria, ci servirebbe sapere ogni pattern $\mathbf{x}_j$ del training set da quale componente $p_i(\cdot)$ della mixture è stato generato.

A tal fine si utilizza EM, che è un approccio iterativo nato per il calcolo del maximum likelihood nel caso in cui i dati a disposizione $\mathcal{X}=\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \ldots \mathbf{x}_n\}$ siano incompleti per la mancanza di alcuni valori $\mathcal{Y}=\{\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2 \ldots \mathbf{y}_n\}$. Ogni pattern completo $\mathbf{z}_j = [\mathbf{x}_j, \mathbf{y}_j], j = 1 \ldots n$ è costituito da due parti di cui solo la prima è nota.

Nel caso di interesse (*derivare i parametri di una gaussian mixture*) i dati sono completi ma le potenzialità di EM sono utilizzate per rendere trattabile la massimizzazione: sfruttiamo i valori $\mathcal{Y}$ come indicatori delle componenti ignote che hanno generato i singoli pattern.

EM: nel caso generale

Obiettivo di EM è dunque la massimizzazione del log-likelihood dei dati completi o log-likelihood-completo:

$$log\, \mathcal{L}(\Theta|\mathcal{Z}) = log\, \mathcal{L}(\Theta|\mathcal{X}, y) = p(\mathcal{X}, y|\Theta)$$

A tal fine vengono eseguiti iterativamente (fino a convergenza) due passi, Expectation e Maximization:

- *Expectation*: viene calcolato il valore atteso $E(\cdot)$ del log-likelihood-completo, dato il training set $\mathcal{X}$ e una stima dei parametri Θ^g ottenuti all'iterazione precedente:

$$Q(\Theta|\Theta^g) = E\left(log\, p(\mathcal{X}, y|\Theta) \mid \mathcal{X}, \Theta^g\right)$$

  Il valore atteso (media) è calcolato rispetto alla variabile aleatoria y, governata dalla distribuzione $f(\mathbf{y}|\mathcal{X}, \Theta^g)$:

$$E\left(log\, p(\mathcal{X}, y|\Theta) \mid \mathcal{X}, \Theta^g\right) = \int_{\mathbf{y}\in\mathbf{\Psi}} log\, p(\mathcal{X}, y|\Theta) \cdot f(\mathbf{y}|\mathcal{X}, \Theta^g)\, d\mathbf{y}$$

- *Maximization*: determina il valore dei parametri che massimizzano il valore atteso calcolato al passo di Expectation:

$$\Theta^{g+1} = \underset{\Theta}{argmax}\, Q(\Theta|\Theta^g)$$

EM: nel caso specifico

Sfruttando le peculiarità di EM, si assume l'esistenza di una componente nascosta y_j (per ogni pattern) che indica quale delle s distribuzioni gaussiane ha generato il pattern $\mathbf{x}_j$.

Il log-likelihood-completo assume ora la forma:

$$log\mathcal{L}(\Theta|\mathcal{X}, \mathcal{Y}) = \sum_{j=1\ldots n} log\left(\alpha_{y_j} \cdot p_{y_j}\left(\mathbf{x}_j|\boldsymbol{\theta}_{y_j}\right)\right)$$

sebbene gli y_j non siano noti, una loro stima (o meglio una stima della loro distribuzione) può essere derivata (teorema di Bayes) dai parametri Θ^g disponibili all'iterazione (g) corrente.

Per un singolo y_j (e corrispondente $\mathbf{x}_j$):

$$P\left(y_j = k|\mathbf{x}_j, \Theta^g\right) = P\left(k|\mathbf{x}_j, \Theta^g\right) = \frac{\alpha_k{}^g \cdot p_k\left(\mathbf{x}_j|\boldsymbol{\theta}_k{}^g\right)}{\sum_{i=1\ldots s} \alpha_i{}^g \cdot p_i\left(\mathbf{x}_j|\boldsymbol{\theta}_i{}^g\right)} \qquad \text{Eq. (1)}$$

Per un generico vettore $\mathbf{y}$ di osservazioni:

$$P(\mathbf{y}|\mathcal{X}, \Theta^g) = \prod_{j=1\ldots n} P\left(y_j|\mathbf{x}_j, \Theta^g\right)$$

Il valore atteso Q della slide precedente può essere scritto come:

$$Q(\Theta|\Theta^g) = \sum_{\mathbf{y}\in\boldsymbol{\Psi}} log\mathcal{L}(\Theta|\mathcal{X}, \mathcal{Y}) \cdot P(\mathbf{y}|\mathcal{X}, \Theta^g) =$$

$$= \sum_{\mathbf{y}\in\boldsymbol{\Psi}} \left(\sum_{j=1\ldots n} log\left(\alpha_{y_j} \cdot p_{y_j}\left(\mathbf{x}_j|\boldsymbol{\theta}_{y_j}\right)\right) \cdot \prod_{j=1\ldots n} P\left(y_j|\mathbf{x}_j, \Theta^g\right) \right)$$

EM: formule incrementali

A seguito di alcuni passaggi (non banali) [1] durante i quali l'ottimizzazione è eseguita eguagliando a 0 le derivate parziali rispetto ai parametri incogniti si ottengono le seguenti formule per l'aggiornamento incrementale dei parametri:

$$P\left(C_k|\mathbf{x}_j,\Theta^g\right)=\frac{{\alpha_k}^g\cdot p\left(\mathbf{x}_j|{\boldsymbol{\theta}_k}^g\right)}{\sum_{i=1\ldots s}{\alpha_i}^g\cdot p\left(\mathbf{x}_j|{\boldsymbol{\theta}_i}^g\right)} \qquad \text{Eq. (1)}$$

$${\alpha_k}^{g+1}=\frac{1}{n}\sum_{j=1\ldots n}P\left(C_k|\mathbf{x}_j,{\boldsymbol{\theta}_k}^g\right) \qquad \text{Eq. (2)}$$

$${\boldsymbol{\mu}_k}^{g+1}=\frac{\sum_{j=1\ldots n}P\left(C_k|\mathbf{x}_j,{\boldsymbol{\theta}_k}^g\right)\cdot\mathbf{x}_j}{\sum_{j=1\ldots n}P\left(C_k|\mathbf{x}_j,{\boldsymbol{\theta}_k}^g\right)} \qquad \text{Eq. (3)}$$

$${\boldsymbol{\Sigma}_k}^{g+1}=\frac{\sum_{j=1\ldots n}P\left(C_k|\mathbf{x}_j,{\boldsymbol{\theta}_k}^g\right)\left(\mathbf{x}_j-{\boldsymbol{\mu}_k}^{g+1}\right)\left(\mathbf{x}_j-{\boldsymbol{\mu}_k}^{g+1}\right)^t}{\sum_{j=1\ldots n}P\left(C_k|\mathbf{x}_j,{\boldsymbol{\theta}_k}^g\right)} \qquad \text{Eq. (4)}$$

Intuitivamente, trattando le componenti della mixture come cluster:

- Eq (1), stessa della slide precedente: indica la probabilità di appartenenza di $\mathbf{x}_j$ al cluster C_k. Calcolata sfruttando inversione di Bayes. *Ricorda*: $p(\cdot\,|\boldsymbol{\theta}_k)$ è una multinormale con parametri $\boldsymbol{\theta}_k$
- Eq (2). Calcola il «peso» del cluster C_k in base alla somma delle appartenenze a $C_k$di tutti i pattern del training set.
- Eq (3) e (4). Calcolano media e matrice di covarianza del cluster C_k pesando i pattern rispetto al loro grado di appartenenza a C_k.

[1] J. A. Bilmes, "*A Gentle Tutorial of the EM Algorithm and its Application for Gaussian Mixture and Hidden Markov Models*", International Computer Science Institute,1998.

EM: algoritmo

Inizializza n, s

Inizializza $g = 0$, $\alpha_k{}^0$, $\boldsymbol{\theta}_k{}^0 = \left\{\boldsymbol{\mu}_k{}^0, \boldsymbol{\Sigma}_k{}^0\right\}$, $k = 1 \dots s$

do {

Expectation: calcola

$P\left(C_k|\mathbf{x}_j, \Theta^g\right)$, $k = 1 \dots s, j = 1 \dots n$ // *Eq. (1)*

Maximization: calcola

$\alpha_k{}^{g+1}, \boldsymbol{\mu}_k{}^{g+1}, \boldsymbol{\Sigma}_k{}^{g+1}$, $k = 1 \dots s$ // *Eq. (2) (3) (4)*

$g = g + 1$

} while (parametri α_k e $\boldsymbol{\theta}_k$ *non stabili* & $g <$ *max*)

L'algoritmo è simile a fuzzy k-means, ma in questo caso, oltre ai centroidi (qui i vettori medi $\boldsymbol{\mu}_k{}^{g+1}$), abbiamo maggiori gradi di libertà nella forma dei cluster che possono essere ellissoidali.

Attenzione all'implementazione:

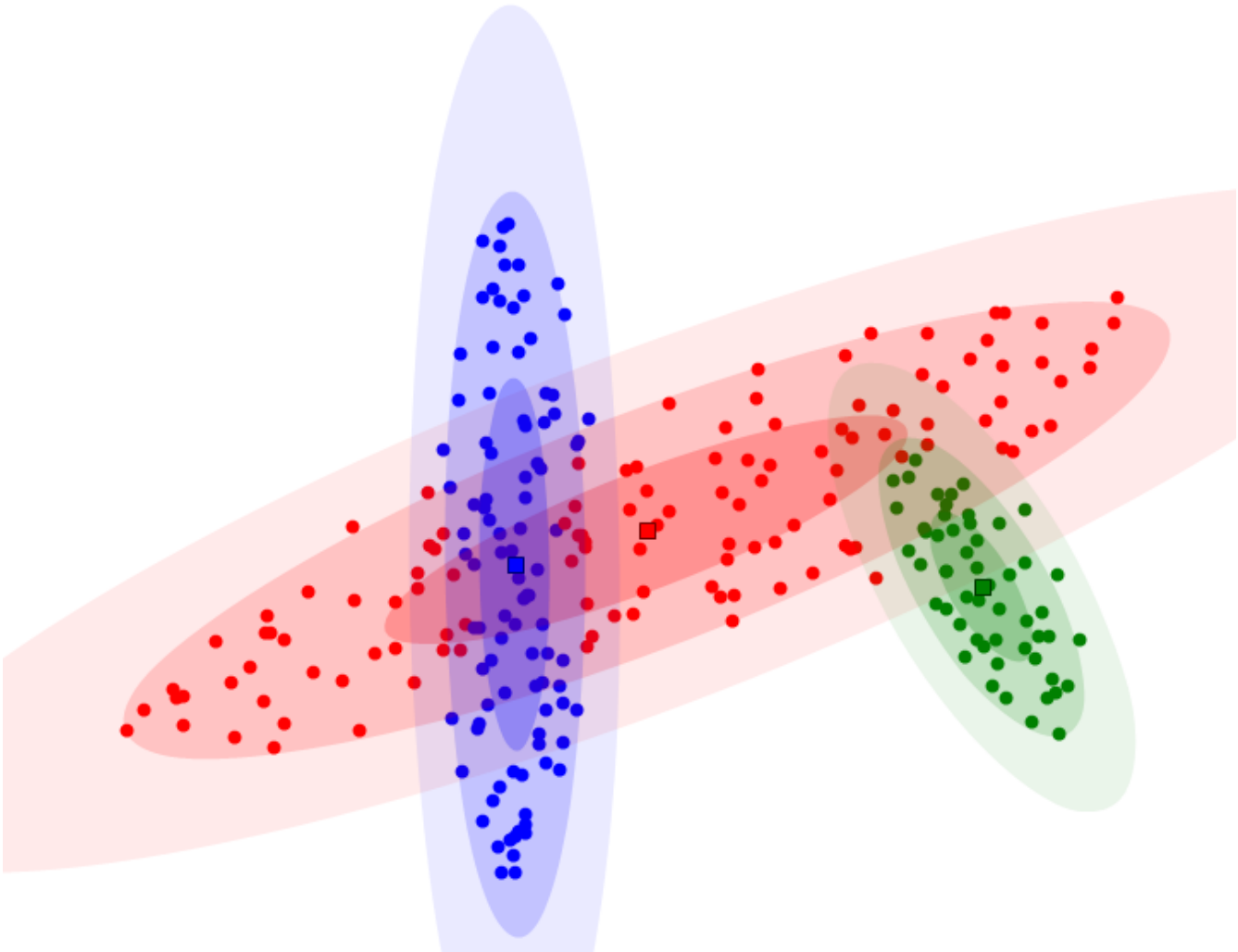
- Le matrici di covarianza non possono essere generate completamente random (è necessario siano simmetriche e definite positive). *Consiglio*: partire con matrici diagonali.
- Le probabilità di appartenenza possono assumere valori molto piccoli e causare problemi numerici. *Consiglio*: usare costanti moltiplicative se necessario e normalizzare alla fine.

Esempio

3 classi – 40 iterazioni circa

(generato con BioLab)

A differenza di K-means e fuzzy K-means, EM è in grado di identificare nuvole di punti con forme ellissoidali



Altro esempio

11 classi – 200 iterazioni circa
(generato con BioLab)