Clustering

Leggere il Capitolo 15 di Riguzzi et al.
Sistemi Informativi

Clustering

- Raggruppare le istanze di un dominio in gruppi tali che gli oggetti nello stesso gruppo mostrino un alto grado di similarità e gli oggetti in gruppi diversi un alto grado di dissimilarità

Misure di distanza o dissimilarità

- Variano tra 0 e + infinito
- Distanze per punti in R^n: *distanza euclidea*

$$d_2(x,y) = \left(\sum_{k=1}^{n} (x_k - y_k)^2 \right)^{1/2} = \|x - y\|_2$$

- E' un caso particolare, con p=2, della *metrica di Minkowski*

$$d_p(x,y) = \left(\sum_{k=1}^{n} (x_k - y_k)^p \right)^{1/p} = \|x - y\|_p$$

Misure di similarità

- Variano tra 0 e 1
- Funzione coseno

$$s_{\cos}(x,y) = \frac{x^T y}{\|x\|\|y\|}$$

- Coefficiente di Dice

$$s_{Dice}(x,y) = \frac{2x^T y}{\left(\|x\|^2 + \|y\|^2\right)}$$

- Similarita' esponente

$$s_{\exp}(x,y) = \exp\left(-\|x-y\|^{\alpha}\right)$$

Relazione tra le misure di similarita' e dissimilarita'

- Un esempio:

$$s(x, y) = \frac{1}{1 + d(x, y)}$$

$$d(x, y) = \frac{1 - s(x, y)}{s(x, y)}$$

K-means (versione di Forgy)

- Si applica a istanze appartenenti a R^n
- Sia k il numero dei cluster che si vogliono trovare

1. Si scelgono k punti a caso in R^n come centri dei cluster
2. Le istanze sono assegnate al cluster avente il centro piu' vicino
3. Si calcola il centroide (la media) dei punti in ogni cluster: questo rappresenta il nuovo centro del cluster

$$c_j = \frac{\sum_{i=1}^{m_j} x_i}{m_j}$$

4. Si riparte dal passo 2 finche' tutte le istanze non sono assegnate allo stesso cluster in due iterazioni successive

K-means (versione di MacQueen)

- In questo caso i centroidi vengono ricalcolati dopo l'assegnazione di ogni pattern e non alla fine di un ciclo di riallocazione:

1. Si scelgono k punti a caso in R^n come centri dei cluster
2. Si assegnano le istanze ai cluster
3. Si calcolano i nuovi centroidi dei cluster
4. for i=1 to m (m numero di punti)
    1. assegna il punto x_i al cluster avente il centroide più vicino
    2. ricalcola il centroide del cluster che ha guadagnato l'elemento e di quello che l'ha perso
5. Si riparte dal passo 4 finche' tutte le istanze non sono assegnate allo stesso cluster in due iterazioni successive

Risultato del clustering

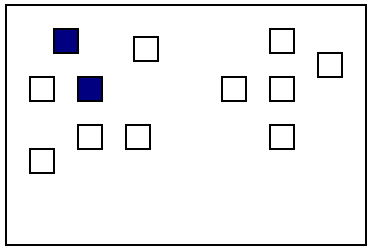
- Il k-means cerca di minimizzare la funzione obiettivo

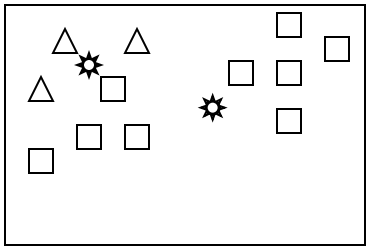
$$e^2 = \sum_{j=1}^{k} \sum_{i \in cluster(j)} d^2\left(x_i, c_j\right)$$

Scelta dei punti iniziali

- Sono possibili varie scelte:
  - Le prime k istanze nel dataset
  - Etichetta le istanze con i numeri da 1 a m (numero delle istanze) e scegli quelle con numeri m/k,2m/k,…,(k-1)m/k e m
  - Scegliere a caso k istanze
  - Generare k punti scegliendo a caso i valori di ciascun coordinata nel range della coordinata
  - Genera un partizione del dataset in k sottoinsiemi mutuamente esclusivi e considera i centroidi dei sottoinsiemi

Esempio (versione di Forgy)



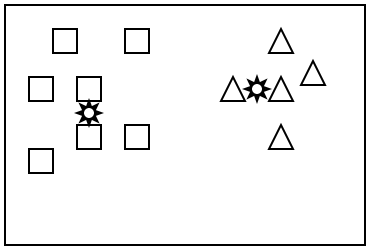


■ Punti iniziali

△ Membri del primo cluster

☼ Centri dei cluster

□ Membri del secondo cluster



Dopo la seconda iterazione

PAM

- PAM (Partitioning Around Medoids)
- Per trovare k cluster, si determina un oggetto rappresentativo per ogni cluster. Questo oggetto, chiamato medoid, e' l'oggetto collocato piu' centralmente nel cluster.
- Una volta selezionati i medoid, gli altri oggetti vengono raggruppati intorno a quello piu' simile a loro

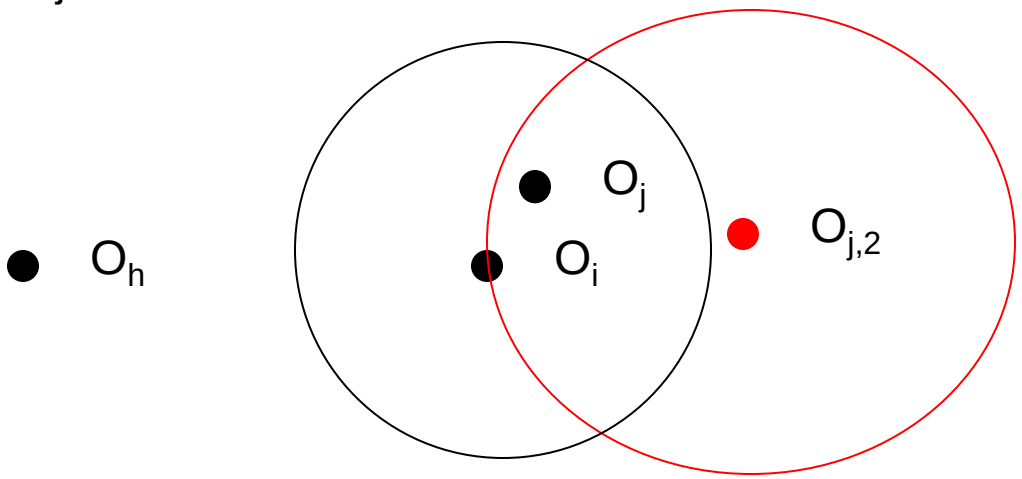
1. Seleziona arbitrariamente k medoid iniziali
2. Per ogni oggetto non selezionato, si vede se scambiandolo con uno dei medoid si ottiene un clustering migliore
3. Continua fino a che nessuno scambio porta a miglioramento

PAM

- Sia O_i un oggetto selezionato come medoid e O_h l'oggetto non selezionato considerato per lo scambio
- PAM calcola il costo C_{jih} dello scambio tra O_he O_i per ogni oggetto non selezionato O_j
- Ci sono 4 casi

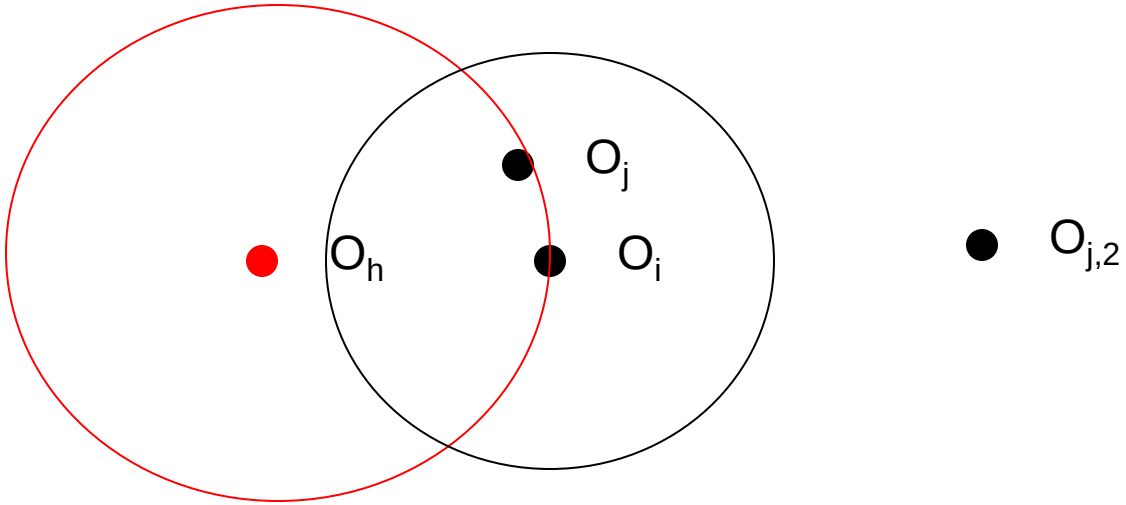
Caso 1

1. O_j appartiene al cluster di O_i
   - Sia O_j piu' vicino a $O_{j,2}$ che a O_h cioe' $d(O_j, O_h) >= d(O_j, O_{j,2})$ dove $O_{j,2}$ e' il secondo medoid piu' vicino a O_j
   - O_j va nel cluster di $O_{j,2}$
   - $C_{jih} = d(O_j,O_{j,2}) - d(O_j,O_i)$
   - C_{jih} e' sempre non negativo



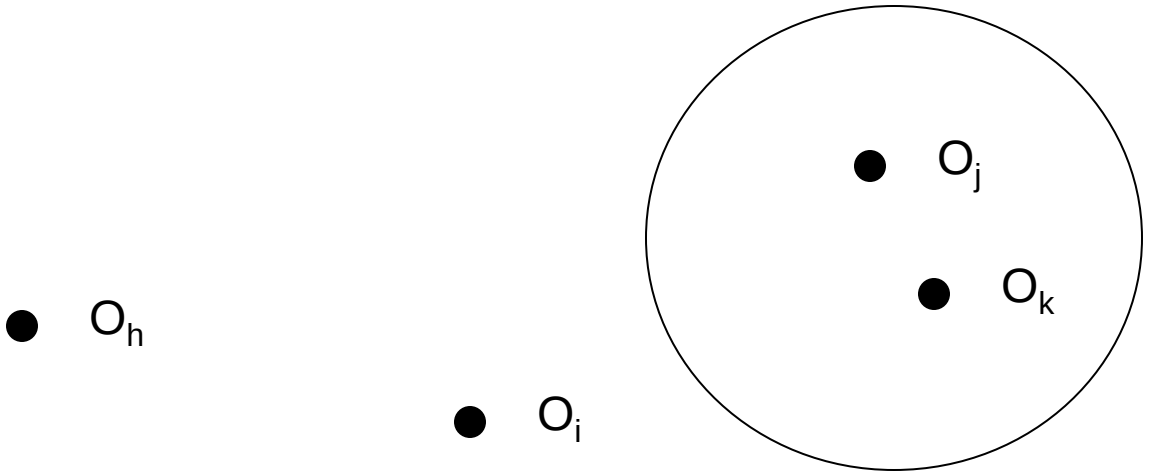
Caso 2

2. O_j appartiene al cluster di O_i. Ma O_j e' piu' distante da $O_{j,2}$ che da O_h cioe' $d(O_j, O_h)<d(O_j, O_{j,2})$
   - O_j va nel cluster di O_h
   - $C_{jih}=d(O_j,O_h)-d(O_j,O_i)$
   - C_{jih} puo' essere sia positivo che negativo



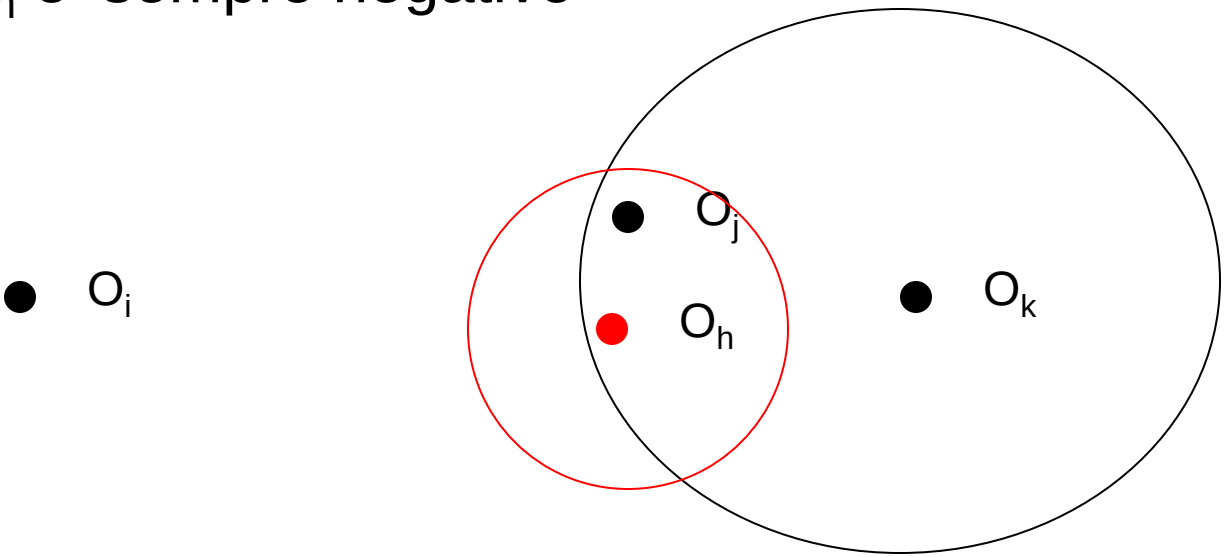
Caso 3

3. O_j appartiene al cluster di un O_k diverso da O_i. Sia O_j piu' vicino a O_k che a O_h
   - O_j rimane nel cluster di O_k
   - $C_{jih}=0$



Casi per C_{jih}

4. O_j appartiene al cluster di un O_k, ma O_j e' piu' lontano da O_k che da O_h
   - O_j va nel cluster di O_h
   - $C_{jih}=d(O_j,O_h)-d(O_j,O_k)$
   - C_{jih} e' sempre negativo



Costo totale

- Il costo totale di rimpiazzare O_i con O_h e'

$$TC_{ih} = \sum_j C_{jih}$$

Algoritmo

1. Seleziona k oggetti arbitrariamente
2. Calcola TC_{ih} per tutte le coppie di oggetti O_i, O_h dove O_i e' correntemente selezionato e O_h no
3. Seleziona la coppia O_i, O_h che corrisponde al $min_{Oi,Oh}$ TC_{ih} Se il minimo e' negativo, sostituisci O_i con O_h e torna al passo 2.
4. Altrimenti, assegna ciscun oggetto al suo cluster e termina

Clustering basato sulla probabilita’

- Basato su un modello statistico che si chiama **finite mixture**
- Una mixture e’ un insieme di k distribuzioni di probabilita, rappresentanti k cluster, ciascuna delle quali descrive la distribuzione dei valori per i membri di quel cluster
- Ogni distribuzione fornisce la probabilita’ che una istanza abbia certi valori per i suoi attributi supponendo che sia noto a quale cluster appartiene
- Ogni istanza appartiene a un solo cluster ma non sappiamo quale
- I cluster non hanno la stessa probabilita’

Finite mixture

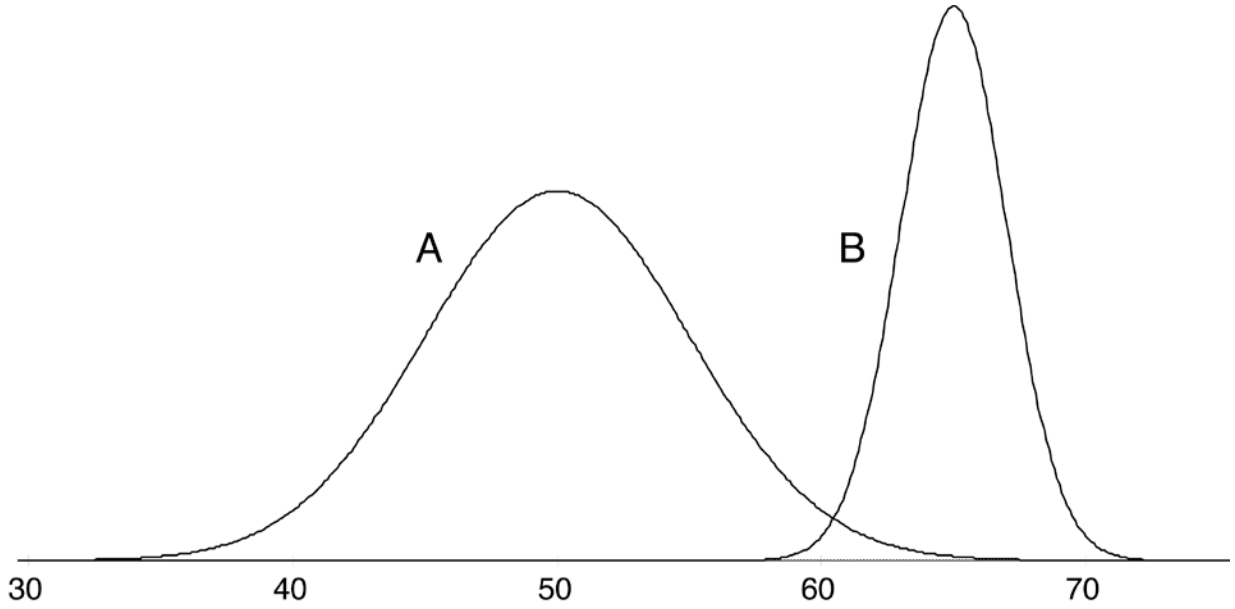
- Il caso piu’ semplice e quello in cui si ha una sola variabile reale e due cluster con distribuzione normale.
- Media e varianza della distribuzione sono diverse per i due cluster
- Obiettivo del clustering e’ quello di prendere un insieme di istanze e di trovare la media e la varianza delle due distribuzioni normali piu’ la distribuzione delle istanze nei cluster

Esempio

data

A	51	B	62	B	64	A	48	A	39	A	51
A	43	A	47	A	51	B	64	B	62	A	48
B	62	A	52	A	52	A	51	B	64	B	64
B	64	B	64	B	62	B	63	A	52	A	42
A	45	A	51	A	49	A	43	B	63	A	48
A	42	B	65	A	48	B	65	B	64	A	41
A	46	A	48	B	62	B	66	A	48		
A	45	A	49	A	43	B	65	B	64		
A	45	A	46	A	40	A	46	A	48		

model



Finite mixture problem

- Ci sono due cluster A e B con medie e deviazioni standard μ_A, σ_A e μ_B, σ_B
- I campioni sono presi da A con probabilita' p_A e da B con probabilita' p_B con $p_A+p_B=1$
- Il risultato e' il dataset mostrato
- Problema di clustering (detto anche finite mixture problem): date le istanze (senza le classi A o B), trovare il cinque parametri $\mu_A, \sigma_A, \mu_B, \sigma_B$ e p_A (p_B puo' essere ricavato da p_A)

Calcolo di media e varianza

- Se si conoscesse da quale distribuzione viene ogni istanza, si potrebbero calcolare μ_A, σ_A, μ_B e σ_B con le seguenti formule:

$$\mu = \frac{x_1 + x_2 + \ldots + x_p}{p}$$

$$\sigma^2 = \frac{(x_1 - \mu)^2 + (x_2 - \mu)^2 + \ldots + (x_p - \mu)^2}{p - 1}$$

- p-1 a denominatore e' usato perche' σ e' calcolata su un campione invece che sull'intera popolazione (si chiama stimatore senza bias). Se p e' grande c'e' poca differenza.

Calcolo di Pr(A|x)

- Se conoscessimo i 5 parametri, potremmo trovare le probabilita' che una istanza x appartenga a ciascuna distribuzione con la seguente formula

$$Pr(A|x)=\frac{Pr(x|A)Pr(A)}{Pr(x)}=\frac{f(x;\mu_A,\sigma_A)dx\ p_A}{Pr(x)}$$

dove f(x; μ,σ) e' la distribuzione normale:

$$f(x;\mu,\sigma)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}}e^{\frac{-(x-\mu)2}{2\sigma^2}}$$

- Pr(x) non e' noto

Calcolo di Pr(A|x)

- Allo stesso modo possiamo trovare il numeratore di Pr(B|x).
- Sappiamo che Pr(A|x)+Pr(B|x)=1 quindi

$$\frac{f(x;\mu_A,\sigma_A)dxp_A + f(x;\mu_B,\sigma_B)dxp_B}{Pr(x)}=1$$

$$f(x;\mu_A,\sigma_A)dxp_A + f(x;\mu_B,\sigma_B)dxp_B = Pr(x)$$

Quindi:

$$Pr(A|x)=\frac{f(x;\mu_A,\sigma_A)p_A}{f(x;\mu_A,\sigma_A)p_A + f(x;\mu_B,\sigma_B)p_B}$$

Algoritmo EM

- Il problema e' che non conosciamo ne' i 5 parametri ne' l'appartenenza delle istanze ai cluster
- Percio' adottiamo una procedura simile a quella del k-means:
  - Cominciamo con valori scelti a caso per i 5 parametri
  - Calcoliamo le probabilita' dei due cluster per ogni istanza usando i valori attuali dei parametri (passo di Expectation)
  - Usiamo la distribuzione delle istanze nei cluster per stimare i parametri (passo di Maximization (della verosimiglianza dei dati))
  - Ripartiamo dal passo di Expectation

Stima dei parametri

- In EM non abbiamo l'appartenenza netta delle istanze ai vari cluster ma solo una probabilita'. Percio' le formule per la stima dei parametri diventano:

$$\mu_A = \frac{w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_p x_p}{w_1 + w_2 + \ldots + w_p}$$

$$\sigma_A^{\ 2} = \frac{w_1 (x_1 - \mu)^2 + w_2 (x_2 - \mu)^2 + \ldots + w_p (x_p - \mu)^2}{w_1 + w_2 + \ldots + w_p}$$

- Dove w_i è $Pr(A|x_i)$ e dove gli x_i sono tutti gli x

Stima di p_A

$$p_A = \frac{w_1 + w_2 + \ldots + w_p}{p}$$

$$p_B = 1 - p_A$$

- Dove w_i è $Pr(A|x_i)$ e p è il numero totale di campioni

Quando terminare?

- K-means si ferma quando le classi delle istanze non variano piu'
- EM coverge verso un punto fisso
- Possiamo pero' capire quanto e' vicino calcolando la **verosimiglianza** (**likelihood**) globale che i dati derivino da questo dataset, dati i valori dei 5 parametri (verosimiglianza=probabilità)
- La verosimiglianza globale si ottiene in questo modo

$$\prod_i \Pr(x_i) = \prod_i (\Pr(x_i, A) + \Pr(x_i, B)) =$$

$$= \prod_i (p_A \Pr(x_i \mid A) + p_B \Pr(x_i \mid B))$$

Quando terminare

- La verosimiglianza globale e' una misura della "bonta'" del clustering e aumenta a ogni iterazione dell'algoritmo EM
- Attenzione: per $Pr(x_i|A)$ si usa $f(x; \mu_A,\sigma_A)dx$ cha ha un parametro sconosciuto (dx)
- Però devo solo confrontare valori di verosimiglianza che hanno tutti il fattore dx, quindi ok
- La verosmiglianza da' una misura della bonta' del clustering
- In pratica, viene calcolato il logaritmo della verosimiglianza che trasforma i prodotti in somme
- Per esempio, un criterio per fermarsi potrebbe essere: ci si ferma quando la differenza tra due valori successivi della verosimiglianza/dx e' inferiore a 10^{-10} per dieci iterazioni successive.

Proprieta' dell'algoritmo EM

- Anche se e' garantito che EM converga a un massimo, non e' detto che sia un massimo globale, potrebbe essere un massimo locale.
- Per questo la procedura deve essere ripetuta diverse volte, partendo da diversi valori iniziali dei parametri
- La verosimiglianza globale viene poi usata per confrontare le diverse soluzioni ottenute e prendere quella con la verosimiglianza piu' alta

Estensioni del mixture model

- Usare piu' di due distribuzioni: facile se il numero di distribuzioni e' dato come input
- Piu' di un attributo numerico: facile se si assume l'indipendenza tra gli attributi:
  - Le probabilita' di ciascun attributo data una classe sono moltiplicate insieme per ottenere la probabilita' congiunta dell'istanza data la classe

$$x=(x_1,x_2)$$

$$Pr(A|x)=\frac{Pr(x|A)Pr(A)}{Pr(x)}=\frac{Pr(x_1|A)Pr(x_2|A)Pr(A)}{Pr(x)}$$

Estensioni del mixture model

- Coppie di attributi numerici correlati: difficile
  - I due attributi possono essere descritti da una distribuzione normale bivariata
  - Ha un media ma invece di due varianze ha una matrice di covarianza simmetrica con 4 celle (3 parametri indipendenti)
  - Ci sono tecniche standard per stimare le probabilita' delle classi delle istanze e per stimare la media e la matrice di covarianza date le istanze e le loro probabilita' delle classi

Estensioni del mixture model

- Piu' di due attributi correlati: difficile
  - Si usano ancora distribuzioni multivariate
  - Il numero dei parametri aumenta con il quadrato del numero di attributi
    - n attributi indipendenti: 2n parametri
    - n attributi correlati: n+n(n+1)/2 parametri (per la simmetria della matrice di covarianza)
  - Il numero di parametri causa overfitting

Estensioni del mixture model

- Attributi nominali non correlati: un attributo con v valori possibili e' descritto da v numeri per ogni cluster ($Pr(x_i=v_j|cluster_h)$) che rappresentano la probabilita' di ogni valore
  - Passo di expectation:
    - Si calcola $Pr(cluster_h|x)$ da $Pr(x|cluster_h)$ usando il teorema di Bayes
    - Si calcola $Pr(x|cluster_h)$ moltiplicando i vari $Pr(x_i=v_j|cluster_h)$ per ogni attributo (assunzione di indipendenza)
  - Passo di maximization
    - Si calcolano i vari $Pr(x_i=v_j|cluster_h)$ dai dati:
    - $Pr(x_i=v_j|cluster_h)=\frac{p_j}{p}$

Estensioni del mixture model

- nel passo di maximization ci sono due problemi:
  - Non conosciamo l'appartenenza di una istanza ad una classe in maniera netta ma solo probabilistica (si considerano dei pesi)
  - Alcune stime di probabilita' possono risultare nulle. Queste stime annullano le $Pr(cluster_h|x_i=v_j)$ e quindi anche $Pr(cluster_h|x)$
    - Per questo si usa la stima di Laplace
    - $Pr(x_i=v_j|cluster_h)=\frac{p_j+1}{p+2}$

Estensioni del mixture model

- Due attributi nominali correlati: se hanno v_1 e v_2 possibili valori, possiamo sostituirli con un solo attributo covariante con v_1v_2 valori
  - Il numero di parametri aumenta esponenzialmente con l'aumentare del numero di attributi correlati
- Presenza di attributi sia numerici che nominali: non ci sono problemi se nessun attributo numerico e' correlato con quelli nominali. In caso contrario il problema e' difficile e non ce ne occupiamo

Estensioni del mixture model

- Valori nominali mancanti: due possibilita':
  - Non si considerano ne' nel passo di expectation (non si moltiplica per $Pr(x_i=v_j|cluster_h)$) ne' nel passo di maximization
  - Si trattano come un valore in piu'
- Valori numerici mancanti: stesse possibilita' che per i valori nominali

Estensioni del mixture model

- Al posto della distribuzione normale, altre distribuzioni possono essere usate:
  - Attributi numerici:
    - Se c'e un valore minimo (ad es. peso) e' meglio la distribuzione "log-normale"
    - Se c'e' sia un minimo che un massimo e' meglio la distribuzione "log-odds"
    - Se sono conteggi interi invece che valori reali e' meglio la distribuzione di "Poisson"
- Distribuzioni diverse possono essere usate per attibuti diversi

Autoclass

- Autoclass e' un sistema di clustering sviluppato dalla NASA che utilizza l'algoritmo EM
- Prova diversi numeri di cluster e differenti distribuzioni di probabilita' per gli attributi numerici
- L'algoritmo e' computazionalmente pesante, per questo si definisce a priori un tempo di esecuzione e l'algoritmo termina una volta esaurito il tempo
  - Con piu' tempo possiamo ottenere risultati migliori

Bibliografia

Ian Witten, Eibe Frank

Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques (Second Edition)

Morgan Kaufmann Publishers, 2005, ISBN 0-12-088407-0

(disponibile in biblioteca)