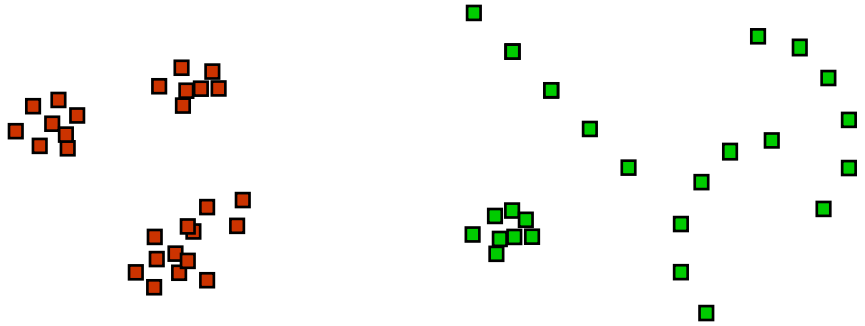
CLUSTERING II

Efektywne metody grupowania danych

Plan wykładu

- Wstęp:
  - Motywacja i zastosowania
- Metody grupowania danych
  - Algorytmy oparte na podziałach (partitioning algorithms)
    - PAM
    - Ulepszanie: CLARA, CLARANS
  - Hierarchiczne algorytmy (hierarchical algorithms)
    - BIRCH
  - Algorytmy oparte na gęstościach (density-based algorithms)
    - DBSCAN

Motywacja i zastosowania



- **Problem**: wyznaczyć grupy podobnych obiektów na podstawie podanej z góry miary podobieństwa lub funkcji odległości
- **Cel**:
  - **Wyznaczyć grupy** obiektów podobnych
  - **Redukcja zbioru danych**: znaleźć obiekty reprezentatywne w „homogenicznych” grupach
  - **Odkrywanie nowych cech**: szukanie „naturalnych” grup obiektów. Dla każdej grupy wyznaczyć (nieznaną) cechę opisującą obiekty w grupie
  - **Odkrywanie szumu (okłamania) w danych**: Szukanie obiektów, które nie należą do żadnej grupy

Zastosowania

- WWW:
  - Klasyfikacja dokumentów
  - Grupowanie danych Weblog w celu odkrywaniu wzorców dostępu do sieci użytkownika
- Marketing:
  - Odkrywanie grup klientów o podobnych zachowaniach
- Przetwarzanie obrazów:
  - Kompresja obrazów
- Automatyczne uporządkowanie książek, dokumentów
- Odkrywanie oszust

Problem grupowania danych

- **Dany jest:**
  - Zbiór *N* obiektów, każdy jest określony wektorem wartości o takiej samej długości
  - Funkcja odległości (macierz odległości)
  - Funkcja oceny jakości grupowania
- **Problem:** Podzielić zbiór obiektów na grupy, które optymalizują funkcję jakości.

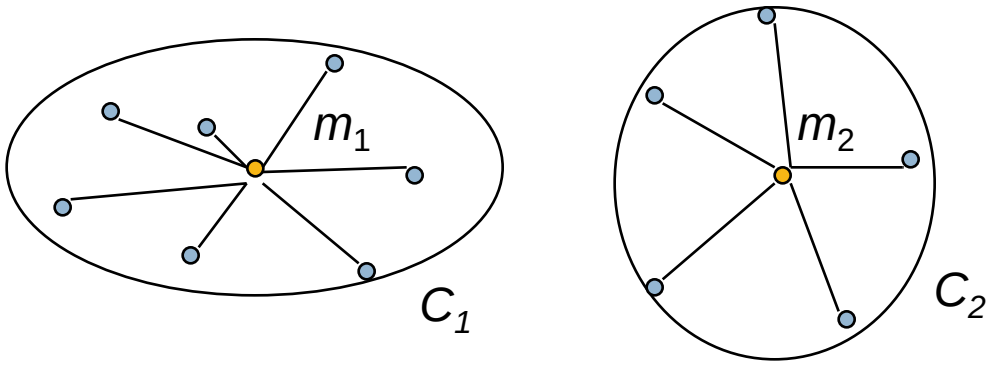
Główne metody grupowania

- Algorytmy oparte na podziałach (**partitioning algorithms**): Konstrukcja różnych podziałów i potem ocenia się je za pomocą kryterium jakości
- Hierarchiczne algorytmy (**hierarchical algorithms**): Utworzy hierarchiczną dekompozycję zbioru danych
- Algorytmy oparte na gęstościach (**density-based algorithms**): oparte na funkcji gęstości i na lokalnych połączeniach.

Algorytm oparty na podziałach

- Dane są zbiór obiektów *D* i parametr *k*. Podziel zbiór *D* na *k* grup takich, że optymalizują one wybrane kryterium optymalizacji.
- Suma kwadratów błędu (square error criterion):

$$E = \sum_{i=1}^{k} \sum_{p \in C_i} dist(p, m_i)^2$$



Znane algorytmy podziałowe

- Algorytm optymalny
- Algorytmy aproksymacyjne:
  - *k-means* (MacQueen): Każda grupa jest reprezentowana przez środek ciężkości obiektów w grupie
  - *k-medoids*: Każda grupa jest reprezentowana przez jeden obiekt w grupie.
    - PAM (**P**artition **a**round **m**edoids) (Kaufman i Rouseeuw)
    - CLARA (**C**lustering **Lar**ge **A**pplications)
    - CLARANS (**C**lustering **L**arge **A**pplications based on **Ran**domized **S**earch) (Raymont T. Ng i Jiawei Han)

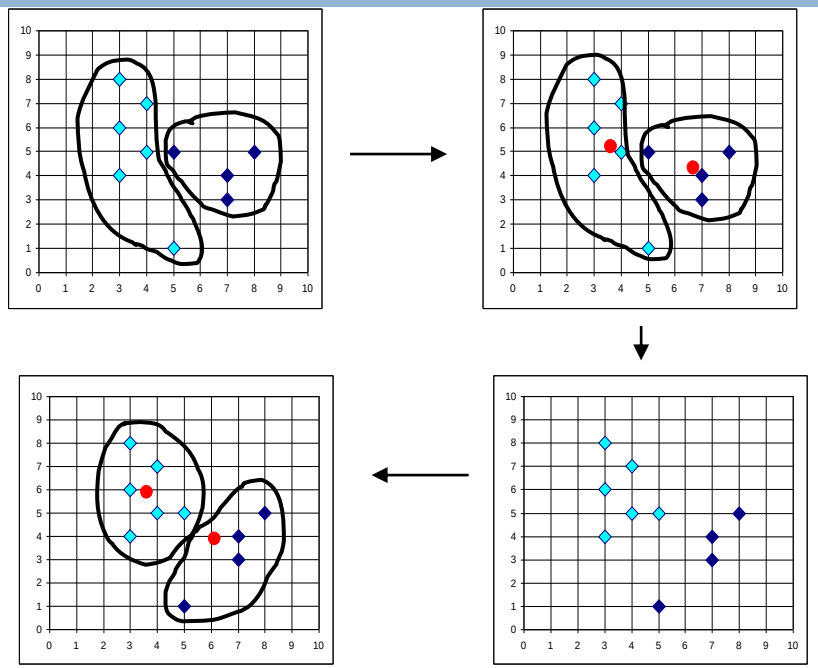
Algorytm *k* – centroidów

Krok 1. Podziel zbiór danych na dowolnych *k* rozłącznych zbiorów

Krok 2. Dla każdej grupy wyznacz centroid. Centroid jest środkiem ciężkości grupy.

Krok 3. Podziel obiekty do najbliższego centroida.

Krok 4. Jeśli grupy się nie zmieniają **stop**, wpp. **Goto** krok 2.



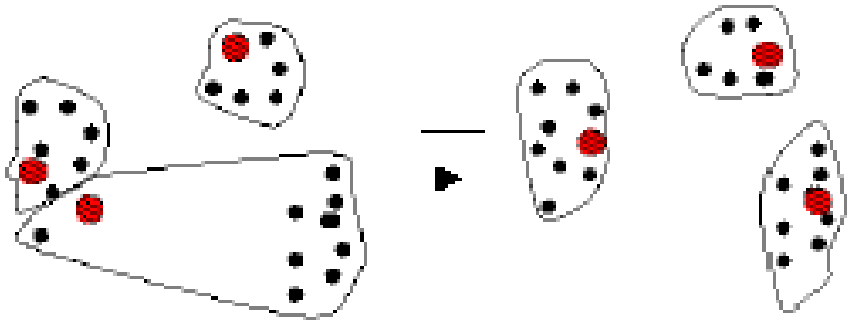
Zaleta:

- Efektywny: **O(*tkn*)**, gdzie *n*: liczba obietów, *k*: liczba grup, i *t*: liczba iteracji

Wada:

- Stosowalny tylko dla danych rzeczywistych
- Liczba grup *k* musi być podana
- Nie wykrywa szumu
- Nie pasuje, jeśli grupy nie są wypukłe

Algorytm *k*-medoidów - PAM



Cel: wyznaczyć *k* reprezentatywnych obiektów.

Krok 1. Wybierz dowolnie *k* reprezentatywnych obiektów

Krok 2. Dla każdej pary: (obiekt zwykły *h*,

obiekt reprezentatywny *i*)

wyznacz całkowity koszt zamiany TC_{ih}

Krok 3. Dla pary (*i*,*h*) o najmniejszym koszcie TC_{ih} zamień zwykły obiekt *h*

na medoid i medoid *i* na zwykły obiekt,

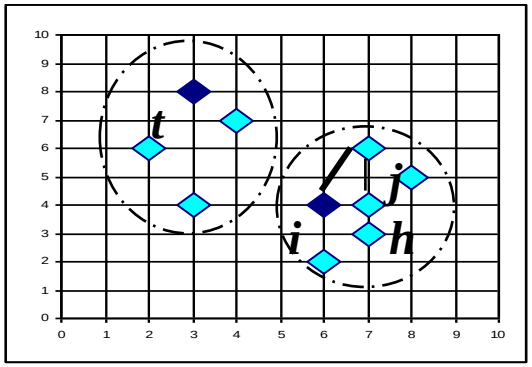
jeśli $TC_{ih} < 0$

Krok 4. Podziel obiekty do grup względem nowego układu medoidów, goto **Krok 2**

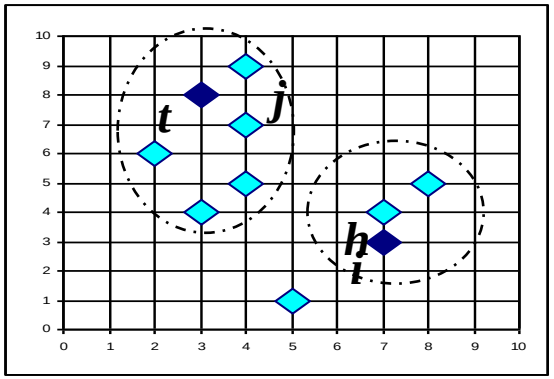
Złożoność: $O(k(n-k)^2.t)$

***n**-liczba obiektów, **k**-liczba grup, **t**-liczba iteracji*

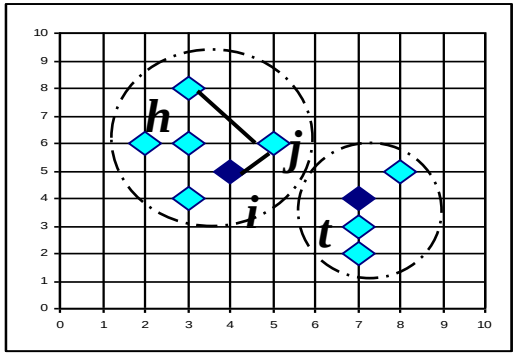
Wyznaczanie $TC_{ih} = \sum_j C_{jih}$



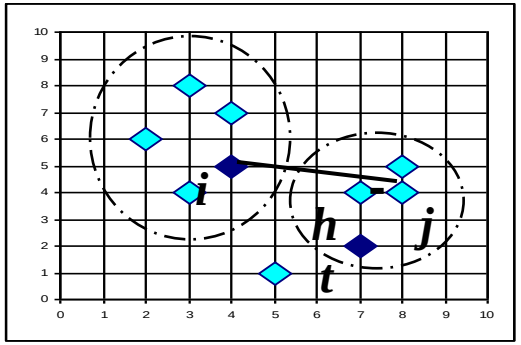
$C_{jih} = d(j, h) - d(j, i)$



$C_{jih} = 0$



$C_{jih} = d(j, t) - d(j, i)$



$C_{jih} = d(j, h) - d(j, t)$

Algorytm CLARA (Clustering Large Applications)

- **Algorytm CLARA**
  - Próbkuj wiele razy zbiór danych
  - Dla każdej próbki szukaj obiektów reprezentatywnych (za pomocą *PAM*)
  - Zwracaj najlepszy zbiór *medoidów*
- **Zaleta**: stosowalna dla dużego zbioru danych
- **Wada**: jakość zależy od wyniku próbkowania
- **Modyfikacja CLARA:** Próbkowanie za pomocą R*-drzewa

Algorytm CLARANS (Randomized CLARA)

CLARANS (A Clustering Algorithm based on Randomized Search) (Ng and Han'94)

Interpretacja przestrzeni wyszukiwania:

- **Graf pełny $G_{n,k}$:**
  - wierzchołkami są zbiory *k* medoidów
  - Dwa wierzchołki są połączone, jeśli odpowiednie zbiory medoidów mają (*k*-1) wspólnych elementów
- Zmiana jednego medoidu odpowiada przejściu z jednego węzła do węzła sąsiedniego.

Algorytm CLARANS (Randomized CLARA) (c.d.)

- **Algorytm PAM**: przeszukiwanie całego grafu
- **Algorytm CLARANS**: ma dwa parametry *max_neighbor* i *num_local*
  - Startuje od dowolnego węzła
  - Dla bieżącego węzła *t*, szukaj lepszego węzła wśród (*max_neighbor*) sąsiadów *t* i przejdź do lepszego sąsiada
  - Powtórz proces wyszukiwania aż liczba cykli osiągnie *num_local*
  - Jeśli lokalne minimum jest osiągalne, to algorytm losuje dowolny nowy węzeł i szuka innego minimum lokalnego zaczynając od tego węzła.

Algorytm CLARANS

Wejście: *max_neighbor*, *num_local*, $G_{n,k}$

Wyjście: zbiór *k* medoidów

Krok 1. *current* = dowolny węzeł w grafie $G_{n,k}$;

j =1; *best_node* = *current*;

Krok 2. Wybierz losowego sąsiada *s* i oceń jakość *s* (za pomocą funkcję *TC*)

Krok 3. if (sąsiad *s* jest lepszy niż *current*) **then** *current* = *s*,

else *j* = *j*+1;

if (*j* < *max_neighbor*) **goto Krok 2**

else if (*current* jest lepszy niż *best_node*) **then**

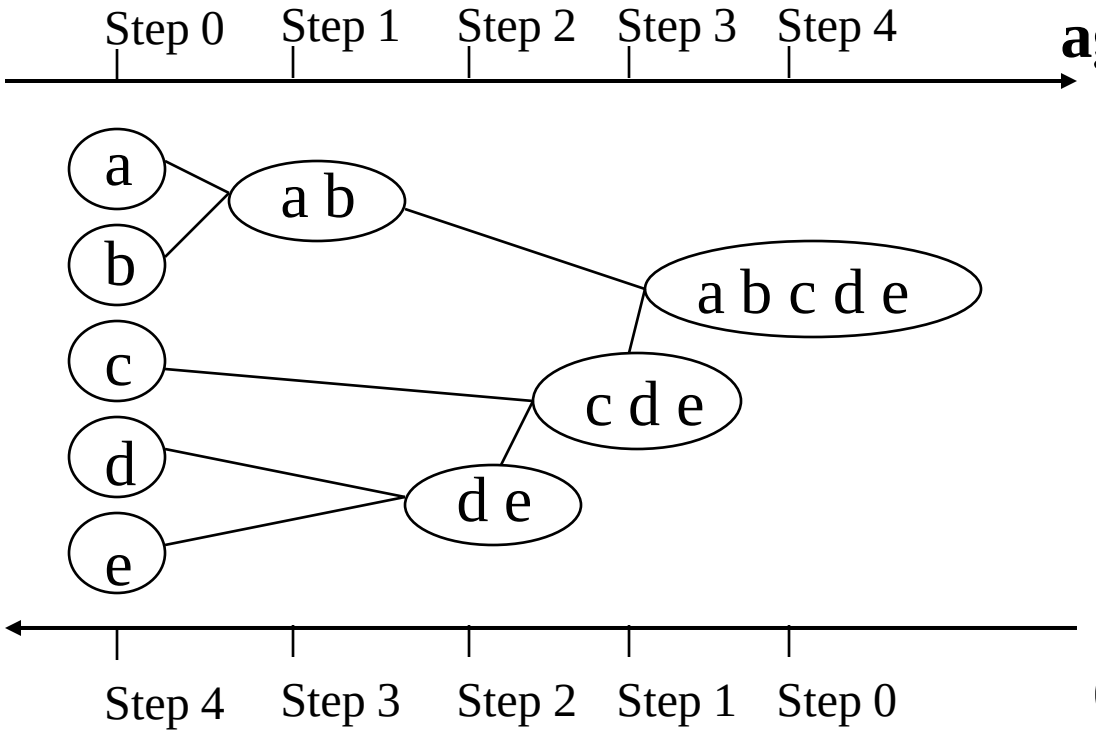
best_node = *current*;

Krok 4. *i* = *i*+1;

if (*i* > *num_local*) return *best_node*;

else goto Krok 1

Hierarchiczne grupowanie



agglomerative (AGNES)

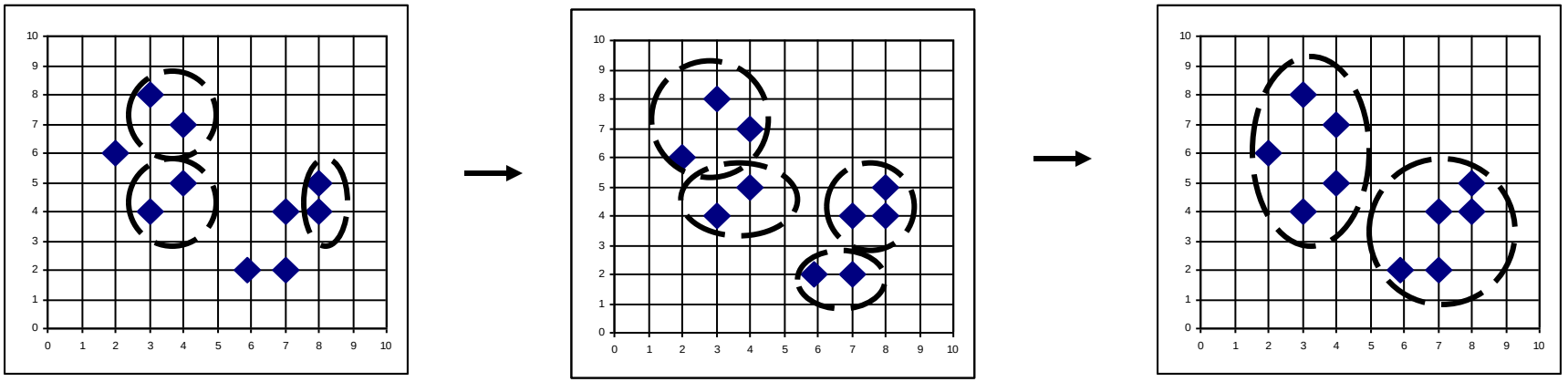
Stopniowe grupowanie

divisive (DIANA)

Stopniowe podzielenie

AGNES (Agglomerative Nesting)

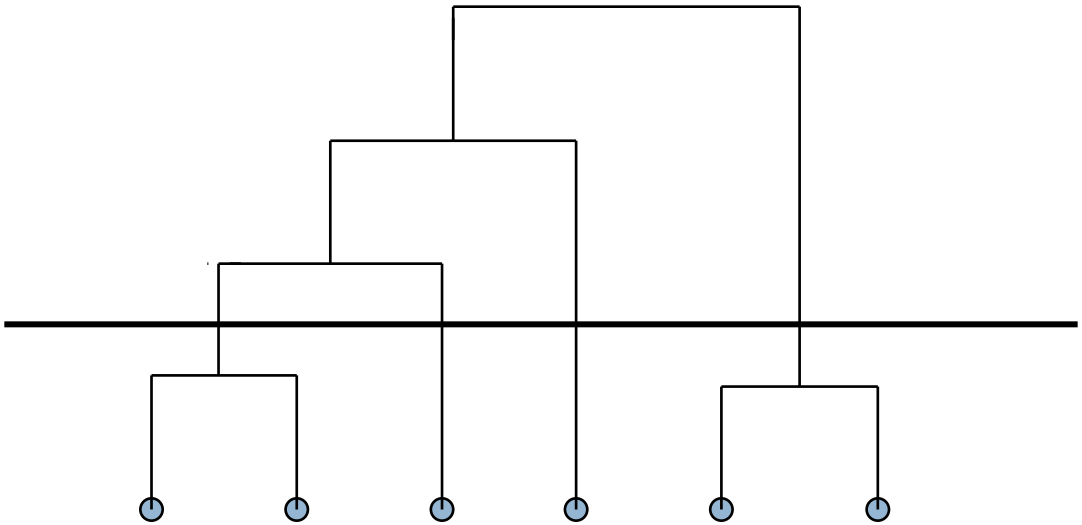
- Algorytm **bottom-up**
- Każdy obiekt należy do jednej grupy (do jednego liścia)
- Połącz węzły, które są bardziej podobne (odległość najmniejsza)
- Kontynuuj, aż wszystkie obiekty należą do jednej grupy (do korzenia)



Hierarchia grup - Dendrogram

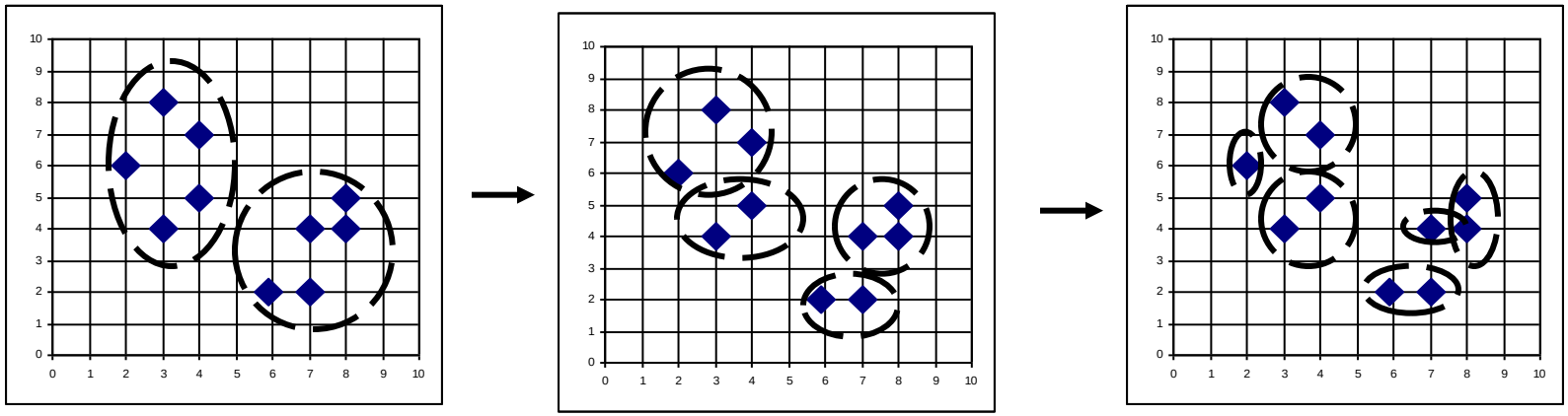
Dendogram: drzewo grup

Grupowania:
Grupy danych otrzymane przez obcięcie drzewa na dowolnym poziomie



DIANA (Divisive Analysis)

- Algorytm **top-down**
- Podziel węzeł na dwa węzły
- Kontynuuj, aż każdy obiekt znajduje się w jednym liściu



Hierarchiczne grupowanie- Obserwacja

Zaleta:

- Liczba grup *k* nie musi być znana
- Wielkość grupy można dobrać

Wada:

- Nie jest efektywne: $O(n^2)$, gdzie *n* jest liczbą obiektów
- Struktura jest statyczna

Ulepszony algorytm hierarchiczny- BIRCH

- **BIRCH** (**B**alanced **I**terative **R**educing and **C**lustering using **H**ierarchies):
  - Działa efektywnie: decyzja dla jednej grupy (dzielenie czy połączenie z inną grupą) nie wymaga przeglądania całego zbioru danych
  - I/O koszt jest liniowy względem rozmiaru danych: przeglądanie zbioru danych raz
  - Algorytm działa dla danych dynamicznie zmienionych
  - Wykrywa szumy w danych

BIRCH –Struktura CF drzewa

- CF (**C**lustering **F**eature) – drzewo:
  - Zrównoważone drzewo
  - Ma trzy parametry:
    - *B* – maksymalna liczba rozgałęzień,
    - *L* – maksymalna liczba obiektów w liściach
    - *T* – maksymalny promień (grup w liściach)
  - Węzeł wewnętrzny: $[CF_i, child_i]$ $i= 1,2,...,B$
  - Węzeł zewnętrzny (liść): $[CF_i]$ $i =1,2,...,L$

Opis grupy

- Niech grupa *G* zawiera *N* punktów $\vec{x}_i \in R^d$
- **Środek, promień** (*R*) i **średnica** (*D*) grupy są zdefiniowane:

$$\vec{x}_0 = \frac{\sum_{i=1}^{N} \vec{x}_i}{N}$$

$$R = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N} (\vec{x}_i - \vec{x}_0)^2}{N}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N} \vec{x}_i^2}{N} - \vec{x}_0^2}$$

$$D = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} (\vec{x}_i - \vec{x}_j)^2}{N(N-1)}} = \ldots$$

- Parametry $\vec{x}_0$, *R* i *D* opisują grupę obiektów *G*.

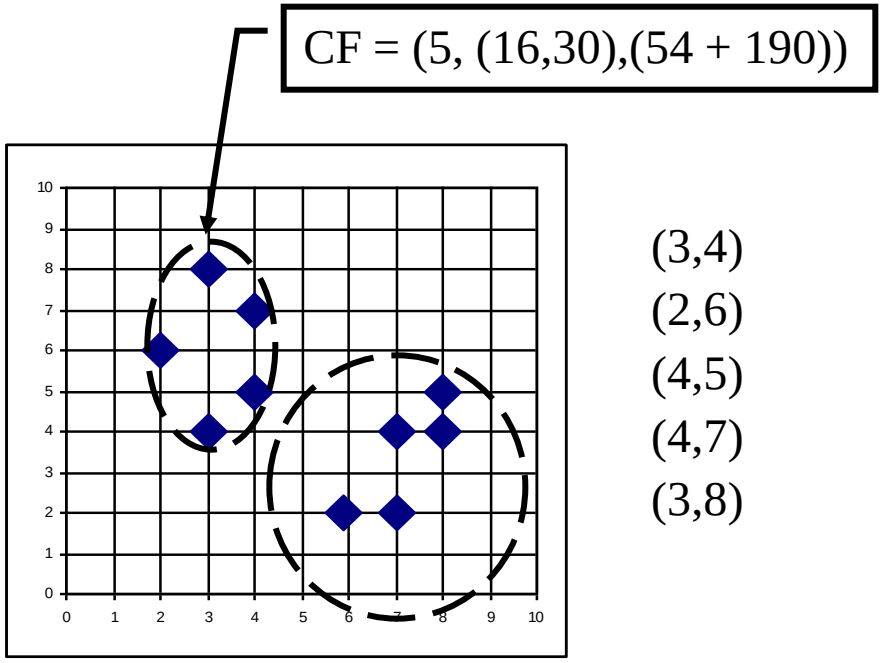
Opis grupy – wektor CF

Opis grupy : $CF = (N, \vec{LS}, SS)$

N: liczba punktów w grupie

$\vec{LS}$: $\sum_{i=1}^{N} = \vec{X_i}$

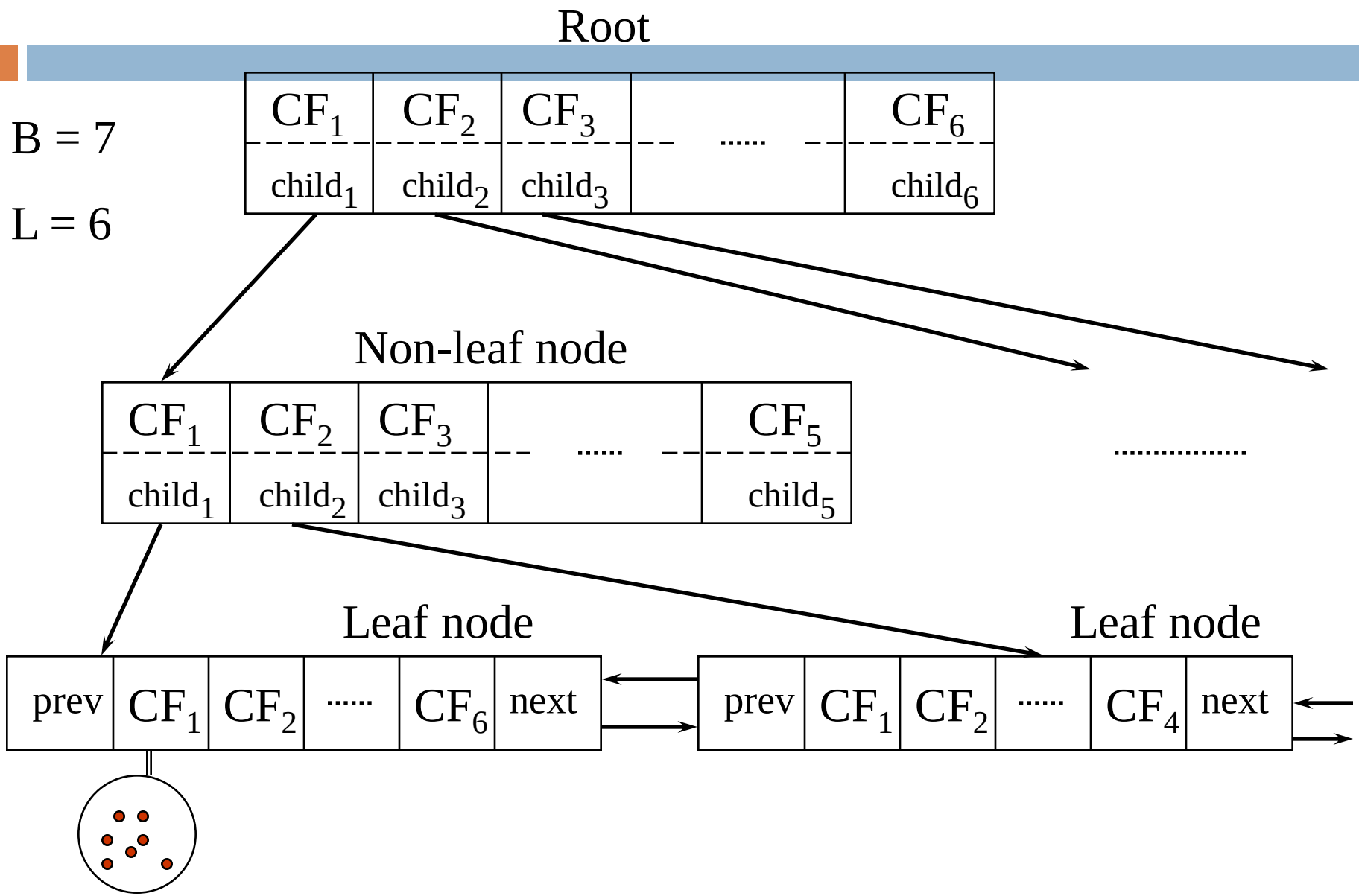
SS: $\sum_{i=1}^{N} = X_i^2$



Twierdzenie:

Niech $CF_1 = (N_1, \vec{LS_1}, SS_1)$ i $CF_2 = (N_2, \vec{LS_2}, SS_2)$ będą opisami dwóch grup G_1 i G_2, to $CF = (N_1+N_2, \vec{LS_1}+ \vec{LS_2}, SS_1+SS_2)$ będzie opisem grupy, która jest połączeniem G_1 i G_2

CF - drzewo


Root
B = 7
L = 6
CF1
CF2
CF3
.....
CF6
child1
child2
child3
child6
Non-leaf node
CF1
CF2
CF3
.....
CF5
child1
child2
child3
child5
.....
Leaf node
Leaf node
prev
CF1
CF2
.....
CF6
next
prev
CF1
CF2
.....
CF4
next

Wstawianie obiektu do drzewa

Krok 1. Wybierz najbliższy liść *l* do wstawiania.
Użyj jednej z funkcji odległości D do wyznaczenia najbliższej grupy do badanego punktu

Krok 2. **Jeśli** w *l* jest miejsce to wstaw *x* do *l*,

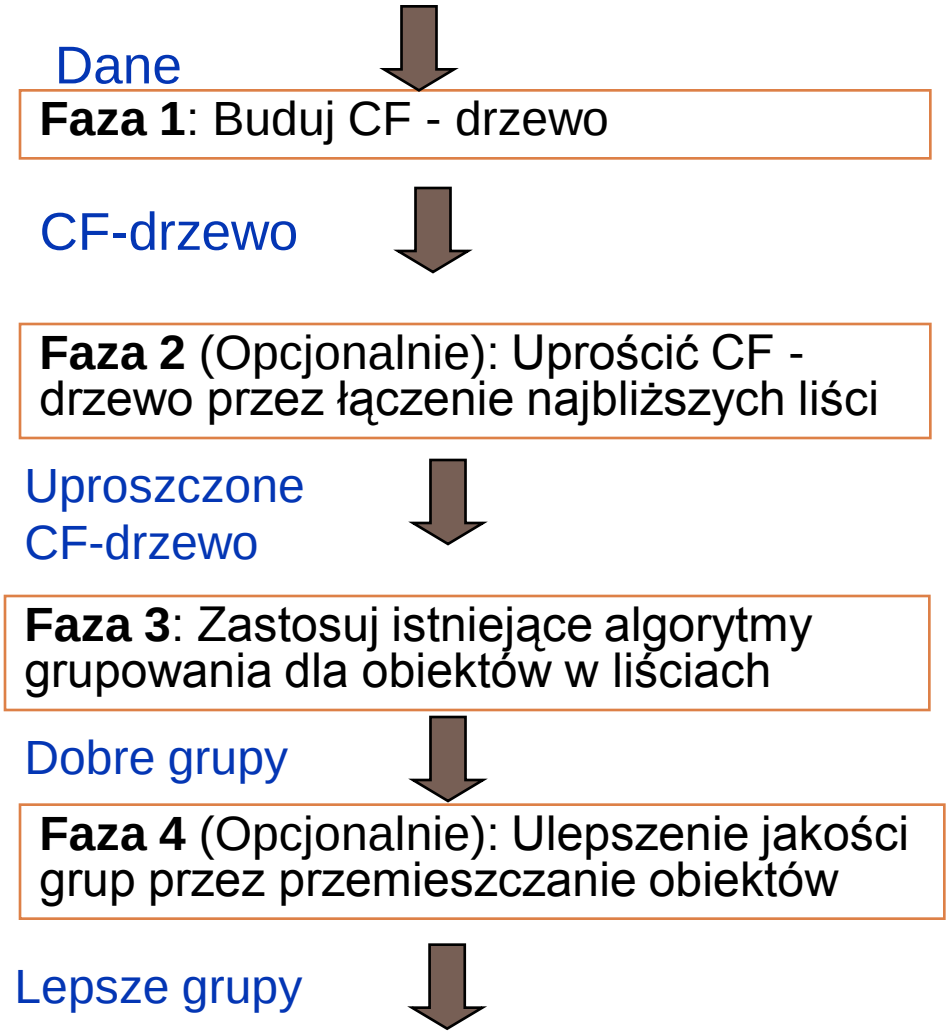
wpp. Podziel liść *l* na dwa liście

Krok 3. Popraw ścieżkę od *l* do korzenia.

Krok 4. Rekonstrukcja drzewo przez połączenie dwa najbliższe węzły i podzielić na dwa (w razie potrzeby): *merge i resplite*

Efekt *splite*, *merge* i *resplite*

Algorytm BIRCH – Schemat blokowy



Algorytm BIRCH –Faza 3,4

- **Faza 3**:
  - Każda grupa w liściu jest reprezentowana przez środek ciężkości. Zastosuj dowolny algorytm grupowania dla zbioru środków
  - Zastosuj dowolny algorytm grupowania bezpośrednio na obiektach w grupie.

- **Faza 4** (ulepszenie jakości grup):
  - Wyznaczaj środków grup generowanych przez fazę 3
  - Dla każdego obiektu o, przemieszczaj go do grupy, której środek jest najbliżej o.

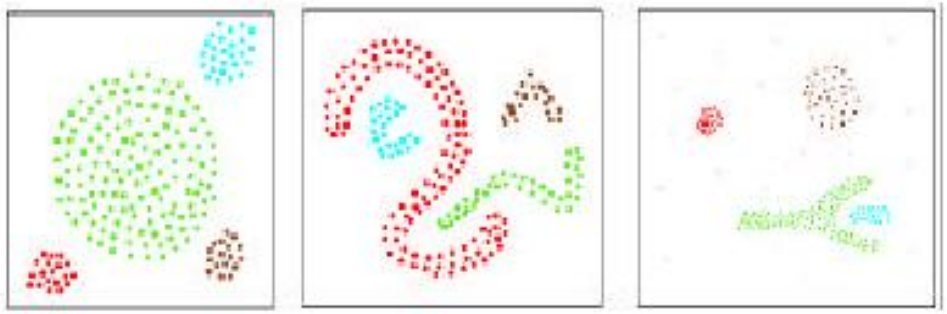
BIRCH - Ocena

- **Zaleta:**
  - Wyznacza grupy przez jedno przeglądanie zbiór danych.
  - Proces wstępny dla wielu algorytmów grupowania
- **Wada:**
  - Działa tylko dla danych numerycznych
  - Wrażliwy na kolejność obiektów

Ograniczenie algorytmu grupowania oparte na odległości

- Każda grupa jest reprezentowana przez jeden obiekt lub środek ciężkość
- Grupy są wypukłymi figurami.

Grupowanie oparte na gęstości



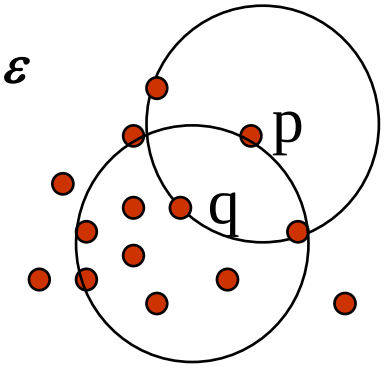
- Grupa składa się z punktów sąsiednich o wysokiej gęstości w otoczeniu
- Regiony pokrywające grupy mają wyższą gęstość niż regiony na zewnątrz

Grupowanie oparte na gęstości

- Główne zalety:
  - Odkrywa grupy o dowolnym kształcie
  - Odkrywa szumy (okłamywanie)
  - Jedno przeglądanie zbioru danych
- Interesujące algorytmy:
  - DBSCAN: Ester, et al. (KDD'96)
  - OPTICS: Ankerst, et al (SIGMOD'99).
  - DENCLUE: Hinneburg & D. Keim (KDD'98)
  - CLIQUE: Agrawal, et al. (SIGMOD'98)

Pojęcia podstawowe

- Dwa parametry:
  - ε : promień definiujący otoczenie obiektu
  - ***MinPts***: minimalna liczba punktów w ε -otoczeniu
- **Rdzeń**: obiekt, który ma co najmniej MinPts w ε - otoczeniu
- **Brzegowy obiekt**: obiekt posiadający , mniej niż *MinPts* obiektów w ε - otoczeniu.



$MinPts = 5$

$\varepsilon = 1$ cm

Pojęcia podstawowe (c.d.)

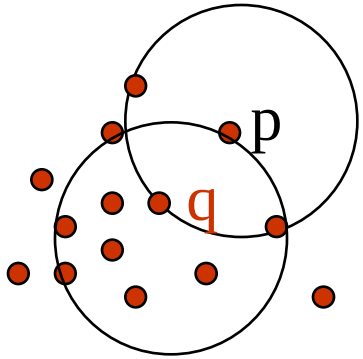
- ε -otoczenie:

$$N_{\varepsilon}(p): \{q \in D \mid dist(p,q) \leq \varepsilon\}$$

- Dane są parametry ε i *MinPts*. Punkt **p** jest bezpośrednio wyprowadzony z punktu **q** jeśli

  1) $\boldsymbol{p} \in N_{\varepsilon}(q)$

  2) $|N_{\varepsilon}(q)| \geq$ ***MinPts***

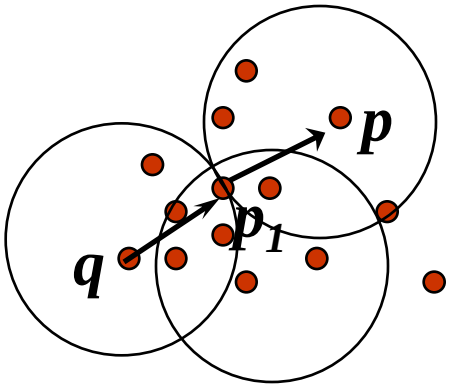


$MinPts = 5$

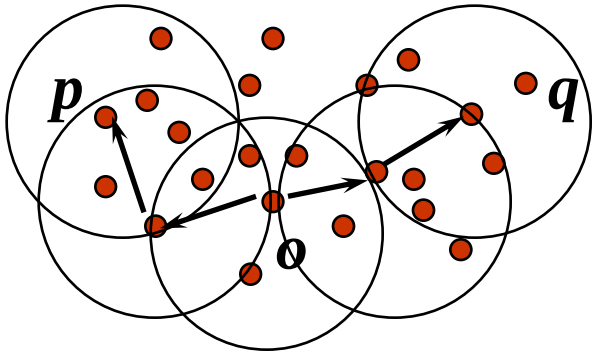
$\varepsilon = 1$ cm

Density-Based Clustering: Background (II)

- Punkt *p* jest wyprowadzony z punktu *q* jeśli istnieje ciąg punktów $p_1, \ldots, p_n$ *taki, że* $p_1 = q$, $p_n = p$ i p_{i+1} jest bezpośrednio osiągalny z p_i

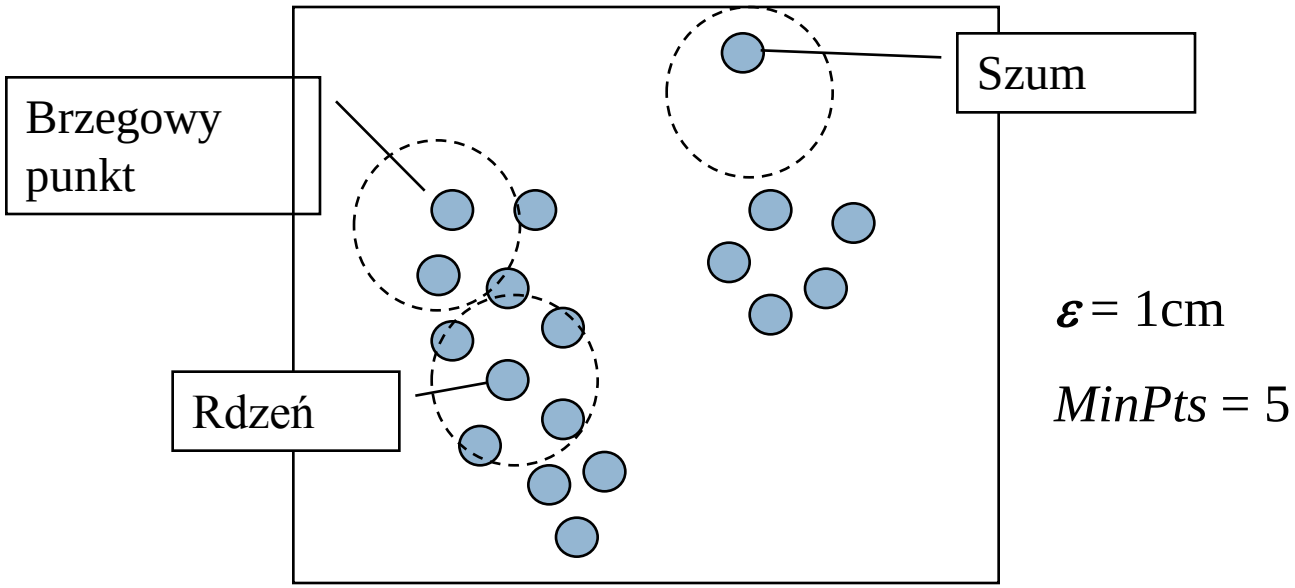


- Punkt *p* i *q* są połączone jeśli istnieje punkt o taki, że *p* i *q* są wyprowadzone z o



DBSCAN: Wykrywanie i usuwanie szumów

- Grupa: Maksymalny zbiór punktów połączonych



Algorytm DBSCAN

Krok 1. Wybierz dowolny punkt ***p***

Krok 2. Wyszukiwać zbiór *G* wszystkich punktów osiągalnych z punktu *p* w sensie ε i *MinPts*.

Krok 3. Jeśli ***p*** jest rdzeniem, **return** *G* (grupa była utworzona) .

Krok 4. jeśli ***p*** jest punktem brzegowym (żaden punkt nie jest osiągalny z *p*) to sprawdź następny nieodwiedzony punkt

Krok 5. Kontynuuj aż wszystkie punkty są odwiedzone

Ulepszanie

- Użycie *R**-drzewa do indeksowania zbioru danych
- Wyznaczanie sąsiadów w ε-otoczeniu danego punktu *p*:
  - Przeglądaj drzewo od korzenia do liścia
  - Dla węzła *t*, wybierz poddrzewo, którego prostokąt ma niepuste przecięcie z okręgiem o środku w *p* i promieniu ε.

Złożoność czasowa	Czas wyszukiwania sąsiadów	Złożoność DBSCAN
Bez indeksowania	$O(n)$	$O(n^2)$
R*-drzewo	$O(\log n)$	$O(n*\log n)$