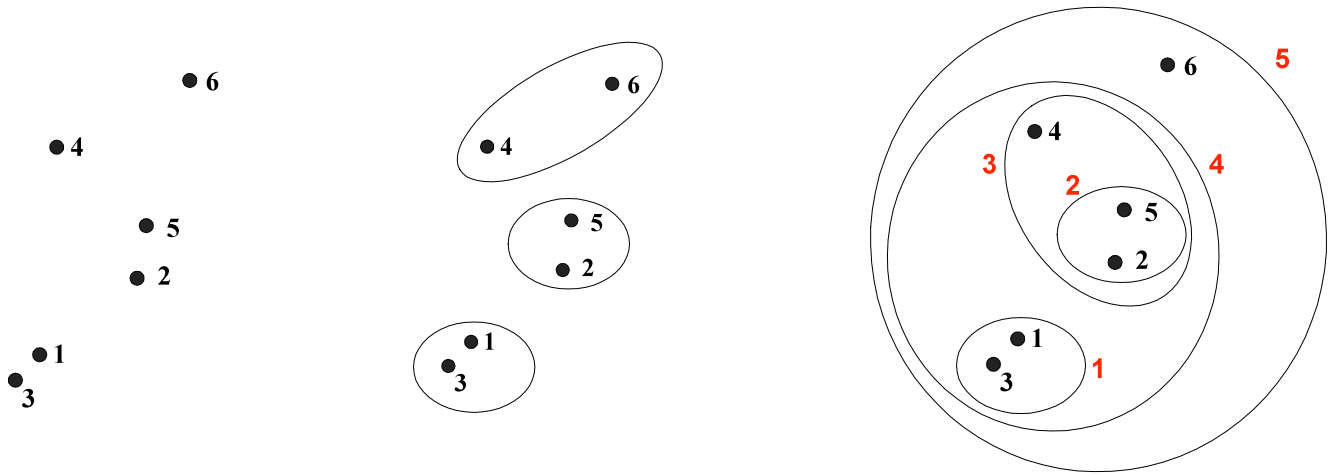
Cluster Analysis

Metodi di raggruppamento

R. Pappadà (rpappada@units.it)

28 aprile 2024

Introduzione



data | *raggruppamento non gerarchico* | *raggruppamento gerarchico*

Metodi non gerarchici Le tecniche di aggregazione non gerarchica sono finalizzate alla costruzione di una partizione dei dati in un numero di classi prefissato K.

Metodi gerarchici procedure sequenziali che restituiscono una partizione annidata di gruppi rappresentati da una struttura ad albero (dendrogramma)

Metodi non gerarchici: il metodo delle K medie

Date n unità su cui sono misurate p variabili e fissato un numero $K \geq 2$, l'obiettivo è trovare una partizione ottimale in K gruppi disgiunti $C_1, \ldots, C_K$, tali che

- $C_1 \cup C_2 \cdots \cup C_K$ comprenda tutte le unità di indici $\{1, \ldots, n\}$ (tutte le unità sono collocate in un gruppo)
- $C_j \cap C_{j'} = \emptyset$ for all $j \neq j'$ (ciascuna unità appartiene ad un solo gruppo)

Osservazione: una partizione *buona* è quella per cui la variabilità all'interno del cluster è più piccola possibile $\rightarrow$ si vuole minimizzare la distanza tra le osservazioni all'interno di ciascun cluster

Metodo K-means: formulazione del problema

Indichiamo con $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \ldots, x_{ip})$ l'i-ma unità. Fissato il numero di gruppi K, il problema è quello di trovare una partizione tale che sia minima la *variabilità interna ai gruppi*. La quantità da minimizzare è

$$\sum_{k=1}^{K} W(C_k)$$

dove occorre definire meglio come calcoliamo la quantità $W(C_k)$ (within-cluster variation) per ciascun cluster. Si ricorre alla *distanza euclidea al quadrato* e si definisce

$$W(C_k) = \frac{1}{|C_k|} \sum_{i,i' \in C_k} \sum_{j=1}^{p} (x_{ij} - x_{i'j})^2$$

dove $|C_k|$ è il numero di unità nel cluster k-esimo.

Metodo K-means: formulazione del problema (cont)

Il problema di ottimizzazione si può allora riscrivere come segue

$$\min_{C_1,\ldots,C_K} \sum_{k=1}^{K} W(C_k) = \min_{C_1,\ldots,C_K} \left\{ \sum_{k=1}^{K} \frac{1}{|C_k|} \sum_{i,i' \in C_k} \sum_{j=1}^{p} (x_{ij} - x_{i'j})^2 \right\} \quad (1)$$

- l'esplorazione di tutte le possibili partizioni per scegliere la migliore non è percorribile
- si può dimostrare che l'algoritmo utilizzato e introdotto da MacQueen (1967) fornisce un ottimo locale al problema delle K-medie

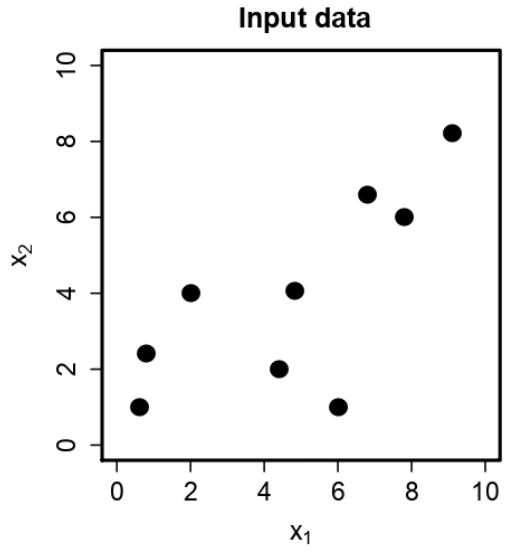
L'algoritmo K-means

Algoritmo

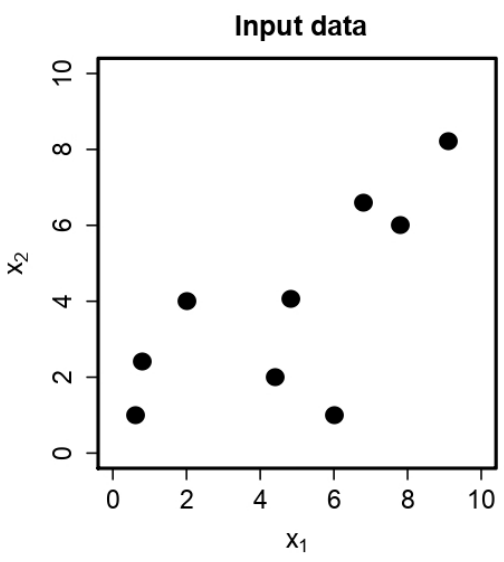
Fissato $K \geq 2$

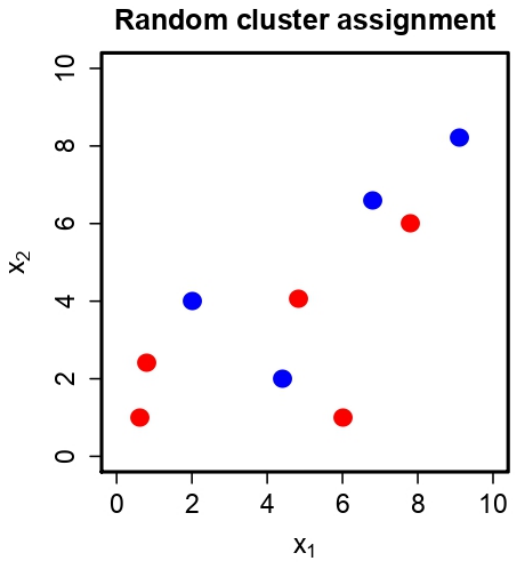
1. **Assegnazione iniziale:** assegnare casualmente ogni unità ad un cluster da 1 a K
2. **Riassegnazione:** Ripetere fino a quando la configurazione non si stabilizza:
   a. si calcola il *centroide* per ogni gruppo, cioè il vettore delle medie sulle p variabili con riferimento alle unità del gruppo
   b. si assegna ciascuna unità al cluster che è più vicino (distanza euclidea calcolata rispetto al centroide)

K-means: esempio

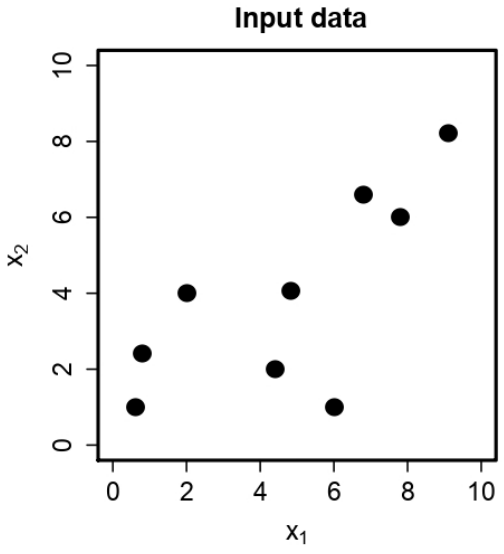


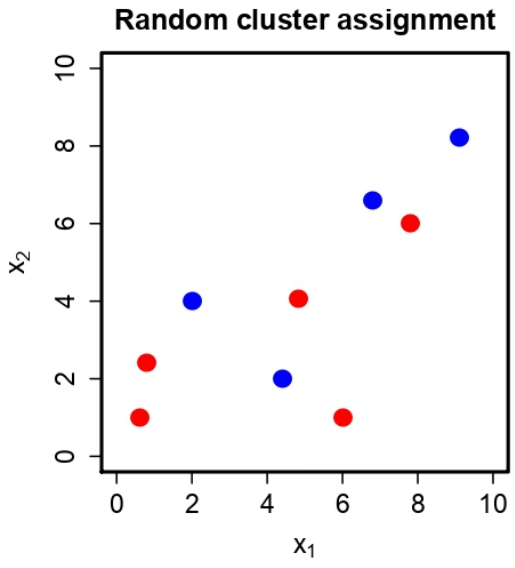
K-means: esempio

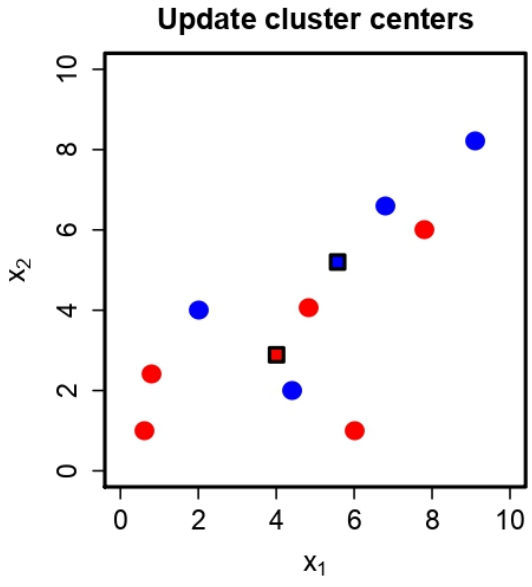




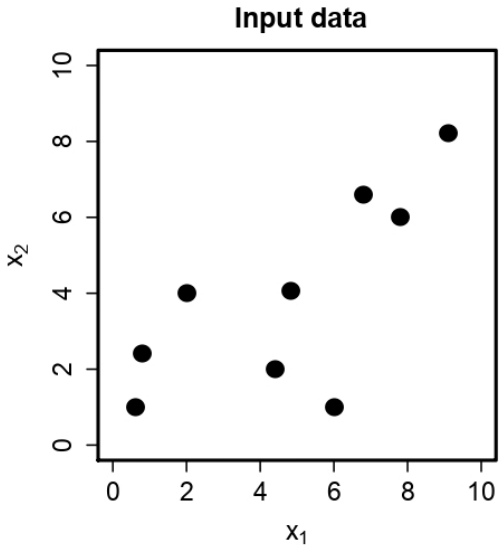
K-means: esempio

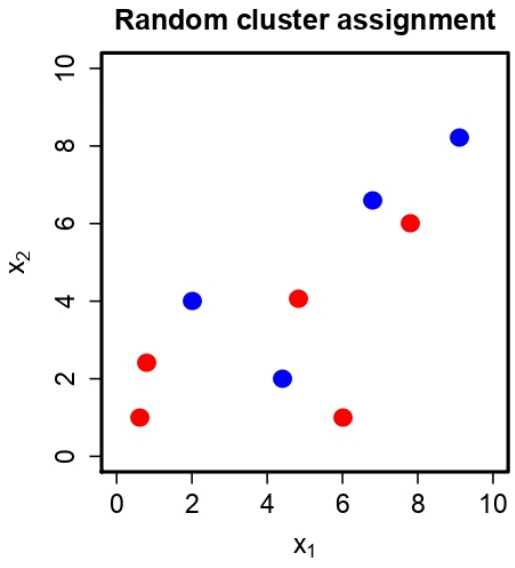


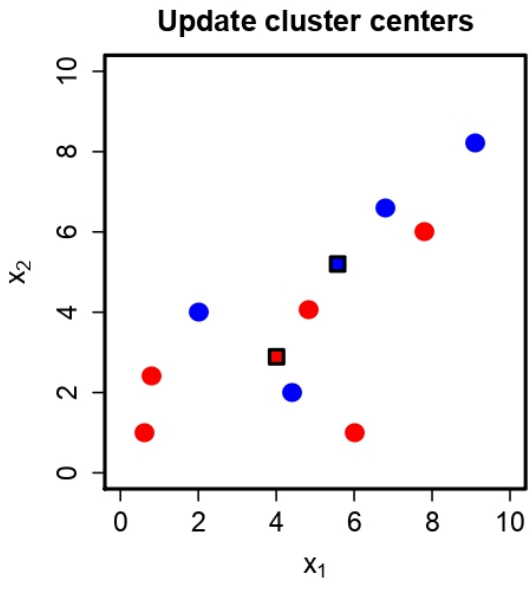


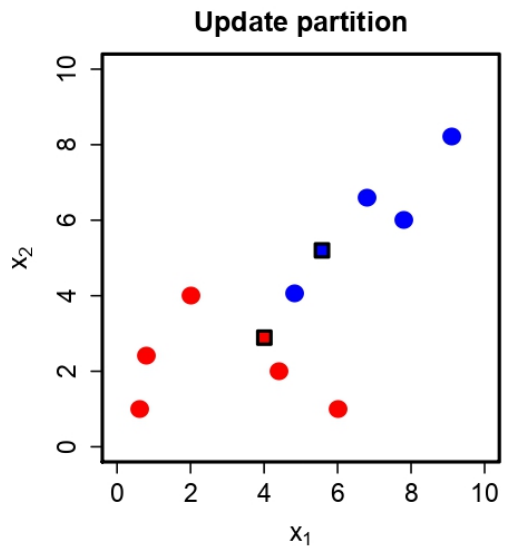


K-means: esempio

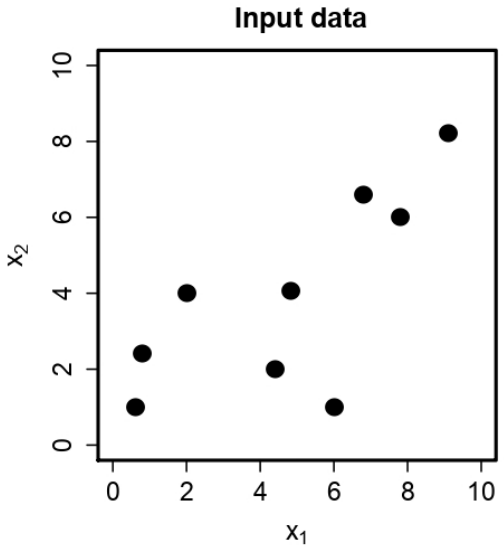


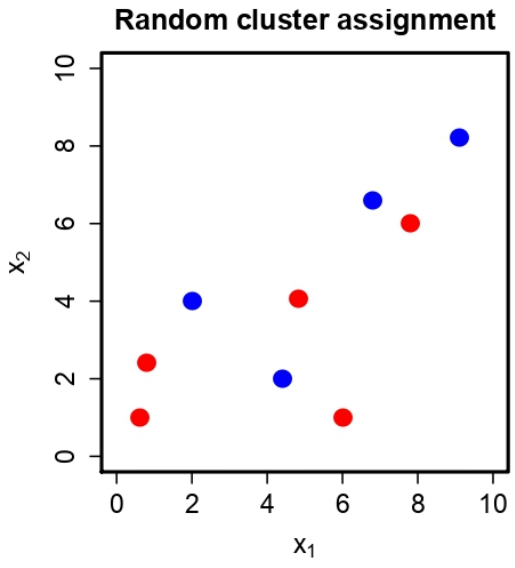


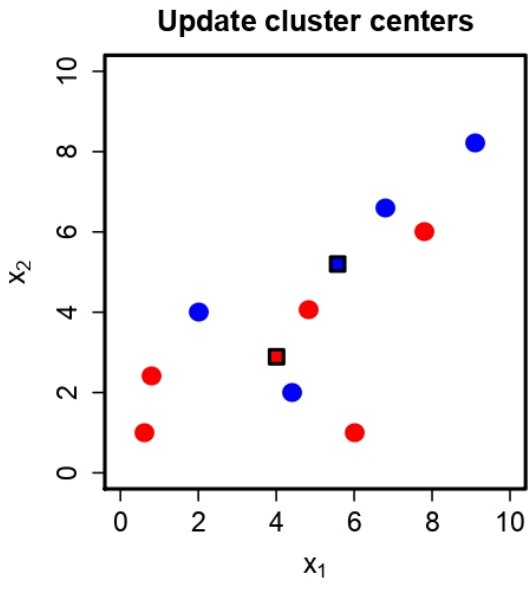


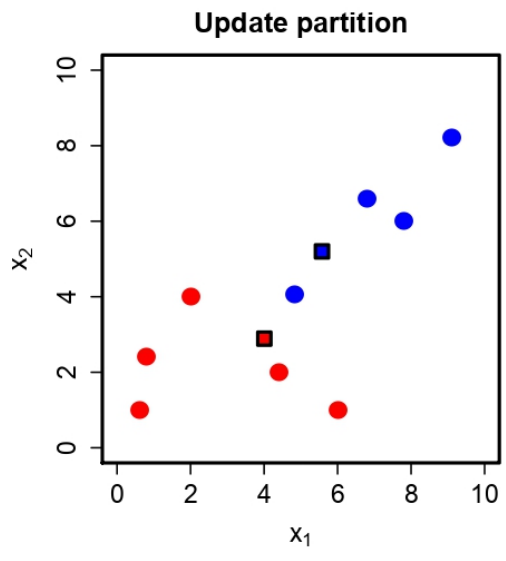


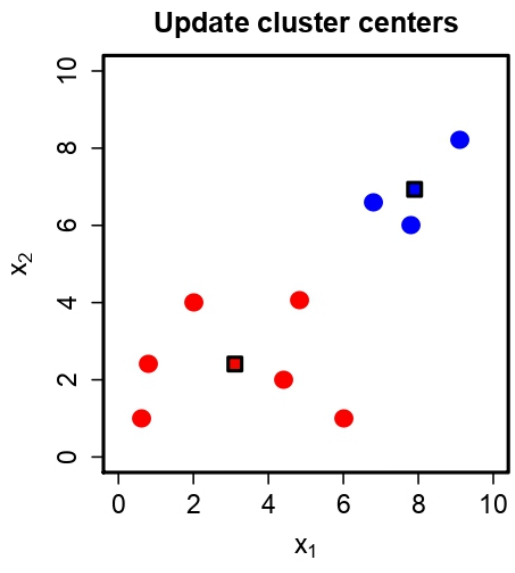
K-means: esempio



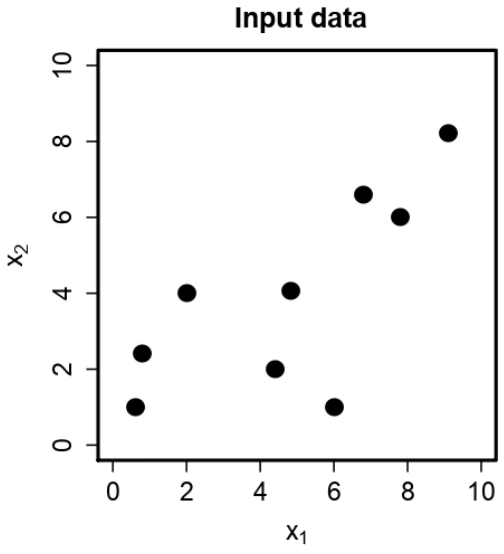


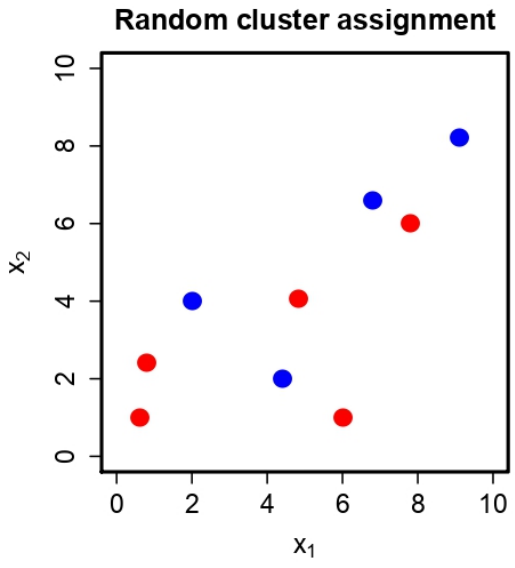


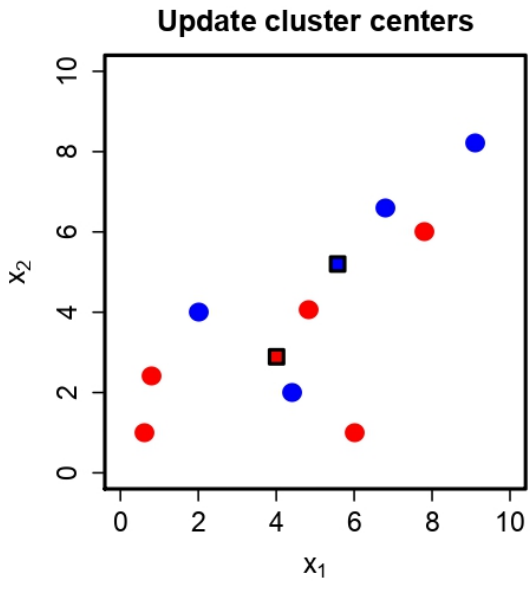


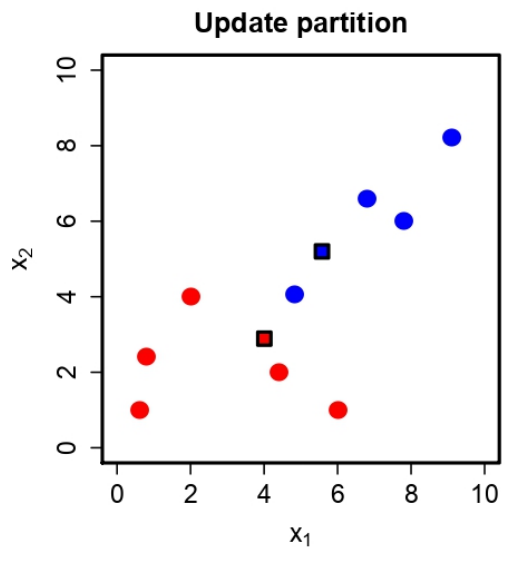


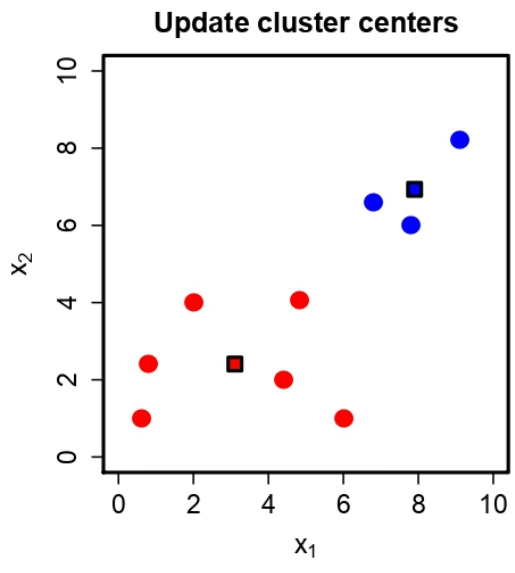
K-means: esempio

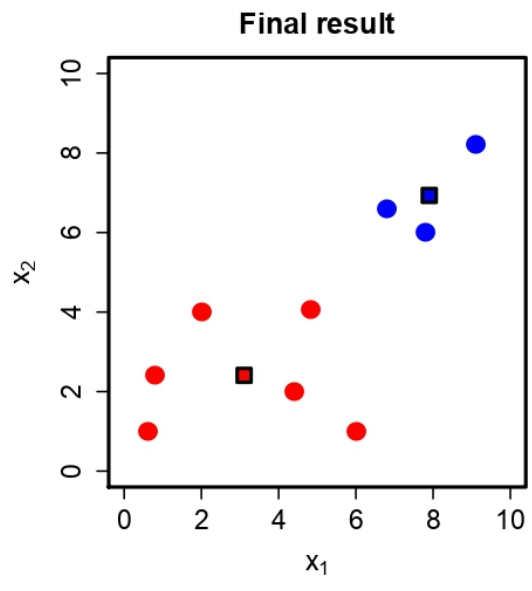












K-means: funzione obiettivo

L'algoritmo K-means garantisce che la funzione obiettivo nell'Eq.(1) diminuisca ad ogni step.
Infatti, si ha

$$\frac{1}{|C_k|}\sum_{i,i'\in C_k}\sum_{j=1}^{p}(x_{ij}-x_{i'j})^2 = 2\sum_{i\in C_k}\sum_{j=1}^{p}(x_{ij}-\bar{x}_{kj})^2,$$

dove $\bar{x}_{kj} = \frac{1}{|C_k|}\sum_{i\in C_k} x_{ij}$ è la media per la variabile j-esima nel cluster C_k.

- In 2(a) le medie di gruppo sono le costanti che minimizzano gli scostamenti al quadrato
- In 2(b) le unità vengono riassegnate per migliorare l'assegnazione finale
- quando la configurazione rimane invariata è stato raggiunto un ottimo locale.

K-means: funzione obiettivo (cont)

Poiché l'algoritmo K-means trova un *ottimo locale* e non globale, i risultati ottenuti dipenderanno dall'assegnazione iniziale (casuale) del cluster di ciascuna osservazione nello **Step 1** dell'algoritmo.

Per questa ragione, nella pratica si esegue l'algoritmo più volte con diverse assegnazioni iniziali e poi si seleziona la soluzione migliore, cioè quella per cui la quantità

$$\sum_{k=1}^{K} W(C_k)$$

è più piccola

K-means: pros/cons

Il metodo K-means è molto utilizzato in svariati campi grazie alla sua semplicità, velocità ed efficienza.

Le principali limitazioni dell'algoritmo K-means sono:

- la convergenza ad un minimo locale può produrre risultati indesiderati
- è sensibile alla diversa assegnazione iniziale e conseguente scelte dei baricentri
- l'algoritmo K-means funziona male nel caso di cluster di dimensioni non omogenee o forme non sferiche
- una scelta inappropriata di K potrebbe dare scarsi risultati

Algoritmo PAM - Partitioning Around Medoids

Analogamente al metodo K-means, PAM è una procedura iterativa che assegna ciascun punto dato a uno e un solo gruppo da 1 a K

A differenza dell'algoritmo K-means, PAM individua una unità rappresentativa per ciascun gruppo tra le unità del dataset

Tali unità, dette medoidi, vengono utilizzate per assegnare le altre unità ad un gruppo sulla base della più piccola dissimilarità tra le unità e i medoidi

Un vantaggio importante di PAM è che è più robusto rispetto alla presenza di osservazioni anomale rispetto all'algoritmo K-means

K-means VS PAM (Esempio per $K = 2$)

Consideriamo i dati rappresentati nelle figure (a) e (b): i gruppi sono ottenuti rispettivamente con i metodi K-means e PAM. Si noti come i due raggruppamenti siano molto simili.

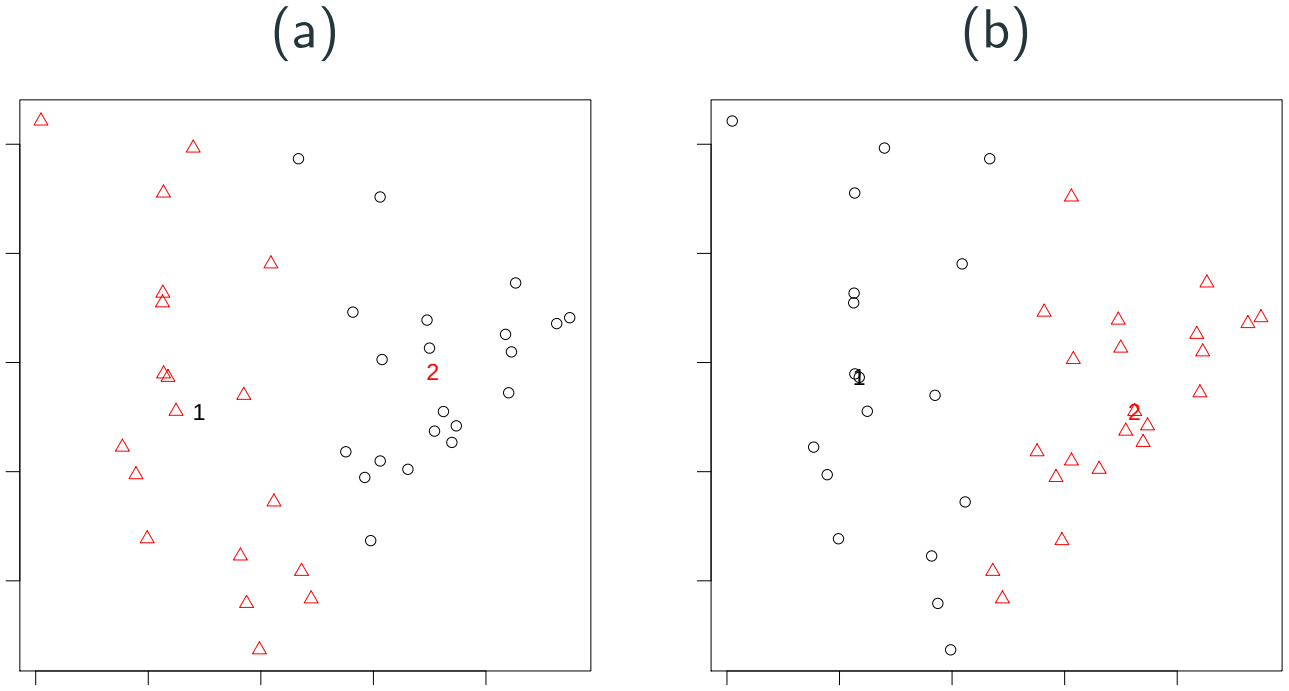


Figura 1: K-Means (a) e PAM (b): i centroidi e i medoidi in (a) e (b), rispettivamente, sono riportati con i numeri 1 e 2.

K-means VS PAM (Esempio per $K = 2$)

Il campione viene quindi contaminato e si può vedere che il raggruppamento ottenuto con K-means è cambiato sostanzialmente, non è così per il raggruppamento ottenuto con PAM.

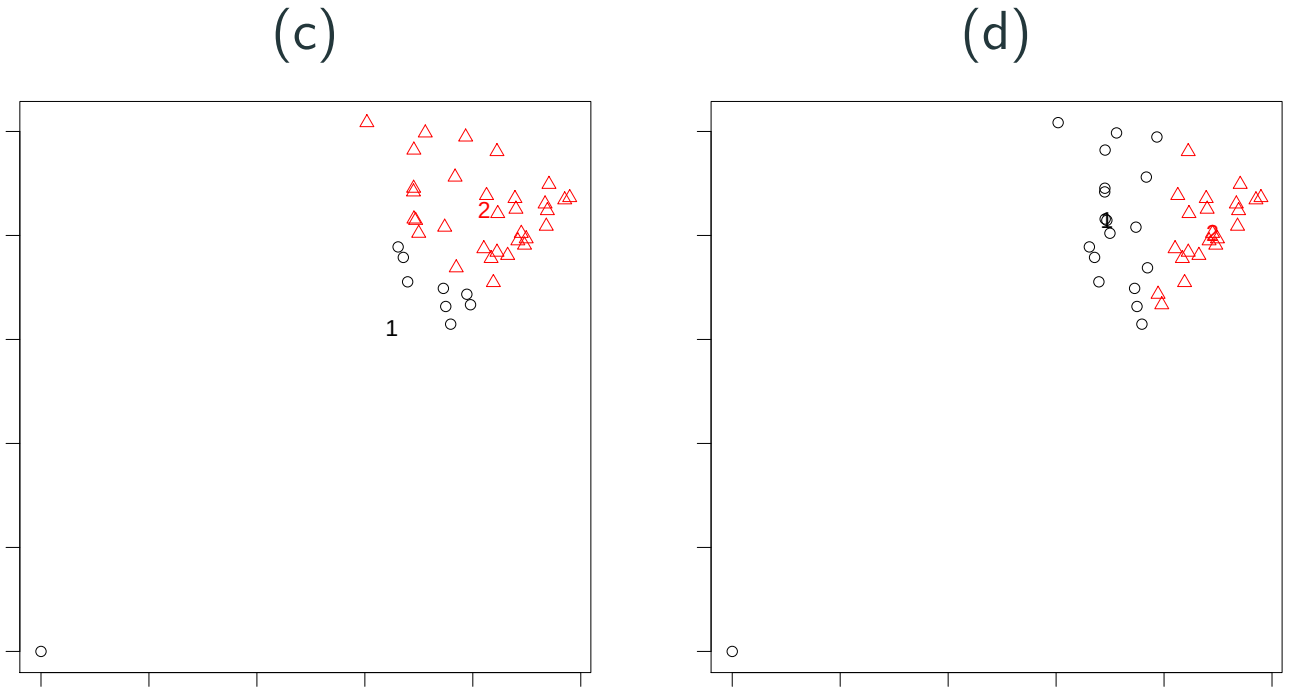


Figura 2: K-Means (c) e PAM (d) con dati contaminati

Valutazione di un raggruppamento

Vedremo nei laboratori che vi sono diversi indici che possono dare informazioni sulla *bontà* di una partizione, e quindi anche dare indicazioni sul K da scegliere.
In `R`, molti pacchetti contengono funzioni per gli indici più comuni in letteratura (si veda, ad esempio, il pacchetto `fpc`, `cluster`)

Esempio: la *Silhouette*: data una partizione in K gruppi di n unità basata sulla matrice di dissimilarità D, per l'i-ma unità nel cluster $C^{(i)}$ si calcola

$$s(i) = \frac{b(i) - a(i)}{\max\{a(i), b(i)\}}$$

$a(i)$ = dissimilarità media tra i e tutti gli altri punti nello stesso cluster;
$b(i) := \min_C d(i, C)$, dove $d(i, C)$ è la dissimilarità media tra i e tutti gli altri punti di C, cluster diverso da $C^{(i)}$

Se $s(i)$ è vicino a 1 l'unità è correttamente assegnata al cluster, un valore basso o negativo di $s(i)$ indica una criticità