Cluster Analysis

Metodi gerarchici

R. Pappadà (rpappada@units.it)

Analisi dei dati per l'impresa, a.a. 25-26

Algoritmi gerarchici

Metodi gerarchici

I metodi gerarchici rappresentano un approccio alternativo ai metodi come il K-means e non richiedono la specificazione del numero di cluster in input

I metodi gerarchici consentono di ottenere una partizione delle unità e inoltre forniscono informazioni sulla dissimilarità tra i cluster:

- piccoli gruppi sono annidati in grandi gruppi di oggetti, e questi cluster più grandi vengono via via aggregati formando gruppi sempre più numerosi
- una partizione in gruppi disgiunti viene ottenuta "tagliando" ad un certo *livello* di aggregazione

Metodi gerarchici agglomerativi e divisivi

Tra le procedure gerarchiche distinguiamo

- **metodi agglomerativi**, che procedono mediante una serie di fusioni successive delle unità n in gruppi
- **metodi divisivi**, che separano successivamente gli oggetti n in raggruppamenti più fini

Descriveremo innanzitutto il clustering *bottom-up* o agglomerativo (AHC), che è il metodo gerarchico più utilizzato.

AHC: Algoritmo

Data una matrice di distanza/dissimilarità $n \times n$, Δ,

(0) Si considerino i cluster $C_i = \{\mathbf{x}_i\}$ per $i \in \{1, \ldots, n\}$, formati da singole unità

(1) si identificano i cluster con il valore più piccolo in Δ; si uniscono per formare un nuovo cluster e si aggiorna la matrice di dissimilarità;

(2) Se il numero di gruppi dopo il passo (1) è uguale a 1 allora **stop**. Altrimenti si ripete (1).

Il dendrogramma

I metodi gerarchici producono una serie di partizioni annidate che sono rappresentate attraverso una struttura ad albero detta **dendrogramma**:

- è costruito partendo dalle foglie e unendo i gruppi fino al tronco
- partendo dal basso e procedendo verso l'alto, le foglie (unità) più simili vengono unite e formano i rami, gruppi di unità simili tra loro
- le unità che si fondono proprio alla base dell'albero sono molto simili tra loro, mentre le osservazioni che si fondono vicino alla cima dell'albero tenderanno ad essere abbastanza diverse

AHC: Esempio

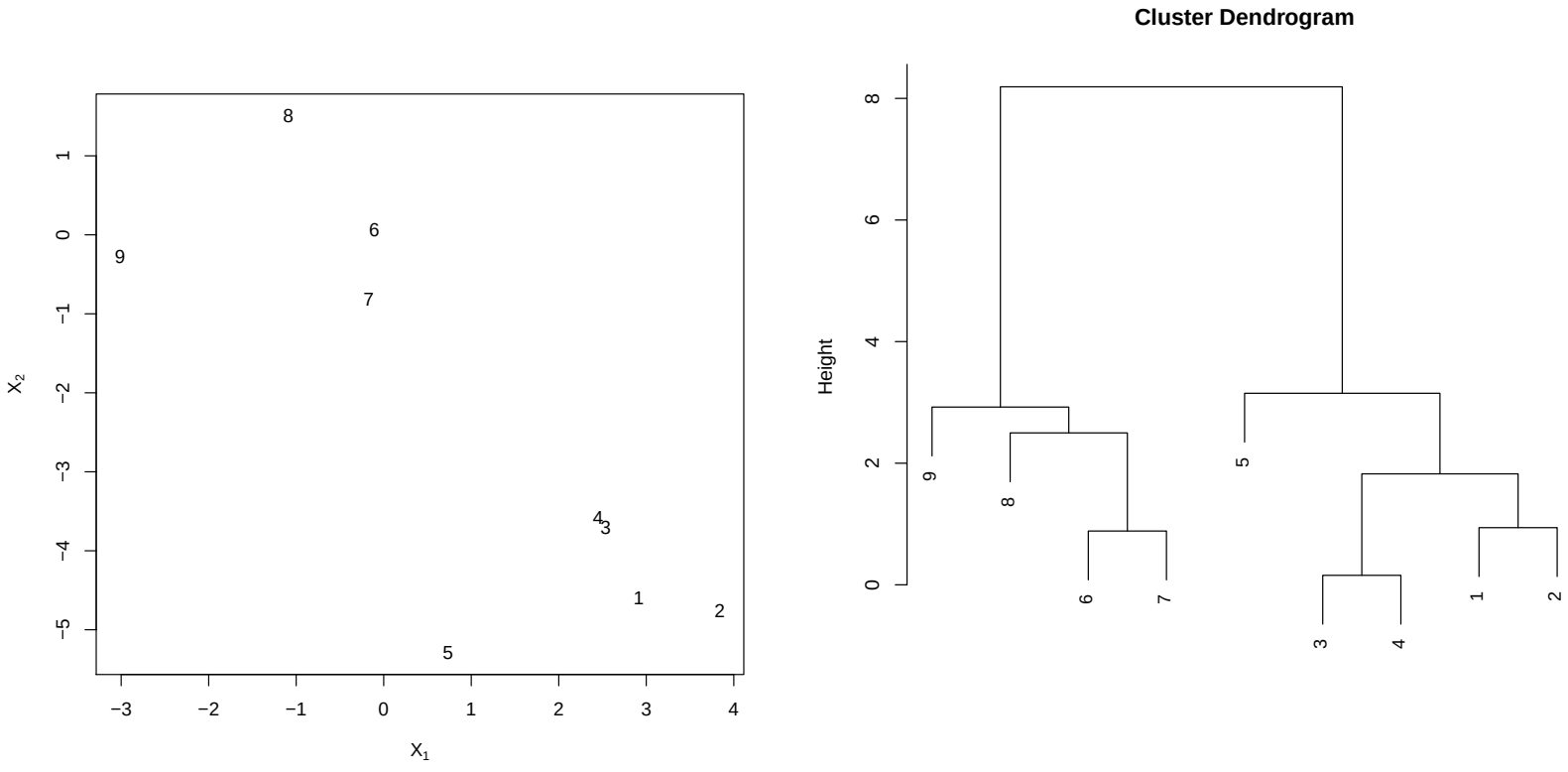


Figura 1: Dati (2-dim) e un possibile dendrogramma risultante da un metodo di AHC. Le unità 3 e 4 vengono raggruppate per prime, a seguire le coppie (1,2) e (6,7). L'asse y riporta l'altezza di aggregazione data dalla distanza tra i gruppi che si formano

AHC: Esempio

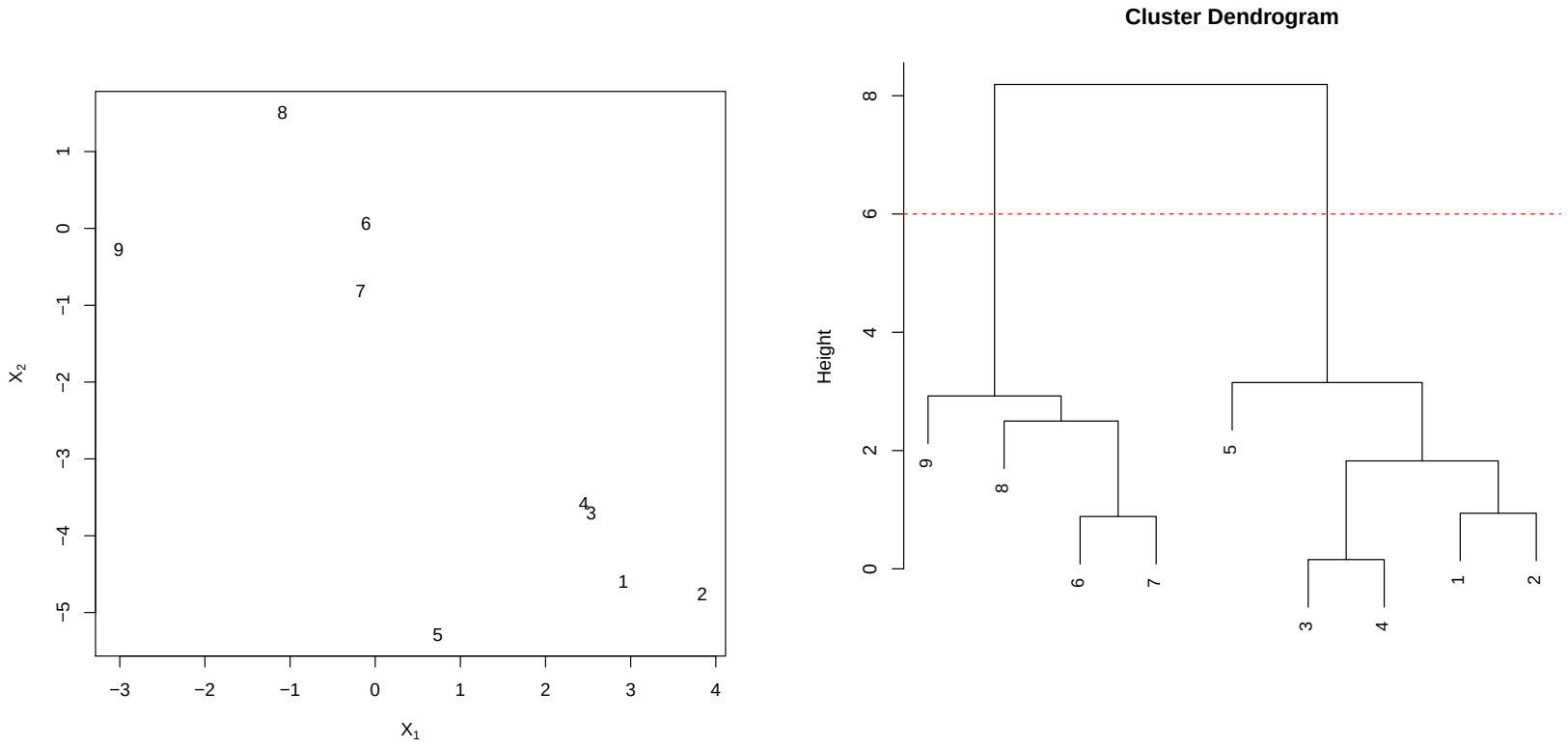
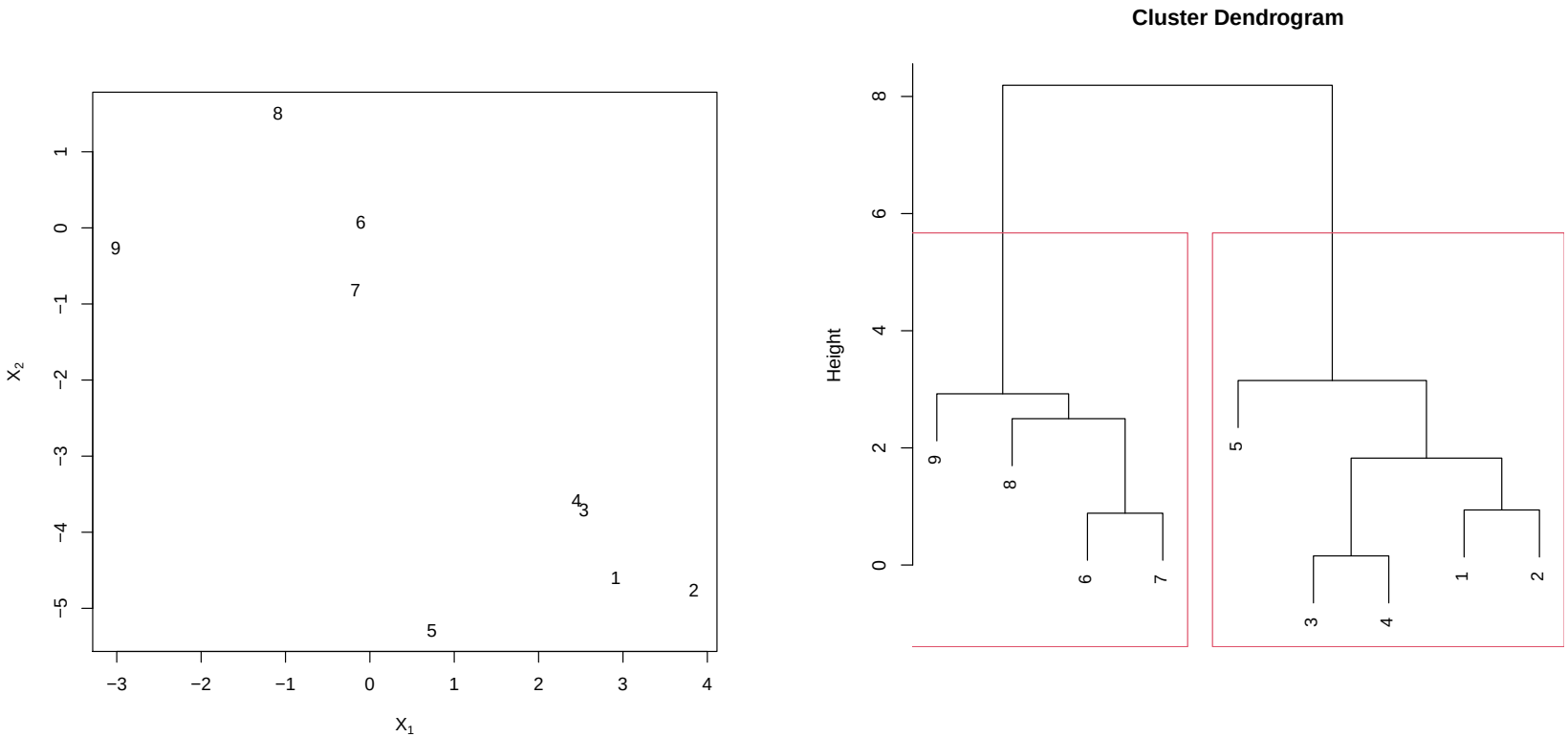


Figura 1: Dati (2-dim) e un possibile dendrogramma risultante da un metodo di AHC. Le unità 3 e 4 vengono raggruppate per prime, a seguire le coppie (1,2) e (6,7). L'asse *y* riporta l'altezza di aggregazione data dalla distanza tra i gruppi che si formano

AHC: Esempio

Taglio del dendrogramma per ottenere 2 gruppi



La determinazione dei gruppi finali richiede il taglio dell'albero in corrispondenza di un certo livello di altezza; talvolta, è agevole individuare un opportuno taglio attraverso una analisi visiva del *salto* più evidente nel dendrogramma

Distanza tra gruppi

Il passo (1) dell'algoritmo richiede di aggiornare la matrice di dissimilarità tenendo conto dei gruppi che si sono formati.

Occorre quindi definire una misura di dissimilarità tra C_l e C_m, per ogni $l \neq m$.

Esempio Si hanno $n = 5$ unità e $n(n-1)/2$ distanze a coppie:

	1	2	3	4	5
1	0				
2	9	0			
3	3	7	0		
4	6	5	9	0	
5	11	10	2	8	0

Distanza tra gruppi

Il passo (1) dell'algoritmo richiede di aggiornare la matrice di dissimilarità tenendo conto dei gruppi che si sono formati.

Occorre quindi definire una misura di dissimilarità tra C_l e C_m, per ogni $l \neq m$.

Esempio Si hanno $n = 5$ unità e $n(n-1)/2$ distanze a coppie:

	1	2	3	4	5
1	0				
2	9	0			
3	3	7	0		
4	6	5	9	0	
5	11	10	2	8	0

{5} e {3} presentano la distanza più piccola $\rightarrow$ {3,5}.

Distanza tra gruppi

Il passo (1) dell'algoritmo richiede di aggiornare la matrice di dissimilarità tenendo conto dei gruppi che si sono formati.

Occorre quindi definire una misura di dissimilarità tra C_l e C_m, per ogni $l \neq m$.

Esempio Si hanno $n = 5$ unità e $n(n-1)/2$ distanze a coppie:

	1	2	3	4	5
1	0				
2	9	0			
3	3	7	0		
4	6	5	9	0	
5	11	10	2	8	0

$d_{(3,5),1} = ?$ $d_{(3,5),2} = ?$ $d_{(3,5),4} = ?$

Come si misura la distanza tra i gruppi?

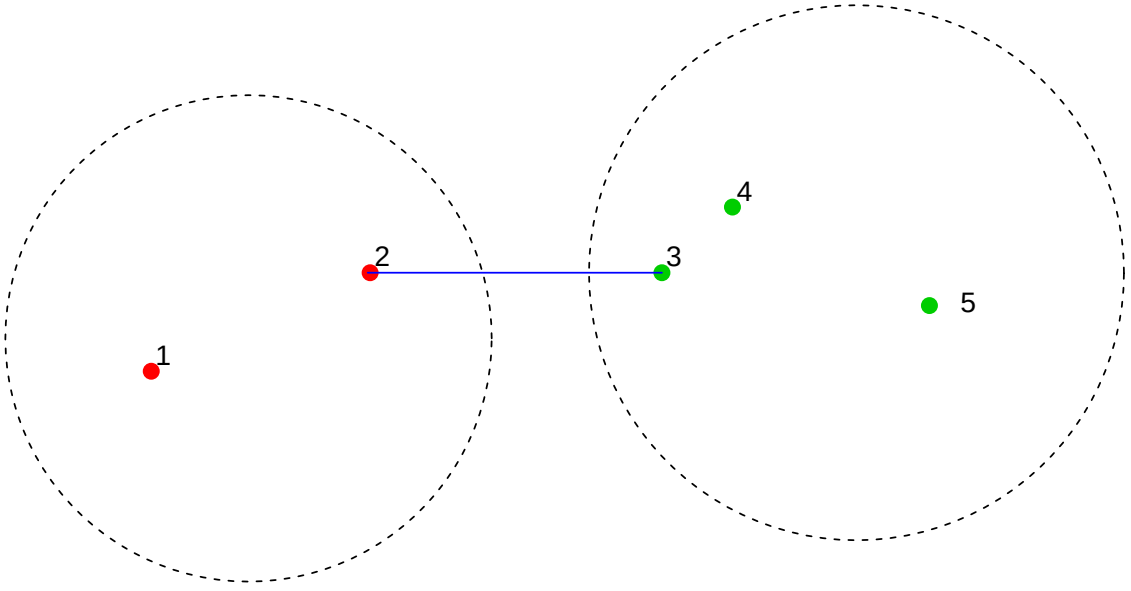
Nell'esempio precedente le unità 3 e 5 vengono unite al primo passo. Come misuriamo la distanza tra questo nuovo cluster $\{3, 5\}$ e tutte le altre unità?

Esistono diversi modi per definire la distanza tra una singola unità e un gruppo contenente più unità, o tra due gruppi di unità. In particolare, gli algoritmi di AHC utilizzano diversi legami o *linkages*, tra cui

- legame singolo o *single linkage*
- legame completo *complete linkage*
- legame medio *average linkage*

Tipi di legami: Legame singolo

Single linkage

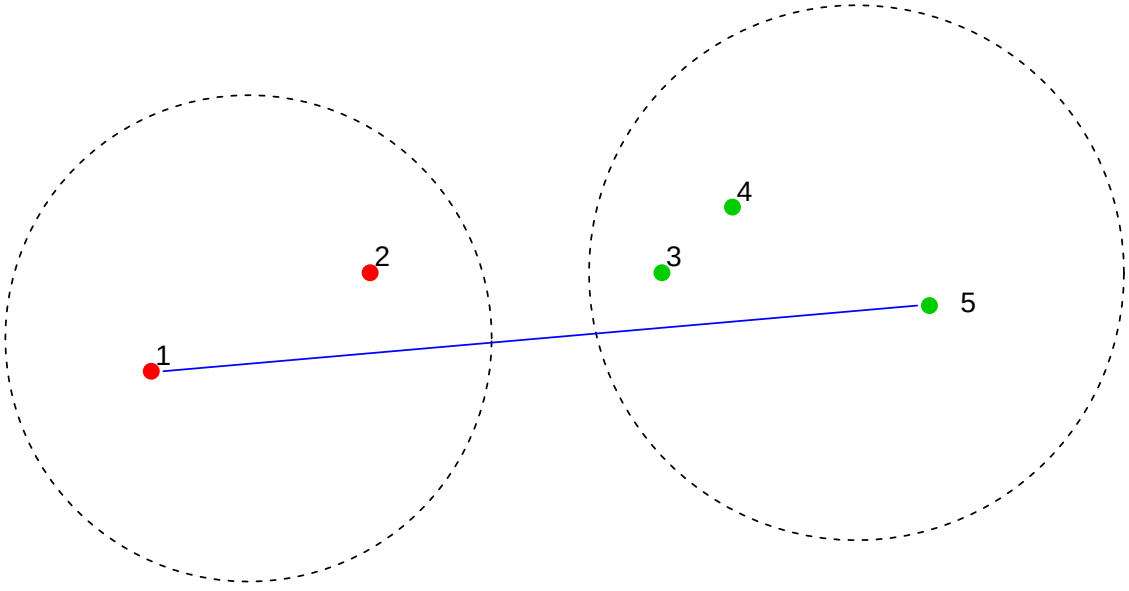


$$\text{dissimilarità tra i gruppi} = \delta(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) := \delta_{2,3}$$

Metodo del vicino più vicino: la distanza tra i gruppi corrisponde alla distanza più piccola tra tutte quelle delle coppie appartenenti ai due cluster

Tipi di legami: Legame completo

Complete linkage

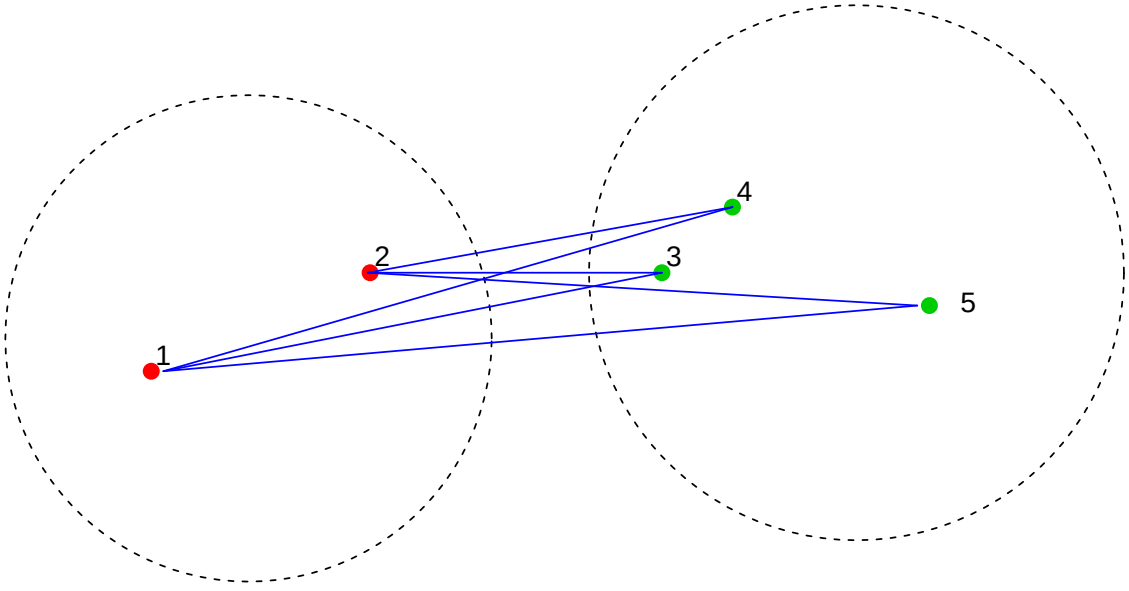


$$\text{dissimilarità tra i gruppi} = \delta(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_5) := \delta_{1,5}$$

Metodo del vicino più lontano: la distanza tra i gruppi corrisponde alla distanza più grande tra tutte quelle delle coppie appartenenti ai due cluster

Tipi di legami: Legame medio

Average linkage



$$\text{dissimilarità tra i gruppi} = \frac{\delta_{1,3} + \delta_{1,4} + \delta_{1,5} + \delta_{2,3} + \delta_{2,4} + \delta_{2,5}}{6}$$

Metodo della media: la distanza tra i gruppi corrisponde alla media aritmetica di tutte le distanze tra le coppie di unità appartenenti ai due cluster

Tipi di legame nei metodi AHC: Esempio

La scelta del tipo di legame può avere un forte impatto sui risultati ottenuti.

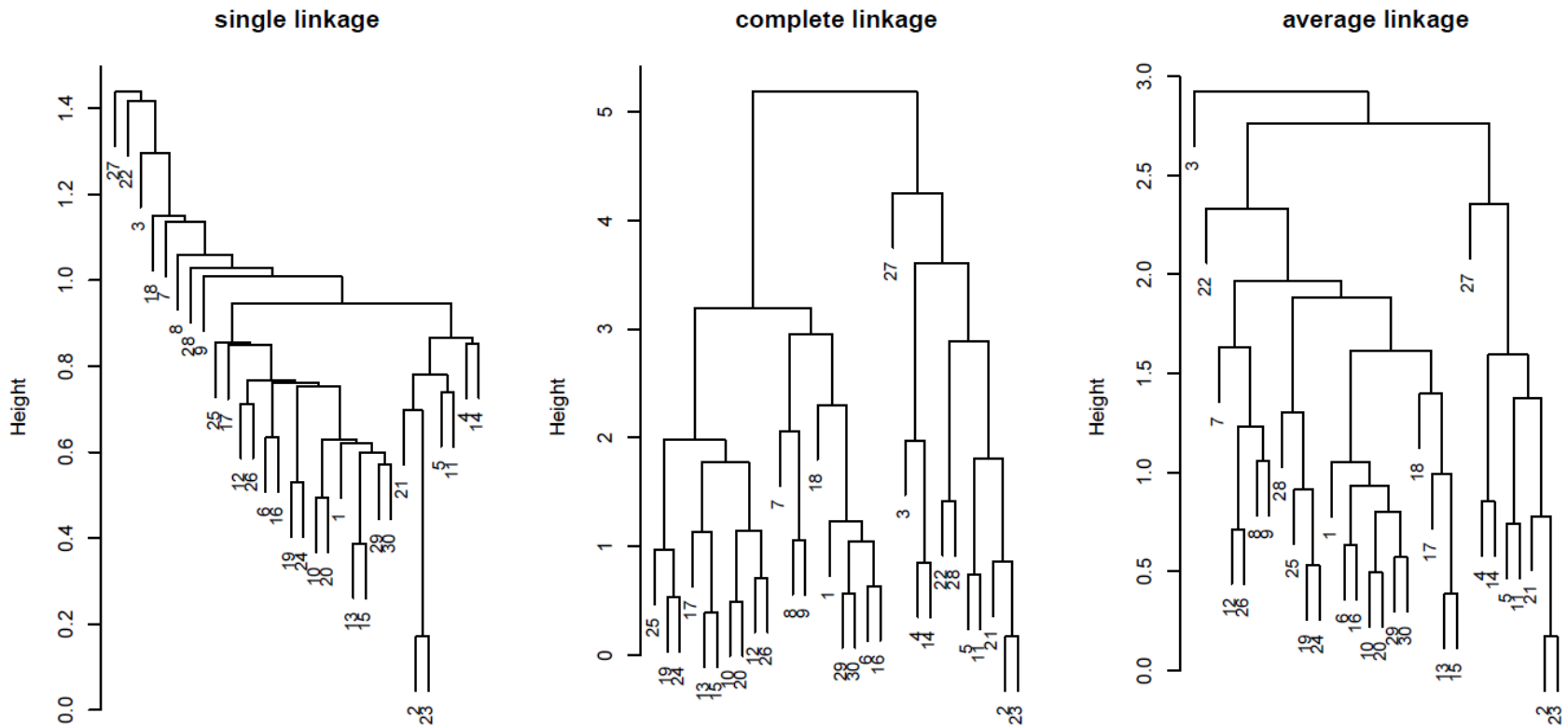


Figura 1: Dendrogrammi ottenuti con i diversi linkage. Average e complete linkage producono generalmente cluster più equilibrati, il single linkage determina un effetto a cascata

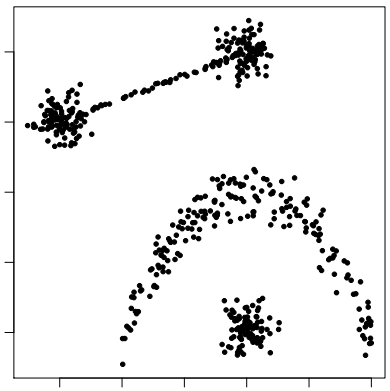
Alcune considerazioni finali

- Il **legame singolo** enfatizza la separazione dei cluster, vengono riconosciute le nuvole di punti allungate, ma può risultare in cluster estesi e finali in cui le singole osservazioni vengono fuse una alla volta, un problema noto come *effetto cascata*
- Il **legame completo** tende a favorire la formazione di nuovi cluster di dimensioni simili, portando a dendrogrammi di forma equilibrata anche se la struttura dei dati non lo supporta
- Il metodo del **legame medio** è intermedio tra la strategia di collegamento singolo e quella completa, tentando quindi di compensare gli svantaggi di una strategia con i vantaggi dell'altra.

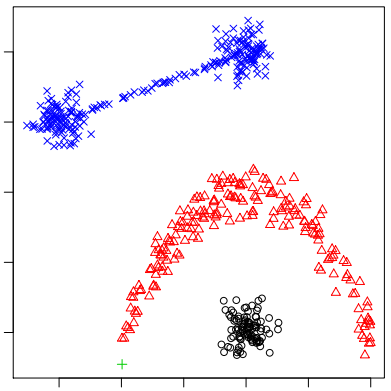
Alcune considerazioni finali

Esempio con dati simulati

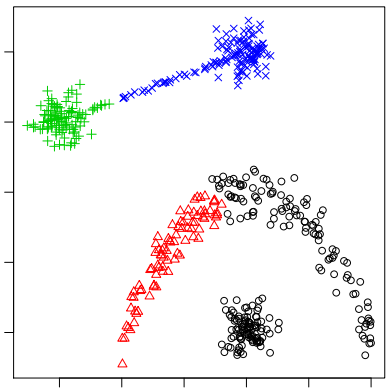
dati



singolo



completo



Metodo di Ward

Ward (1963) ha introdotto un terzo tipo di metodo, in cui l'obiettivo in ogni fase dell'algoritmo è quello di *minimizzare* una funzione obiettivo. Tale funzione è la somma delle devianze interne ai cluster

$$ESS_{tot,K} = ESS_1 + ESS_2 + \cdots + ESS_K$$

con $K \in \{1, \ldots, n\}$ numero di cluster e

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

dove $\bar{x}_{kj}$ è la media del k-esimo cluster per la j-esima variabile

Metodo di Ward

La tecnica di Ward si propone quindi di minimizzare la varianza delle variabili entro ciascun gruppo

- Ogni fusione genera un incremento di $ESS_{tot,K}$, la procedura si ferma quando tutti i gruppi sono stati fusi
- Il metodo di Ward si basa sulla distanza euclidea, funziona bene con gruppi di forma tendenzialmente sferica ed è sensibile ai valori anomali

Nota: Non esiste un metodo che risulti superiore agli altri in tutte le condizioni, molte scelte vengono fatte in base alle caratteristiche dei dati oggetto di studio

Cenno sui metodi divisivi

I metodi gerarchici se possono anche essere divisivi quando procedono per successive scissioni di gruppi

Algoritmo

(0) Si individua una coppia di punti nodali (punti che presentano dissimilarità massima);

(1) Si attribuiscono le unità rimanenti ai due gruppi corrispondenti ai punti nodali, in base alla distanza minima da questi;

(2) Si iterano i passi precedenti sino ad arrivare alla partizione in n gruppi (ciascuno composto da una unità).

I metodi divisivi

- sono più costosi in termini di tempi computazionali
- meno impiegati nelle applicazioni
- trovano applicazione soprattutto in ambito biologico