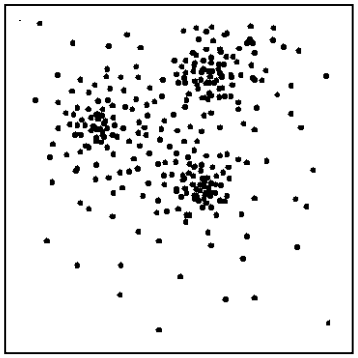
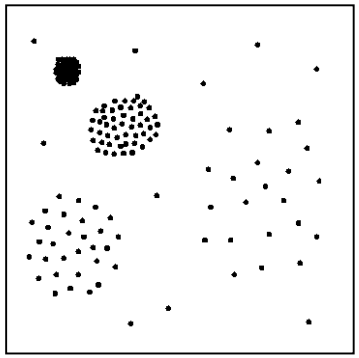
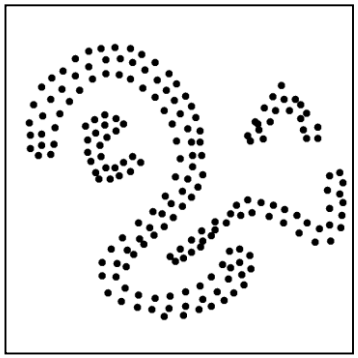
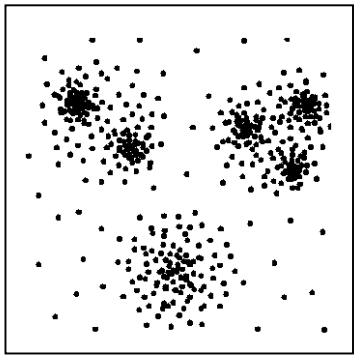
Überblick

Ziel des Clustering

Ziel: Identifikation einer endlichen Menge von Kategorien, Klassen oder Gruppen (*Cluster*) in den Daten

- Objekte im *gleichen* Cluster sollen möglichst ähnlich sein
- Objekte aus *verschiedenen* Clustern sollen möglichst unähnlich zueinander sein

Herausforderungen:

- Cluster unterschiedlicher Größe, Form und Dichte
- hierarchische Cluster
- Rauschen (Noise)

=> unterschiedliche Clustering-Algorithmen

Typen von Clustering-Verfahren

- Partitionierende Verfahren
  - Parameter: Anzahl *k* der Cluster, Distanzfunktion
  - sucht ein „flaches“ Clustering in *k* Cluster mit minimalen Kosten
- Dichtebasierte Verfahren
  - Parameter: minimale Dichte in einem Cluster, Distanzfunktion
  - erweitert Punkte um ihre Nachbarn solange Dichte groß genug

Partitionierende Verfahren

Grundlagen

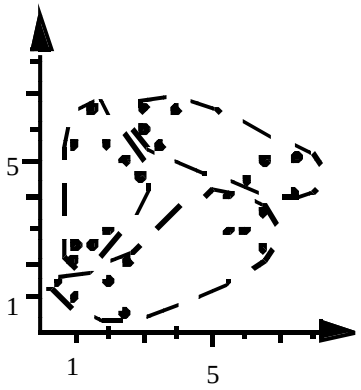
- Ziel
  - Partitionierung in *k* Cluster so dass eine Kostenfunktion minimiert wird (Gütekriterium)
- Lokal optimierendes Verfahren
  - wähle *k* initiale Cluster-Repräsentanten
  - optimiere diese Repräsentanten iterativ
  - ordne jedes Objekt seinem ähnlichsten Repräsentanten zu
- Typen von Cluster-Repräsentanten
  - Mittelwert des Clusters (*Centroid*)
  - Element des Clusters (*Medoid*)
  - Wahrscheinlichkeitsverteilung des Clusters (*Erwartungsmaximierung*)

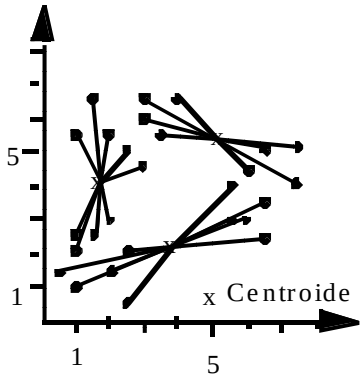
Partitionierende Verfahren

Beispiel

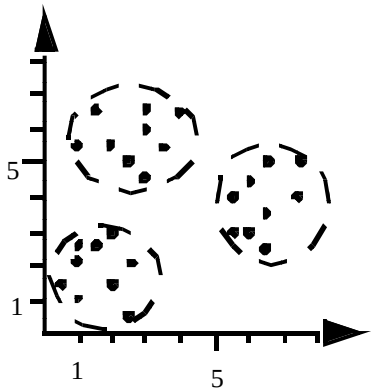
Cluster | Cluster-Repräsentanten

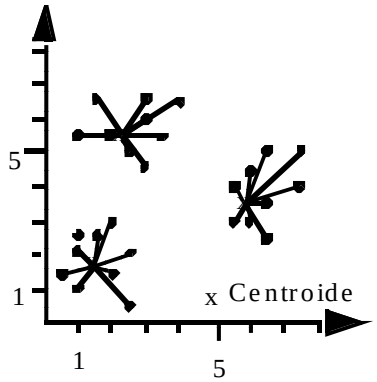
schlechtes Clustering





optimales Clustering





Partitionierende Verfahren: k-means

Grundbegriffe

- Objekte sind Punkte $p=(p_1, ..., p_d)$ in einem euklidischen Vektorraum
- euklidische Distanz
- *Centroid* μ_C: Mittelwert aller Punkte im Cluster *C*
- *Maß für die Kosten* (Kompaktheit) *eines Clusters C*

$$TD^2(C) = \sum_{p \in C} dist(p, \mu_C)^2$$

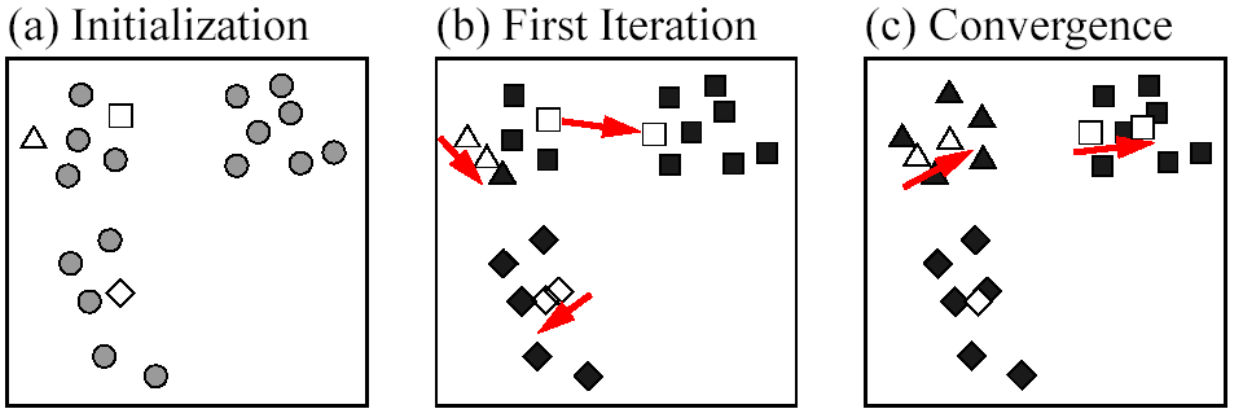
- *Maß für die Kosten* (Kompaktheit) *eines Clustering*

$$TD^2 = \sum_{i=1}^{k} TD^2(C_i)$$

Partitionierende Verfahren: k-means

Idee des Algorithmus

- Algorithmus startet z.B. mit zufällig gewählten Punkten als Cluster-Repräsentanten
- Der Algorithmus besteht aus zwei alternierenden Schritten:
  - Zuordnung jedes Datenpunktes zum räumlich nächsten Repräsentanten
  - Neuberechnung der Repräsentanten (Centroid der zugeordneten Punkte)
- Diese Schritte werden so lange wiederholt, bis sich keine Änderung mehr ergibt



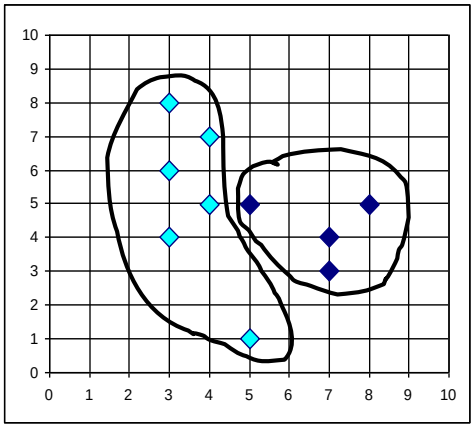
Partitionierende Verfahren: k-means

Algorithmus

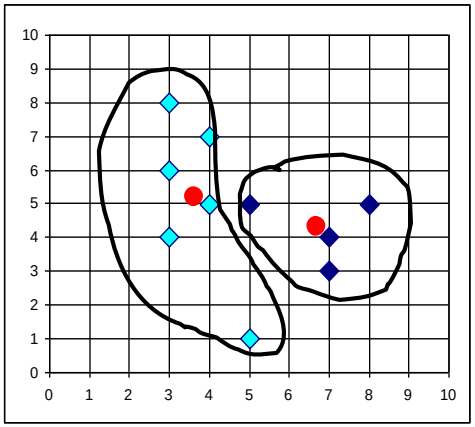
```
ClusteringDurchVarianzMinimierung(Punktmenge D, Integer k)
   Erzeuge eine „initiale“ Zerlegung der Punktmenge D in k Klassen;
   Berechne die Menge C'={C_1, ..., C_k} der Zentroide für die k Klassen;
   C = {};
   repeat
      C = C';
      Bilde k Klassen durch Zuordnung jedes Punktes zum
        nächstliegenden Zentroid aus C;
      Berechne die Menge C'={C'_1, ..., C'_k} der Zentroide für die neu
        bestimmten Klassen;
   until C = C';
   return C;
```

Partitionierende Verfahren: k-means

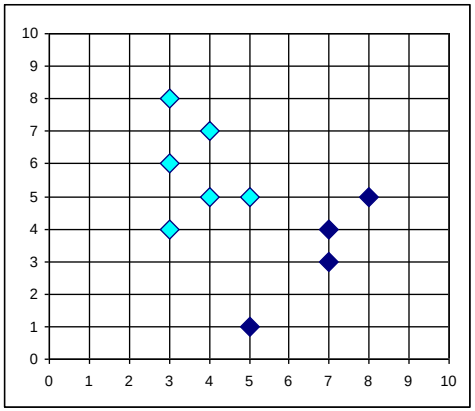
Beispiel



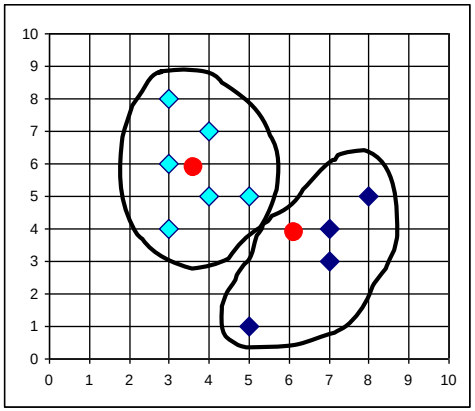
Berechnung der neuen Zentroide



Zuordnung zum nächsten Zentroid



Berechnung der neuen Zentroide



Partitionierende Verfahren: k-means

Diskussion

+ Effizienz:
  - Anzahl der Iterationen ist im allgemeinen klein (~ 5 - 10).
+ einfache Implementierung:
  - *k*-means ist das populärste partitionierende Clustering-Verfahren

– Anfälligkeit gegenüber Rauschen und Ausreißern
(alle Objekte gehen ein in die Berechnung des Zentroids)
– Cluster müssen konvexe Form haben
– die Anzahl *k* der Cluster muss bekannt sein
– starke Abhängigkeit von der initialen Zerlegung
(sowohl Ergebnis als auch Laufzeit)

Dichtebasiertes Clustering

LMU

Grundlagen

- Idee
  - Cluster als Gebiete im *d*-dimensionalen Raum, in denen die Objekte dicht beieinander liegen
  - getrennt durch Gebiete, in denen die Objekte weniger dicht liegen
- Anforderungen an dichtebasierte Cluster
  - für jedes Objekt eines Clusters überschreitet die lokale Punktdichte einen gegebenen Grenzwert
  - die Menge von Objekten, die den Cluster ausmacht, ist räumlich zusammenhängend

Dichtebasiertes Clustering

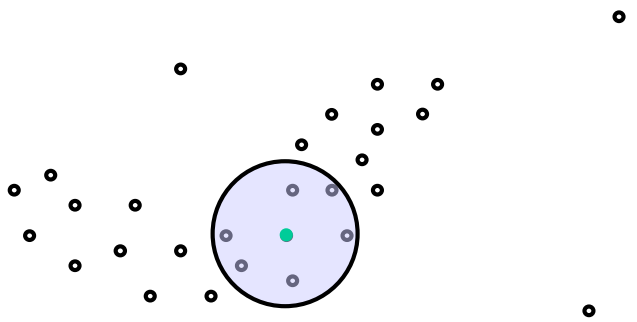
Grundlagen

Parameter:

- $\varepsilon \in \mathbf{R}$
- $minPts \in \mathbf{N}$
- Distanzfunktion dist

ε $\quad$ $minPts = 4$

- ε-*Umgebung eines Punktes p*: $N_\varepsilon(p) = \{q \mid \text{dist}(p,q) \leq \varepsilon\}$



Dichtebasiertes Clustering

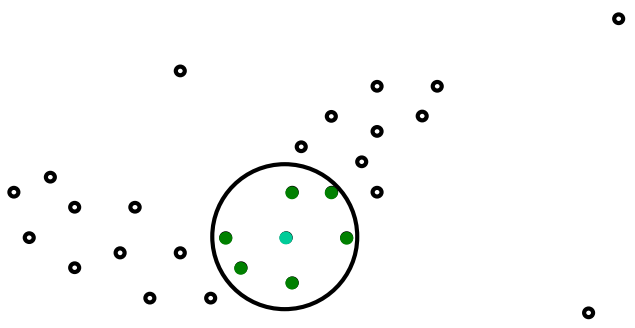
Grundlagen

Parameter:

- $\varepsilon \in \mathbf{R}$
- $minPts \in \mathbf{N}$
- Distanzfunktion

ε $minPts = 4$

- ε-*Umgebung eines Punktes p*: $N_\varepsilon(p) = \{q \mid \text{dist}(p,q) \leq \varepsilon\}$
- *Kernpunkt p*: $|N_\varepsilon(p)| \geq minPts$
- *Randpunkt / Rauschen ???*
- *Dichte-Verbundenheit: sammle rekursiv alle Punkte, die in der ε-Umgebung eines Kernpunktes liegen auf*



Dichtebasiertes Clustering

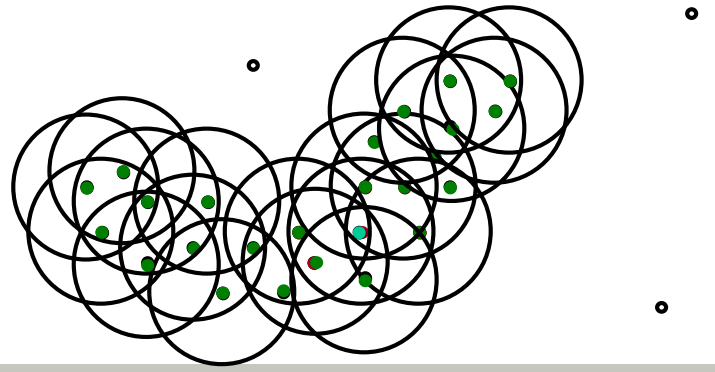
Grundlagen

Parameter:

- $\varepsilon \in \mathbf{R}$
- $minPts \in \mathbf{N}$
- Distanzfunktion

ε $minPts = 4$

- ε-*Umgebung eines Punktes p*: $N_\varepsilon(p) = \{q \mid \text{dist}(p,q) \leq \varepsilon\}$
- *Kernpunkt p*: $|N_\varepsilon(p)| \geq minPts$
- *Randpunkt / Rauschen ???*
- *Dichte-Verbundenheit: sammle rekursiv alle Punkte, die in der ε-Umgebung eines Kernpunktes liegen auf*



Dichtebasiertes Clustering

Algorithmus DBSCAN

- Entdecken eines Clusters:
  - Finde einen beliebigen Kernpunkt des Clusters
  - Expandiere das Cluster, d.h. finde alle dichteverbundenen Punkte, indem *rekursiv* alle Punkte, die in der ε-Umgebung eines Kernpunkts liegen, aufgesammelt werden
- Algorithmus:
  - Prüfe jeden noch nicht markierten Punkt ob es ein Kernpunkt ist
  - Wenn ja, expandiere einen neuen Cluster (alle Punkte des Clusters werden mit der entspr. Cluster-ID markiert)
  - Wenn nein, markiere Punkt als Rauschen (Randpunkte werden bei der Expansion des entspr. Clusters später richtig markiert)

Dichtebasiertes Clustering

Diskussion

+ Effizienz:
  - ε-Umgebungen i.d.R. effizient auswertbar
+ einfache Implementierung:
+ keine Anfälligkeit gegenüber Rauschen und Ausreißern
+ Cluster unterschiedlicher Form erkennbar
+ Anzahl der Cluster wird automatisch bestimmt

– Parameter (Dichtegrenzwert) nicht immer einfach zu bestimmen (Cluster unterschiedlicher Dichte)