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

Zentrale Annahmen

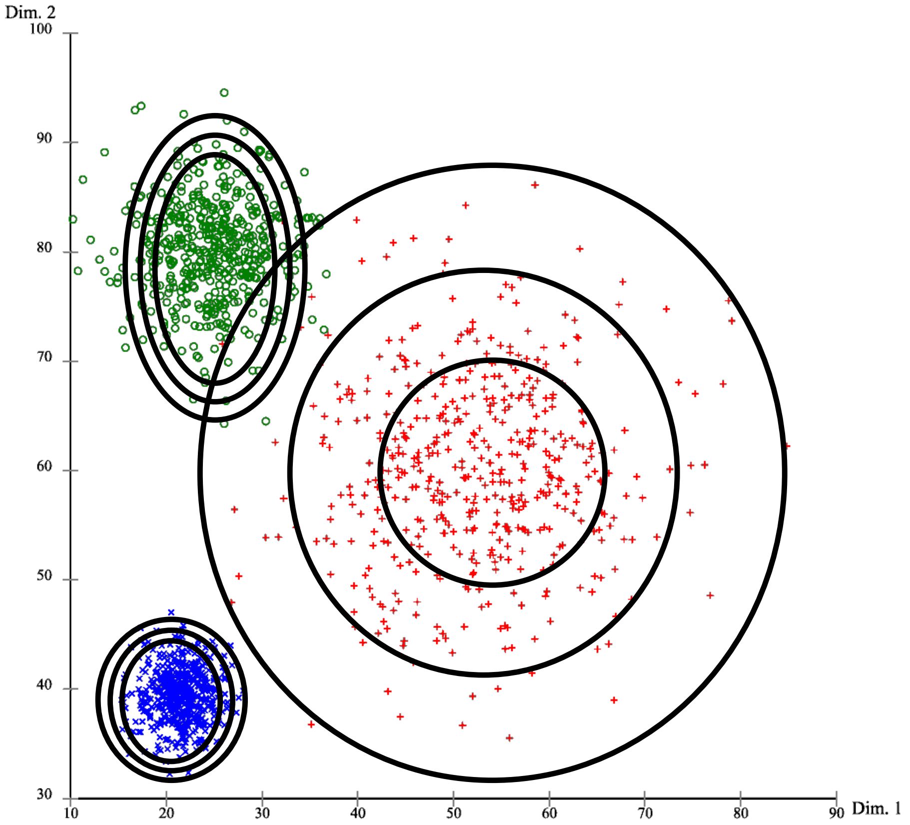
- für jedes Objekt eines Clusters überschreitet die lokale Punktdichte einen gegebenen Grenzwert
- die Menge von Objekten, die den Cluster ausmacht, ist räumlich zusammenhängend

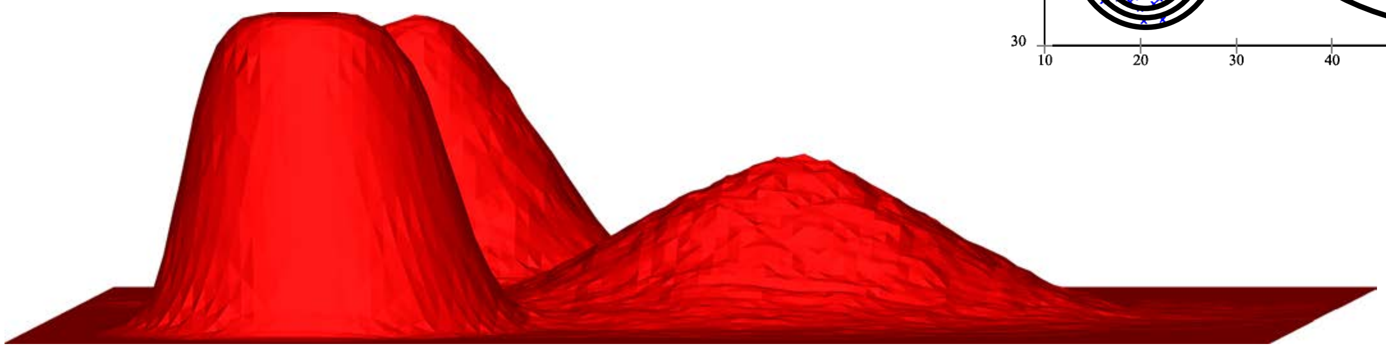
Dichtebasiertes Clustering

Intuition

(nach: [Kriegel, Kröger, Sander, Zimek 2011])

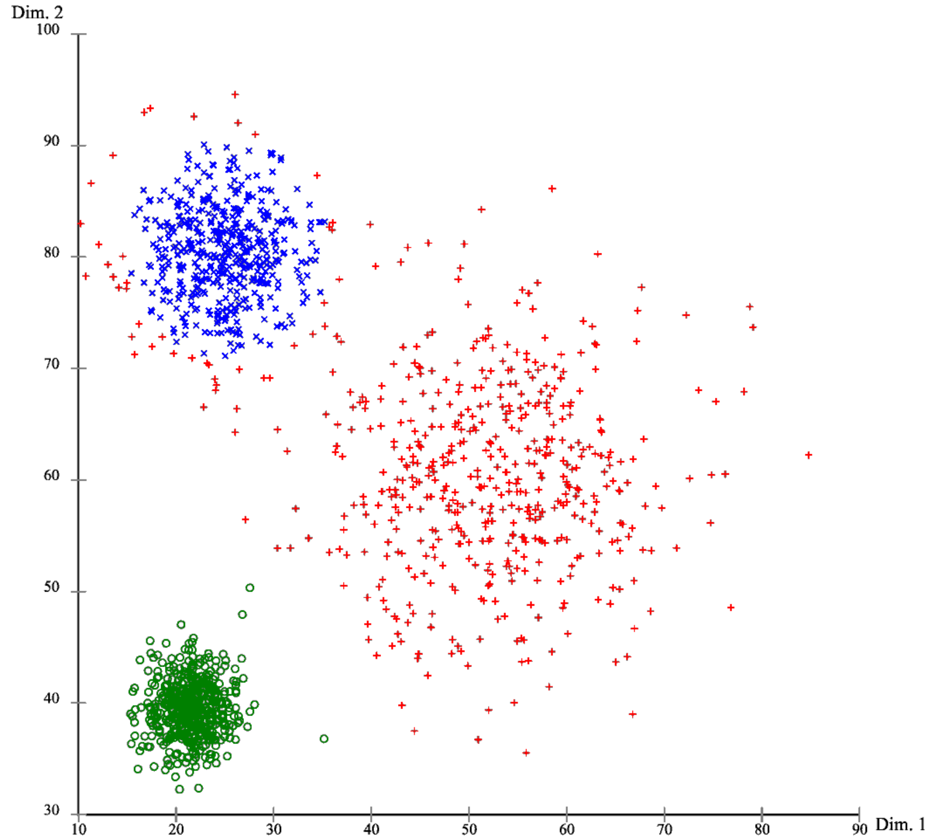
- Partitionierend: approximiere unterschiedliche Dichtefunktionen
  - „parametrisch“
- Dichte-basiert: unabhängig von zugrundeliegender Dichtefunktion: selektiere Bereiche, die mit Mindest-Dichte verbunden sind
  - „nicht-parametrisch“

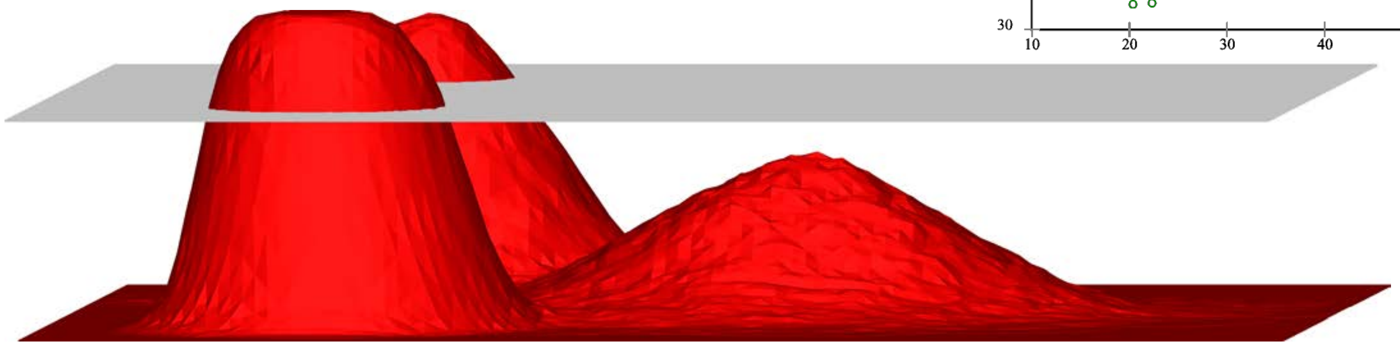




Intuition

hohes Dichte-Niveau: Cluster
geringer Dichte gilt als Noise



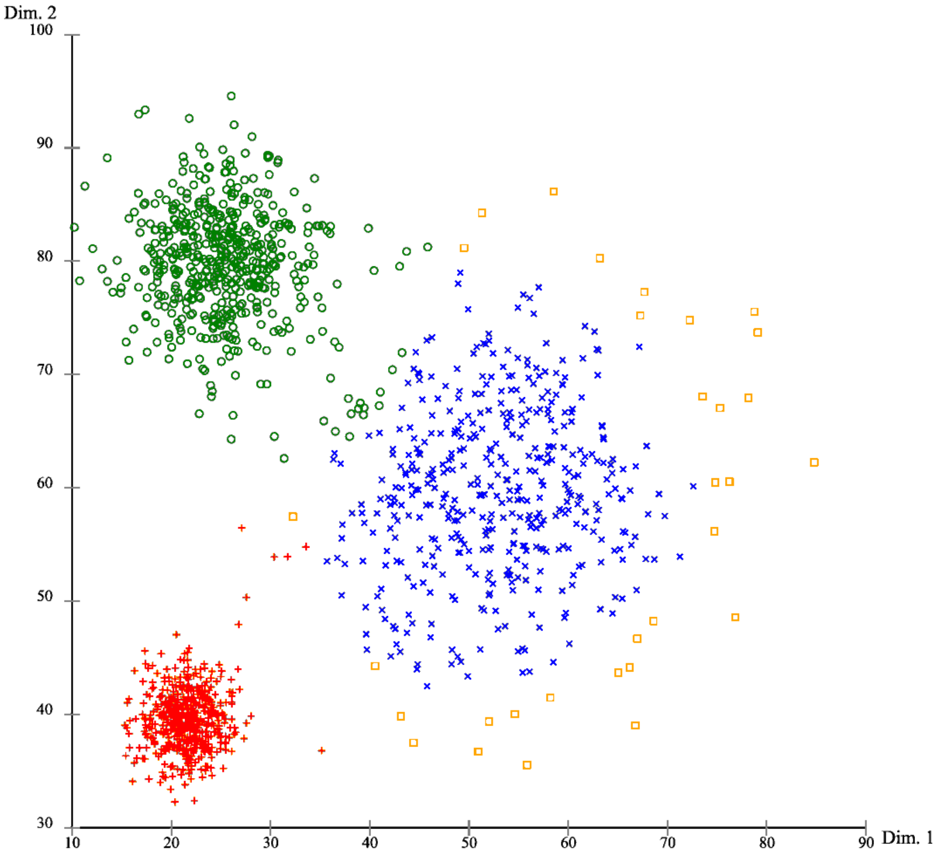


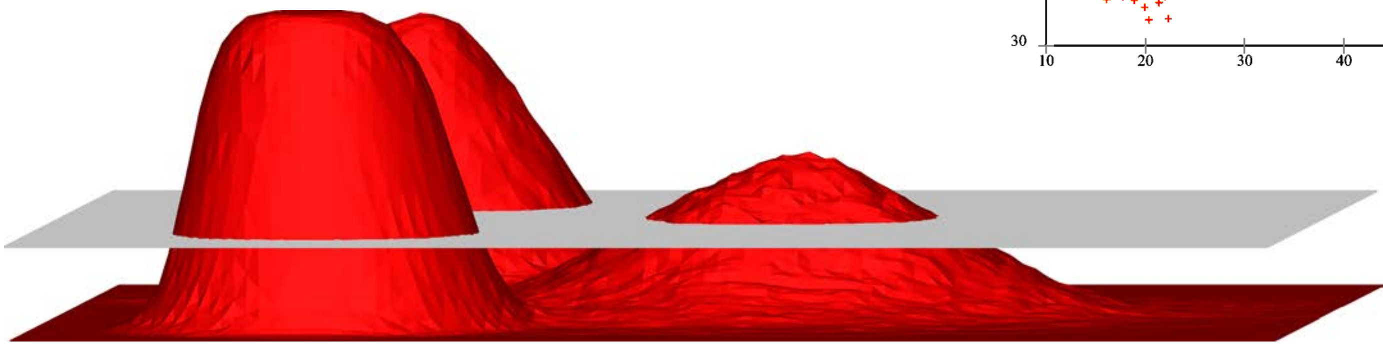
DATABASE
SYSTEMS
GROUP

Dichtebasiertes Clustering

Intuition

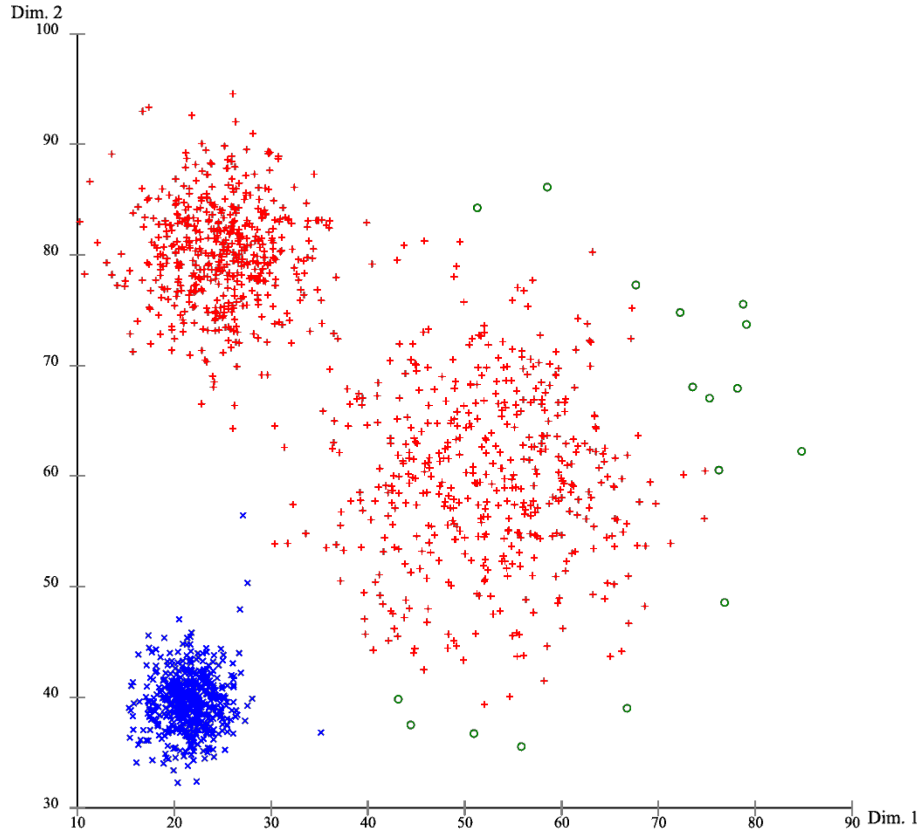
mittleres Dichte-Niveau: Identifikation von drei Clustern, einige Punkte in den Ausläufern der Verteilungen werden zu Noise

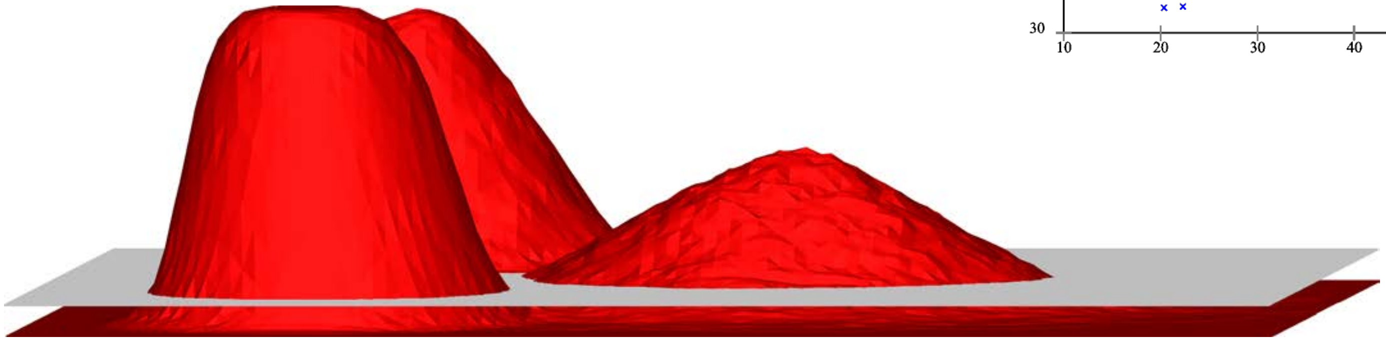




Intuition

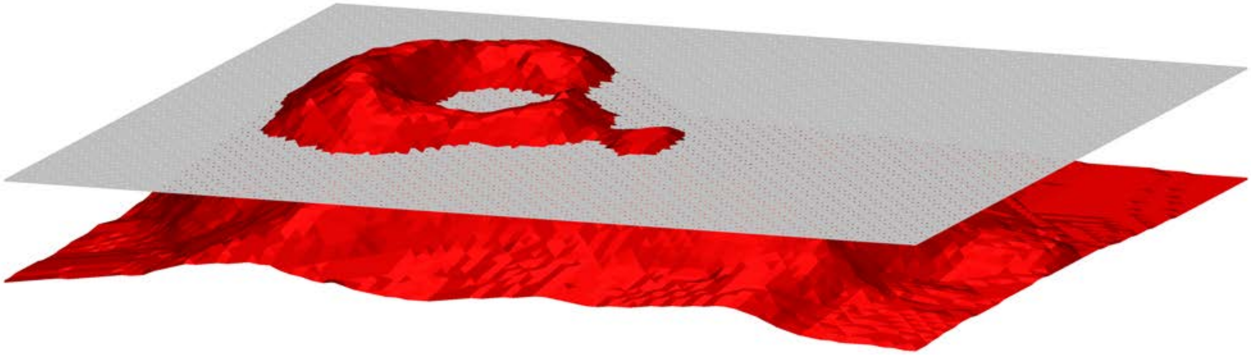
geringes Dichte-Niveau: zwei Cluster verschmelzen





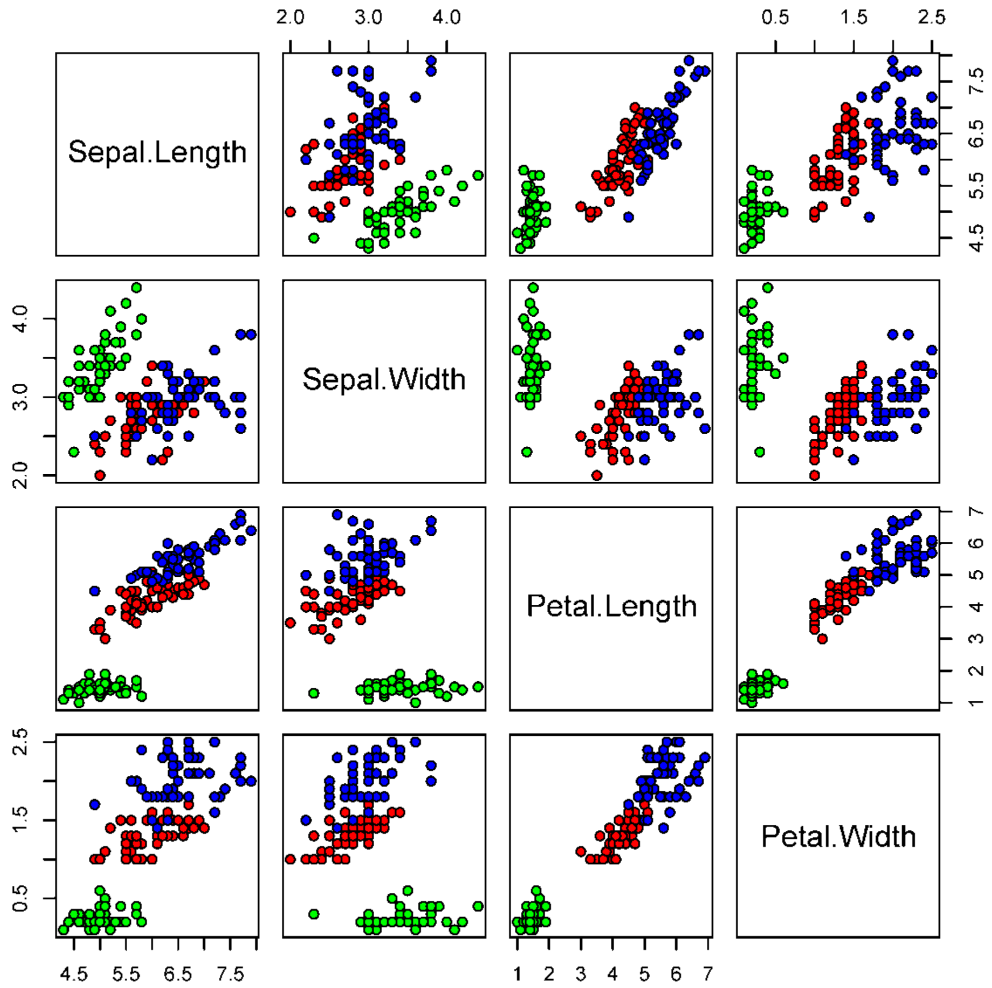
Intuition

- Partitionierend: Optimierungsproblem
- Dichte-basiert: „natürliche" Strukturen (oft: geographisch/ topographisch, oder biologisch)
- Beispiel: Höhenprofil (Vulkan Mt. Eden, Auckland)



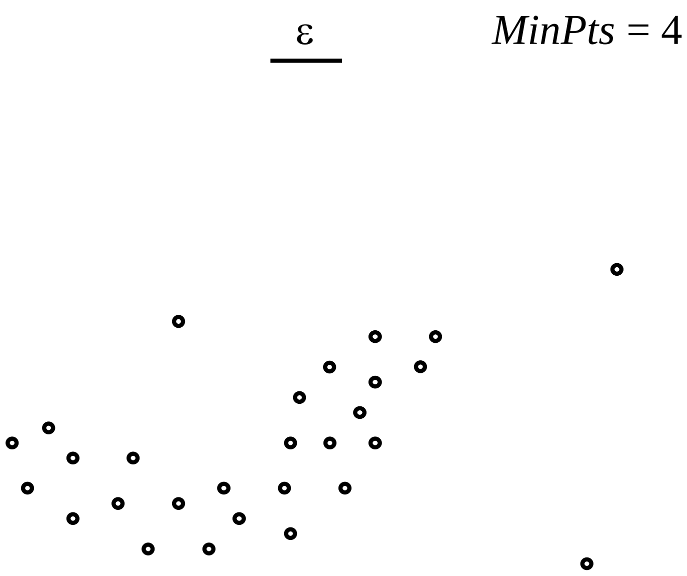
Intuition

Beispiel: Iris-Arten – innerhalb einer Art gewisse Bandbreite, aber keine Sprünge



Idee zur effizienten Suche

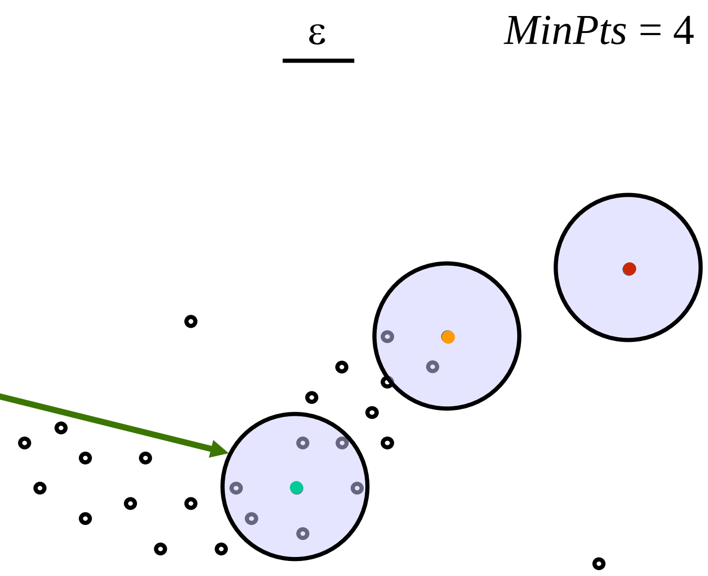
Parameter $\varepsilon \in \Re$ und $MinPts \in N$ spezifizieren Dichtegrenzwert



Idee zur effizienten Suche

Parameter $\varepsilon \in \Re$ und $MinPts \in N$ spezifizieren Dichtegrenzwert

- *Kernpunkt*

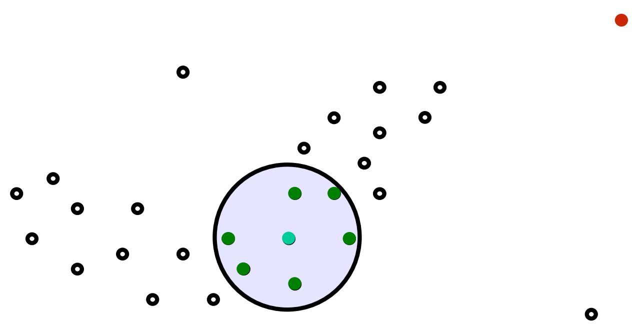


Idee zur effizienten Suche

Parameter $\varepsilon \in \Re$ und $MinPts \in N$ spezifizieren Dichtegrenzwert

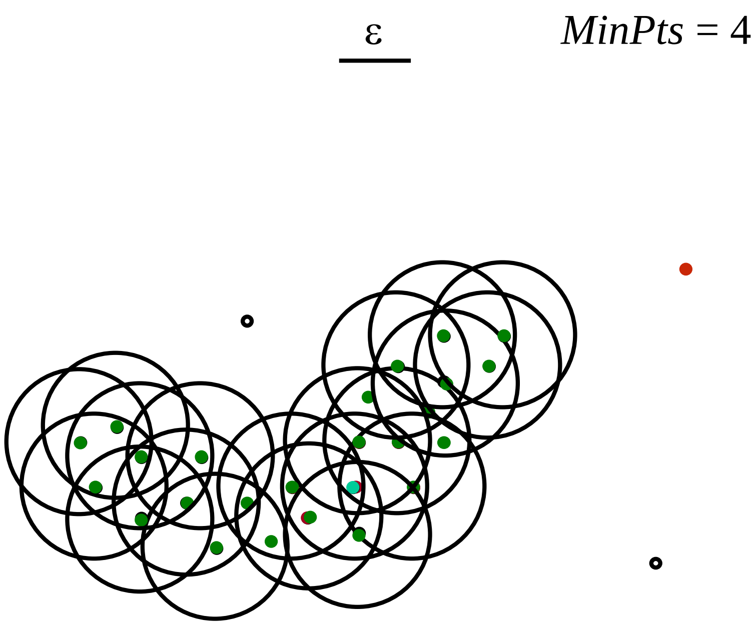
ε $MinPts = 4$

- *Kernpunkt*
- *Direkte Dichte-Erreichbarkeit*



Idee zur effizienten Suche

Parameter $\varepsilon \in \Re$ und $MinPts \in N$ spezifizieren Dichtegrenzwert



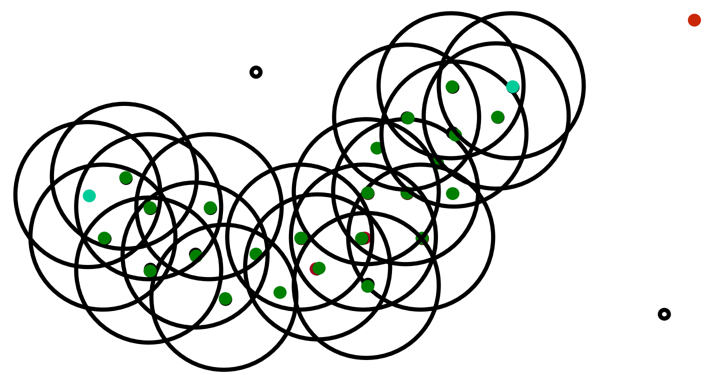
- *Kernpunkt*
- *Direkte Dichte-Erreichbarkeit*
- *Dichte-Erreichbarkeit*

Idee zur effizienten Suche

Parameter $\varepsilon \in \Re$ und $MinPts \in N$ spezifizieren Dichtegrenzwert

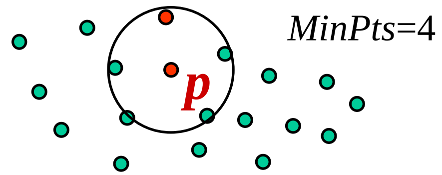
ε $MinPts = 4$

- *Kernpunkt*
- *Direkte Dichte-Erreichbarkeit*
- *Dichte-Erreichbarkeit*
- *Dichte-Verbundenheit*



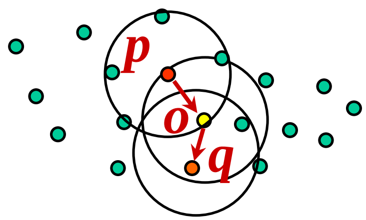
Formalisierung [Ester, Kriegel, Sander & Xu 1996]

- Ein Objekt $p \in DB$ heißt *Kernobjekt*, wenn gilt:
  $|RQ(p,\varepsilon)| \geq MinPts$
  $RQ(p,\varepsilon) = \{o \in DB \mid dist(p,o) <= \varepsilon\}$

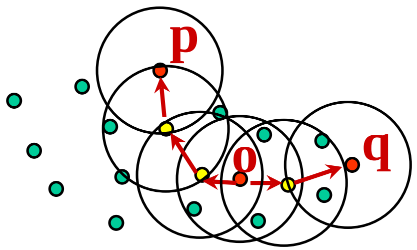


- Ein Objekt $q \in DB$ ist *direkt dichte-erreichbar* von $p \in DB$ bzgl. ε und *MinPts*, wenn gilt:
  $q \in RQ(p,\varepsilon)$ und p ist ein Kernobjekt in *DB*.

- Ein Objekt p ist *dichte-erreichbar* von q, wenn es eine Kette von direkt erreichbaren Objekten von q nach p gibt.



- Zwei Objekte p und q sind *dichte-verbunden*, wenn sie beide von einem dritten Objekt o aus dichte-erreichbar sind.



Formalisierung

Ein (*dichtebasierter*) *Cluster* C bzgl. ε und *MinPts* ist eine nicht-leere Teilmenge von *DB* für die die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

Maximalität: $\forall p,q \in DB$: wenn $p \in C$ und q dichte-erreichbar von p ist, dann ist auch $q \in C$.

Verbundenheit: $\forall p,q \in C$: p ist dichte-verbunden mit q.

Formalisierung

Definition Clustering

Ein *dichtebasiertes Clustering CL* der Menge *DB* bzgl. ε und *MinPts* ist eine „vollständige“ Menge von dichtebasierten Clustern bzgl. ε und *MinPts* in *DB*.

Definition Noise

Die Menge $Noise_{CL}$ („*Rauschen*“) ist definiert als die Menge aller Objekte aus *DB*, die nicht zu einem der dichtebasierten Cluster $C \in CL$ gehören.

Grundlegende Eigenschaft

Sei *C* ein dichtebasierter Cluster und sei $p \in C$ ein Kernobjekt.
Dann gilt:

$$C = \{o \in DB \mid o \text{ dichte-erreichbar von } p \text{ bzgl. } \varepsilon \text{ und } MinPts\}.$$

=> ermöglicht effiziente Suche (WARUM?)

Achtung: Cluster enthält nicht notwendigerweise nur Kernpunkte

Algorithmus DBSCAN

```
DBSCAN(Punktmenge DB, Real ε, Integer MinPts)
  // Zu Beginn sind alle Objekte unklassifiziert,
  // o.ClId = UNKLASSIFIZIERT für alle o ∈ DB

   ClusterId := nextId(NOISE);
   for i from 1 to |DB| do
      Objekt := DB.get(i);
      if Objekt.ClId = UNKLASSIFIZIERT then
         if ExpandiereCluster(DB, Objekt, ClusterId, ε, MinPts)
         then ClusterId:=nextId(ClusterId);
```

Dichtebasiertes Clustering

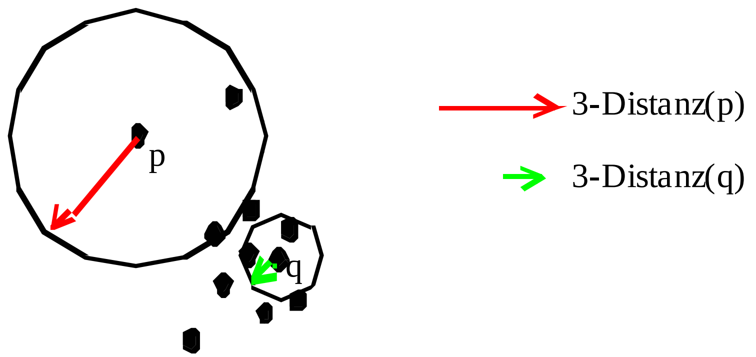

```
ExpandiereCluster(DB, StartObjekt, ClusterId, ε, MinPts): Boolean
seeds:= RQ(StartObjekt, ε);
if |seeds| < MinPts then // StartObjekt ist kein Kernobjekt
  StartObjekt.ClId := NOISE;
  return false;
// sonst: StartObjekt ist ein Kernobjekt
forall o ∈ seeds do o.ClId := ClusterId;
  entferne StartObjekt aus seeds;
  while seeds ≠ Empty do
    wähle ein Objekt o aus der Menge seeds;
    Nachbarschaft := RQ(o, ε);
    if |Nachbarschaft| ≥ MinPts then // o ist ein Kernobjekt
        for i from 1 to |Nachbarschaft| do
                p := Nachbarschaft.get(i);
                if p.ClId in {UNCLASSIFIED, NOISE} then
                        if p.ClId = UNCLASSIFIED then
                                füge p zur Menge seeds hinzu;
                        p.ClId := ClusterId;
    entferne o aus der Menge seeds;
return true;
```

Parameterbestimmung

Cluster: Dichte größer als die durch ε und *MinPts* spezifizierte „Grenzdichte“

Gesucht: der am wenigsten dichte Cluster in der Datenmenge

Heuristische Methode: betrachte die Distanzen zum *k*-nächsten Nachbarn.

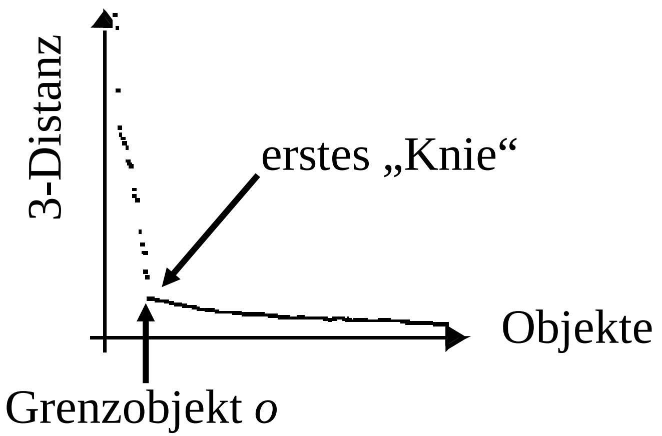


Funktion *k-Distanz*: Distanz eines Objekts zu seinem *k*-nächsten Nachbarn

k-Distanz-Diagramm: die *k*-Distanzen aller Objekte absteigend sortiert

Parameterbestimmung

Beispiel eines *k*-Distanz-Diagramms

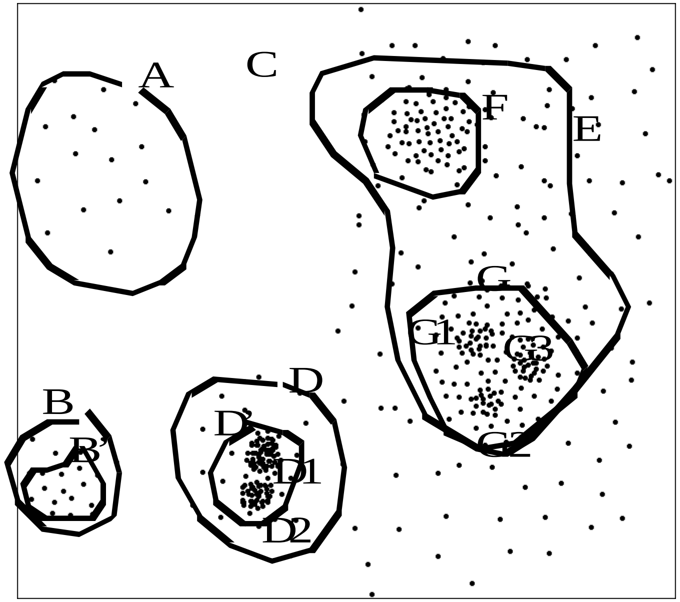


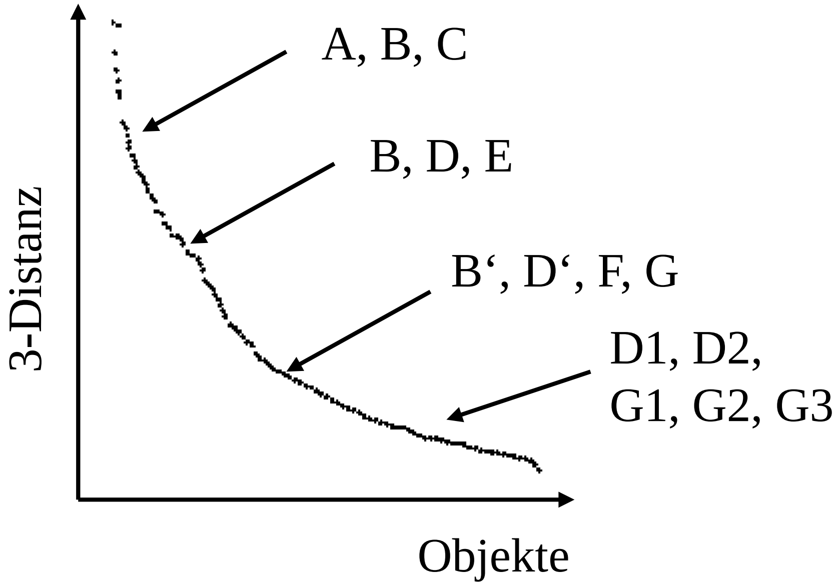
Heuristische Methode

- Benutzer gibt einen Wert für *k* vor (Default ist *k* = 2**d* - *1*), *MinPts* := *k*+1.
- System berechnet das *k*-Distanz-Diagramm und zeigt das Diagramm an.
- Der Benutzer wählt ein Objekt *o* im *k*-Distanz-Diagramm als Grenzobjekt aus, ε := *k*-Distanz(*o*).

Probleme der Parameterbestimmung

- hierarchische Cluster
- stark unterschiedliche Dichte in verschiedenen Bereichen des Raumes
- Cluster und Rauschen sind nicht gut getrennt

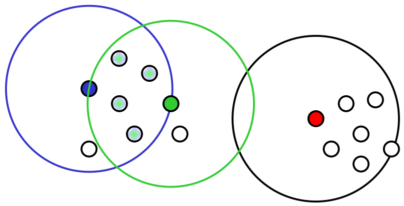




Shared Nearest Neighbor (SNN) Clustering

- DBSCAN
  - Erkennt Cluster unterschiedlicher Form und Größe
  - Hat Probleme bei Clustern mit unterschiedlicher Dichte
- Verbesserung: anderer Ähnlichkeitsbegriff
  - Ähnlichkeit zwischen zwei Objekten, wenn sie beide sehr nahe zu einer Referenzmenge *R* sind
  - Ähnlichkeit wird durch die Referenzmenge *R* “bestätigt”
  - Ähnlichkeit z.B. durch die Anzahl gemeinsamer nächster Nachbarn definieren (d.h. *R* ist die Menge der nächsten Nachbarn)
  - Shared Nearest Neighbor (SNN) Ähnlichkeit:
    - SNN_k-similarity$(p,q) = |NN(p, k) \cap NN(q, k)|$
    - $NN(o, k)$ = Menge der *k*-nächsten Nachbarn von *o*

$k = 6$



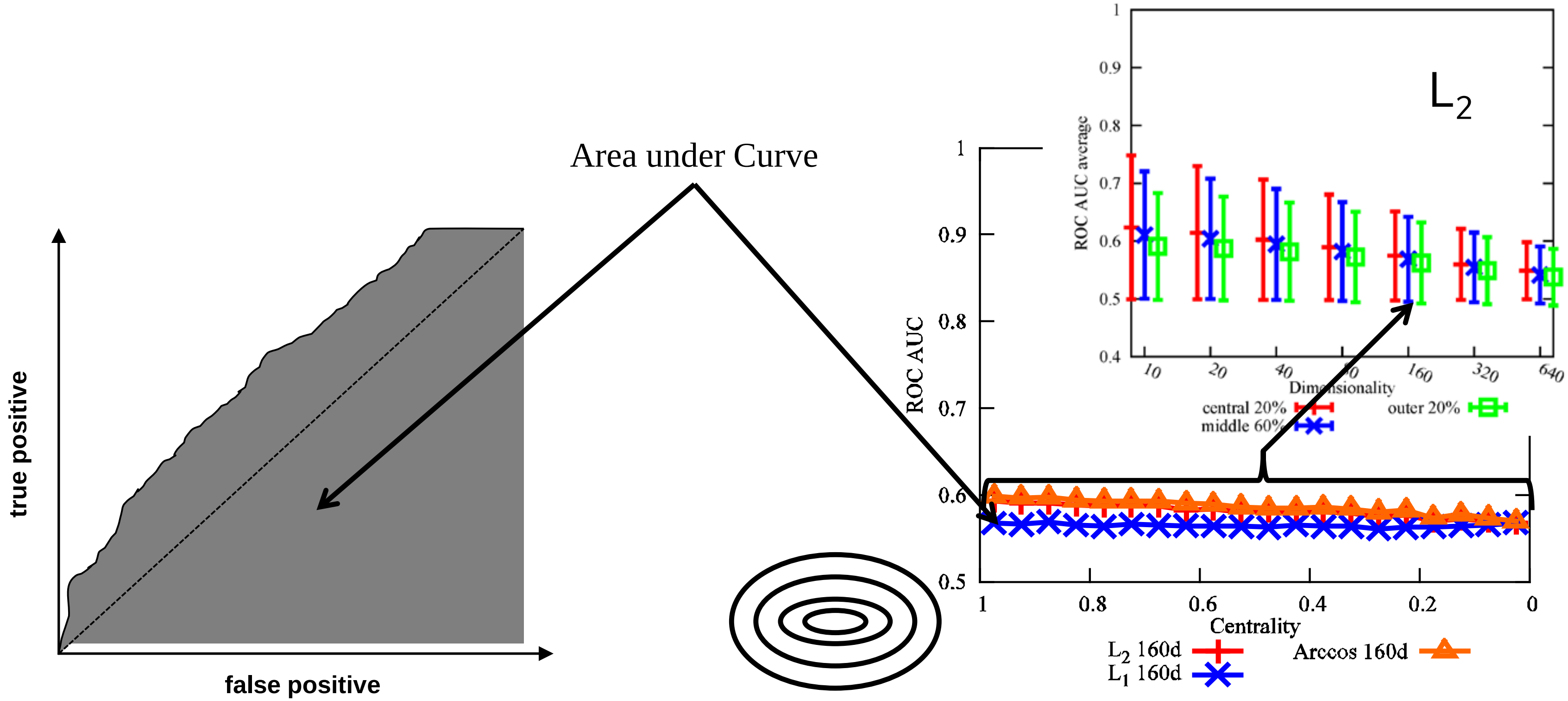
SNN_6-similarity(●, ●) = 4

SNN_6-similarity(●, ●) = 0

Dichtebasiertes Clustering

Studie: Stabilität von SNN [Houle, Kriegel, Kröger, Schubert, Zimek 2010]

Experiment: Jedes Datenbankobjekt wird einmal als Anfrageobjekt verwendet, Nachbarschaftsranking: Area under curve (AUC) of the Receiver Operating Characteristic (ROC)

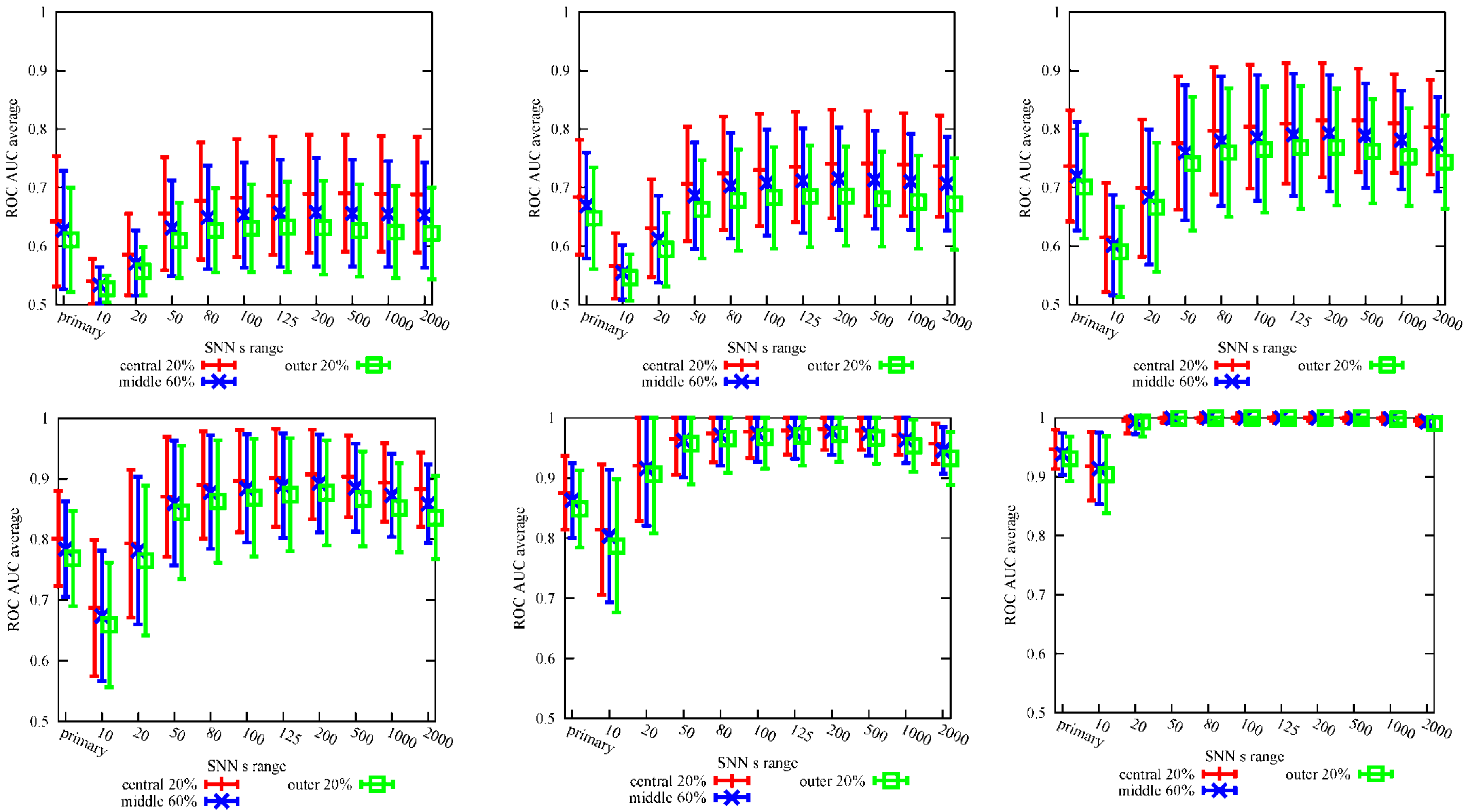


eine Anfrage (Nachbarn gleicher vs. anderer Cluster)

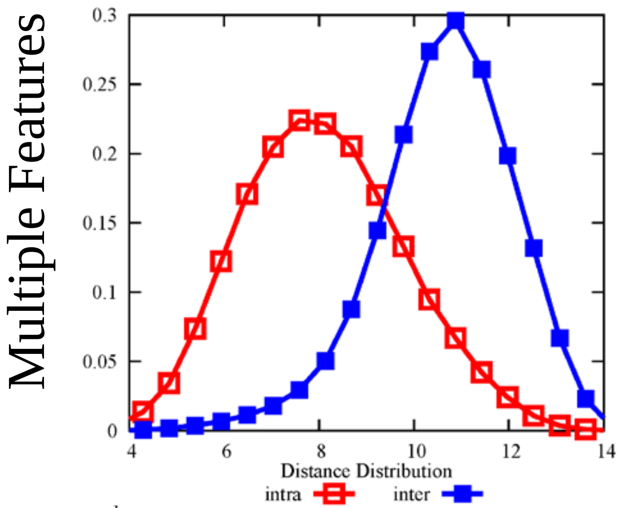
Durchschnitt aller Anfragen

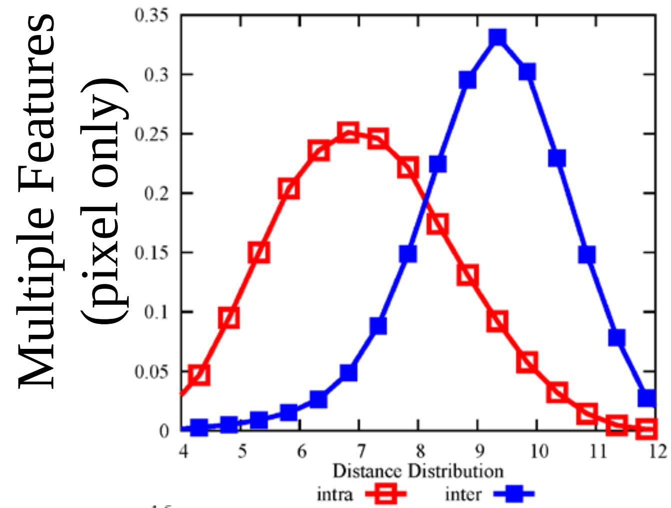
Dichtebasiertes Clustering

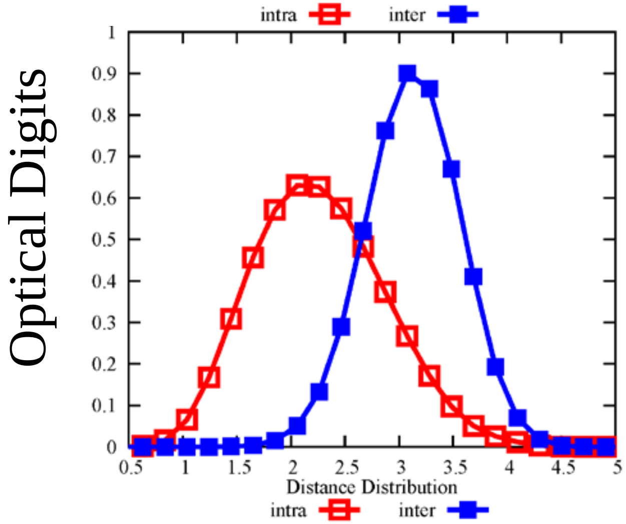
SNN basierend auf Euklidischer Distanz, künstliche Datensätze, alle Attribute relevant, 20/40/80/160/320/640 Dimensionen

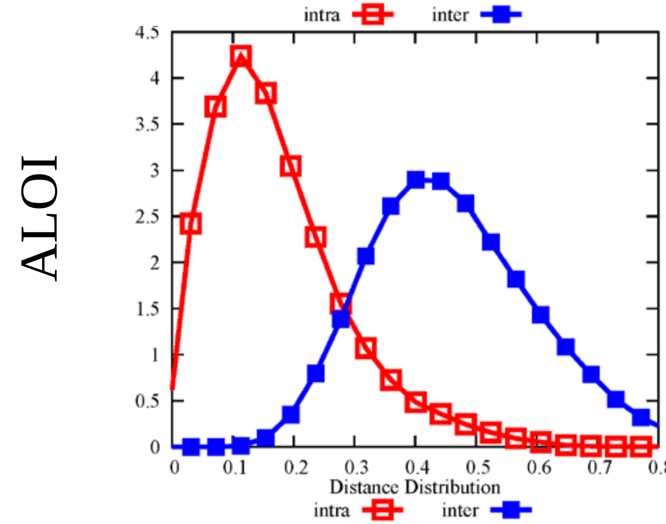


Verteilungen Euklidischer Distanz



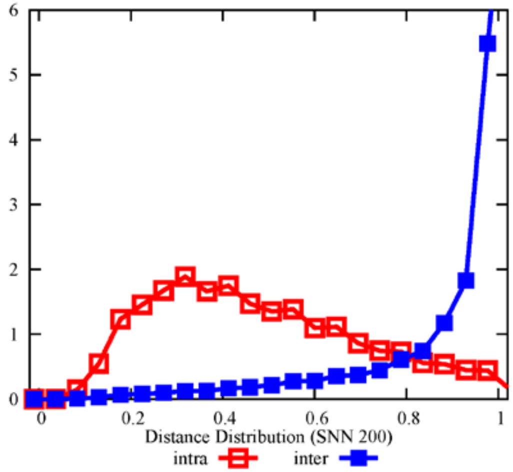




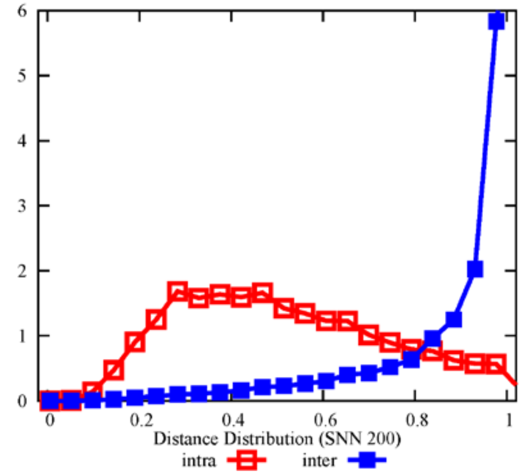


Verteilungen SNN Distanz

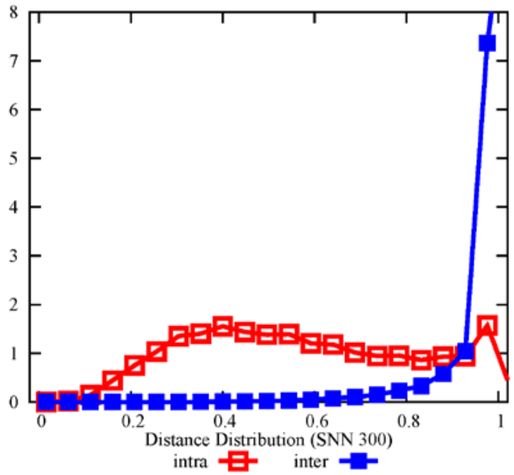
Multiple Features



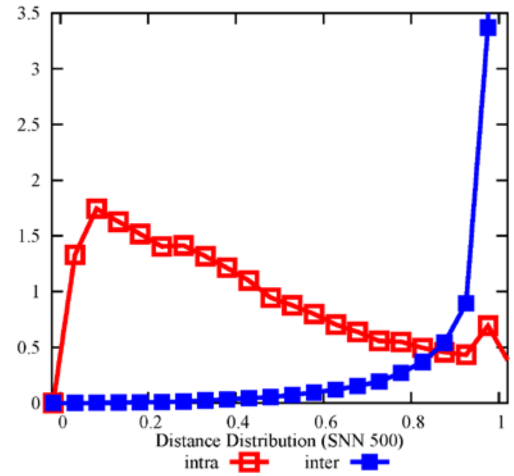
Multiple Features (pixel only)



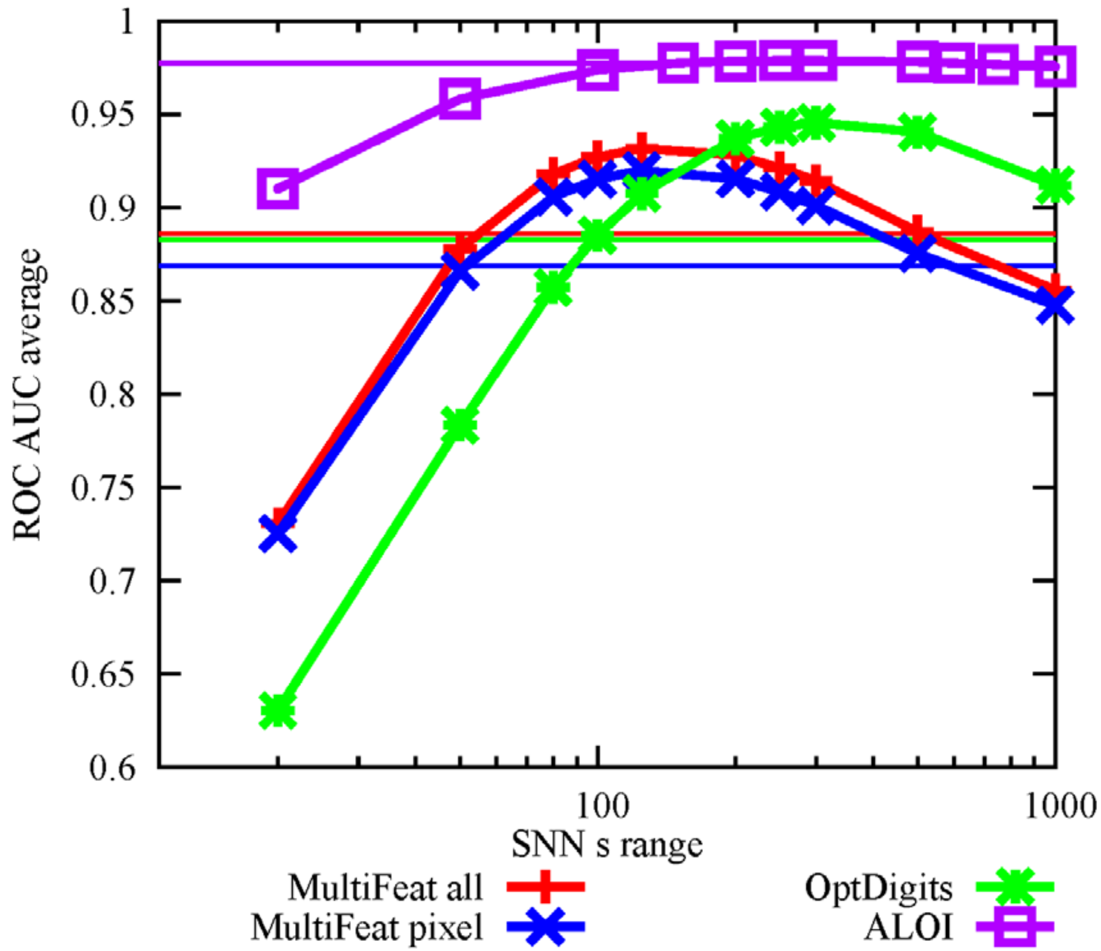
Optical Digits



ALOI



Ranking-Qualität

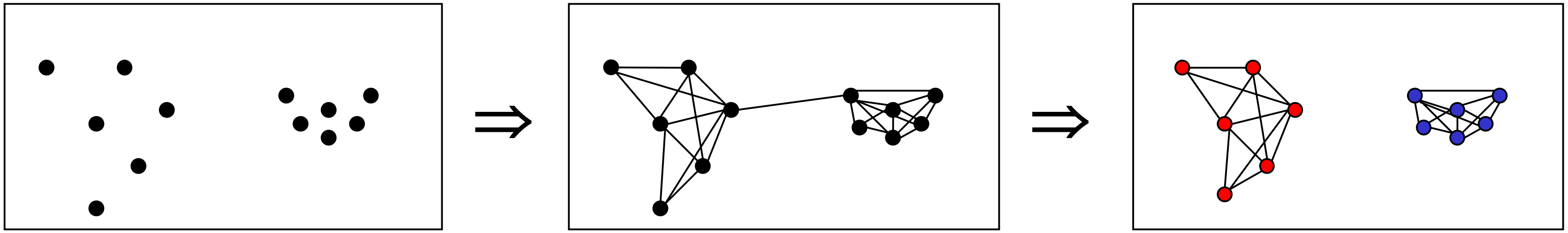


mehr Ergebnisse auf:

http://www.dbs.ifi.lmu.de/research/SNN/

Einfaches SNN-Clustering [Jarvis, Patrick 73]:

1. Berechnung der Ähnlichkeitsmatrix und des Ähnlichkeitsgraphen
   - für alle Objekt-Paare $p,q \in DB$: berechne SNN_k-similarity(p,q)
   - SNN_k-Ähnlichkeitsgraph:
     - Knoten = Objekte
     - Kante zwischen jedem Objektpaar p,q mit Gewicht SNN_k-similarity(p,q)
   - Keine Kanten mit Gewicht 0
2. Generiere Cluster
   - Lösche alle Kanten, deren Gewicht unterhalb eines Grenzwerts τ liegen
   - Cluster = verbundene Komponenten im resultierenden Graphen

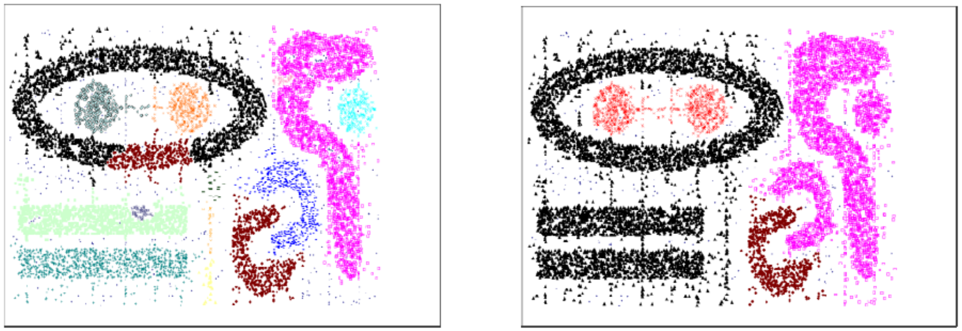


Datensatz SNN Ähnlichkeitsgraph Generiere Cluster

Dichtebasiertes Clustering

Problem:

- Threshold τ schwer zu bestimmen
- kleine Variationen führen zu stark unterschiedlichen Ergebnissen



(a) No-merging Threshold (b) No-merging Threshold + 1

Bild aus:

[Ertöz, Steinbach, Kumar 03]

Lösung [Ertöz, Steinbach, Kumar 03]

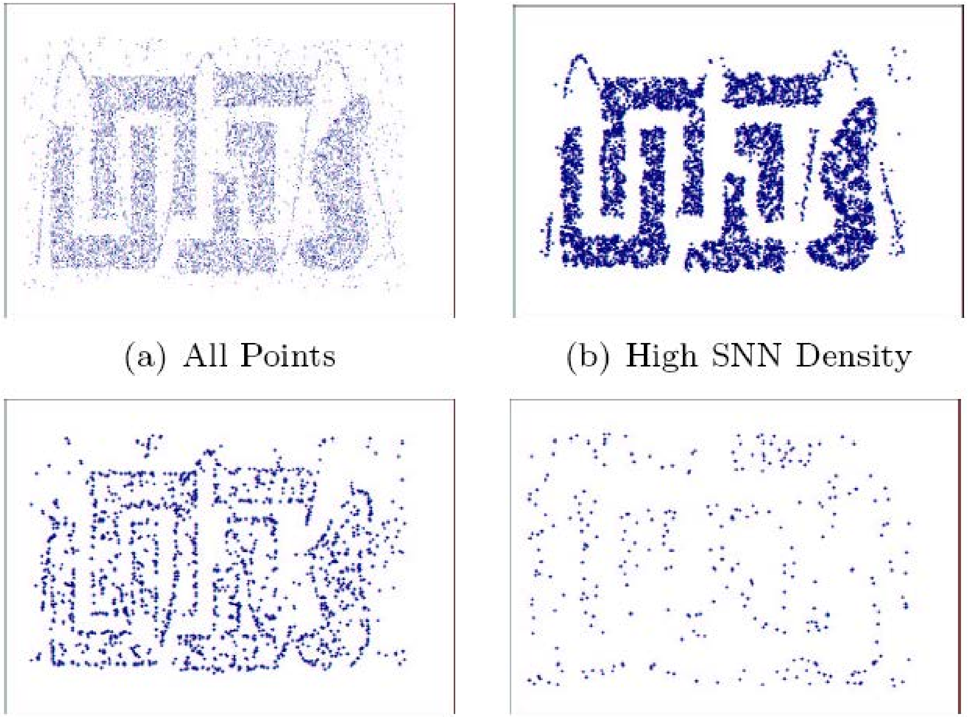
- Kombiniere SNN-Ähnlichkeit mit dichtebasierten Konzepten
- SNN-Dichte:

  Anzahl der Punkte innerhalb eines spezifizierten Radius ε bzgl. SNN-Ähnlichkeit

  $\text{SNN}_k\text{-density}(p,\varepsilon) = |\{q \mid \text{SNN}_k\text{-similarity}(p,q) \geq \varepsilon\}|$

SNN-Dichte

- Beispiel:
  - 10 000 Daten (Bild (a))
    $k = 50$, $\varepsilon = 20$
  - Bild (b): “Kernpunkte”
    alle Punkte mit SNN-Dichte ≥ 34
  - Bild (c): “Randpunkte”
    alle Punkte mit SNN-Dichte ≥ 17
  - Bild (d): “Rauschen”
    alle Punkte mit SNN-Dichte < 17



(a) All Points (b) High SNN Density (c) Medium SNN Density (d) Low SNN Density

Bild aus: [Ertöz, Steinbach, Kumar 03]

- Analogie zu DBSCAN: $\varepsilon = 20$, $minPts = 34$
- Kernpunkt p: mehr als *minPts* Punkte haben 20 oder mehr der 50 nächsten Nachbarn mit p gemeinsam

SNN-Clustering Algorithmus [Ertöz, Steinbach, Kumar 03]

Eingabe: k, ε, *minPts*

1. Berechne Ähnlichkeitsmatrix und –graph
   (siehe einfaches SNN-Clustering)
2. Berechne die SNN_k-Dichte für jeden Punkt bzgl. ε
3. Bestimme Kernpunkte bzgl. *minPts*
   (alle Punkte mit einer SNN-Dichte $\geq$ *minPts*)
4. Vereinige Kernpunkte p,q, wenn SNN_k-similarity$(p,q) \geq \varepsilon$
5. Ordne Nicht-Kernpunkt p einem Cluster zu, wenn es einen Kernpunkt q gibt, mit SNN_k-similarity$(q,p) \geq \varepsilon$
6. Alle anderen Nicht-Kernpunkte sind Rauschen

DBSCAN mit SNN-Ähnlichkeit

Diskussion

- Unterschied zu DBSCAN
  - DBSCAN mit Euklidischer Distanz: nur Cluster, die dichter sind als der Grenzwert (spezifiziert durch *minPts* und ε)
  - SNN-Dichte eines Punktes *p*: Anzahl der Punkte, die mind. ε nächste Nachbarn mit *p* gemeinsam haben
  - $\Rightarrow$ unabhängig von der eigentlichen Dichte
- Parametrisierung
  - Wahl von *k* ist kritisch:
    - Zu klein: auch relativ gleichverteilte Cluster werden wegen lokalen Variationen gesplittet $\Rightarrow$ viele kleine Cluster
    - Zu groß: wenige große, gut-separierte Cluster
  - *minPts*, $\varepsilon < k$

Generalisierung von DBSCAN [Sander, Ester, Kriegel & Xu 1998]

Grundidee für dichte-basierte Cluster :

“ε-Nachbarschaft enthält mindestens ***MinPts*** Punkte***”***

“Distanz ≤ ε”

“$| N_\varepsilon | \geq MinPts$”

NPred(*o*,*p*)
reflexiv, symmetrisch
für Paare von Objekten

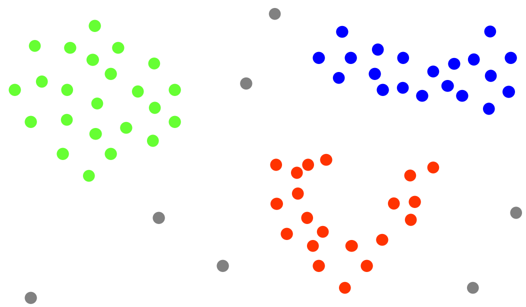
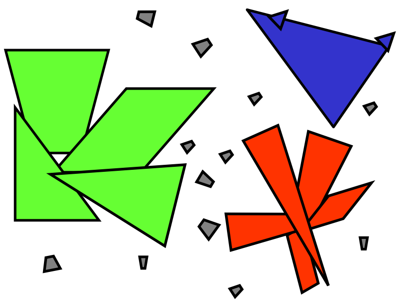
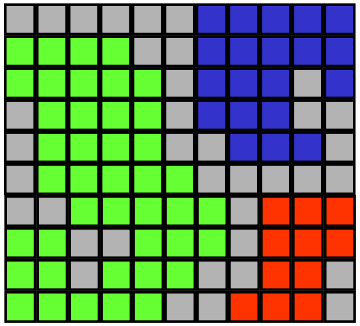
MinWeight(N)
beliebiges Prädikat für
Mengen von Objekten

Verallgemeinerte Nachbarschaft
$\boldsymbol{N_{NPred}(o) = \{p \mid NPred(o, p)\}}$

Verallgemeinerte minimale Kardinalität
$\boldsymbol{MinWeight(N_{NPred}(o))}$

“NPred-Nachbarschaft hat mindestens das “Gewicht” ***MinWeight”***

Beispiele

			
NPred	dist(p,q) ≤ ε	intersect(p,q)	Nachbarzelle und ähnliche Farbe
MinWeight	cardinality(. . .) ≥ MinPoints	Summe der Flächen ≥ 5 % der Gesamtfläche	true

Algorithmus GDBSCAN

- dasselbe algorithmische Schema wie DBSCAN
- anstelle einer RQ(o,ε)-Anfrage eine N_{NPred}-Anfrage
- anstelle der Bedingung |RQ(o,ε)| ≥ *MinPts* das *MinWeight*-Prädikat auswerten
- Laufzeitkomplexität O(n log n) bei geeigneter Unterstützung der N_{NPred}-Anfrage
- Beliebige Nachbarschaftsprädikate denkbar

Literatur

L. Ertöz, M. Steinbach, V. Kumar: Finding Clusters of Different Sizes, Shapes, and Densities in Noisy, High Dimensional Data. SDM 2003.

M. Ester, H.-P. Kriegel, J. Sander, X. Xu: A Density-Based Algorithm for Discovering Clusters in Large Spatial Databases with Noise. KDD 1996: 226-231.

M. E. Houle, H.-P. Kriegel, P. Kröger, E. Schubert, A. Zimek: Can Shared-Neighbor Distances Defeat the Curse of Dimensionality? SSDBM 2010: 482-500.

R. A. Jarvis, E. A. Patrick: Clustering using a similarity measure based on shared near neighbors. IEEE Transactions on Computers 100(11) : 1025-1034 (1973).

H.-P. Kriegel, P. Kröger, J. Sander, A. Zimek: Density-based clustering. Wiley Interdisc. Rew.: Data Mining and Knowledge Discovery 1(3): 231-240 (2011).

J. Sander, M. Ester, H.-P. Kriegel, X. Xu: Density-Based Clustering in Spatial Databases: The Algorithm GDBSCAN and Its Applications. Data Min. Knowl. Discov. 2(2): 169-194 (1998).

Dichte-basierte Verfahren: Was haben Sie gelernt?

- Parametrisches vs. Nicht-Parametrisches Clustering
- Algorithmus DBSCAN: Intuition und Formalisierung
  - Kernpunkte
  - (direkt) dichte-erreichbar
  - dichte-verbundene Menge
  - Randpunkte
  - Rauschpunkte
- Heuristiken zur Bestimmung geeigneter Dichte-Grenzwert-Parameter
- Shared-Neighbor Distanzen
- (dichte-basiertes) Clustering mit SNN
- Generalisierung von DBSCAN