

TEORETYCZNE PODSTAWY INFORMATYKI

21/01/2020

WFAiS UJ, Informatyka Stosowana
II stopień studiów

Wykład 13b

2

Eksploracja
danych

- Co rozumiemy pod pojęciem „eksploracja danych”
- Algorytmy grupujące (klajstrujące)

Graficzna reprezentacja danych

3

- Graficznie pokazujemy najistotniejsze charakterystyki danych
 - Tabela ze statystycznym podsumowaniem
 - Histogramy
 - Box-ploty
 - Scatter-ploty
- Mogą być wykonane bardzo szybko/łatwo, powinny pozwolić na pierwsze wrażenie „co jest w danych”
- Staramy się robić stosunkowo dużo rysunków, tabel sumarycznych w różny sposób grupując zmienne.

Przykład

4

- Danie: zanieczyszczenie drobinkami materiałów powietrza na terenie USA.
 - <http://www.epa.gov/air/ecosystem.html>
- Dla poziomu zanieczyszczeń ustalona jest norma $12\mu\text{g}/\text{m}^3$
- Zestawienie dzienne jest dostępne ze strony
 - <http://www.epa.gov/ttn/airs/airsaqs/detaildata/downloadaqsddata.htm>
- Pytanie: czy są „stany” w USA w których ta norma jest przekraczana?

Dane: (przykłady kodu w języku R)

5

Tu są dane za okres 2008-2010

```
pollution <- read.csv("data/avgpm25.csv", colClasses = c("numeric", "character",  
  "factor", "numeric", "numeric"))  
head(pollution)
```

```
##      pm25  fips region longitude latitude  
## 1  9.771 01003  east    -87.75    30.59  
## 2  9.994 01027  east    -85.84    33.27  
## 3 10.689 01033  east    -87.73    34.73  
## 4 11.337 01049  east    -85.80    34.46  
## 5 12.120 01055  east    -86.03    34.02  
## 6 10.828 01069  east    -85.35    31.19
```

Czy w jakiś stanach przekroczona jest ta norma?

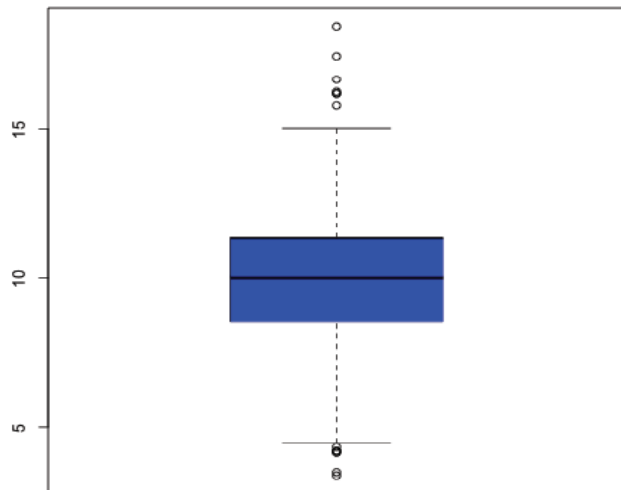
Tabela summaryczna, box plot, histogram

6

```
summary(pollution$pm25)
```

```
##      Min. 1st Qu.  Median    Mean 3rd Qu.    Max.   \n##      3.38   8.55   10.00   9.84  11.40   18.40
```

```
boxplot(pollution$pm25, col = "blue")
```



```
hist(pollution$pm25, col = "green")
```

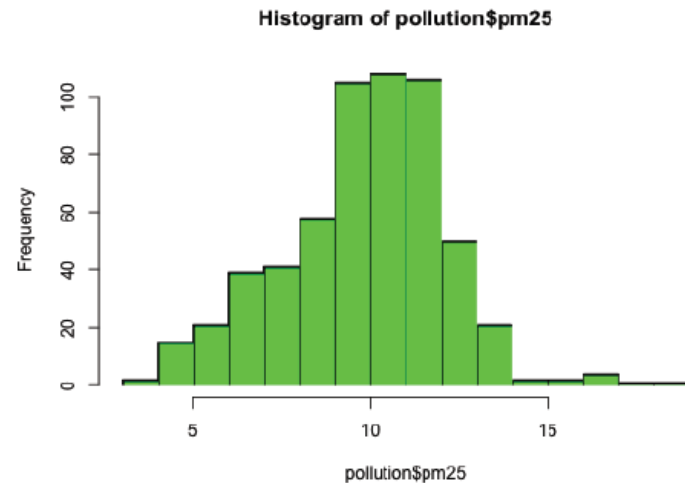


Tabela summaryczna, box plot, histogram

7

```
hist(pollution$pm25, col = "green")  
rug(pollution$pm25)
```

```
hist(pollution$pm25, col = "green", breaks = 100)  
rug(pollution$pm25)
```

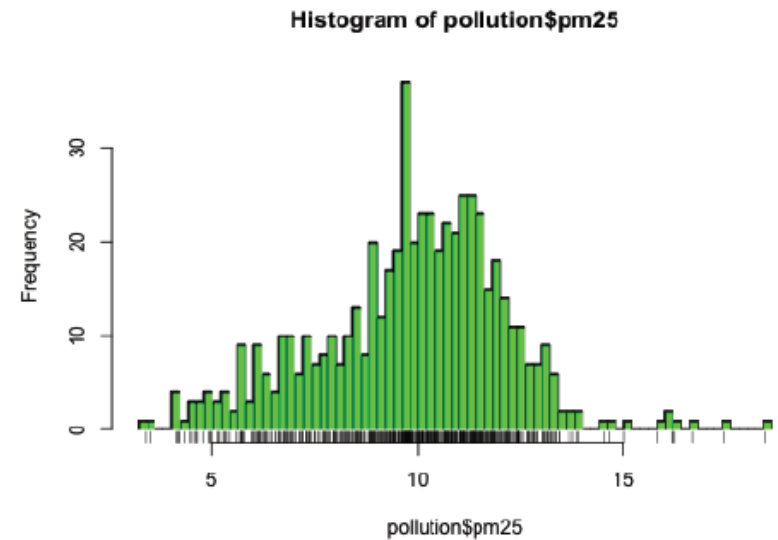
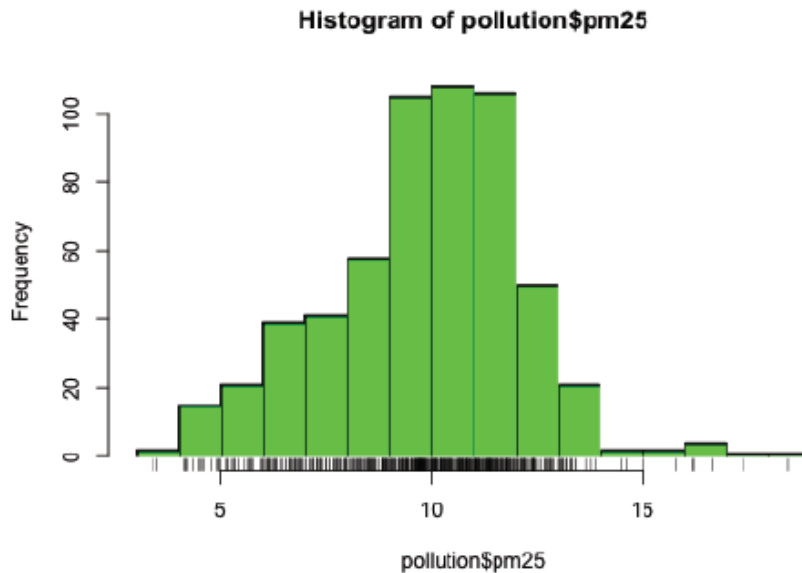
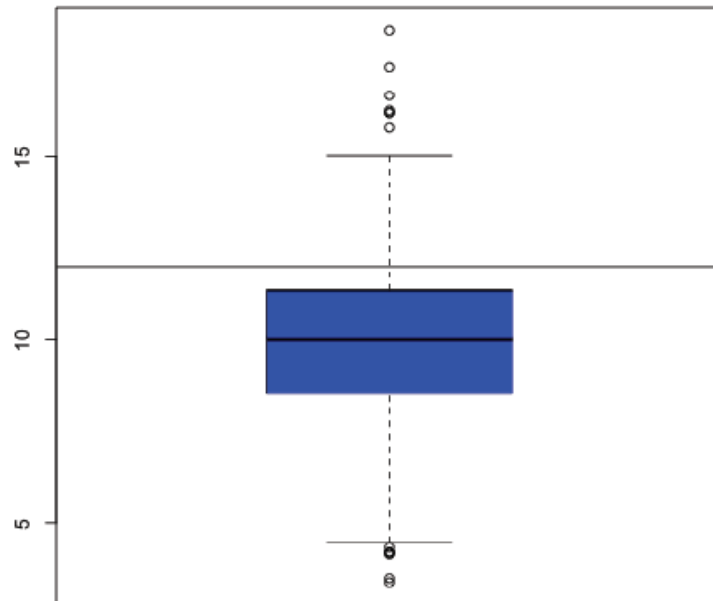


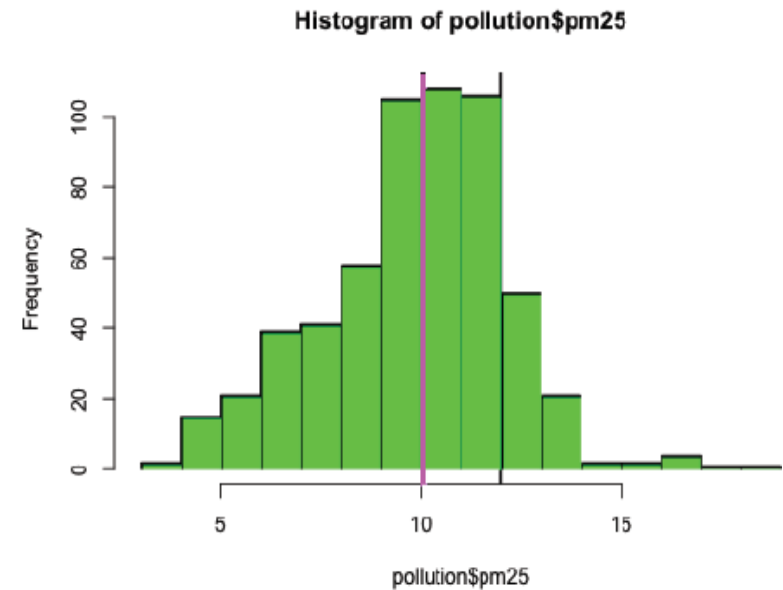
Tabela summaryczna, box plot, histogram

8

```
boxplot(pollution$pm25, col = "blue")  
abline(h = 12)
```



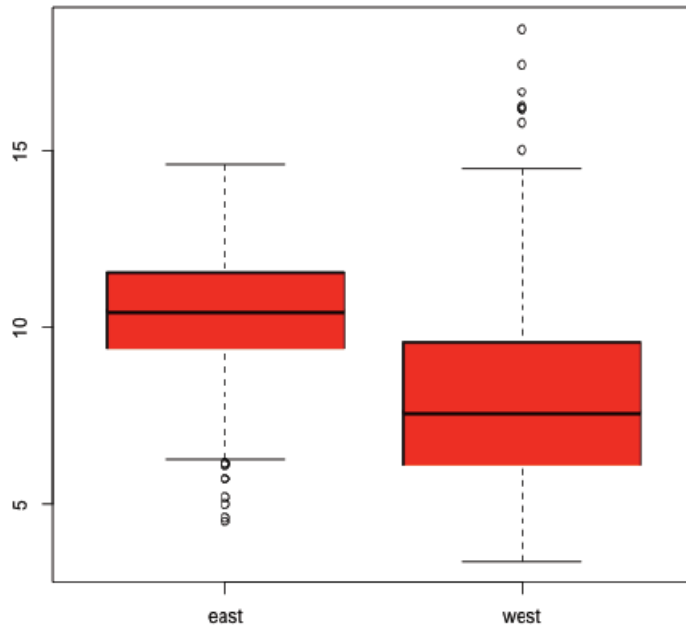
```
hist(pollution$pm25, col = "green")  
abline(v = 12, lwd = 2)  
abline(v = median(pollution$pm25), col = "magenta", lwd = 4)
```



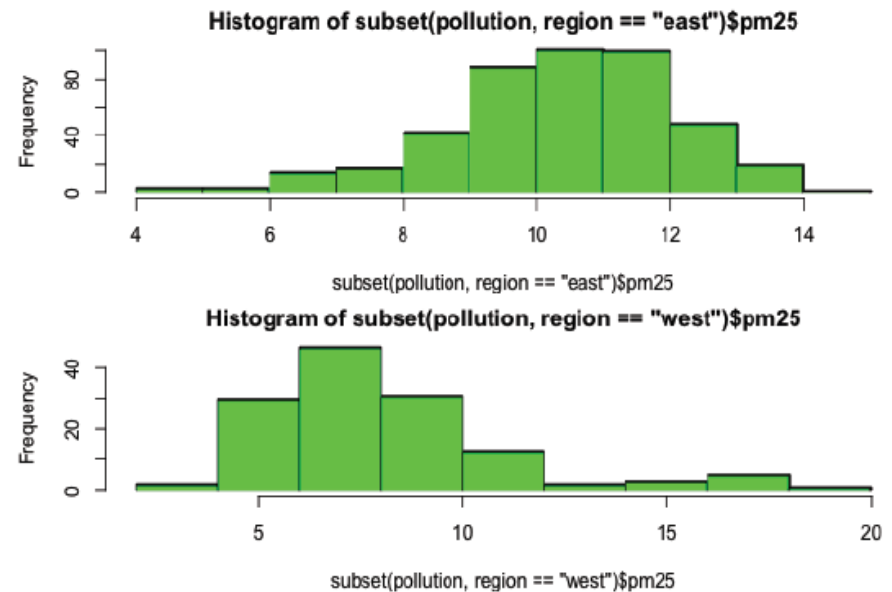
Multi-box plot, multi-histograms

9

```
boxplot(pm25 ~ region, data = pollution, col = "red")
```



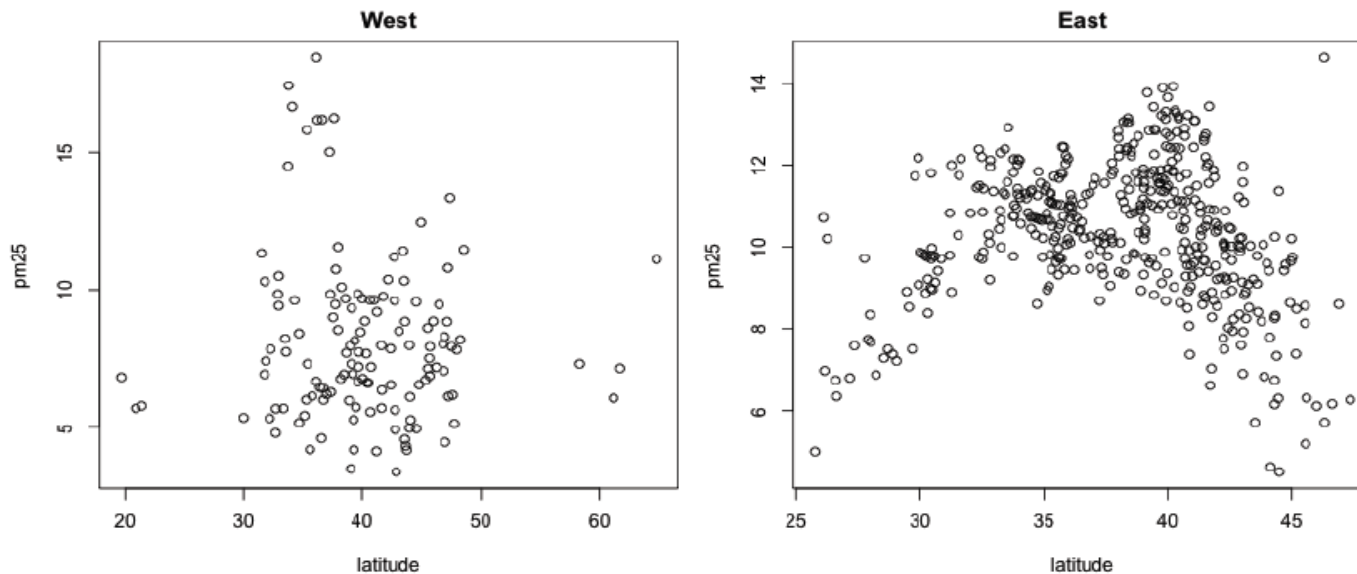
```
par(mfrow = c(2, 1), mar = c(4, 4, 2, 1))  
hist(subset(pollution, region == "east")$pm25, col = "green")  
hist(subset(pollution, region == "west")$pm25, col = "green")
```



Multiple scatter plots

10

```
par(mfrow = c(1, 2), mar = c(5, 4, 2, 1))  
with(subset(pollution, region == "west"), plot(latitude, pm25, main = "West"))  
with(subset(pollution, region == "east"), plot(latitude, pm25, main = "East"))
```



Jak badać co się dzieje w danych które są w wielu wymiarach

11

- Klastrowanie organizuje dane które są „blisko” w pewne grupy czyli klastry.
 - ▣ Co to znaczy że dane są blisko
 - ▣ Co to znaczy że grupujemy?
 - ▣ Jak pokazać graficznie grupowanie?
 - ▣ Jak interpretować grupowanie?

Grupowanie jest bardzo ważną techniką

12

cluster analysis - Google Sci x
scholar.google.com/scholar?q=cluster+analysis&btnG=&hl=en&as_sdt=0%2C21

Web Images More... jtleak@gmail.com

Google cluster analysis

Scholar About 2,880,000 results (0.04 sec) My Citations 0

2800 linkow

Articles
Legal documents

Any time
Since 2013
Since 2012
Since 2009
Custom range...

Sort by relevance
Sort by date

include patents
 include citations

Create alert

Cluster analysis for applications
MR Anderberg - 1973 - DTIC Document
Abstract: **Cluster analysis** is a collective term covering a wide variety of techniques for delineating natural groups or clusters in data sets. This book integrates the necessary elements of data **analysis**, **cluster analysis**, and computer implementation to cover the ...
Cited by 5438 Related articles All 12 versions Cite More

Cluster analysis and display of genome-wide expression patterns
MR Eisen, PT Spellman, PO Brown... - Proceedings of the ..., 1998 - National Acad Sciences [HTML] from nih.gov
Abstract A system of **cluster analysis** for genome-wide expression data from DNA microarray hybridization is described that uses standard statistical algorithms to arrange genes according to similarity in pattern of gene expression. The output is displayed graphically, ...
Cited by 12537 Related articles BL Direct All 259 versions Cite

The application of cluster analysis in strategic management research: an analysis and critique
DJ Ketchen, CL Shook - Strategic management journal, 1996 - Wiley Online Library
Abstract **Cluster analysis** is a statistical technique that sorts observations into similar sets or groups. The use of **cluster analysis** presents a complex challenge because it requires several methodological choices that determine the quality of a **cluster** solution. This paper ...
Cited by 754 Related articles BL Direct All 3 versions Cite

A cluster analysis method for grouping means in the analysis of variance
AJ Scott, M Knott - Biometrics, 1974 - JSTOR
It is sometimes useful in an **analysis** of variance to split the treatments into reasonably homogeneous groups. Multiple comparison procedures are often used for this purpose, but a more direct method is to use the techniques of **cluster analysis**. This approach is ...
Cited by 1125 Related articles All 2 versions Cite

Hierarchiczne klastrowanie

13

- Aglomeracyjne podejście (bottom-up)
 - Znajdź dwa najbliższe położone punkty
 - Połącz je ze sobą w „super-punkt”
 - Znajdź kolejne najbliższe punkty (traktując już połączone jako jeden super-punkt)
- Parametry algorytmu
 - definicję odległości punktów
 - definicję „łączenia” punktów
- Wynik
 - Prezentujemy jako pewne „drzewo” (dendogram)

Jak definiujemy odległość

14

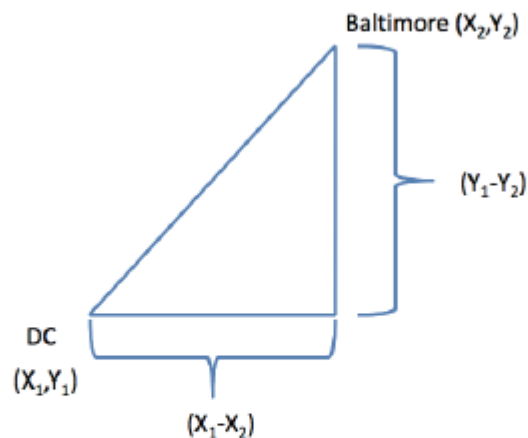
- Odległość:
 - Ciągła: euklidesowa metryka
 - Ciągła: stopień podobieństwa lub korelacji
 - Dyskretna: „Manhattan”
- Wybieramy taką definicję która stosuje się do naszych danych

Jak definiujemy odległość

15

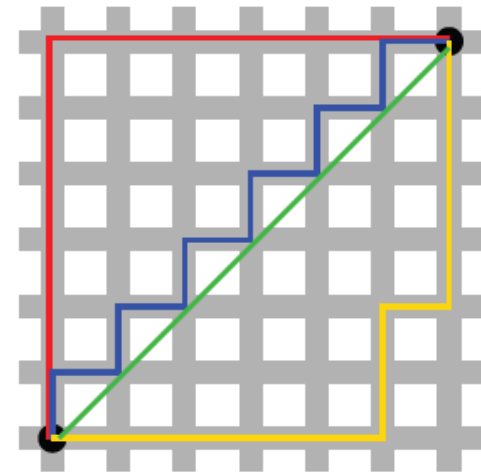
- Euklidesowa metryka vs Manhattan metryka

$$\sqrt{(X_1 - X_2)^2 + (Y_1 - Y_2)^2}$$



Naturalnie rozszerzalne do wielu wymiarów

$$\sqrt{(A_1 - A_2)^2 + (B_1 - B_2)^2 + \dots + (Z_1 - Z_2)^2}$$

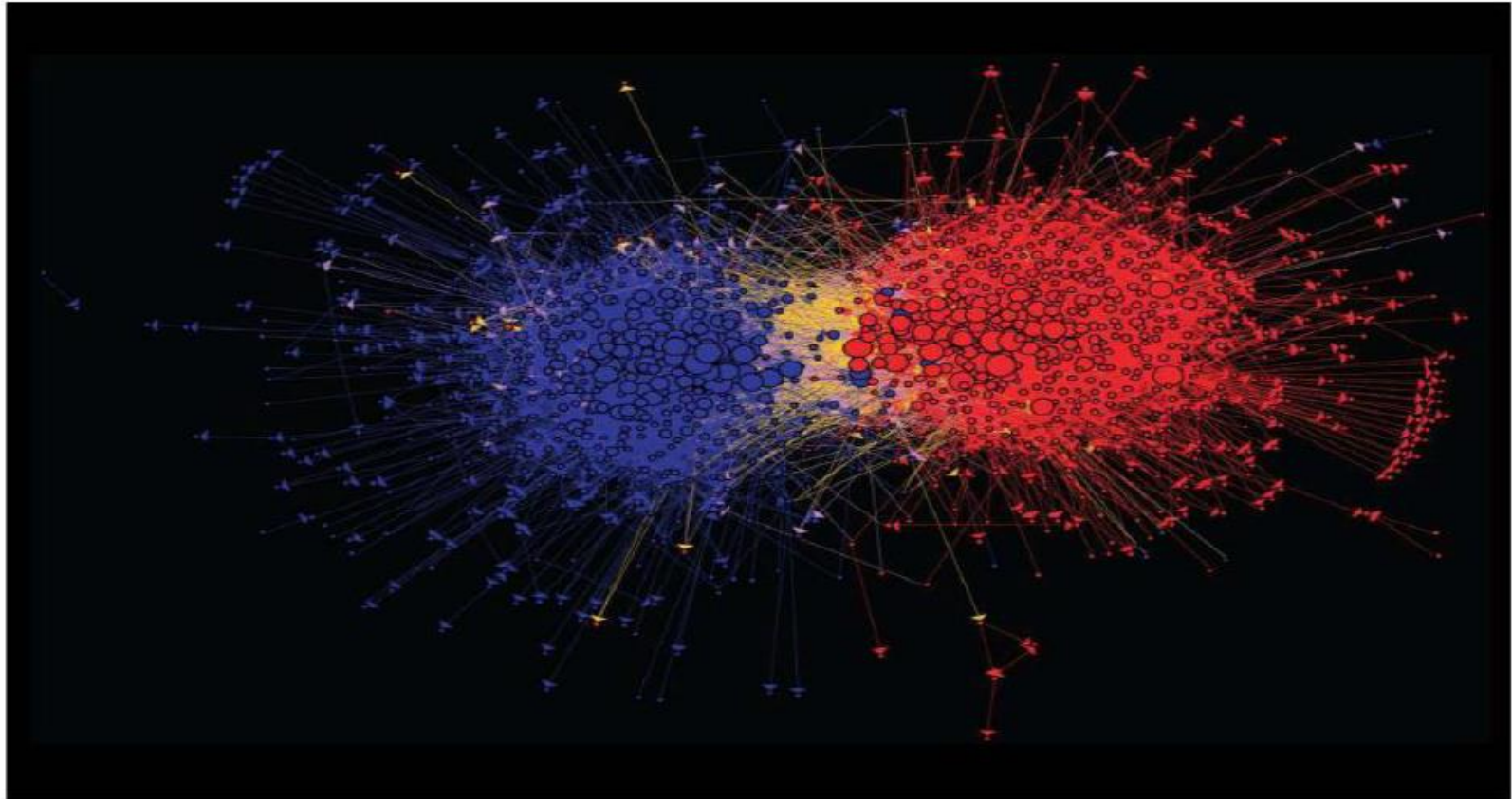


Musimy chodzić po ulicach

$$|A_1 - A_2| + |B_1 - B_2| + \dots + |Z_1 - Z_2|$$

Przykład: media network

16

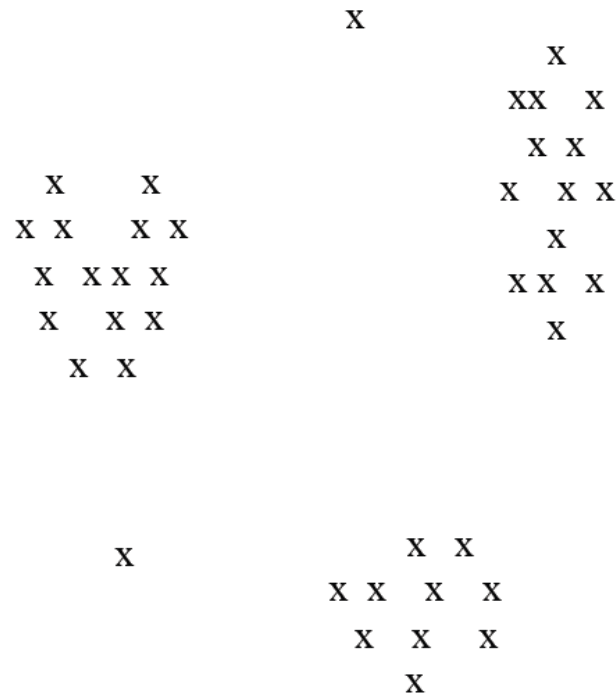


Connections between political blogs
Polarization of the network [Adamic-Glance, 2005]

Problem

17

- Mając daną chmurę punktów chcielibyśmy zrozumieć ich strukturę



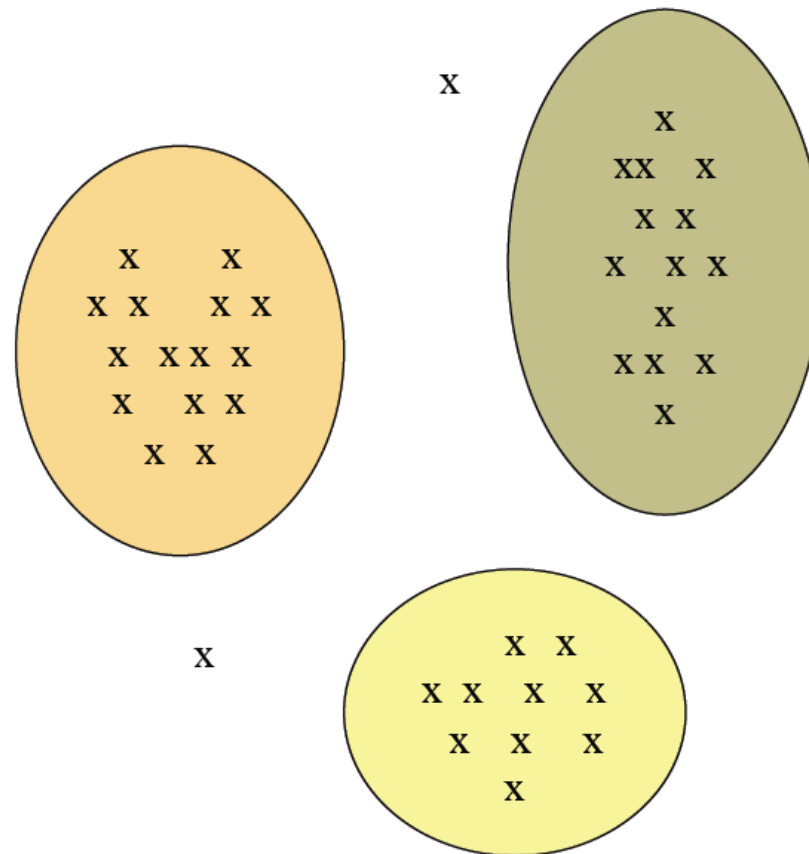
Bardziej formalnie

18

- Mając dany zbiór punktów pomiarowych oraz podaną miarę odległości pomiędzy punktami pogrupuj dane w klastry
 - Punkty należące do tego samego klastra powinny być „podobne” do siebie
 - Punkty należące do dwóch różnych klastrów powinny się istotnie od siebie różnić
- Zazwyczaj:
 - Punkty są w przestrzeni wielowymiarowej
 - Podobieństwo jest zdefiniowane jako miara odległości pomiędzy punktami
 - Euklidesowa, Cosinus kąta, etc...

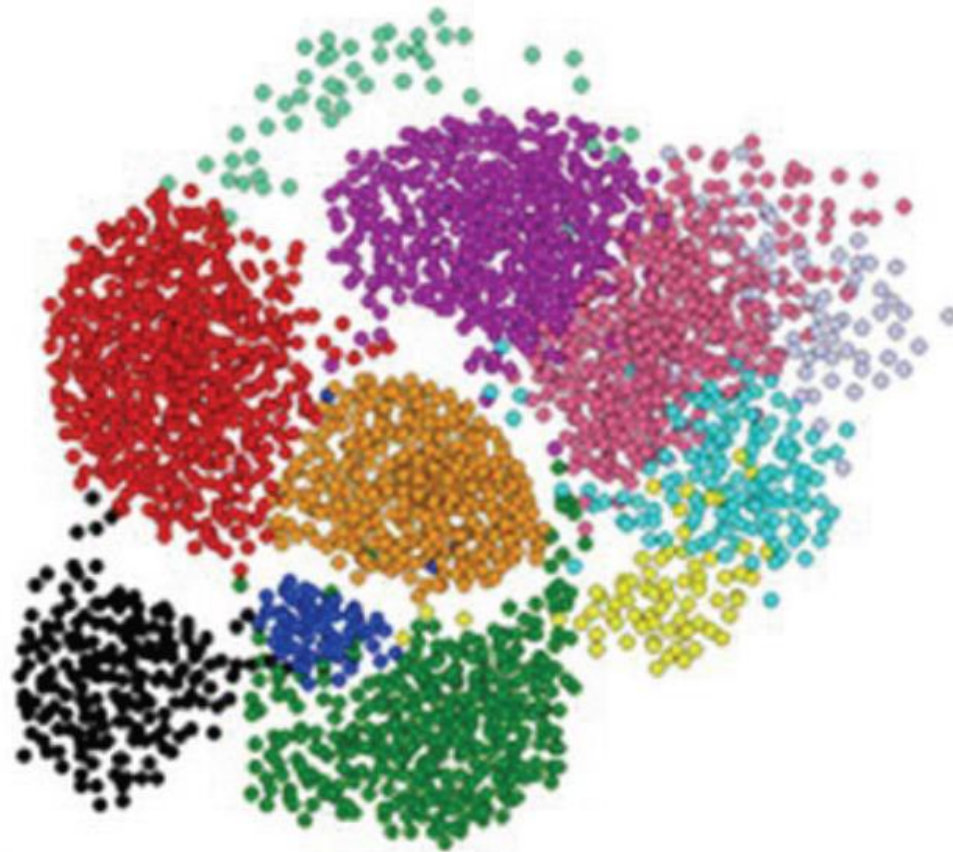
Przykład klastrów

19



Problem jest nietrywialny

20



Gdzie jest trudność

21

- Grupowanie w dwóch wymiarach jest na ogół łatwe
- Grupowanie małej ilości danych jest na ogół łatwe
- Wiele praktycznych zastosowań dotyczy problemów nie 2 ale 10 lub 10000 wymiarowych.
- W dużej ilości wymiarów trudność polega na fakcie że większość danych jest w „tej samej odległości”.

Przykład: grupowanie obiektów widocznych na niebie: SkyCat

22

- Katalog 2 bilionów „obektów” grupuje obiekty ze względu na częstości emisji promieniowania w 7 zakresach
- Powinien grupować obiekty tego samego typu, np. galaktyki, gwiazdy, kwazary, etc.

Przykład: grupowanie CD's

23

- Intuicyjnie: muzyka może być klasyfikowana w kilka kategorii i kupujący na ogół preferują pewne kategorie.
 - Na czym polegają te kategorie?
- A może grupować CD's ze względu na kategorię osób które je kupują?
 - Podobne CD's mają podobną grupę kupujących i odwrotnie

Przykład: grupowanie dokumentów

24

- Problem: pogrupuj razem dokumenty na ten sam temat.
- Dokumenty z podobnym zestawem słów prawdopodobnie są na ten sam temat.
- A może inaczej sformułować zadanie: „temat” to podobny zestaw słów który występuje w wielu dokumentach. Więc może należy grupować słowa w klastry i te klastry będą definiować tematy?

Miara odległości

25

- Dokument: zbiór słów
 - „Jaccard” odległość: podzbiór tych samych elementów
- Dokument: punkt w przestrzeni słów, (x_1, x_2, \dots, x_n) , gdzie $x_i = 1$ jeżeli dane słowo występuje.
 - „Euklidesowa” odległość
- Dokument: vector w przestrzeni słów (x_1, x_2, \dots, x_n) .
 - „Cosinus” odległość: iloczyn skalarny unormowanych wektorów

Metody grupowania

26

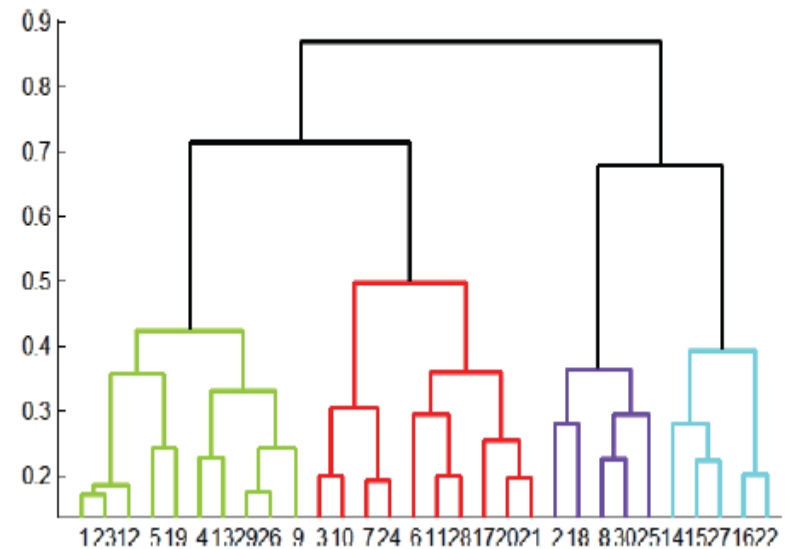
□ Hierarchiczne:

□ Bottom-up

- Początkowo każdy punkt jest klastrem
- Łączymy dwa klastry o najmniejszej odległości w jeden klaster
- Powtarzamy iteracyjnie

□ Top-down

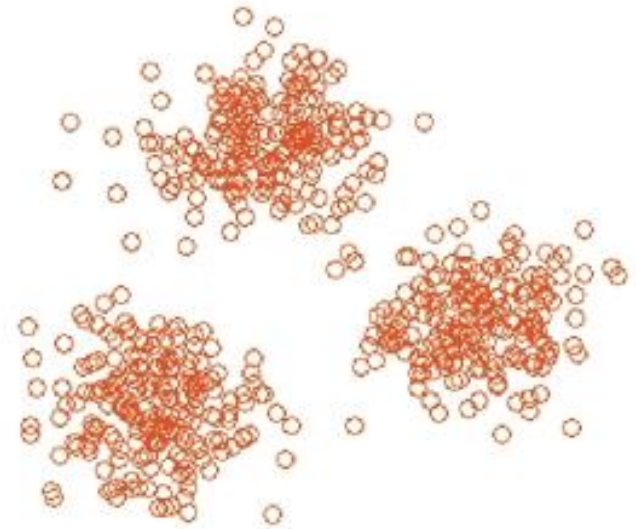
- Startujemy z jednego wielkiego klastra
- Dzielimy na dwa klastry jeżeli spełnione są pewne warunki
- Powtarzamy iteracyjnie aż osiągnięty inny warunek



Metody grupowania

27

- **K-means:**
 - Zakładamy na ile klastrów chcemy pogrupować dane.
 - Wybieramy początkowe centra klastrów.
 - Przeglądamy listę punktów, przypisujemy do najbliższego klastra.
 - Powtarzamy iteracyjnie po każdej iteracji poprawiając położenie centrów klastrów.



28

Klastrowanie hierarchiczne

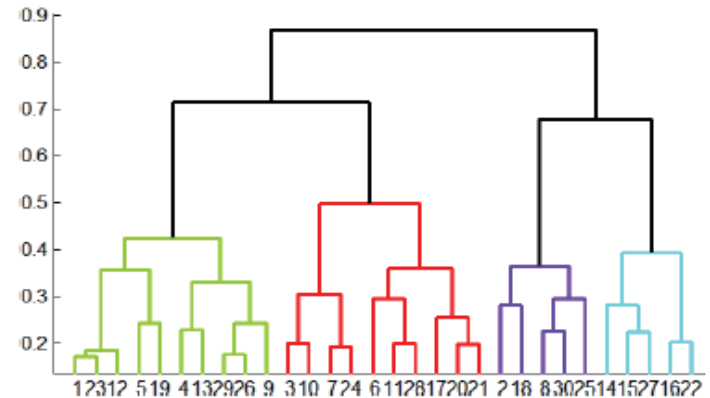
Bottom-up klastrowanie

Klastrowanie hierarchiczne

29

- Podstawowa operacja:
iteracyjnie powtarzają
sklejanie dwóch klastrów
w jeden.

- Podstawowe pytania:
 - ▣ Jak reprezentować klaster który zawiera więcej niż jeden punkt?
 - ▣ W jaki sposób zdefiniować „dwa najbliższe” klastry?
 - ▣ Kiedy zatrzymać procedurę grupującą?



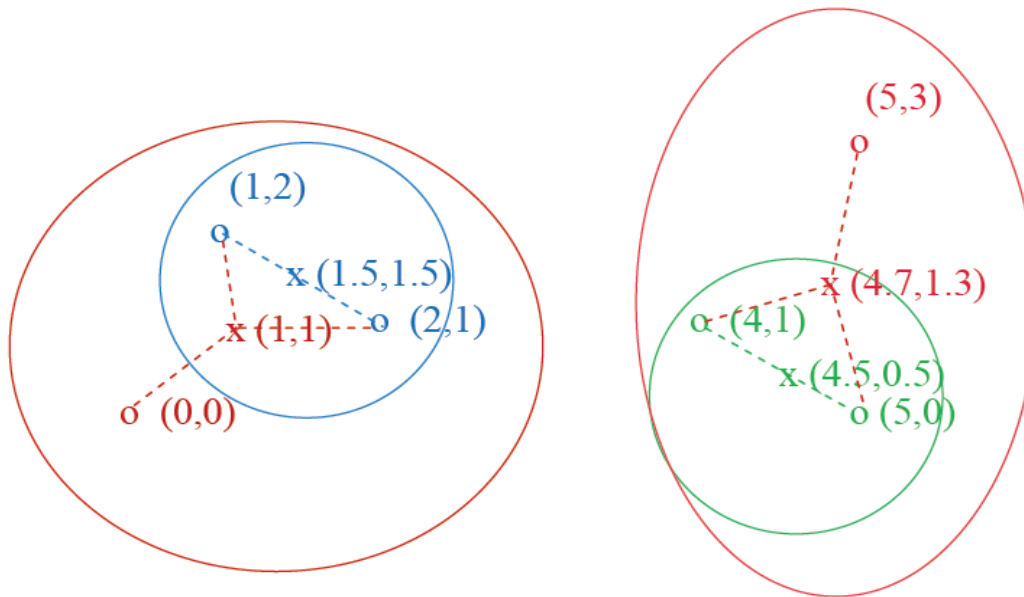
Metryka Euklidesowa

30

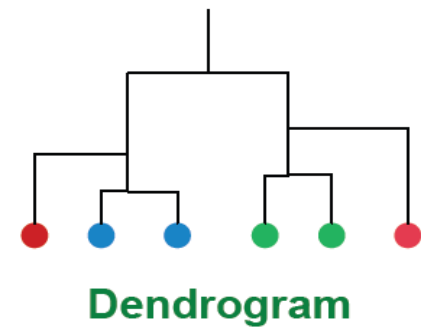
- Jak reprezentować klaster który zawiera więcej niż jeden punkt?
 - ▣ Reprezentujemy każdy klaster przez położenie jego środka ciężkości wg. wybranej metryki. Nazywamy go „centroid”, czyli centrum klastra nie jest jednym z punktów danych.
- W jaki sposób zdefiniować „dwa najbliższe” klastry?
 - ▣ Mierzmy odległość pomiędzy centrami klastrów, wybieramy najbliższe.

Przykład:

31



Data:
o ... data point
x ... centroid



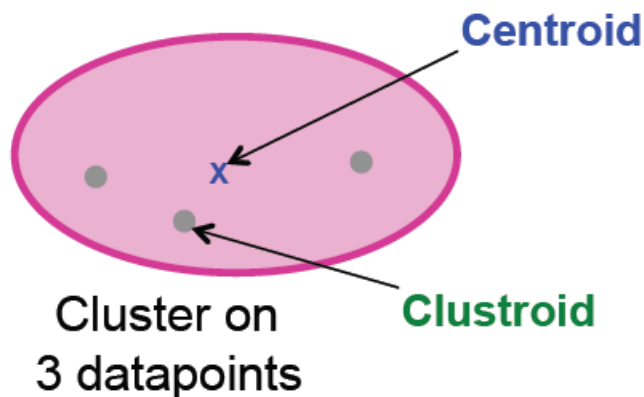
Reprezentacja klastra

32

- Jedyne położenia o których możemy mówić to punkty danych. Nie istnieje pojęcie „średniej”.
 - ▣ Klaster reprezentowany jest przez jego punkt będący najbliżej wszystkich innych punktów. Najbliżej wg. zadanej metryki. Nazywamy go „klastroid”.

Reprezentacja klastra

33

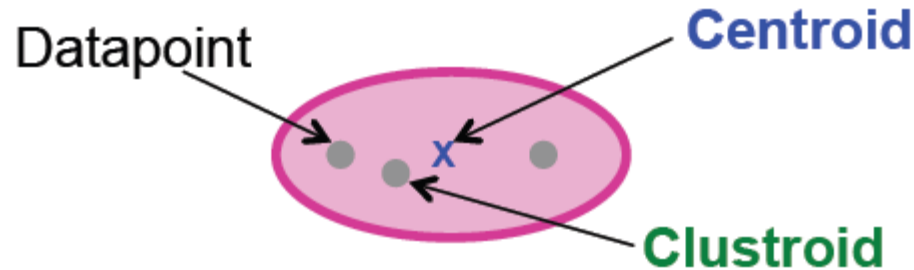


Centroid: średnie położenie wszystkich punktów danych w tym klastrze. To jest „sztuczny” punkt. Jako taki nie istnieje w danych.

Klustroid: istniejący punkt danych który jest najbliższy do wszystkich innych w tym klastrze.

Reprezentacja klastra

34



- Klastroid: punkt najbliższy do wszystkich innych.
- Co to znaczy „najbliższy”?
 - ▣ Najmniejsza maksymalna odległość od wszystkich innych?
 - ▣ Najmniejsza suma odległości od wszystkich innych?
 - ▣ Najmniejsza suma kwadratów odległości od wszystkich innych?

Kiedy zakończyć klastrowanie

35

- Jeżeli oczekujesz że dane powinny się grupować w k –klastrow zakończ jeżeli pogrupujesz w k -klastry
- Zatrzymaj jeżeli kolejne klastrowanie doprowadza do klastrow o gorszej jakości:
 - ▣ np. średnica (maksymalna odległość) większa niż wymagana granica
 - ▣ Np. promień klastra większy niż wymagana granica
 - ▣ Np. potęga promienia klastra większa niż wymagana granica.

Implementacja

36

- Naiwna implementacja: w każdym kroku obliczaj odległość każdej pary klastrów a potem sklejaaj: złożoność $O(N^3)$ dla każdej iteracji
- Optymalna implementacja z wykorzystaniem kolejki priorytetowej: $O(N^2 \log N)$
 - ▣ Złożoność zbyt duża dla dużych zbiorów danych lub danych nie mieszczących się w pamięci.

37

Klastrowanie k-means

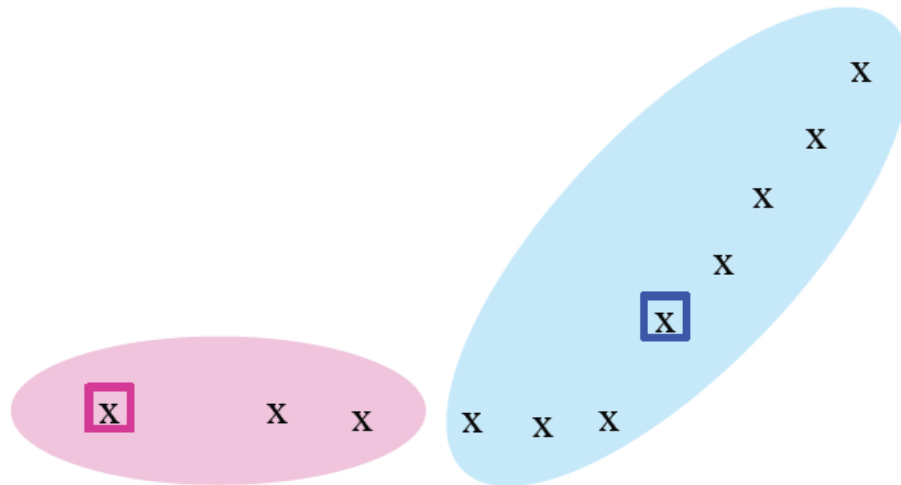
K-means algorytm

38

- Zakłada metrykę euklidesową
- W pierwszym kroku wybieramy liczbę k-klastrów
 - Wybieramy k- punktów danych będących reprezentantami tych klastrów.
 - Na razie założmy że wybieramy je losowo.
- Przeglądamy listę punktów danych i przyporządkowujemy do klastrów
- Korygujemy położenie centrów klastrów wyliczając ich pozycję na podstawie punktów przypisanych do klastrów
- Powtarzamy operację przeglądania listy punktów, przypisujemy do najbliższych klastrów, punkty mogą migrować pomiędzy klastrami.
- Powtarzamy dopóki punkty nie przestają migrować

Przykład: $k = 2$

39

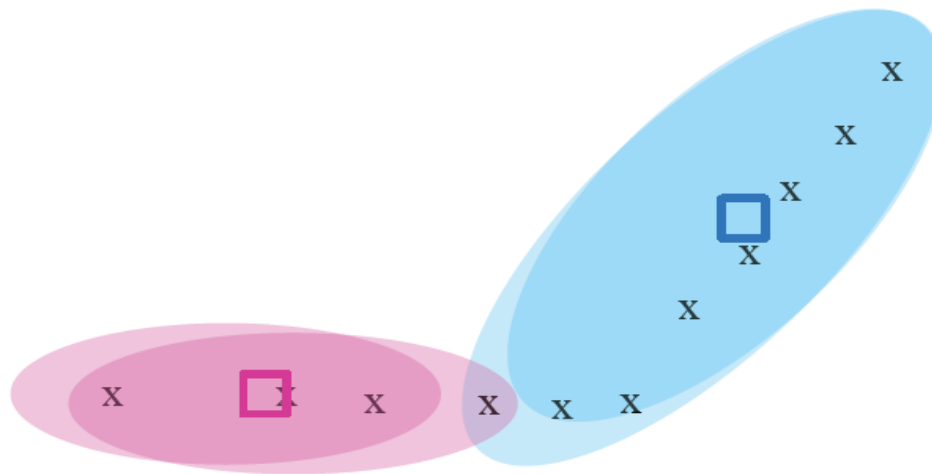


x ... data point
□ ... centroid

Round 1

Przykład: przyporządkuj punkty

40

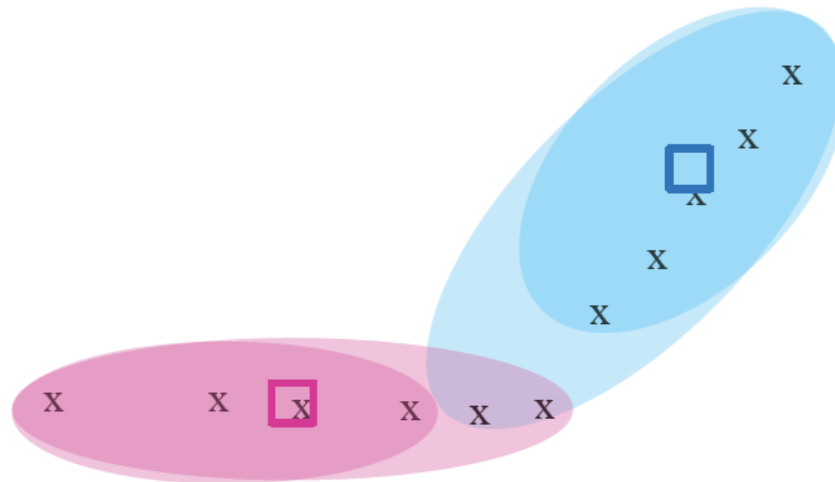


x ... data point
□ ... centroid

Round 2

Przykład: popraw centra

41



x ... data point

□ ... centroid

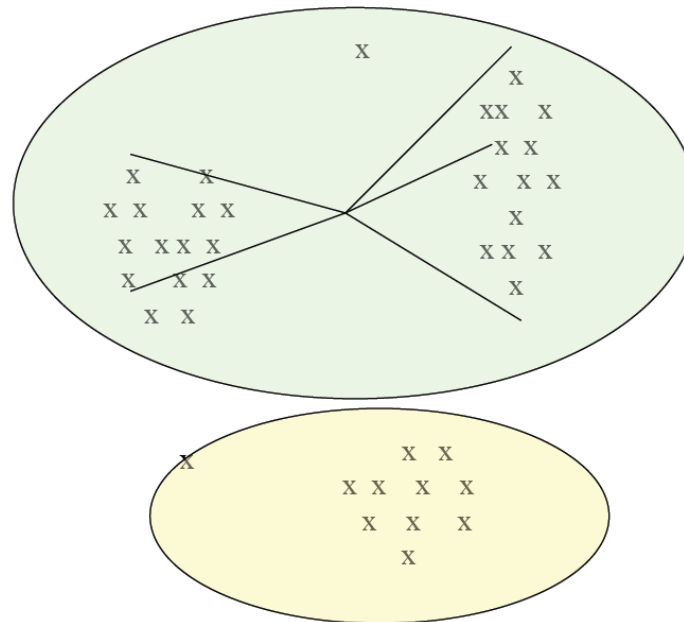
Round 3

W jaki sposób wybrać ilość k?

42

- Spróbuj kilka różnych wartości, badaj jaka jest zmiana średniej odległości jak zwiększasz k

Too few;
many long
distances
to centroid.

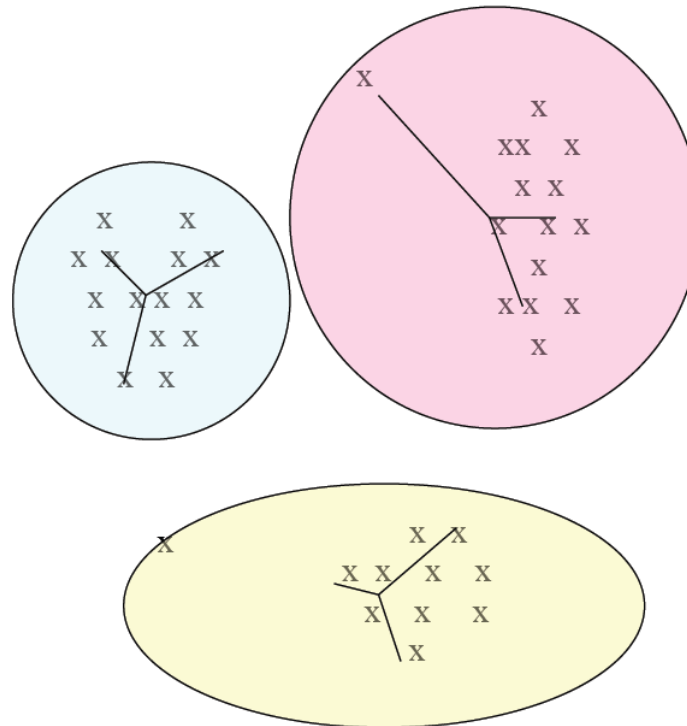


W jaki sposób wybrać ilość k ?

43

- Spróbuj kilka różnych wartości, badaj jaka jest zmiana średniej odległości jak zwiększasz k

Just right;
distances
rather short.

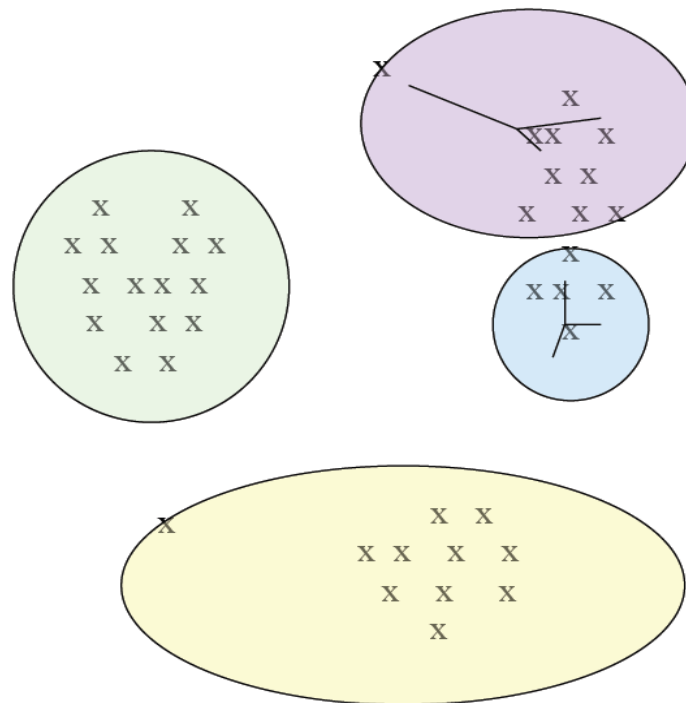


W jaki sposób wybrać ilość k ?

44

- Spróbuj kilka różnych wartości, badaj jaka jest zmiana średniej odległości jak zwiększasz k

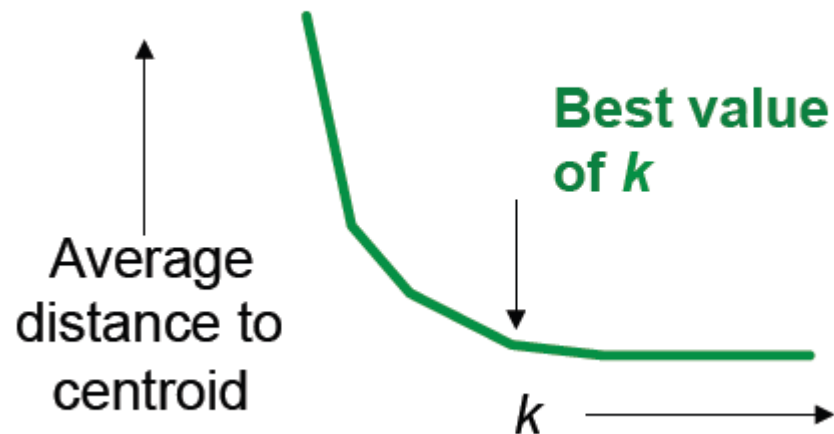
Too many;
little improvement
in average
distance.



W jaki sposób wybrać ilość k ?

45

- Spróbuj kilka różnych wartości, badaj jaka jest zmiana średniej odległości jak zwiększasz k



W jaki sposób wybieramy startowe punkty?

46

- Na podstawie podzbioru danych:
 - ▣ Wybierz podzbiór danych, przeprowadź klastrowanie hierarchiczne aby otrzymać k-klastrów.
 - ▣ Wybierz dla każdego punkt najbliższe do środka klastra
 - ▣ Użyj tych punktów jako punktów startowych
- Najbardziej odległe punkty:
 - ▣ Wybierz pierwszy punkt losowo
 - ▣ Jako następny wybierz najbardziej od niego odległy
 - ▣ Powtarzaj zawsze wybierając najbardziej odległy od już wybranych punktów, aż wybierzesz k-punktów

Złożoność obliczeniowa

47

- Za każdym razem przeglądamy pełną listę punktów aby przypisać punkt do jednego z k -centrów
- Każda iteracja dla N punktów i k -centrów to $O(N k)$
- Liczba wymaganych iteracji może być bardzo duża.

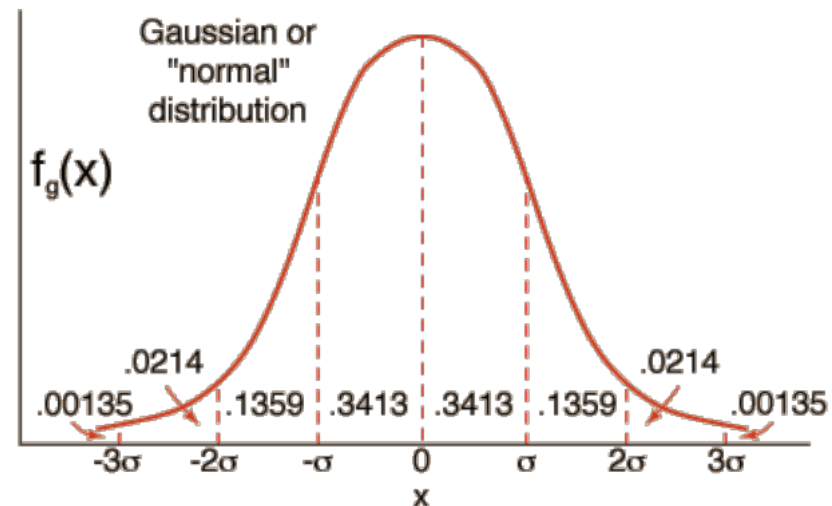
Czy moglibyśmy ten algorytm zrealizować przeglądając dane tylko raz?

Algorytm BFR (Bradley- Fayyard-Reina)

Algorytm BFR

49

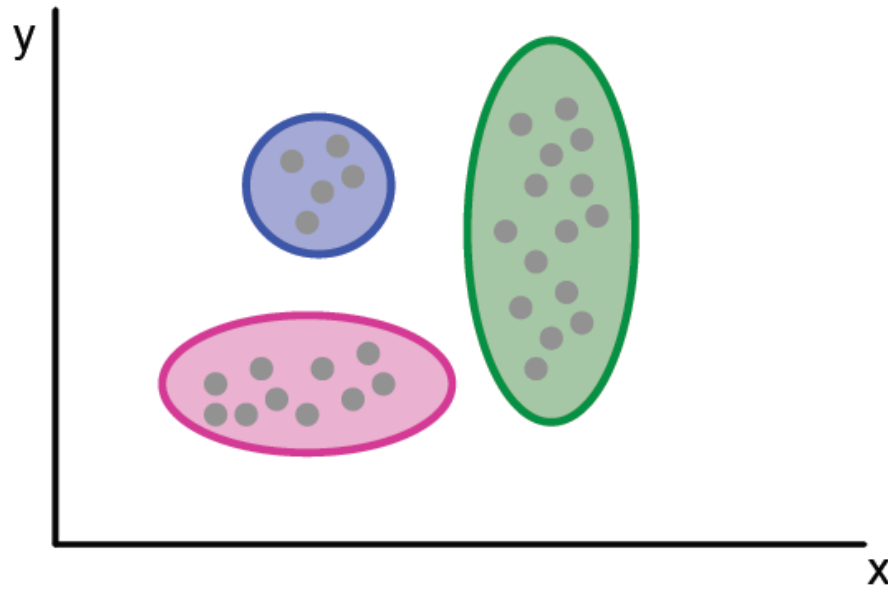
- To jest wersja algorytmu k-means dla bardzo dużych zbiorów danych.
- Zakłada euklidesowa metrykę.
- Zakłada że dane w klastrze mają rozkład normalny względem centrum klastra i każdego wymiaru



BFR klastry

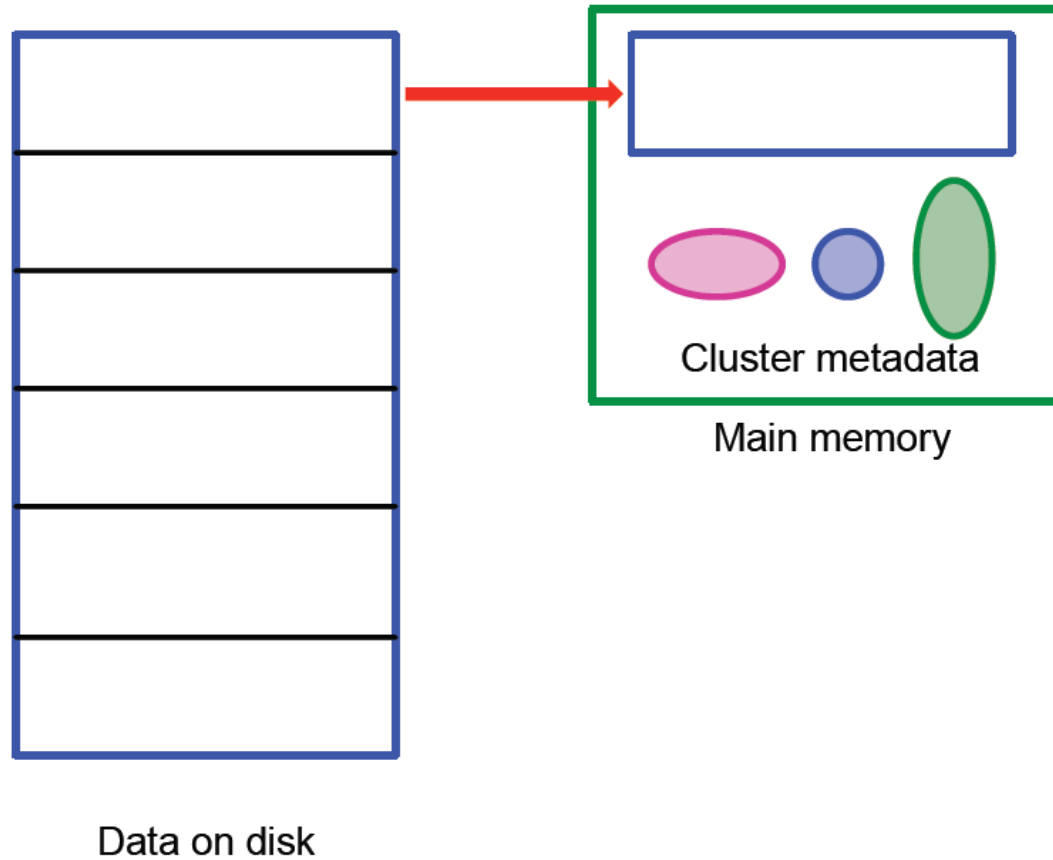
50

- Z założenia o normalności rozkładu wynika że klastry wyglądają jak elipsy o osiach równoległych do kierunków wymiarów.



BFR algorytm

51



BFR algorytm

52

- Punkty danych przeglądane są tylko raz, każdorazowo w pamięci znajduje się tylko podzbiór danych
- Informacja dotycząca rozkładu większości z punktów z każdej partii przechowywana w postaci kilku sumarycznych wielkości statystycznych.
- Na początku, z pierwszej partii punktów wybieramy k -centrów wg. jednej z poznanych wcześniej metod.

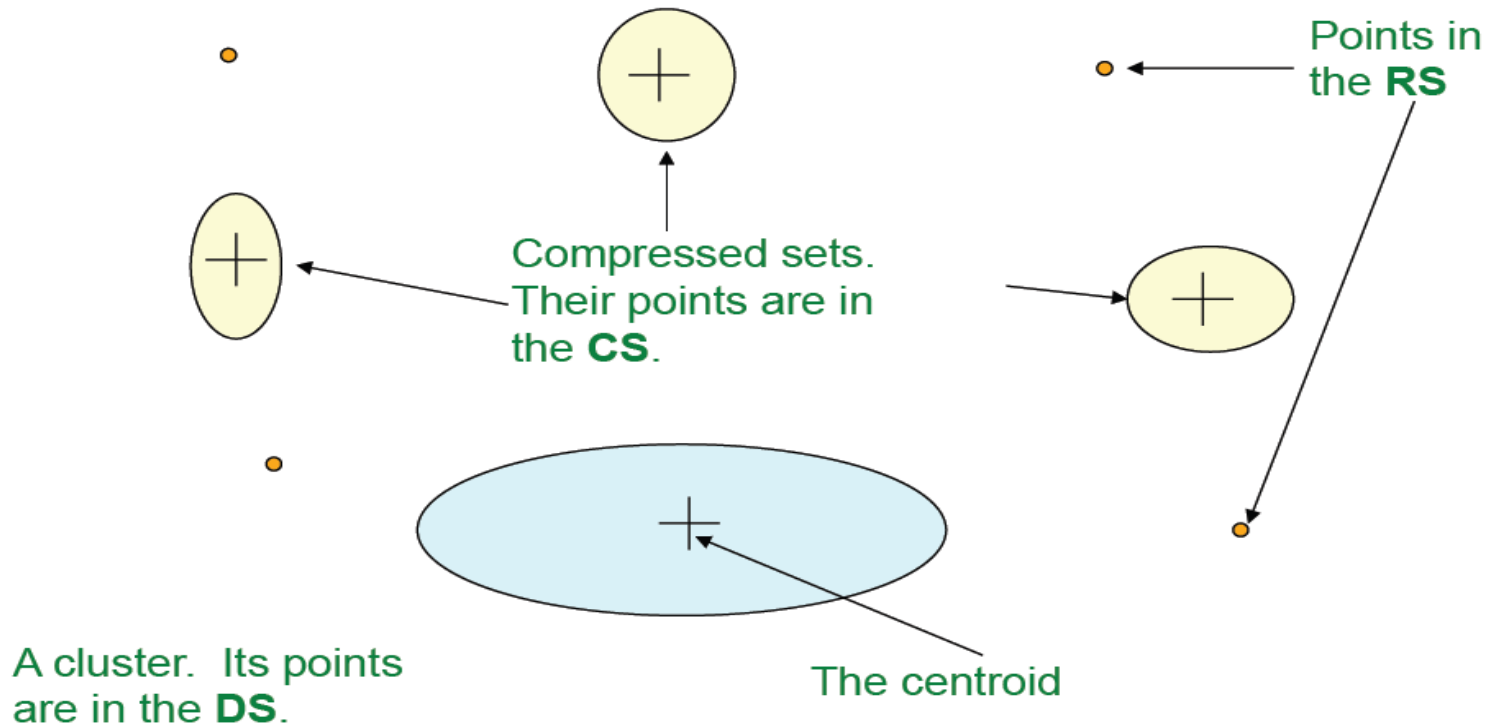
Trzy klasy punktów

53

- Odrzucone punkty (discarded set DS): punkty będące blisko centrów klastrów tak że wystarczy zapisanie informacji sumarycznej
- Punkty w mini-klastrach (compression set CS): punkty które są blisko siebie ale nie wystarczająco blisko żadnego z centrów, zapisujemy tylko informację sumaryczną
- Punkty izolowane (retained set RS): przechowujemy izolowane punkty do następnego etapu.

Trzy klasy punktów

54



Discard set (DS): Close enough to a centroid to be summarized
Compression set (CS): Summarized, but not assigned to a cluster
Retained set (RS): Isolated points

Sumaryczna informacja

55

- Dla każdego klastra (DS) i każdego mini-klustra (CS) przechowywana jest informacja sumaryczna:
 - Liczba punktów N
 - Wektor d -wymiarowy SUM: każda współrzędna to suma odległości punktów klastra od centrum w danym wymiarze
 - Wektor d -wymiarowy SUMSQ: każda współrzędna to suma kwadratów odległości punktów klastra od centrum w danym wymiarze

Sumaryczna informacja

56

- $2d + 1$ wartości reprezentuje każdy klaster i mini-klaster
- Średnia w każdym wymiarze (centroid) może być przeliczona jako SUM_i/N
- Wariancja w każdym wymiarze może być przeliczona jako $(SUMSQ_i/N) - (SUM_i/N)^2$

Procesowanie podzbioru danych

57

- Sprawdź czy punkt jest „wystarczająco blisko” do DS lub CS klastra, wybierz najbliższy, dodaj do sumarycznej informacji a następnie usuń punkt z pamięci.
- Jeżeli punkt nie był wystarczająco blisko sprawdź czy możesz utworzyć nowy CS klaster przeglądając RS punkty. Jeżeli nie, zapamiętaj ten punkt jako nowy RS punkt.
- Po analizie ostatniego podzbioru posklejaj wszystkie CS i RS do najbliższych DS. Ostatecznie utworzone zostanie tylko k klastrów.

Mahalanobis odległość

58

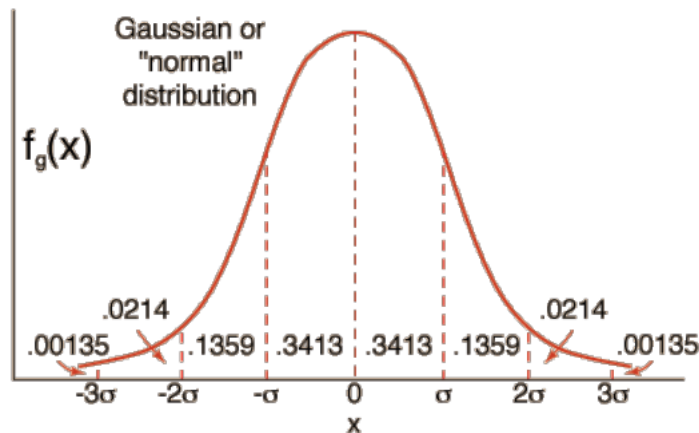
- Co to znaczy że punkt jest „wystarczająco blisko”?
 - ▣ Klaster C ma centroid w (c_1, c_2, \dots, c_d) i odchylenie standardowe $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_d)$
 - ▣ Rozważany punkt $P = (x_1, x_2, \dots, x_d)$
 - ▣ Znormalizowana odległość: $y_i = (x_i - c_i) / \sigma_i$
- MD punktu P od klastra C :

$$\sqrt{\sum_{i=1}^d y_i^2}$$

Mahalanobis warunek

59

- Przypuśćmy że punkt P jest w odległości jednego odchylenia standardowego od centrum w każdym wymiarze.
- Każdy $y_i = 1$ i wówczas $MD = \text{sqrt}(d)$



68% of points have $MD \leq \sqrt{d}$

95% of points have $MD \leq 2\sqrt{d}$

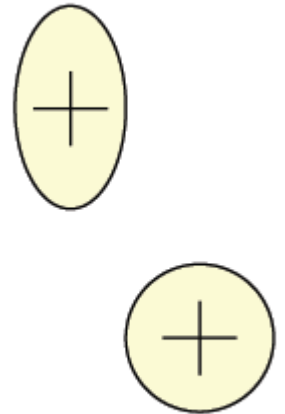
99% of points have $MD \leq 3\sqrt{d}$

Akceptuj punkt P do klastra C jeżeli np. wartość $MD < 3 \text{sqrt}(d)$

Kiedy sklejać dwa CS

60

- Policz wariancję dla sklejonych klastrów, sklej jeżeli wariancja poniżej wartości granicznej.
- Możliwe inne warunki:
 - ▣ Gęstość klastra
 - ▣ Odległości mogą mieć inną wagę dla każdej współrzędnej
 - ▣ Itd..



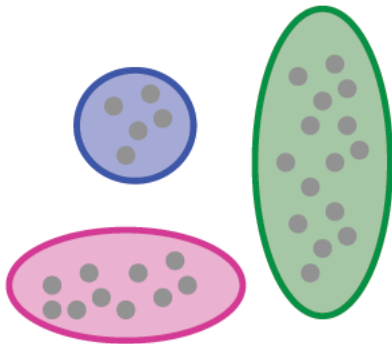
61

Algorytm CURE

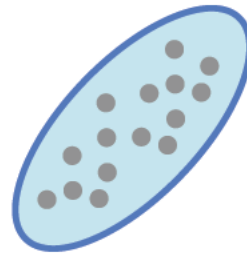
Ograniczenia algorytmu BFR

62

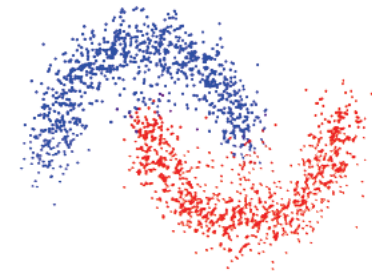
- Silne założenia:
 - ▣ Normalny rozkład punktów w każdym wymiarze
 - ▣ Osie wzdłuż osi współrzędnych



OK



Not OK

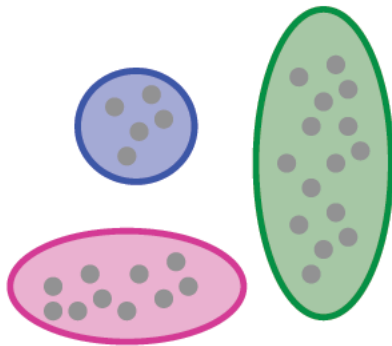


Not OK

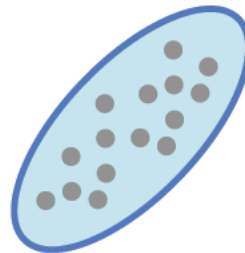
Algorytm CURE

63

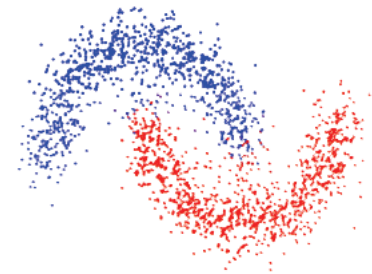
- CURE (Clustering Using REpresentatives):
 - ▣ Zakłada metrykę Euklidesową
 - ▣ Dopuszcza klastry różnych kształtów
 - ▣ Używa podzbiór punktów do reprezentowania klastra



OK



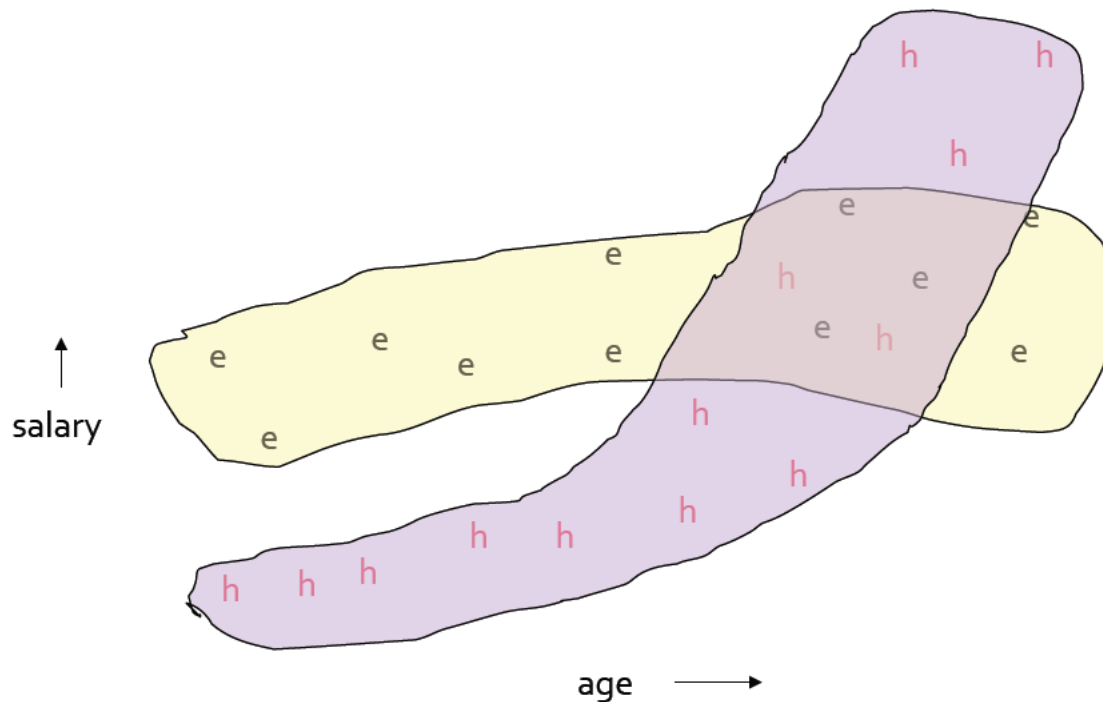
OK



OK

Przykład: płace w Stanford

64



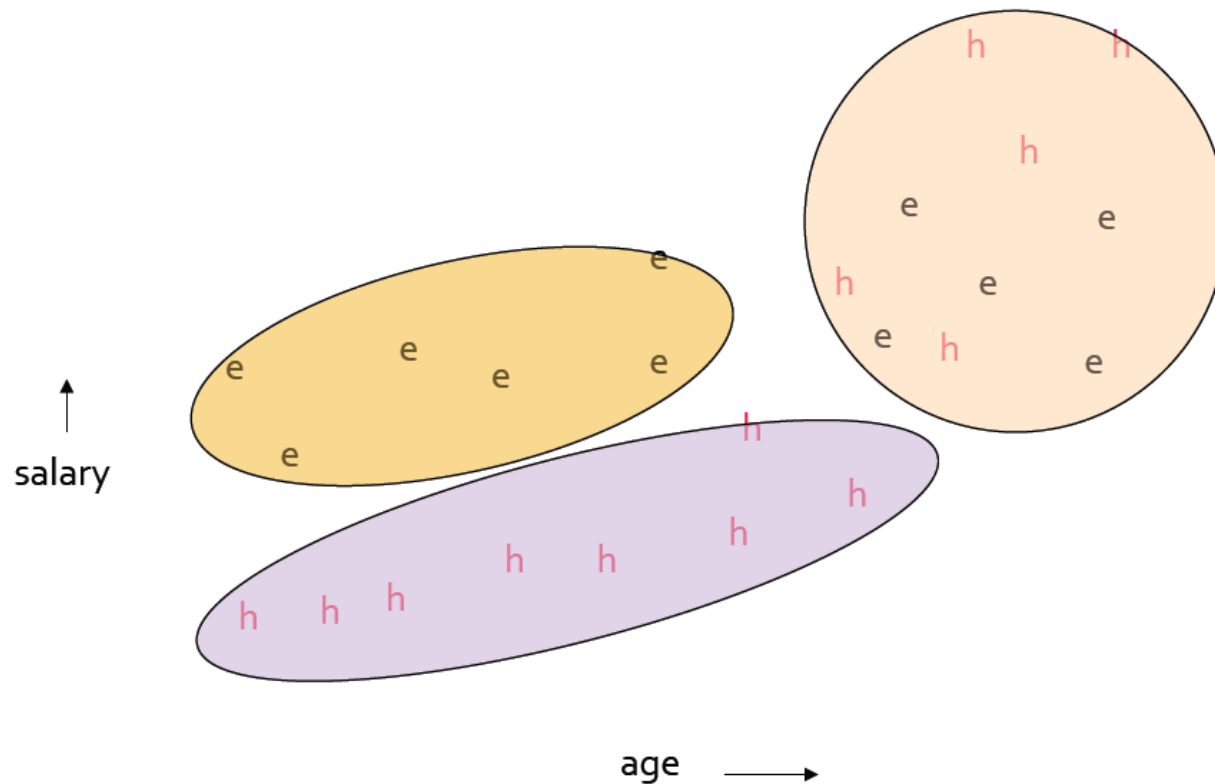
Algorytm CURE

65

- Pierwsze przejrzanie danych
 - Wybierz podzbiór danych który mieści się w pamięci
 - Przeprowadź klastrowanie hierarchiczne tego podzbioru danych.
 - Wybierz k -punkty reprezentujące klaster (np. $k=4$), jak najbardziej od siebie odległe
 - Utwórz sztuczne punkty przez przesunięcie wybranych k punktów np. o 20% w stronę centrum klastra, to będą reprezentanci klastra

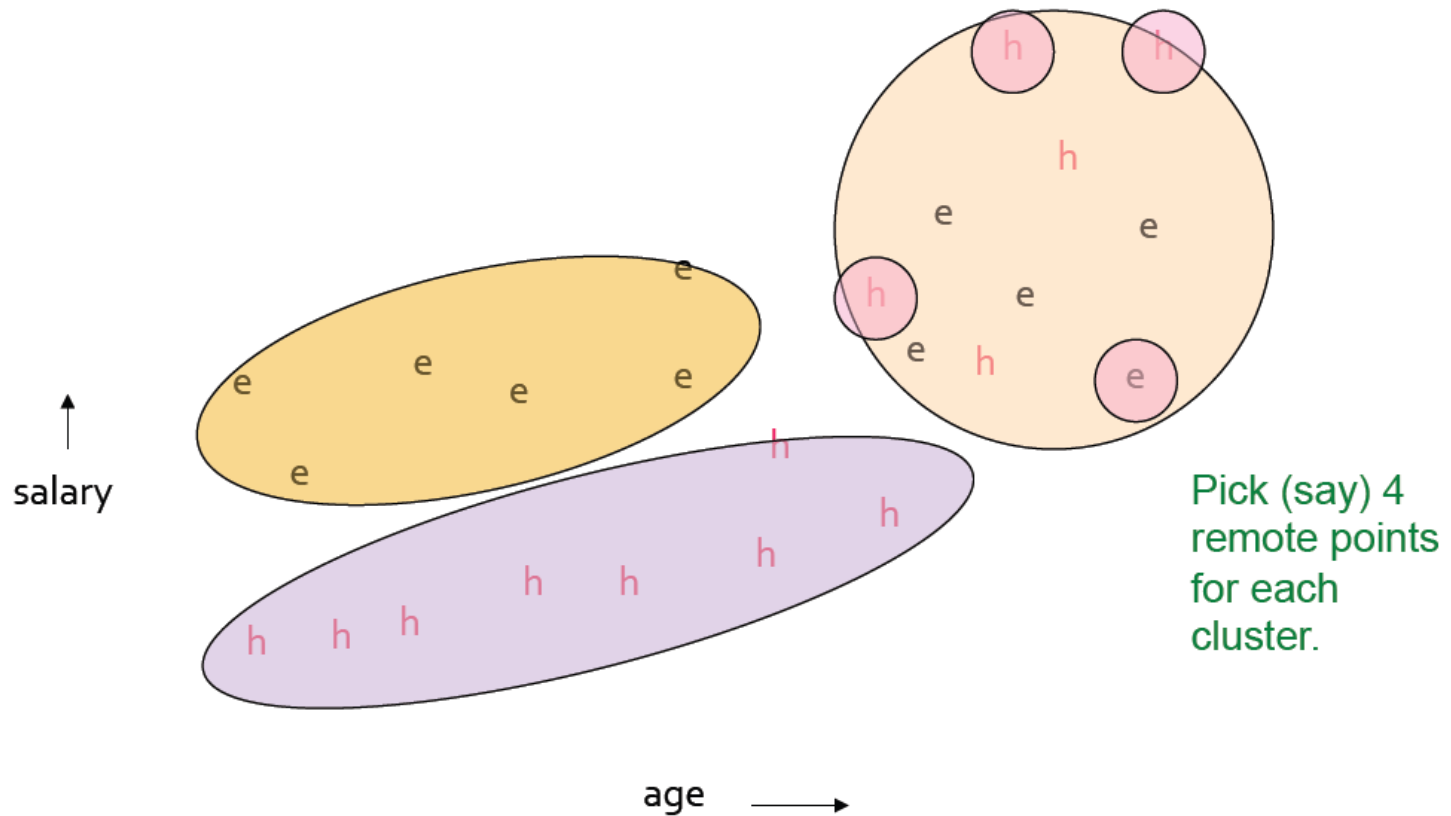
Przykład: początkowe klastry

66



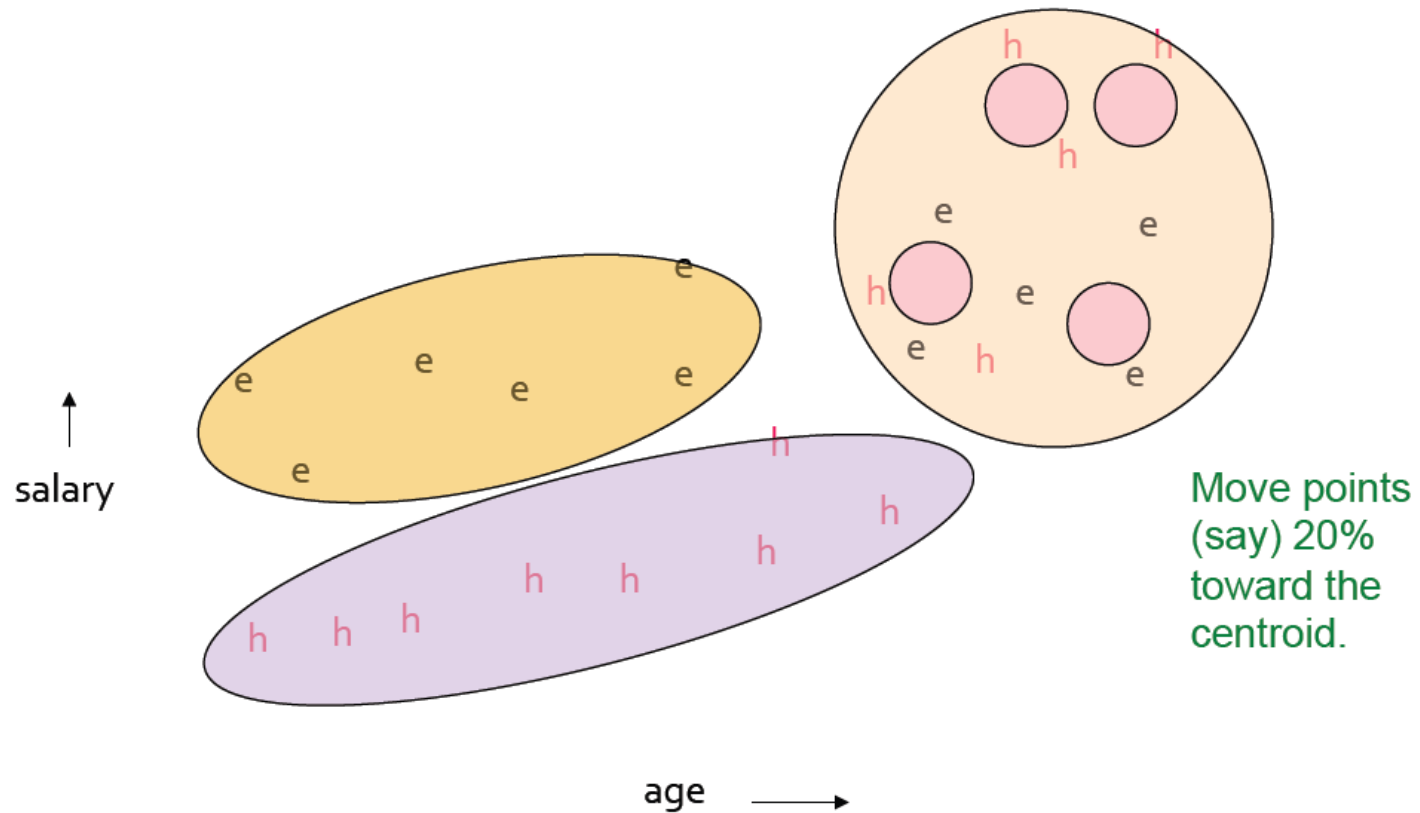
Przykład: wybór reprezentatywnych punktów

67



Przykład: wybór reprezentatywnych punktów

68



Algorytm CURE

69

- Drugie przejrzanie danych
 - ▣ Teraz przejrzyj całość danych
 - ▣ Przypisz punkty w najbliższych klastrze: do określenia „najbliższy” użyj dla każdego klastra reprezentatywnych punktów

I to już jest koniec procesowania algorytmu!