3. Clustering

Inhalt dieses Kapitels

3.1 Einleitung

Ziel des Clustering, Distanzfunktionen, Anwendungen,
Typen von Algorithmen

3.2 Partitionierende Verfahren

k-means, k-medoid, Expectation Maximization, Initialisierung und
Parameterwahl, Probleme optimierender Verfahren, dichtebasierte Verfahren

3.3 Hierarchische Verfahren

Single-Link und Varianten, dichtebasiertes hierarchisches Clustering

3. Clustering

Inhalt dieses Kapitels

3.4 Datenbanktechniken zur Leistungssteigerung

Indexunterstütztes Sampling, Indexunterstützte Anfragebearbeitung, Datenkompression mit BIRCH

3.5 Besondere Anforderungen und Verfahren

k-modes, verallgemeinertes dichtebasiertes Clustering, inkrementelles Clustering, Subspace Clustering

3.1 Einleitung

Ziel des Clustering

- 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

Cluster unterschiedlicher Größe, Form und Dichte

hierarchische Cluster

3.1 Distanzfunktionen

Grundbegriffe

Formalisierung der Ähnlichkeit

- manchmal: Ähnlichkeitsfunktion
- meist: Distanzfunktion $dist(o_1,o_2)$ für Paare von Objekten o_1 und o_2
- kleine Distanz ≈ ähnliche Objekte
- große Distanz ≈ unähnliche Objekte

Anforderungen an Distanzfunktionen

(1) $dist(o_1, o_2) = d \in R^{\geq 0}$

(2) $dist(o_1, o_2) = 0$ genau dann wenn $o_1 = o_2$

(3) $dist(o_1, o_2) = dist(o_2, o_1)$ (Symmetrie)

(4) zusätzlich für Metriken (Dreiecksungleichung)

$$dist(o_1, o_3) \leq dist(o_1, o_2) + dist(o_2, o_3).$$

3.1 Distanzfunktionen

Distanzfunktionen für numerische Attribute

Objekte $x = (x_1, ..., x_d)$ und $y = (y_1, ..., y_d)$

Allgemeine L_p-Metrik (Minkowski-Distanz) $dist(x,y) = \sqrt[p]{\sum_{i=1}^{d} (x_i - y_i)^p}$

Euklidische Distanz ($p = 2$) $dist(x,y) = \sqrt{\sum_{i=1}^{d} (x_i - y_i)^2}$

Manhattan-Distanz ($p = 1$) $dist(x,y) = \sum_{i=1}^{d} |x_i - y_i|$

Maximums-Metrik ($p = \infty$) $dist(x,y) = \max\{|x_i - y_i| | 1 \le i \le d\}$

eine populäre *Ähnlichkeitsfunktion*: Korrelationskoeffizient $\in$ [-1,+1]

3.1 Distanzfunktionen

Andere Distanzfunktionen

- für kategorische Attribute $dist(x,y) = \sum_{i=1}^{d} \delta(x_i, y_i)$ *mit* $\delta(x_i, y_i) = \begin{cases} 0 \text{ falls } x_i = y_i \\ 1 \text{ sonst} \end{cases}$

- für Textdokumente D (Vektoren der Häufigkeit der Terme aus T)

$$d = \{g(f(t_i, D) | t_i \in T\}$$

$f(t_i, D)$: Häufigkeit des Terms t_i in Dokument D

g: monotone *Dämpfungsfunktion*

$$dist(x,y) = 1 - \frac{< x, y >}{|x| \cdot |y|} \quad mit <.,.> Skalarprodukt \text{ und } |.| \text{ Laenge des Vektors}$$

Adäquatheit der Distanzfunktion ist wichtig für Qualität des Clustering

3.1 Typische Anwendungen

Überblick

- Kundensegmentierung

  Clustering der Kundentransaktionen

- Bestimmung von Benutzergruppen auf dem Web

  Clustering der Web-Logs

- Strukturierung von großen Mengen von Textdokumenten

  Hierarchisches Clustering der Textdokumente

- Erstellung von thematischen Karten aus Satellitenbildern

  Clustering der aus den Rasterbildern gewonnenen Featurevektoren

3.1 Typische Anwendungen

Bestimmung von Benutzergruppen auf dem Web

Einträge eines Web-Logs

```
romblon.informatik.uni-muenchen.de lopa - [04/Mar/1997:01:44:50 +0100] "GET /~lopa/ HTTP/1.0" 200 1364
romblon.informatik.uni-muenchen.de lopa - [04/Mar/1997:01:45:11 +0100] "GET /~lopa/x/ HTTP/1.0" 200 712
fixer.sega.co.jp unknown - [04/Mar/1997:01:58:49 +0100] "GET /dbs/porada.html HTTP/1.0" 200 1229
scooter.pa-x.dec.com unknown - [04/Mar/1997:02:08:23 +0100] "GET /dbs/kriegel_e.html HTTP/1.0" 200 1241
```

Generierung von Sessions

Session::= <IP-Adresse, Benutzer-Id, [URL_1, . . ., URL_k]>

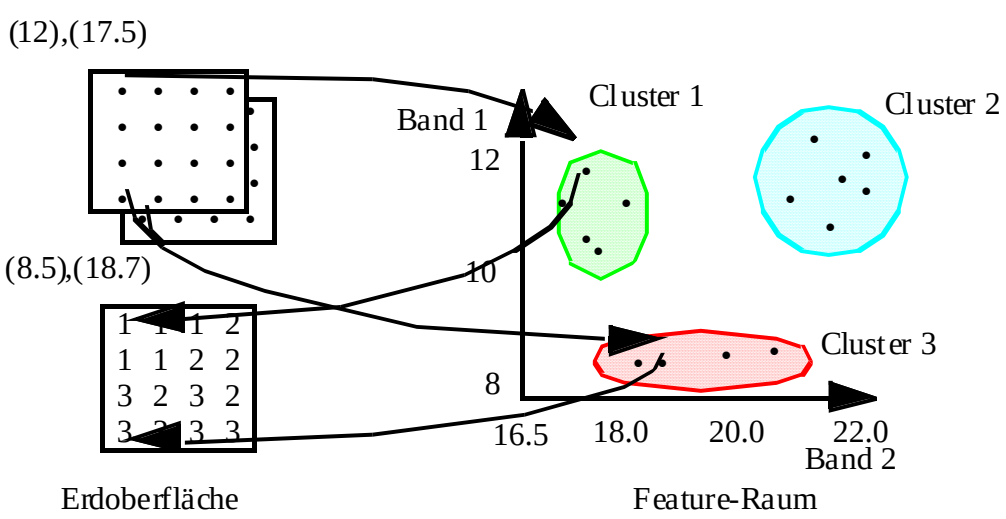
⇒ welche Einträge bilden eine Session?

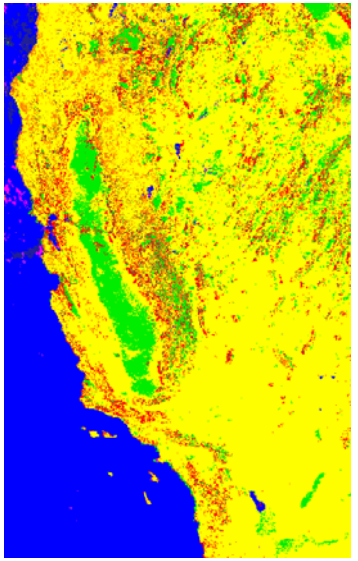
Distanzfunktion für Sessions

$$d(x,y) = \frac{|x \cup y| - |x \cap y|}{|x \cup y|}$$

3.1 Typische Anwendungen

Erstellung von thematischen Karten aus Satellitenbildern





Grundlage

verschiedene Oberflächenbeschaffenheiten der Erde besitzen jeweils ein charakteristisches Reflexions- und Emissionsverhalten

3.1 Typen von Clustering-Verfahren

Partitionierende Verfahren

- Parameter: Anzahl *k* der Cluster, Distanzfunktion
- sucht ein „flaches“ Clustering in *k* Cluster mit minimalen Kosten

Hierarchische Verfahren

- Parameter: Distanzfunktion für Punkte und für Cluster
- bestimmt Hierarchie von Clustern, mischt jeweils die ähnlichsten Cluster

Dichtebasierte Verfahren

- Parameter: minimale Dichte in einem Cluster, Distanzfunktion
- erweitert Punkte um ihre Nachbarn solange Dichte groß genug

Andere Clustering-Verfahren

- Fuzzy Clustering
- Graph-theoretische Verfahren
- neuronale Netze

3.2 Partitionierende Verfahren

Grundlagen

Ziel

eine Partitionierung in *k* Cluster mit minimalen Kosten

Lokal optimierendes Verfahren

- wähle *k* initiale Cluster-Repräsentanten
- optimiere diese Repräsentanten iterativ
- ordne jedes Objekt seinem ähnlichsten Repräsentanten zu

Typen von Cluster-Repräsentanten

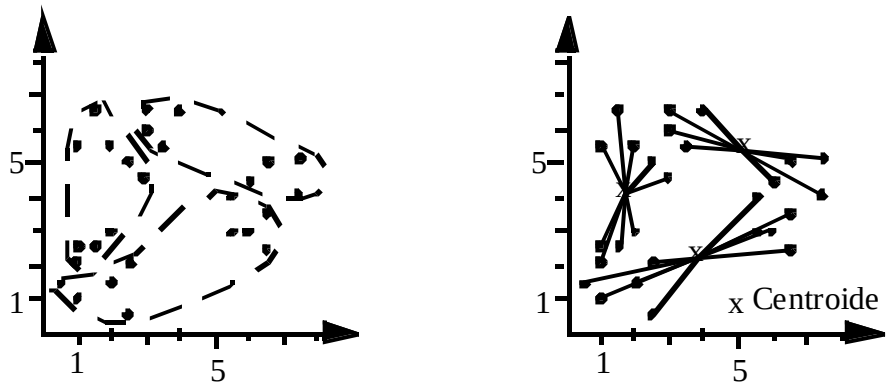
- Mittelwert des Clusters (*Konstruktion zentraler Punkte*)
- Element des Clusters (*Auswahl repräsentativer Punkte*)
- Wahrscheinlichkeitsverteilung des Clusters (*Erwartungsmaximierung*)

3.2 Konstruktion zentraler Punkte

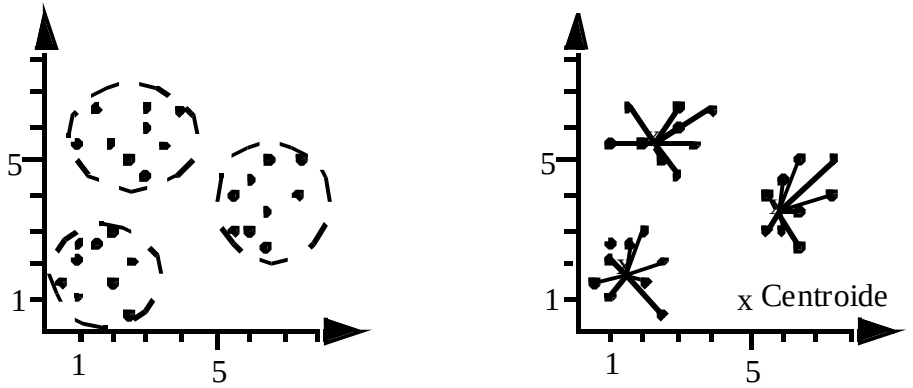
Beispiel

Cluster | Cluster-Repräsentanten

schlechtes Clustering



optimales Clustering



3.2 Konstruktion zentraler Punkte

Grundbegriffe [Forgy 1965]

- Objekte sind Punkte $p=(x^p_1, ..., x^p_d)$ 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*

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

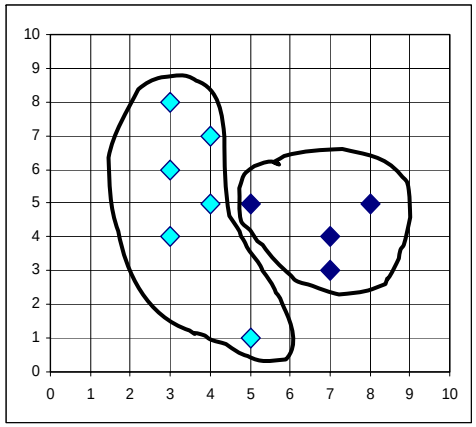
3.2 Konstruktion zentraler Punkte

Algorithmus

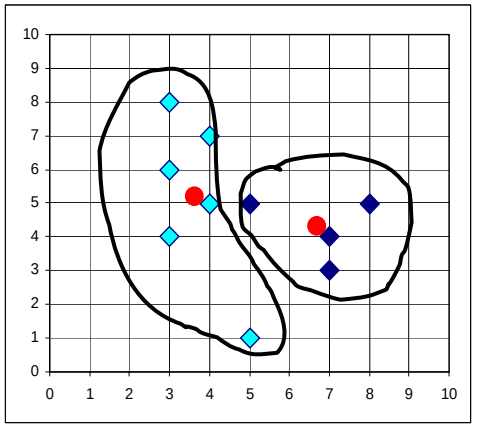
```
ClusteringDurchVarianzMinimierung(Punktmenge D,
Integer k)
  Erzeuge eine „initiale“ Zerlegung der Punktmenge D
   in k Klassen;
  Berechne die Menge C’={C1, ..., Ck} der Centroide
   für die k Klassen;
  C = {};
  repeat until C = C’
    C = C’;
    Bilde k Klassen durch Zuordnung jedes Punktes
     zum nächstliegenden Centroid aus C;
    Berechne die Menge C’={C’1, ..., C’k} der
     Centroide für die neu bestimmten Klassen;
  return C;
```

3.2 Konstruktion zentraler Punkte

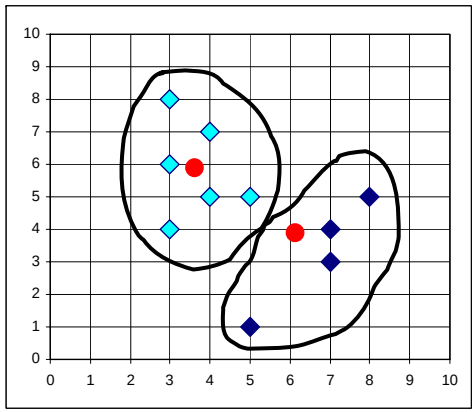
Beispiel



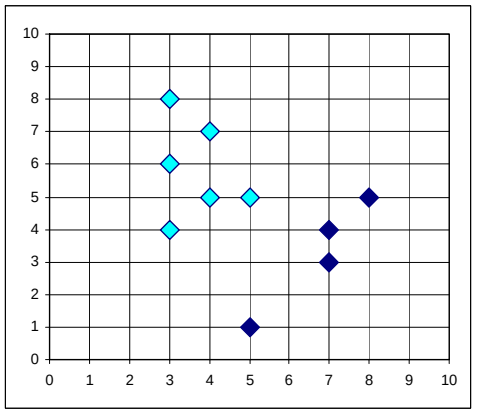
Berechnung der neuen Centroide



Zuordnung zum nächsten Centroid



Berechnung der neuen Centroide



3.2 Konstruktion zentraler Punkte

Varianten des Basis-Algorithmus

k-means [MacQueen 67]

- Idee: die betroffenen Centroide werden direkt aktualisiert, wenn ein Punkt seine Clusterzugehörigkeit ändert
- *K*-means hat im wesentlichen die Eigenschaften des Basis-Algorithmus
- *K*-means ist aber reihenfolgeabhängig

ISODATA

- basiert auf *k*-means
- Verbesserung des Ergebnisses durch Operationen wie
  - Elimination sehr kleiner Cluster
  - Verschmelzung und Aufspalten von Clustern
- Benutzer muß viele zusätzliche Parameter angeben

3.2 Konstruktion zentraler Punkte

Diskussion

+ Effizienz
  Aufwand: O(*n*) für eine Iteration,
  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 Centroids

- Cluster müssen konvexe Form haben

- die Anzahl *k* der Cluster ist oft schwer zu bestimmen

- starke Abhängigkeit von der initialen Zerlegung
  sowohl Ergebnis als auch Laufzeit

3.2 Auswahl repräsentativer Punkte

Grundbegriffe [Kaufman & Rousseeuw 1990]

- setze nur Distanzfunktion für Paare von Objekten voraus
- *Medoid*: ein zentrales Element des Clusters (repräsentativer Punkt)
- *Maß für die Kosten* (Kompaktheit) *eines Clusters C*

$$TD(C) = \sum_{p \in C} dist(p, m_C)$$

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

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

- Suchraum für den Clustering-Algorithmus: alle k-elementigen Teilmengen der Datenbank D mit $|D| = n$

die Laufzeitkomplexität der erschöpfenden Suche ist $O(n^k)$

3.2 Auswahl repräsentativer Punkte

Überblick über die Algorithmen

PAM [Kaufman & Rousseeuw 1990]

- Greedy-Algorithmus:
  in jedem Schritt wird nur ein Medoid mit einem Nicht-Medoid vertauscht
- vertauscht in jedem Schritt das Paar (Medoid, Nicht-Medoid), das die größte Reduktion der Kosten TD bewirkt

CLARANS [Ng & Han 1994]

zwei zusätzliche Parameter: *maxneighbor* und *numlocal*

- höchstens *maxneighbor* viele von zufällig ausgewählten Paaren (Medoid, Nicht-Medoid) werden betrachtet
- die erste Ersetzung, die überhaupt eine Reduzierung des *TD*-Wertes bewirkt, wird auch durchgeführt
- die Suche nach *k* „optimalen“ Medoiden wird *numlocal* mal wiederholt

3.2 Auswahl repräsentativer Punkte

Algorithmus PAM

```
PAM(Objektmenge D, Integer k, Float dist)
  Initialisiere die k Medoide;
  TD_Änderung := −∞;
  while TD_Änderung < 0 do
     Berechne für jedes Paar (Medoid M, Nicht-Medoid N)
      den Wert TD_{N↔M};
     Wähle das Paar (M, N), für das der Wert
      TD_Änderung := TD_{N↔M} − TD minimal ist;
     if TD_Änderung < 0 then
          ersetze den Medoid M durch den Nicht-Medoid N;
          Speichere die aktuellen Medoide als die bisher
           beste Partitionierung;
  return Medoide;
```

3.2 Auswahl repräsentativer Punkte

Algorithmus CLARANS

```
CLARANS(Objektmenge D, Integer k, Real dist,
        Integer numlocal, Integer maxneighbor)
  for r from 1 to numlocal do
    wähle zufällig k Objekte als Medoide; i := 0;
    while i < maxneighbor do
         Wähle zufällig (Medoid M, Nicht-Medoid N);
         Berechne TD_Änderung := TD_{N↔M} – TD;
         if TD_Änderung < 0 then
           ersetze M durch N;
           TD := TD_{N↔M}; i := 0;
         else i:= i + 1;
    if TD < TD_best then
         TD_best := TD; Merke die aktuellen Medoide;
  return Medoide;
```

3.2 Auswahl repräsentativer Punkte

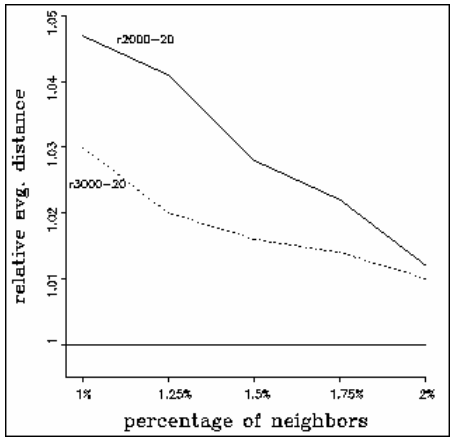
Vergleich von PAM und CLARANS

Laufzeitkomplexitäten

- PAM: $O(n^3 + k(n-k)^2 * \#Iterationen)$
- CLARANS $O(numlocal * maxneighbor * \#Ersetzungen * n)$
  praktisch $O(n^2)$

Experimentelle Untersuchung

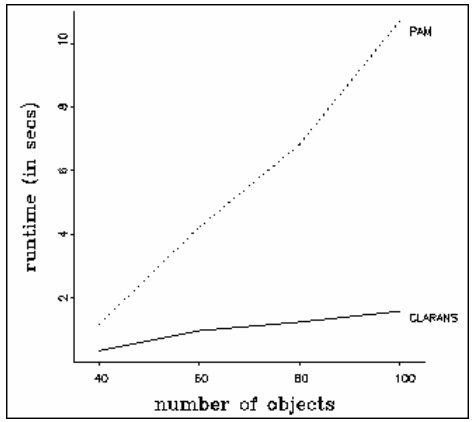
Qualität



TD(CLARANS)

TD(PAM)

Laufzeit



3.2 Erwartungsmaximierung

Grundbegriffe [Dempster, Laird & Rubin 1977]

- Objekte sind Punkte $p=(x^p_1, ..., x^p_d)$ in einem euklidischen Vektorraum
- ein Cluster wird durch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung beschrieben
- typischerweise: Gaußverteilung (Normalverteilung)
- Repräsentation eines Clusters C
  - Mittelwert μ_C aller Punkte des Clusters
  - d x d Kovarianzmatrix Σ_C für die Punkte im Cluster C

- Wahrscheinlichkeitsdichte eines Clusters C

$$P(x|C) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\Sigma_C|}} e^{\frac{1}{2}\cdot(x-\mu_C)^T\cdot(\Sigma_C)^{-1}\cdot(x-\mu_C)}$$

3.2 Erwartungsmaximierung

Grundbegriffe

- Wahrscheinlichkeitsdichte eines Clusterings $M = \{C_1, \ldots, C_k\}$

$$P(x) = \sum_{i=1}^{k} W_i \cdot P(x|C_i)$$

mit W_i Anteil der Punkte aus D in C_i

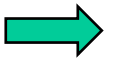
- Zuordnung von Punkten zu Clustern

$$P(C_i|x) = W_i \cdot \frac{P(x|C_i)}{P(x)}$$

Punkt gehört zu mehreren Clustern mit unterschiedlicher Wahrscheinlichkeit

- Maß für die Güte (Wahrscheinlichkeit) eines Clustering M

$$E(M) = \sum_{x \in D} \log(P(x))$$



je größer der Wert E ist, desto wahrscheinlicher sind die gegebenen Daten D

$E(M)$ soll maximiert werden

3.2 Erwartungsmaximierung

Algorithmus

```
ClusteringDurchErwartungsmaximierung
      (Punktmenge D, Integer k)
  Erzeuge ein „initiales“ Modell M’ = (C1’, ..., Ck’);
  repeat // „Neuzuordnung“
     Berechne P(x|Ci), P(x) und P(Ci|x) für jedes
      Objekt aus D und jede Gaußverteilung/jeden
      Cluster Ci;
     // „Neuberechnung des Modells“
     Berechne ein neues Modell M ={C1, ..., Ck} durch
      Neuberechnung von Wi, μC und ΣC für jedes i;
     M’ := M;
  until |E(M) - E(M’)| < ε;
  return M;
```

3.2 Erwartungsmaximierung

Diskussion

- Konvergiert gegen ein (möglicherweise nur *lokales*) Minimum
- Aufwand:

  O(n ∗ |M| * *#Iterationen*)

  Anzahl der benötigten Iterationen im allgemeinen sehr hoch

- Ergebnis und Laufzeit hängen stark ab
  - – von der initialen Zuordnung
  - – von der „richtigen“ Wahl des Parameters *k*
- Modifikation für Partitionierung der Daten in *k disjunkte* Cluster:

  jedes Objekt nur demjenigen Cluster zuordnen,

  zu dem es am wahrscheinlichsten gehört.

3.2 Wahl des initialen Clustering

Idee

- Clustering einer kleinen Stichprobe liefert im allgemeinen gute initiale Cluster
- einzelne Stichproben sind evtl. deutlich anders verteilt als die Grundgesamtheit

Methode [Fayyad, Reina & Bradley 1998]

- ziehe unabhängig voneinander *m* verschiedene Stichproben
- clustere jede der Stichproben

  ⇒ *m* verschiedene Schätzungen für *k* Clusterzentren

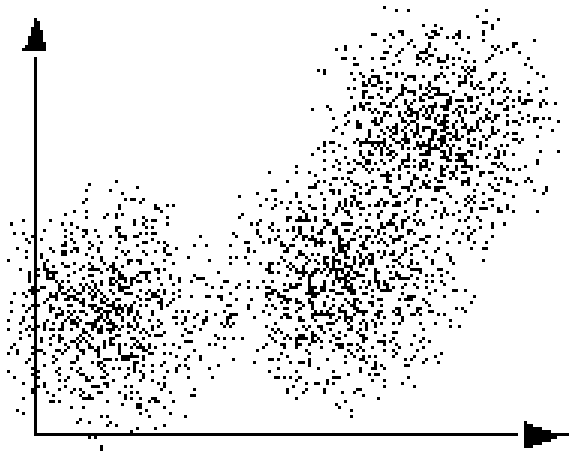
  $A = (A_1, A_2, \ldots, A_k)$, $B = (B_1, \ldots, B_k)$, $C = (C_1, \ldots, C_k)$, . . .
- Clustere nun die Menge $DB = A \cup B \cup C \cup \ldots$

  mit *m* verschiedenen Initialisierungen *A*, *B*, *C*, . . .
- Wähle von den *m* Clusterings dasjenige mit dem besten Wert

  bezüglich des zugehörigen Maßes für die Güte eines Clustering

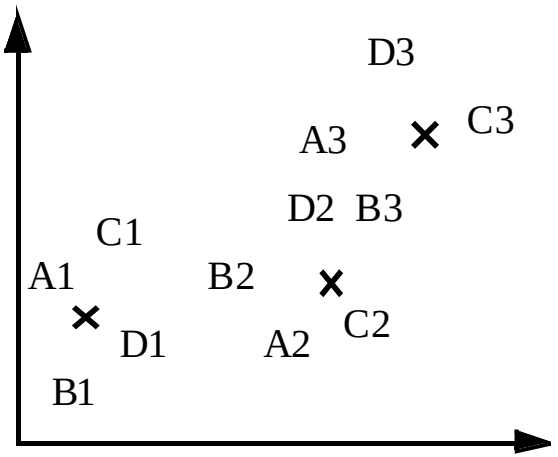
3.2 Wahl des initialen Clustering

Beispiel



Grundgesamtheit

$k = 3$ Gauß-Cluster



DB

von $m = 4$ Stichproben

× *wahre Clusterzentren*

3.2 Wahl des Parameters *k*

Methode

- Bestimme für $k = 2, ..., n\text{-}1$ jeweils ein Clustering
- Wähle aus der Menge der Ergebnisse das „beste“ Clustering aus

Maß für die Güte eines Clusterings

- muß unabhängig von der Anzahl *k* sein
- bei *k*-means und *k*-medoid:

  TD^2 und TD sinken monoton mit steigendem *k*

- bei EM:

  E sinkt monoton mit steigendem *k*

3.2 Wahl des Parameters *k*

Silhouetten-Koeffizient [Kaufman & Rousseeuw 1990]

- ein von *k* unabhängiges Gütemaß für die *k*-means- und *k*-medoid-Verfahren
- sei $a(o)$ der Abstand eines Objekts o zum Repräsentanten seines Clusters und $b(o)$ der Abstand zum Repräsentanten des „zweitnächsten“ Clusters
- Silhouette $s(o)$ von o

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

  $s(o)$ = -1 / 0 / +1: schlechte / indifferente / gute Zuordung

- Silhouettenkoeffizient s_C eines Clustering

  durchschnittliche Silhouette aller Objekte

- Interpretation des Silhouettenkoeffizients

  $s_C > 0{,}7$: starke Struktur,

  $s_C > 0{,}5$: brauchbare Struktur, . . .

3.2 Dichtebasiertes Clustering

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

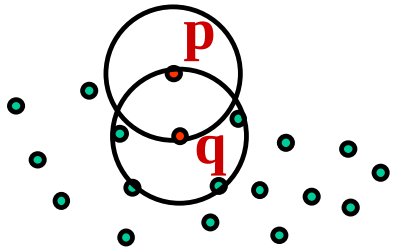
- für jedes Objekt eines Clusters überschreitet die lokale Punktdichte einen gegebenen Grenzwert
- die Menge von Objekten, die den Cluster ausmacht, ist räumlich zusammenhängend

3.2 Dichtebasiertes Clustering

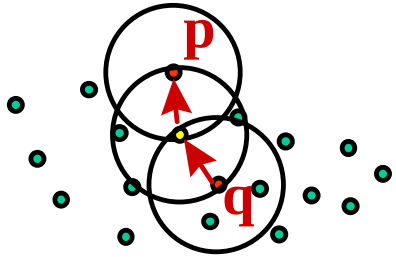
Grundbegriffe [Ester, Kriegel, Sander & Xu 1996]

- Ein Objekt o $\in O$ heißt *Kernobjekt*, wenn gilt:

  $|N_\varepsilon(o)| \geq MinPts$, wobei $N_\varepsilon(o) = \{o' \in O \mid dist(o, o') \leq \varepsilon\}$.



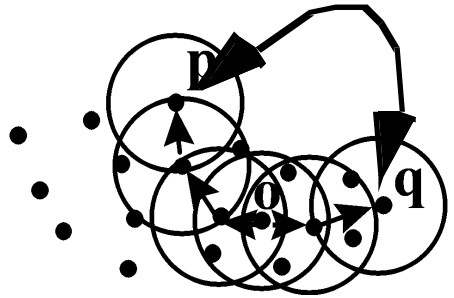
- Ein Objekt $p \in O$ ist *direkt dichte-erreichbar* von $q \in O$ bzgl. ε und *MinPts*, wenn gilt: $p \in N_\varepsilon(q)$ und q ist ein Kernobjekt in O.
- Ein Objekt p ist *dichte-erreichbar* von q, wenn es eine Kette von direkt erreichbaren Objekten zwischen q und p gibt.



3.2 Dichtebasiertes Clustering

Grundbegriffe

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



- Ein *Cluster C* bzgl. ε und *MinPts* ist eine nicht-leere Teilmenge von *O* mit für die die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

  Maximalität: $\forall p,q \in O$: 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*.

3.2 Dichtebasiertes Clustering

Grundbegriffe

- Definition Clustering

  Ein *dichte-basiertes Clustering CL* der Menge *O* bzgl. ε und *MinPts* ist eine „vollständige“ Menge von dichte-basierten Clustern bzgl. ε und *MinPts* in *O*.

- Dann ist die Menge $Noise_{CL}$ („*Rauschen*“) definiert als die Menge aller Objekte aus *O*, die nicht zu einem der dichte-basierten Cluster C_i gehören.

- Grundlegende Eigenschaft

  Sei *C* ein dichte-basierter Cluster und sei $p \in C$ ein Kernobjekt. Dann gilt: $C = \{o \in O \mid o$ dichte-erreichbar von *p* bzgl. ε und *MinPts*$\}$.

3.2 Dichtebasiertes Clustering

Algorithmus DBSCAN

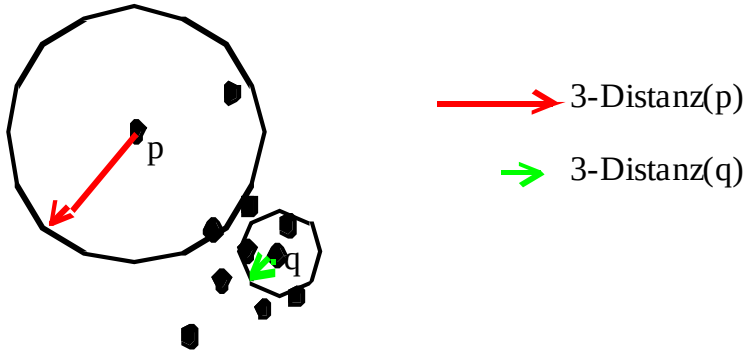
```
DBSCAN(Objektmenge D, Real ε, Integer MinPts)
  // Zu Beginn sind alle Objekte unklassifiziert,
  // o.ClId = UNKLASSIFIZIERT für alle o ∈ Objektmenge

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

3.2 Dichtebasiertes Clustering

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.

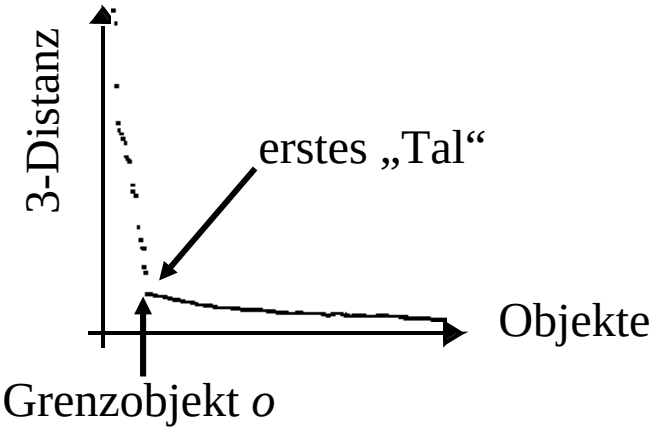


- Funktion *k-Distanz*: Distanz eines Objekts zu seinem *k*-nächsten Nachbarn
- *k-Distanz-Diagramm*: die *k*-Distanzen aller Objekte absteigend sortiert

3.2 Dichtebasiertes Clustering

Parameterbestimmung

Beispiel eines *k*-Distanz-Diagramms



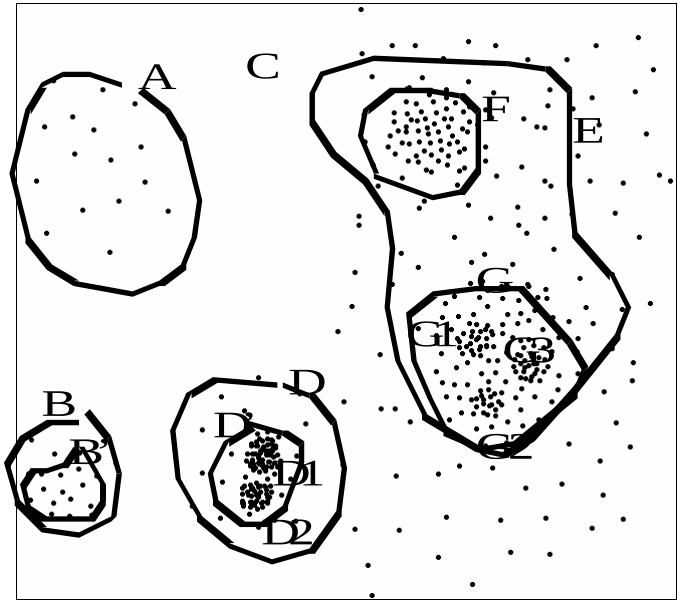
Heuristische Methode

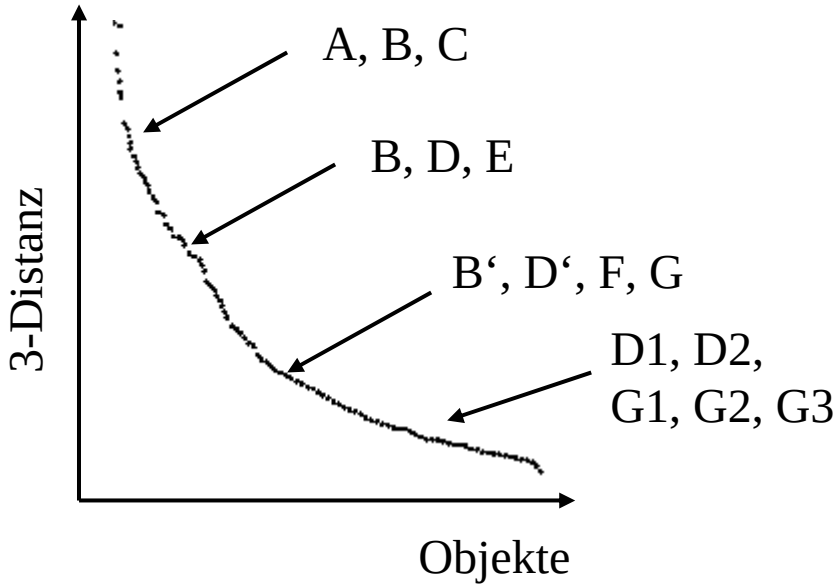
- Benutzer gibt einen Wert für *k* vor (Default ist $k = 2*d - 1$), $MinPts := k+1$.
- System berechnet das *k*-Distanz-Diagramm und zeigt das Diagramm an.
- Der Benutzer wählt ein Objekt *o* im *k*-Distanz-Diagramm als Grenzobjekt aus, $\varepsilon :=$ *k*-Distanz(*o*).

3.2 Dichtebasiertes Clustering

Probleme der Parameterbestimmung

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





3.3 Hierarchische Verfahren

Grundlagen

Ziel

Konstruktion einer Hierarchie von Clustern (*Dendrogramm*), so daß immer die Cluster mit minimaler Distanz verschmolzen werden

Dendrogramm

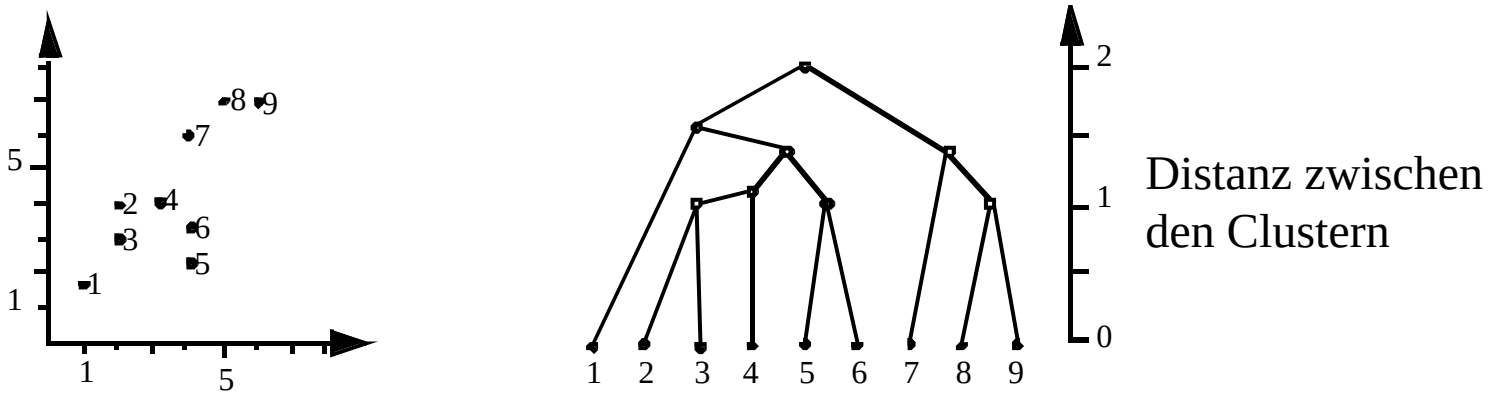
ein Baum, dessen Knoten jeweils ein Cluster repräsentieren, mit folgenden Eigenschaften:

- die Wurzel repräsentiert die ganze DB
- die Blätter repräsentieren einzelne Objekte
- ein innerer Knoten repräsentiert die Vereinigung aller Objekte, die im darunterliegenden Teilbaum repräsentiert werden

3.3 Hierarchische Verfahren

Grundlagen

Beispiel eines Dendrogramms



Typen von hierarchischen Verfahren

- Bottom-Up Konstruktion des Dendrogramms (*agglomerative*)
- Top-Down Konstruktion des Dendrogramms (*divisive*)

3.3 Single-Link und Varianten

Algorithmus Single-Link [Jain & Dubes 1988]

Agglomeratives hierarchisches Clustering

1. Bilde initiale Cluster, die jeweils aus einem Objekt bestehen,
   und bestimme die Distanzen zwischen allen Paaren dieser Cluster.

2. Bilde einen neuen Cluster aus den zwei Clustern,
   welche die geringste Distanz zueinander haben.

3. Bestimme die Distanz zwischen dem neuen Cluster und allen anderen Clustern.

4. Wenn alle Objekte in einem einzigen Cluster befinden:
   Fertig, andernfalls wiederhole ab Schritt 2.

3.3 Single-Link und Varianten

Distanzfunktionen für Cluster

- Sei eine Distanzfunktion *dist*(*x*,*y*) für Paare von Objekten gegeben.
- Seien *X*, *Y* Cluster, d.h. Mengen von Objekten.

Single-Link
$$dist-sl(X,Y)=\min_{x\in X,y\in Y} dist(x,y)$$

Complete-Link
$$dist-cl(X,Y)=\max_{x\in X,y\in Y} dist(x,y)$$

Average-Link
$$dist-al(X,Y)=\frac{1}{|X|\cdot|Y|}\cdot\sum_{x\in X,y\in Y} dist(x,y)$$

3.3 Single-Link und Varianten

Diskussion

+ erfordert keine Kenntnis der Anzahl *k* der Cluster

+ findet nicht nur ein flaches Clustering, sondern eine ganze Hierarchie

+ ein einzelnes Clustering kann aus dem Dendrogramm gewonnen werden,
  z.B. mit Hilfe eines horizontalen Schnitts durch das Dendrogramm
  (erfordert aber wieder Anwendungswissen)

- Entscheidungen können nicht zurückgenommen werden

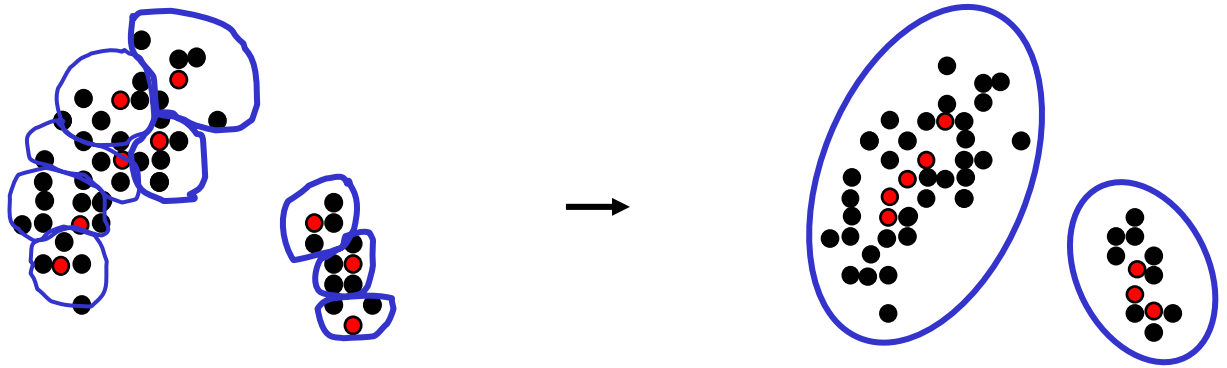
- Anfälligkeit gegenüber Rauschen (Single-Link)
  eine „Linie“ von Objekten kann zwei Cluster verbinden

- Ineffizienz
  Laufzeitkomplexität von mindestens $O(n^2)$ für n Objekte

3.3 Single-Link und Varianten

CURE [Guha, Rastogi & Shim 1998]

- Repräsentation eines Clusters
  - partitionierende Verfahren: ein Punkt
  - hierarchische Verfahren: alle Punkte
- CURE: Repräsentation eines Clusters durch *c* Repräsentanten
- die Repräsentanten werden um den Faktor α zum Centroid gestreckt



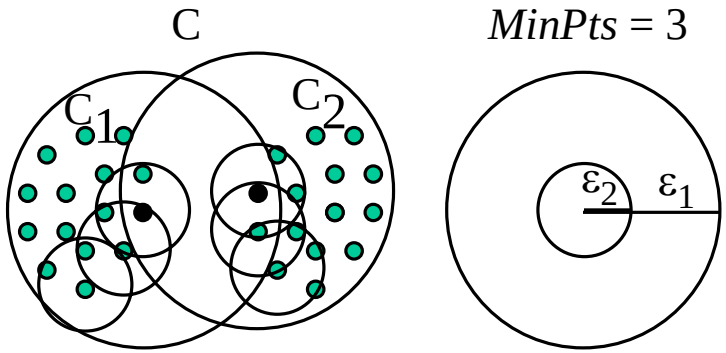
Entdecken nicht-konvexer Cluster

Vermeidung des Single-Link Effekts

3.3 Dichte-basiertes hierarchisches Clustering

Grundlagen [Ankerst, Breunig, Kriegel & Sander 1999]

- für einen konstanten *MinPts*-Wert sind dichte-basierte Cluster bzgl. eines kleineren ε vollständig in Clustern bzgl. eines größeren ε enthalten



- in einem DBSCAN-ähnlichen Durchlauf gleichzeitig das Clustering für verschiedene Dichte-Parameter bestimmen

  zuerst den dichteren Teil-Cluster, dann den dünneren Rest-Cluster

- kein Dendrogramm, sondern eine auch noch bei sehr großen Datenmengen übersichtliche Darstellung der Cluster-Hierarchie

3.3 Dichte-basiertes hierarchisches Clustering

Grundbegriffe

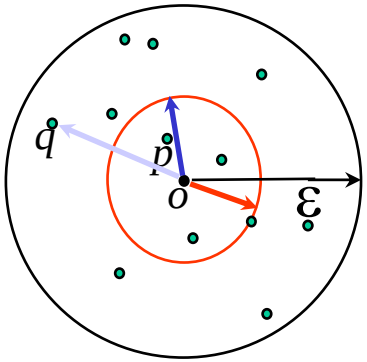
Kerndistanz eines Objekts *p* bzgl. ε und *MinPts*

$$Kerndis\tan z_{\varepsilon, MinPts}(o) = \begin{cases} UNDEFINIERT,\ wenn\ |N_{\varepsilon}(o)| < MinPts \\ Min-Pts-Dis\tan z(o),\ sonst \end{cases}$$

Erreichbarkeitsdistanz eines Objekts *p* relativ zu einem Objekt *o*

$$Erreichbarkeitsdis\tan z_{\varepsilon, MinPts}(p,o) = \begin{cases} UNDEFINIERT,\ wenn\ |N_{\varepsilon}(o)| < MinPts \\ \max\{Kerndis\tan z(o), dist(o,p)\},\ sonst \end{cases}$$

$MinPts = 5$



→ *Kerndistanz*(*o*)

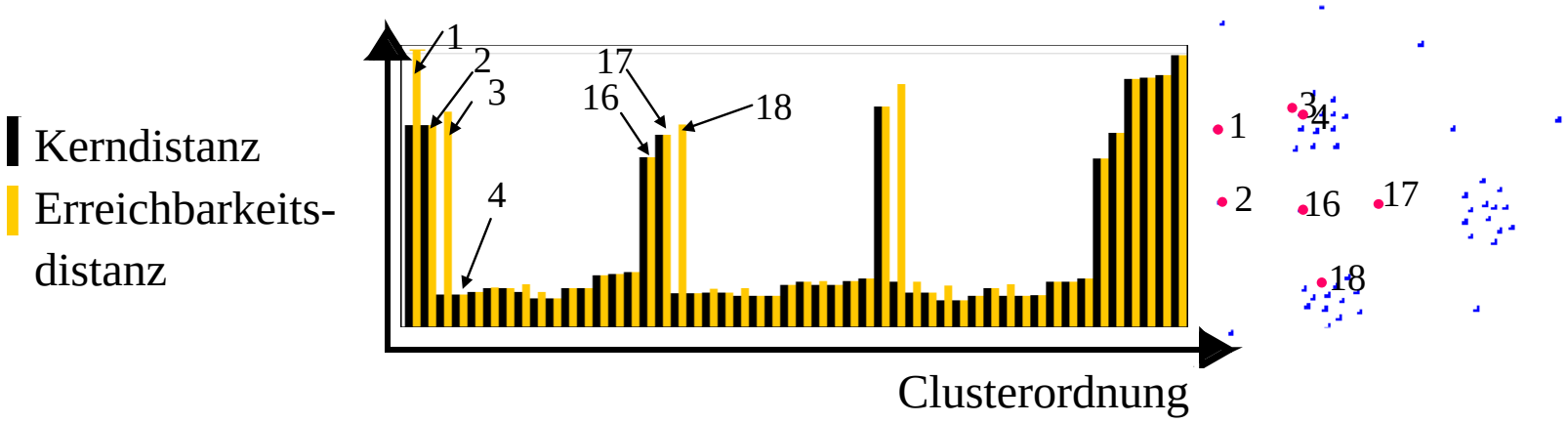
→ *Erreichbarkeitsdistanz*(*p*,*o*)

→ *Erreichbarkeitsdistanz*(*q*,*o*)

3.3 Dichte-basiertes hierarchisches Clustering

Clusterordnung

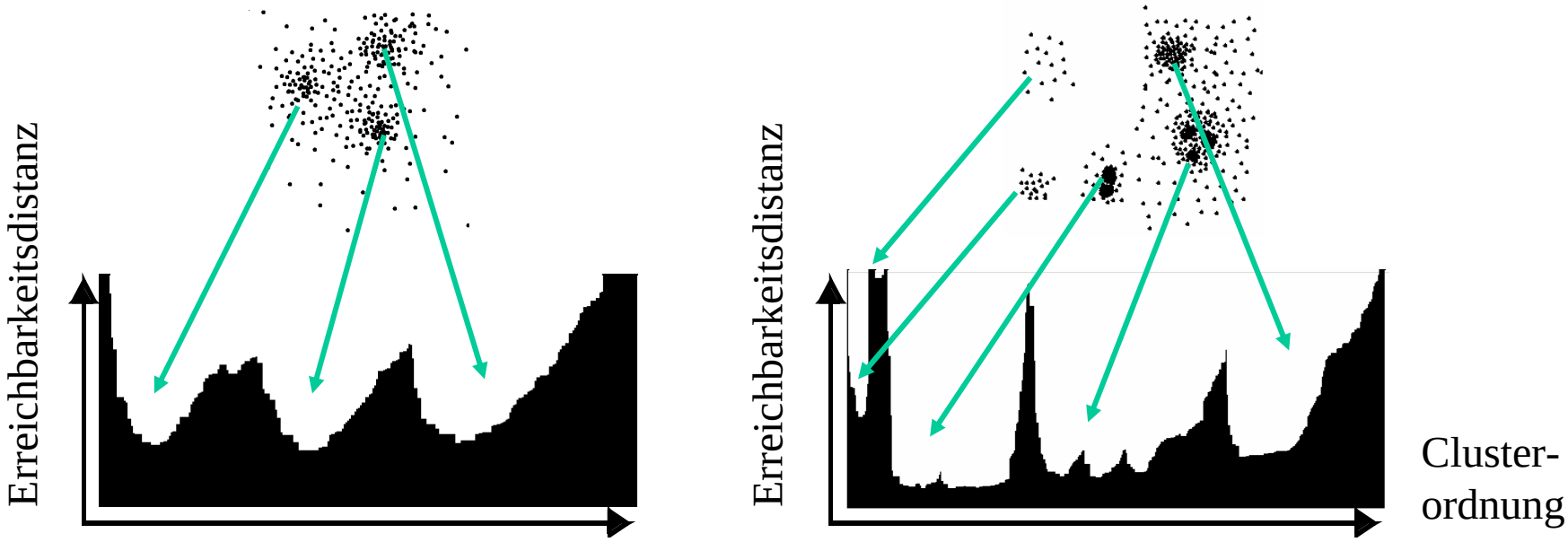
- OPTICS liefert nicht direkt ein (hierarchisches) Clustering, sondern eine „Clusterordnung“ bzgl. ε und *MinPts*
- *Clusterordnung* bzgl. ε und *MinPts*
  - beginnt mit einem beliebigen Objekt
  - als nächstes wird das Objekt besucht, das zur Menge der bisher besuchten Objekte die minimale Erreichbarkeitsdistanz besitzt



3.3 Dichte-basiertes hierarchisches Clustering

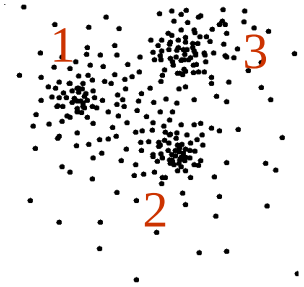
Erreichbarkeits-Diagramm

- Zeigt die Erreichbarkeitsdistanzen (bzgl. ε und *MinPts*) der Objekte als senkrechte, nebeneinanderliegende Balken
- in der durch die Clusterordnung der Objekte gegebenen Reihenfolge

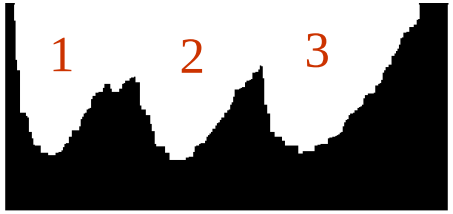


3.3 Dichte-basiertes hierarchisches Clustering

Parameter-Sensitivität



MinPts = 10, ε = 10

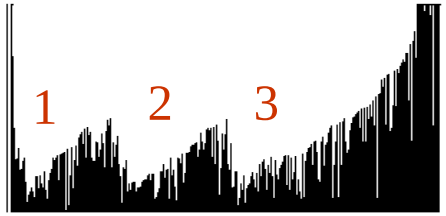


optimale Parameter

MinPts = 10, ε = 5

kleineres ε

MinPts = 2, ε = 10



kleineres *MinPts*

Clusterordnung ist robust gegenüber den Parameterwerten

gute Resultate wenn Parameterwerte „groß genug“

3.3 Dichte-basiertes hierarchisches Clustering

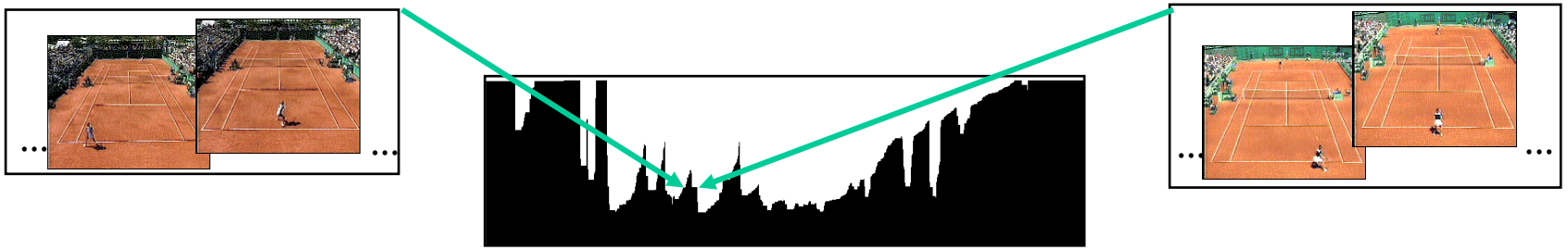
Heuristische Parameter-Bestimmung

ε

- wähle größte *MinPts*-Distanz aus einem Sample oder
- berechne durchschnittliche *MinPts*-Distanz für gleichverteilte Daten

MinPts

- glätte Erreichbarkeits-Diagramm
- vermeide “single-” bzw. “*MinPts*-link” Effekt



3.3 Dichte-basiertes hierarchisches Clustering

Manuelle Analyse der Cluster

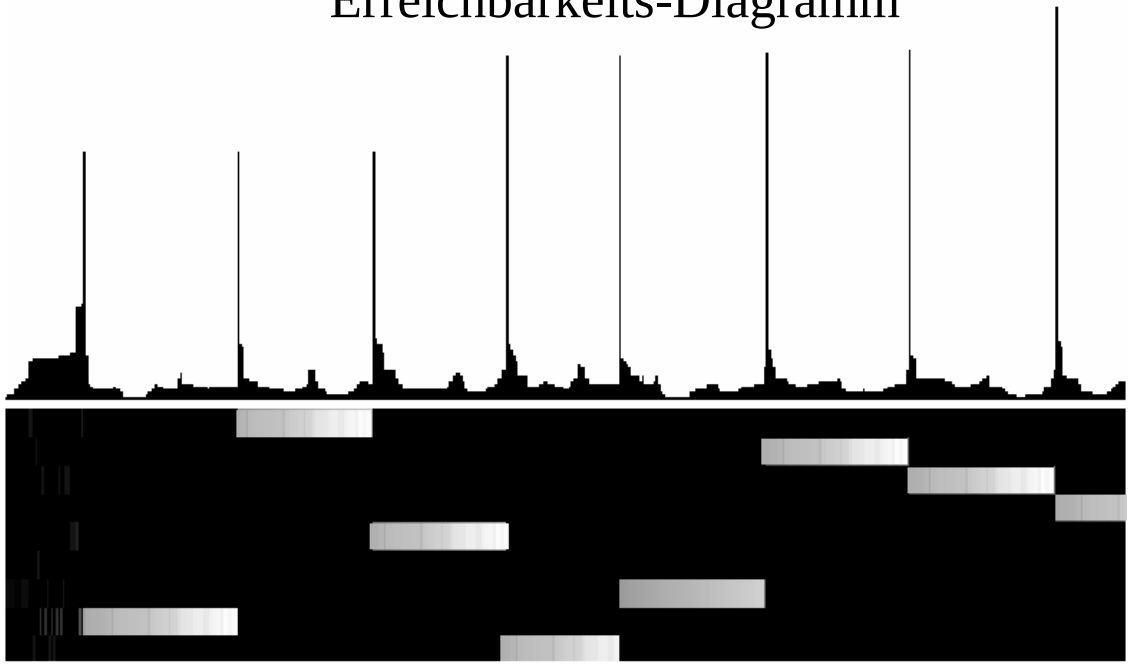
Mit Erreichbarkeits-Diagramm

- gibt es Cluster?
- wieviele Cluster?
- sind die Cluster hierarchisch geschachtelt?
- wie groß sind die Cluster?

Mit Attributs-Diagramm

- warum existieren die Cluster?
- worin unterscheiden sich die Cluster?

Erreichbarkeits-Diagramm



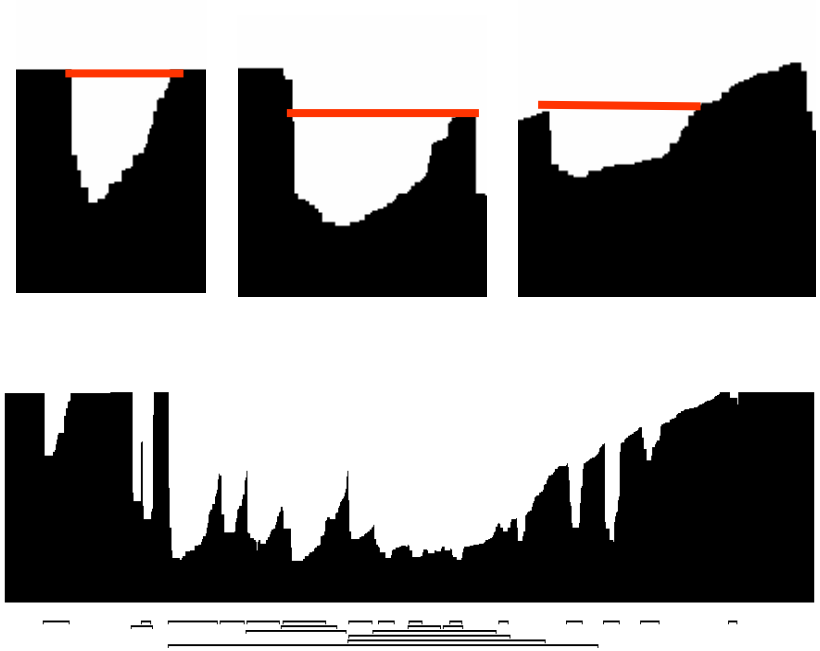
Attributs-Diagramm

3.3 Dichte-basiertes hierarchisches Clustering

Automatisches Entdecken von Clustern

ξ-Cluster

- Teilsequenz der Clusterordnung
- beginnt in einem Gebiet ξ-steil *abfallender* Erreichbarkeitsdistanzen
- endet in einem Gebiet ξ-steil *steigender* Erreichbarkeitsdistanzen bei etwa demselben absoluten Wert
- enthält mindestens *MinPts* Punkte



Algorithmus

- bestimmt alle ξ-Cluster
- markiert die gefundenen Cluster im Erreichbarkeits-Diagramm
- Laufzeitaufwand O(*n*)

3.4 Datenbanktechniken zur Leistungssteigerung

Ziel

Bisher

- kleine Datenmengen
- hauptspeicherresident

Jetzt

- sehr große Datenmengen, die nicht in den Hauptspeicher passen
- Daten auf Sekundärspeicher
  Zugriffe viel teurer als im Hauptspeicher
- effiziente Algorithmen erforderlich
  d.h. Laufzeitaufwand höchstens O(n log n)

Skalierbarkeit von Clustering-Algorithmen

3.4 Datenbanktechniken zur Leistungssteigerung

Idee

Verwendung von räumlichen Indexstrukturen oder verwandten Techniken

- Indexstrukturen liefern ein grobes Vor-Clustering
  räumlich benachbarte Objekte werden möglichst auf der gleichen Seite abgespeichert

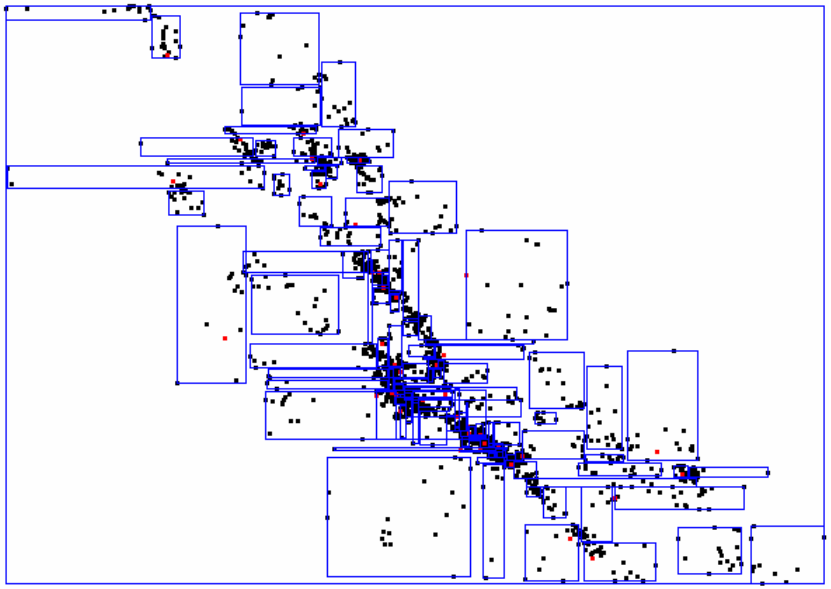
- Indexstrukturen sind effizient
  nur einfache Heuristiken zum Clustering

- schnelle Zugriffsmethoden für verschiedene Ähnlichkeitsanfragen
  z.B. Bereichsanfragen und *k*-Nächste-Nachbarn-Anfragen

3.4 Indexbasiertes Sampling

Methode [Ester, Kriegel & Xu 1995]

- Aufbau eines R-Baums
- Auswahl von Repräsentanten von den Datenseiten des R-Baums
- Anwendung des Clustering-Verfahrens auf die Repräsentantenmenge
- Übertragung des Clustering auf die gesamte Datenbank



Datenseitenstruktur eines R*-Baums

3.4 Indexbasiertes Sampling

Übertragung des Clustering auf die Grundgesamtheit

- Wie erhält man aus dem Clustering der Stichprobe ein Clustering der Grundgesamtheit?
- Bei *k*-means- und *k*-medoid-Verfahren:

Repräsentanten der Cluster für die gesamte Datenmenge übernehmen (Centroide, Medoide)

- Bei dichtebasierten Verfahren:

  eine Repräsentation für jedes Cluster bilden (z.B. MUR)

  die Objekte dem „nächsten“ der gefundenen Cluster zuweisen

- Bei hierarchischen Verfahren:

  ⇒ Generierung einer hierarchischen Repräsentation problematisch!

  (Dendrogramm oder Erreichbarkeits-Diagramm)

3.4 Indexbasiertes Sampling

Auswahl von Repräsentanten

Wieviele Objekte sollen von jeder Datenseite ausgewählt werden?

- hängt vom verwendeten Clusteringverfahren ab
- hängt von der Verteilung der Daten ab
- z.B. für CLARANS: ein Objekt pro Datenseite

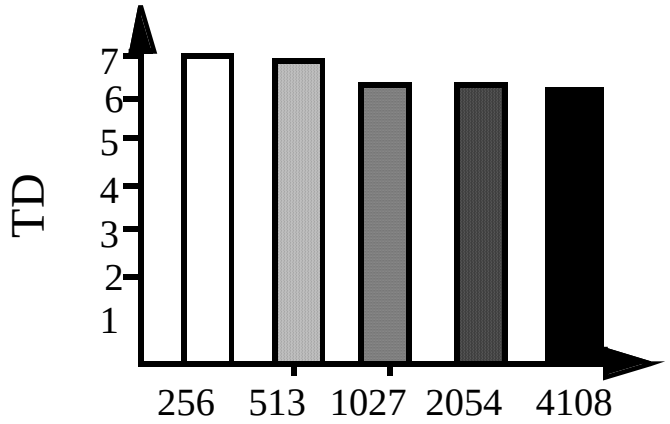
guter Kompromiß zwischen der Qualität des Clusterings und der Laufzeit

Welche Objekte sollen ausgewählt werden?

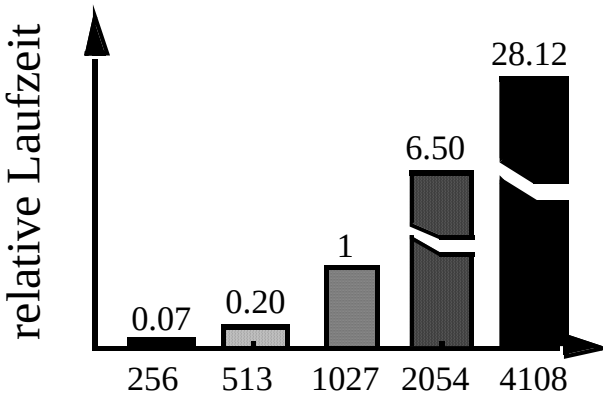
- hängt ebenfalls vom Clusteringverfahren und von der Verteilung der Daten ab
- einfache Heuristik: wähle das „zentralste“ Objekt auf der Datenseite

3.4 Indexbasiertes Sampling

Experimentelle Untersuchung für CLARANS



Anzahl der Repräsentanten



Anzahl der Repräsentanten

- Laufzeit von CLARANS ist etwa $O(n^2)$
- Qualität des Clusterings steigt bei mehr als 1024 Repräsentanten kaum noch

⇨ 1024 Repräsentanten guter Kompromiß zwischen Qualität und Effizienz

3.4 Bereichsanfragen für dichtebasiertes Clustering

- Basisoperation für DBSCAN und für OPTICS:
  Berechnung der ε-Nachbarschaft jedes Objekts *o* in der Datenbank

- effiziente Unterstützung von Bereichsanfragen durch räumliche Indexstrukturen

  R-Baum, X-Baum, M-Baum, . . .

- Laufzeitkomplexitäten für die Algorithmen DBSCAN und OPTICS:

	einzelne Bereichsanfrage	gesamter Algorithmus
ohne Index	$O(n)$	$O(n^2)$
mit Index	$O(\log n)$	$O(n \log n)$
mit direktem Zugriff	$O(1)$	$O(n)$

Probleme räumlicher Indexstrukturen bei hochdimensionalen Daten

3.4 GRID-Clustering

Methode [Schikuta 1996]

Grob-Clustering durch räumliche Indexstruktur

das Volumen des durch eine Datenseite repräsentierten Datenraums ist um so kleiner, je höher die Punktdichte in diesem Gebiet des Raums ist

Nachbearbeitung durch Verschmelzen von Seitenregionen

Seitenregionen mit hoher Punktdichte werden als Clusterzentren angesehen und rekursiv mit benachbarten, weniger dichten Seitenregionen verschmolzen

⇒ dichtebasiertes Clustering

Verwendete Indexstruktur

Gridfile

3.4 GRID-Clustering

Methode

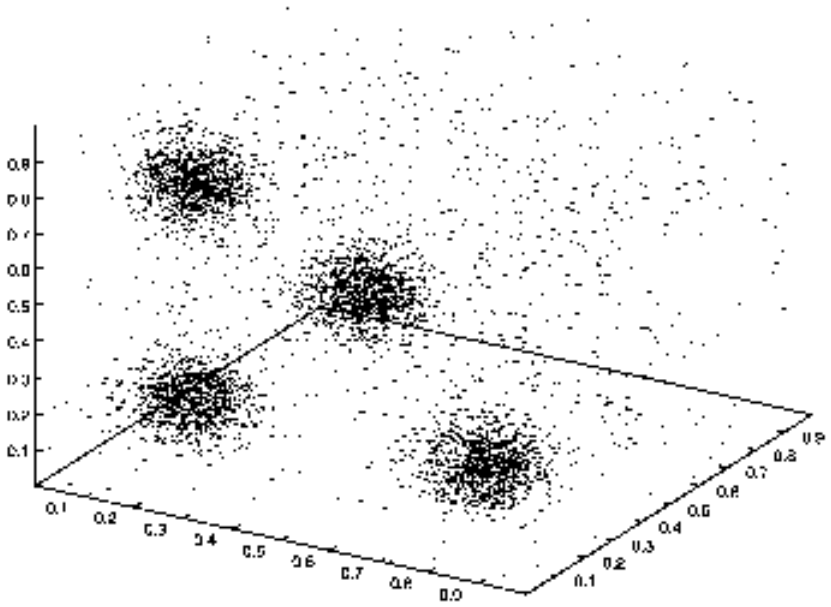
- beginne mit der Datenseite *S*, die die höchste Punktdichte hat
- die Seite *S* wird dann mit allen (direkten und indirekten) Nachbarseiten *R* verschmolzen, deren Punktdichte kleiner oder gleich der Punktdichte von *S* ist
- wenn es nur noch Nachbarseiten mit höherer Punktdichte gibt:

beginne einen neuen Cluster mit der Seite, die nun die höchste Punktdichte unter den noch nicht betrachteten Datenseiten hat

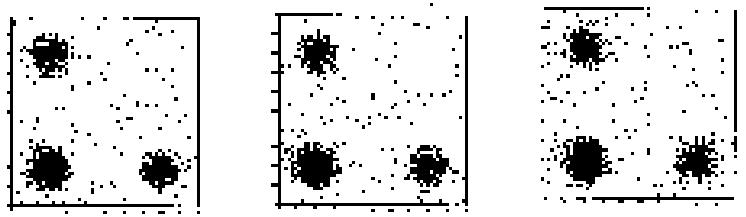
mit der zusätzlichen Information über die Verschmelzungsreihenfolge läßt sich das Ergebnis des Algorithmus als Dendrogramm darstellen!

3.4 GRID-Clustering

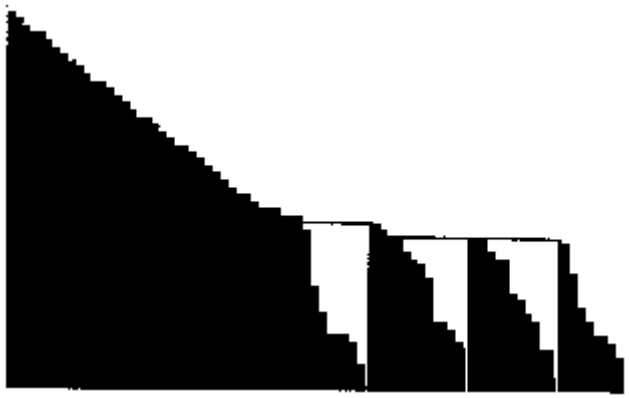
Beispiel



3-dimensionale Punktdaten



Dim1:Dim2 Dim1:Dim3 Dim2:Dim3



Resultierendes Dendrogramm

3.4 Datenkompression zum Vor-Clustering

Grundlagen [Zhang, Ramakrishnan & Linvy 1996]

Methode

- Bildung kompakter Beschreibungen von Teil-Clustern (Clustering Features)
- hierarchische Organisation der Clustering Features
  in einem höhenbalancierten Baum (CF-Baum)
- Anwendung eines Clusteringverfahren wie z.B. CLARANS
  auf die Blätter des Baums

CF-Baum

- komprimierte, hierarchische Repräsentation der Daten
- berücksichtigt die Clusterstruktur

3.4 Datenkompression zum Vor-Clustering

Grundbegriffe

Clustering Feature einer Menge C von Punkten X_i: $CF = (N, LS, SS)$

$N = |C|$ „Anzahl der Punkte in C“

$LS = \sum_{i=1}^{N} X_i$ „lineare Summe der N Datenpunkte“

$SS = \sum_{i=1}^{N} X_i^2$ „Quadratsumme der N Datenpunkte“

aus den CF‘s können berechnet werden

- Centroid
- Kompaktheitsmaße
- und Distanzmaße für Cluster

3.4 Datenkompression zum Vor-Clustering

Grundbegriffe

- Additivitätstheorem

  für CF-Vektoren für zwei disjunkte Cluster C_1 und C_2 gilt

  $$\mathrm{CF}(C_1 \cup C_2) = CF\,(C_1) + CF\,(C_2) = (N_1 + N_2,\ LS_1 + LS_2,\ QS_1 + QS_2)$$

  d.h. CF‘s können inkrementell berechnet werden

- Definition

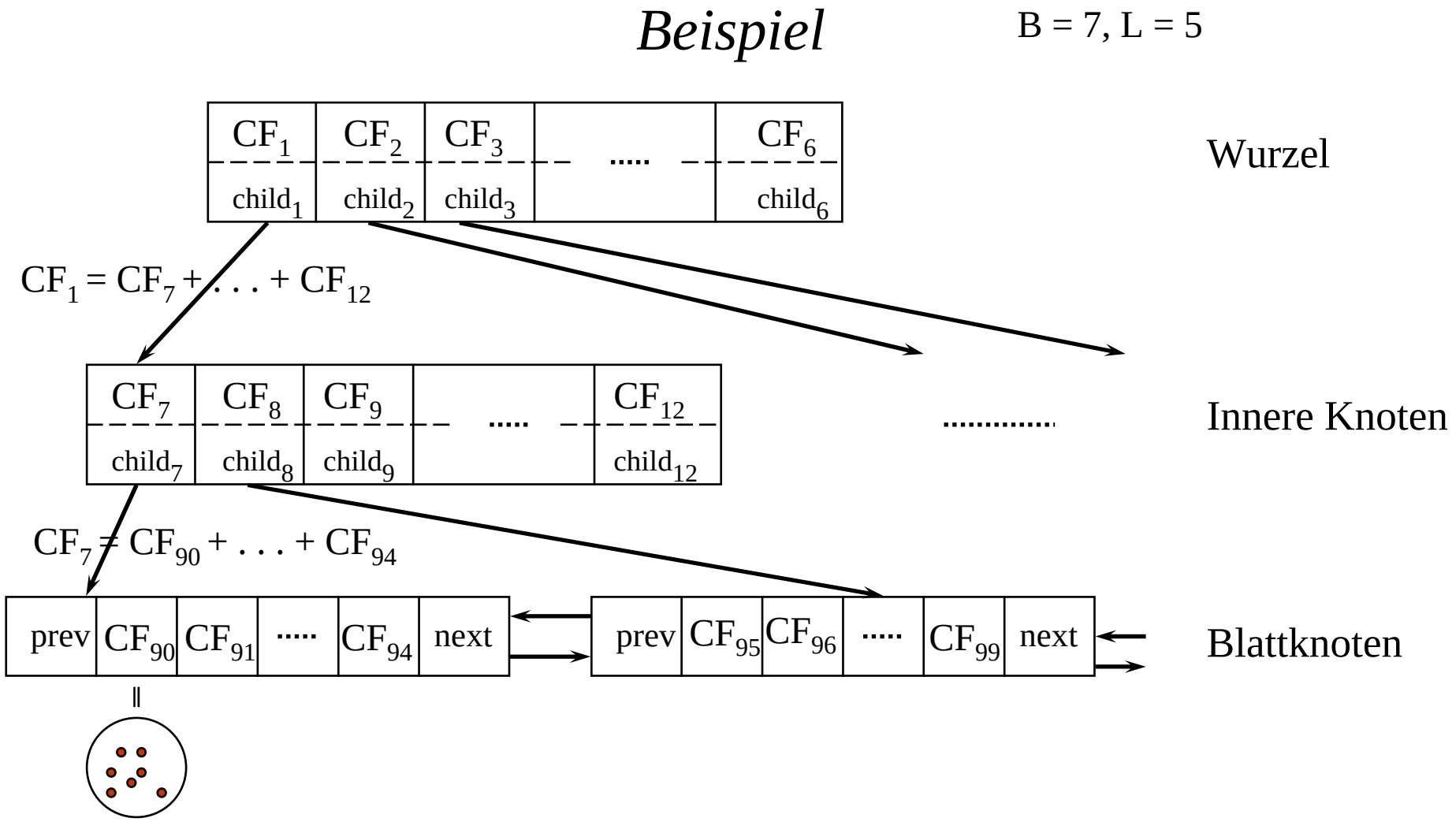
  Ein *CF-Baum* ist ein höhenbalancierter Baum zur Abspeicherung von CF‘s.

3.4 Datenkompression zum Vor-Clustering

Grundbegriffe

- Eigenschaften eines CF-Baums:
  - Jeder innere Knoten enthält höchstens B Einträge der Form [CF_i, $child_i$] und CF_i ist der CF-Vektor des Subclusters des i-ten Sohnknotens.
  - Ein Blattknoten enthält höchstens L Einträge der Form [CF_i].
  - Jeder Blattknoten besitzt zwei Zeiger *prev* und *next*.
  - Der Durchmesser aller Einträge in einem Blattknoten ist kleiner als T
- Aufbau eines CF-Baums
  - Transformation eines Datensatzes p in einen CF-Vektor $CF_p=(1, p, p^2)$
  - Einfügen von CF_p analog dem Einfügen in einen B^+-Baum
  - bei Verletzung des Schwellwertes T wird das entsprechende Blatt gesplittet

3.4 Datenkompression zum Vor-Clustering



3.4 Datenkompression zum Vor-Clustering

BIRCH

Phase 1

- ein Scan über die gesamte Datenbank
- Aufbau eines CF-Baums B_1 bezgl. T_1 durch zukzessives Einfügen der Datensätze

Phase 2

- falls der CF-Baum B_1 noch zu groß ist, wähle ein $T_2 > T_1$
- Aufbau eines CF-Baums B_2 bzgl. T_2 durch Einfügen der CF‘s der Blätter von B_1

Phase 3

- Anwendung eines Clusteringalgorithmus auf die Blatteinträge des CF-Baums
- Clusteringalgorithmus muß evtl. an Clustering Features angepaßt werden

3.4 Datenkompression zum Vor-Clustering

Diskussion

+ Komprimierungsfaktor frei wählbar

+ Effizienz

  Aufbau eines sekundärspeicherresidenten CF-Baums: O(n log n)

  Aufbau eines hauptspeicherresidenten CF-Baums: O(n)

  zusätzlich: Aufwand des Clusteringalgorithmus

- nur für numerische Daten
  euklidischer Vektorraum

- abhängig von der Reihenfolge der Daten

3.5 Besondere Anforderungen und Verfahren

Überblick

- kategorische Attribute

  „modes“ statt means als Repräsentanten

- ausgedehnte Objekte

  verallgemeinertes dichtebasiertes Clustering

- kontinuierliche Updates der Datenbank

  inkrementelles Clustering

- Cluster nur in Unterräumen des Datenraums

  Subspace Clustering

3.5 Clustering mit kategorischen Attributen

Grundlagen [Huang 1997]

- *k*-medoid-Algorithmus wesentlich langsamer als *k*-means- Algorithmus
- *k*-means-Verfahren nicht direkt für kategorische Attribute anwendbar

gesucht ist ein Analogon zum Centroid eines Clusters

- Numerische Attribute

  Centroid $\bar{x}$ einer Menge C von Objekten minimiert $TD(C,\bar{x}) = \sum_{p \in C} dist(p,\bar{x})$

- Kategorische Attribute

  Mode m einer einer Menge C von Objekten minimiert $TD(C,m) = \sum_{p \in C} dist(p,m)$

  $m = (m_1, ..., m_d)$, *dist* eine Distanzfunktion für kategorische Attribute, z.B.

$$dist(x,y) = \sum_{i=1}^{d} \delta(x_i, y_i) \text{ mit } \delta(x_i, y_i) = \begin{cases} 0 \text{ falls } x_i = y_i \\ 1 \text{ sonst} \end{cases}$$

3.5 Clustering mit kategorischen Attributen

Bestimmung des Modes

- Die Funktion $TD(C,m) = \sum_{p \in C} dist(p,m)$ wird minimiert genau dann, wenn für $m = (m_1, ..., m_d)$ und für alle Attribute A_i, $i = 1,..., d$, gilt:

  es gibt in A_i keinen häufigeren Attributwert als m_i

- Der Mode einer Menge von Objekten ist nicht eindeutig bestimmt.
- Beispiel

  Objektmenge {(a, b), (a,c), (c, b), (b,c)}

  (a, b) ist ein Mode

  (a, c) ist ein Mode

3.5 Clustering mit kategorischen Attributen

Algorithmus k-modes

- Initialisierung

  nicht zufällig

  sondern *k* Objekte aus der Datenmenge als initiale *Modes*

- Cluster-Repräsentanten

  Mode anstelle des Centroids

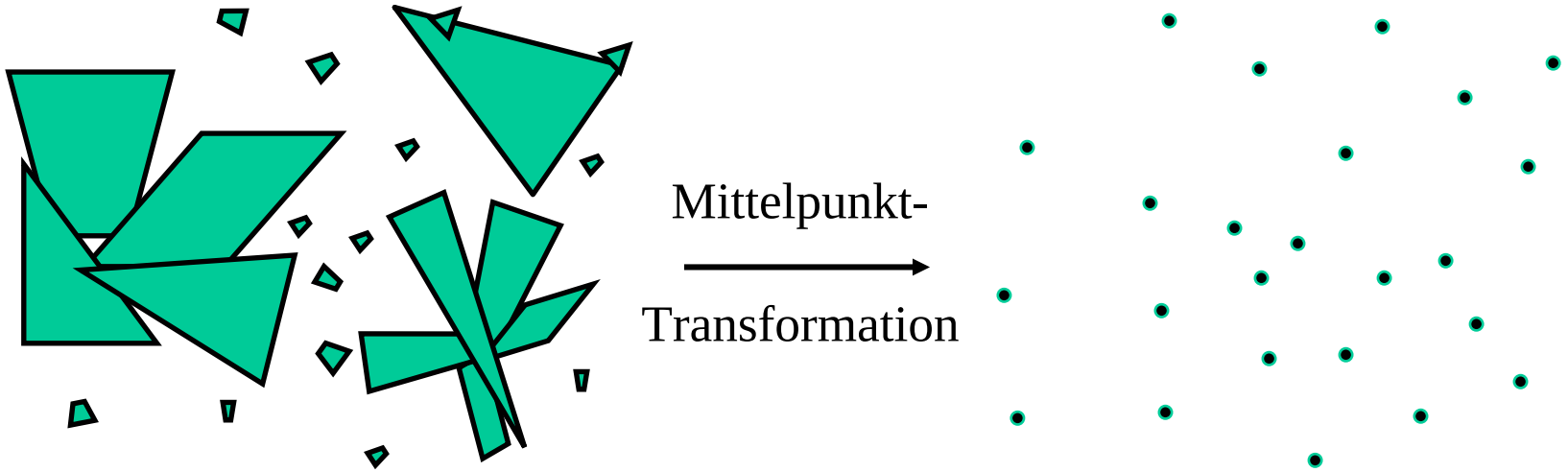
- Distanzfunktion

  anstelle der quadrierten euklidischen Distanz

  Distanzfunktion für Datensätze mit kategorischen Attributen

3.5 Clustering ausgedehnter Objekte

Grundlagen



Berücksichtigung der Fläche und nicht-räumlicher Attribute

natürlicher Begriff der Verbundenheit

3.5 Clustering ausgedehnter Objekte

Verallgemeinertes dichte-basiertes Clustering

[Sander, Ester, Kriegel & Xu 1998]

Grundidee für dichte-basierte Cluster :

"*ε-Nachbarschaft* enthält mindestens *MinPts* Punkte"

"Distanz ≤ ε"

$NPred(o,p)$

reflexiv, symmetrisch

für Paare von Objekten

Verallgemeinerte Nachbarschaft

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

"$|\ N_\varepsilon\ | \geq MinPts$"

MinWeight(N)

beliebiges Prädikat für

Mengen von Objekten

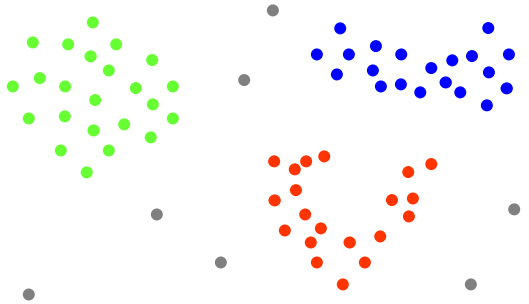
Verallgemeinerte minimale Kardinalität

$MinWeight(N_{NPred}(o))$

"NPred-Nachbarschaft hat mindestens das "Gewicht" ***MinWeight"***

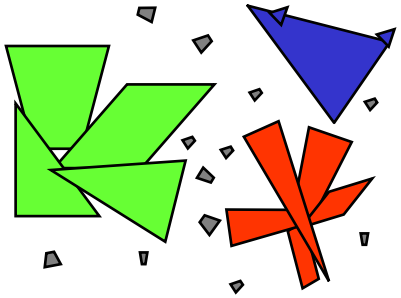
3.5 Clustering ausgedehnter Objekte

Beispiele



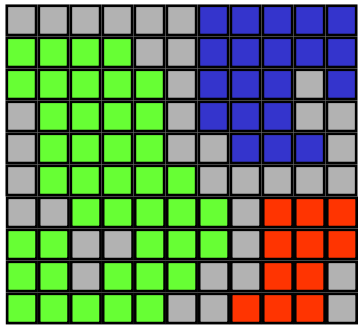
dist(p,q) ≤ ε

cardinality(. . .) ≥ MinPoints



intersect(p,q)

Summe der Flächen ≥ 5 % der Gesamtfläche



Nachbarzelle und ähnliche Farbe

true

3.5 Clustering ausgedehnter Objekte

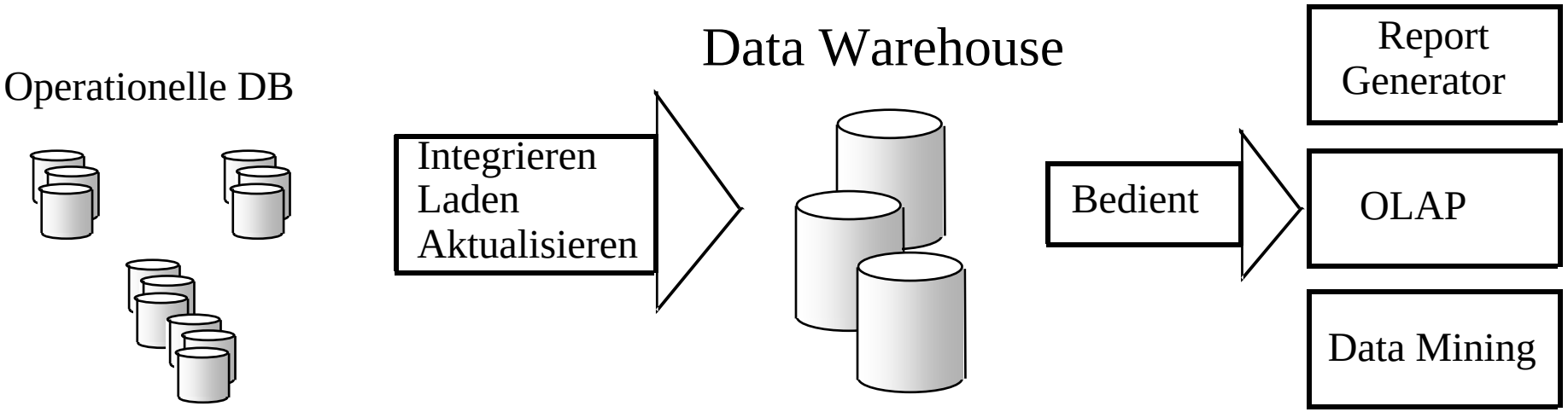
Algorithmus GDBSCAN

- dasselbe algorithmische Schema wie DBSCAN
- anstelle einer N_ε-Anfrage eine N_{NPred}-Anfrage
- anstelle der Bedingung $|N_\varepsilon| \geq MinPts$

  das *MinWeight*-Prädikat auswerten
- Laufzeitkomplexität O(n log$n$) bei geeigneter Unterstützung der N_{NPred}-Anfrage

3.5 Inkrementelles dichte-basiertes Clustering

Data Mining in einem Data Warehouse



- Updates werden gesammelt und periodisch im Data Warehouse nachgeführt
- alle vom Data Warehouse abgeleiteten Muster müssen aktualisiert werden

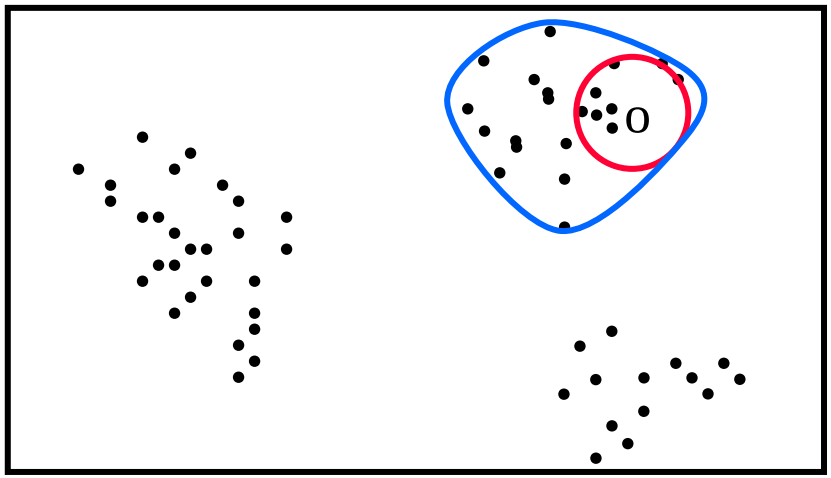
⇒ inkrementelle Data-Mining-Algorithmen

3.5 Inkrementelles dichte-basiertes Clustering

Inkrementelles GDBSCAN

[Ester, Kriegel, Sander, Wimmer & Xu 1998]

- nicht die ganze aktualisierte Datenbank erneut clustern
- nur die alten Cluster und die eingefügten / gelöschten Objekte betrachten
- GDBSCAN: nur die Nachbarschaft eines eingefügten / gelöschten Objekts und die davon dichte-erreichbaren Objekte sind *betroffen*



o Einfügung / Löschung

N_{NPred} (o)

Vom Update betroffen

3.5 Inkrementelles dichte-basiertes Clustering

Grundlagen

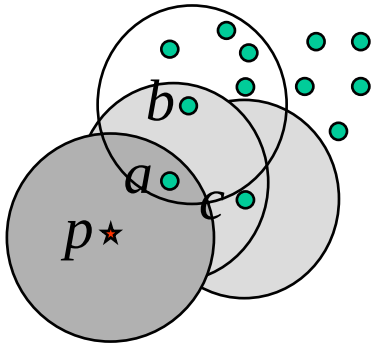
- MinWeight-Prädikat muß *inkrementell auswertbar* sein

  $weight(N) = \sum_{o \in N} weight(\{o\})$ und $MinWeight(N)$ definiert als $weight(N) \geq T$

- *Randobjekt*: gehört zum Cluster, ist aber kein Kernobjekt
- Potentielle Konzequenzen der Einfügung oder Löschung eines Objekts p

  In $N_{NPred}(p)$: Kernobjekte $\leftrightarrow$ Randobjekte $\leftrightarrow$ Rauschen

  In $N_{NPred}(q)$ mit $q \in N_{NPred}(p)$: Randobjekte $\leftrightarrow$ Rauschen

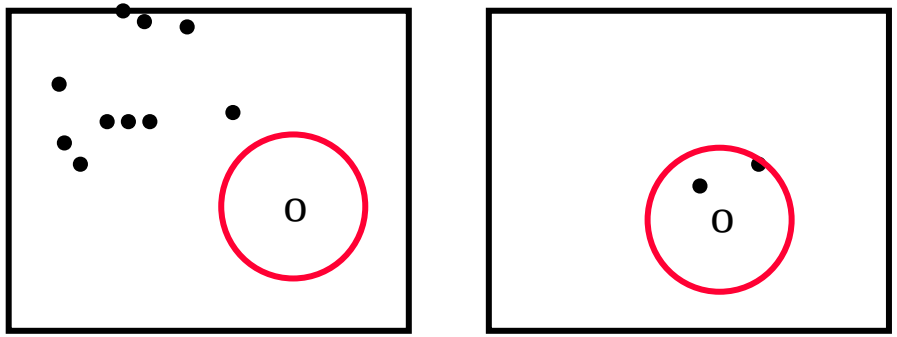


MinPts = 4, ε wie gezeigt

a: Randobjekt $\leftrightarrow$ Kernobjekt
c: Rauschen $\leftrightarrow$ Randobjekt

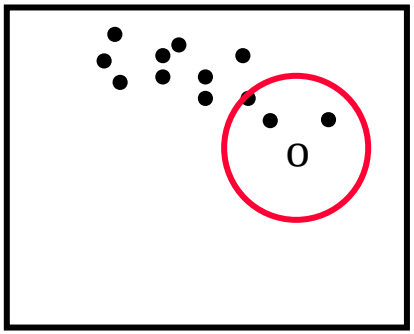
3.5 Inkrementelles dichte-basiertes Clustering

Einfüge-Algorithmus

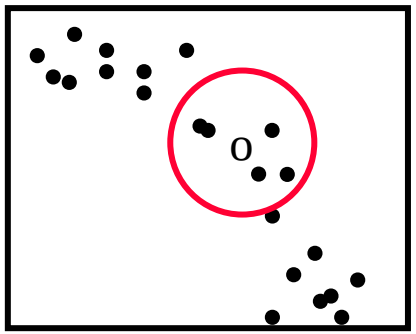


Rauschen

Neues Cluster



Erweiterung



Verschmelzen

o Einfügung

MinPts = 3, ε wie gezeigt

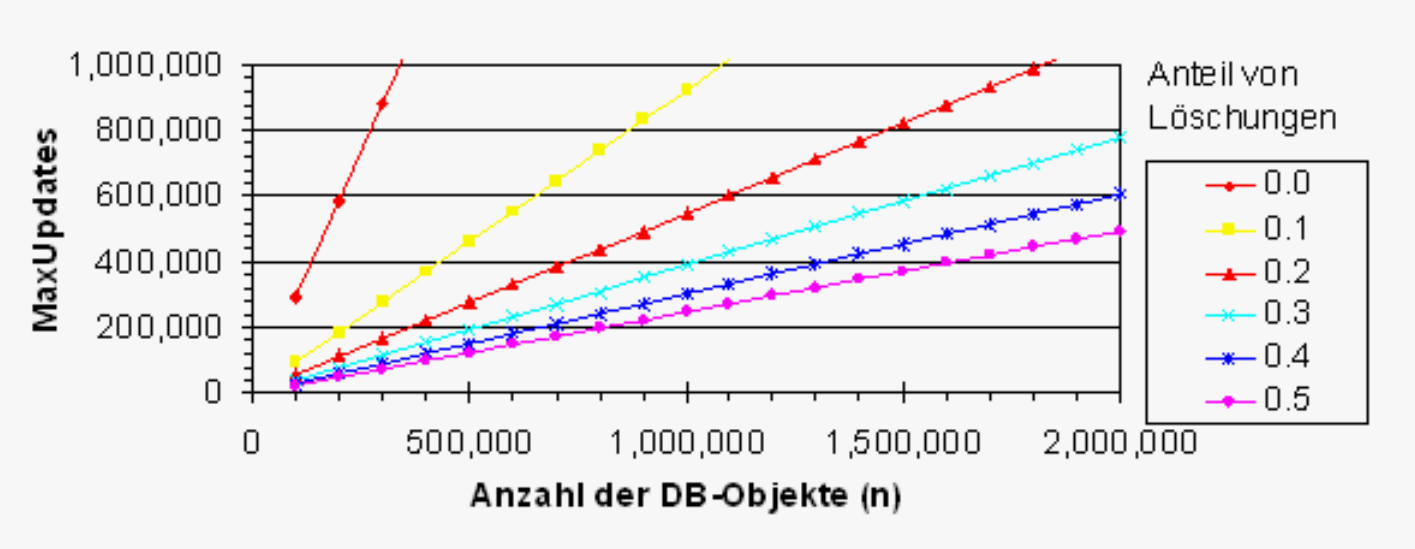
Virtuelle Cluster IDs

- speichere die Information, welche Cluster verschmolzen wurden
- Verschmelzen erfordert keinen Zugriff auf die betroffenen Cluster

3.5 Inkrementelles dichte-basiertes Clustering

Experimentelle Untersuchung

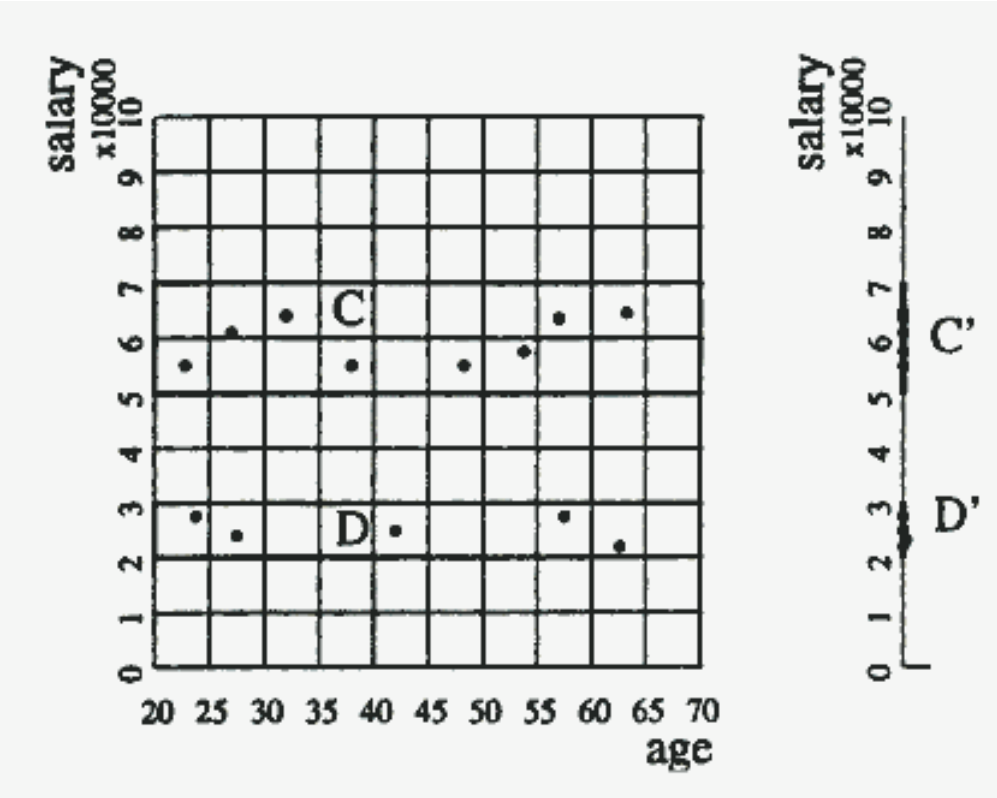
MaxUpdates: Zahl von Updates, bis zu denen Inkrementelles GDBSCAN effizienter ist als GDBSCAN angewendet auf die ganze aktualisierte Datenbank



➡ sogar für 50 % Löschungen: *MaxUpdates* = 25 % der Datenbank Größe

3.5 Subspace Clustering

Motivation



Cluster nur im
1-dimensionalen Unterraum
„salary“

3.5 Subspace Clustering

CLIQUE [Agrawal, Gehrke, Gunopulos & Raghavan 1998]

1. Identifikation von Unterräumen mit Clustern
2. Identifikation von Clustern
3. Erzeugung von Cluster-Beschreibungen

- *Cluster*: „dichte Region“ im Datenraum
- Dichte-Grenzwert τ

  Region ist *dicht*, wenn sie mehr als τ Punkte enthält
- Gitterbasierter Ansatz

  jede Dimension wird in ξ Intervalle aufgeteilt

  Cluster ist Vereinigung von verbundenen dichten Regionen

3.5 Subspace Clustering

Identifikation von Unterräumen mit Clustern

- Aufgabe: Entdecken dichter Basis-Regionen
- naiver Ansatz

  berechne Histogramme für alle Teilmengen der Dimensionen

  ⇒ ineffizient für hoch-dimensionale Daten (O (2^d) für *d* Dimensionen)
- Greedy-Algorithmus (Bottom-Up)

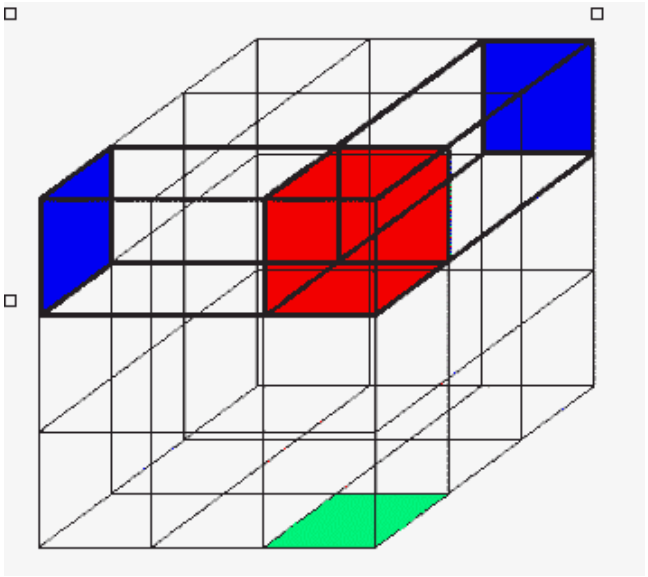
  beginne mit der leeren Menge

  nehme jeweils eine Dimension dazu
- Grundlage dieses Algorithmus: *Monotonie-Eigenschaft*

  wenn eine Region *R* im *k*-dimensionalen Raum dicht ist, dann ist auch jede Projektion von *R* in einen (*k*-1)-dimensionalen Unterraum dicht

3.5 Subspace Clustering

Beispiel



2-dim. dichte Regionen

3-dim. Kandidaten-Region

2-dim. Region, die geprüft werden muß

- Laufzeitkomplexität des Greedy-Algorithmus $O(\varsigma^k + n \cdot k)$

  für n Datenbank-Objekte und k = höchste Dimension einer dichten Region
- heuristische Reduktion der Anzahl der Kandidaten-Regionen

  Anwendung des „Minimum Description Length“ - Prinzips

3.5 Subspace Clustering

Identifikation von Clustern

- Aufgabe: Finden maximaler Mengen verbundener dichter Regionen
- Gegeben: alle dichten Regionen in demselben *k*-dimensionalen Unterraum
- „depth-first“-Suche in folgendem Graphen (Suchraum)

  Knoten: dichte Regionen

  Kanten: gemeinsame Kanten / Dimensionen der beiden dichten Regionen
- Laufzeitkomplexität

  dichte Regionen im Hauptspeicher (z.B. Hashbaum)

  für jede dichte Region 2 *k* Nachbarn zu prüfen

  $\Rightarrow$ Zahl der Zugriffe zur Datenstruktur: 2 *k n*

3.5 Subspace Clustering

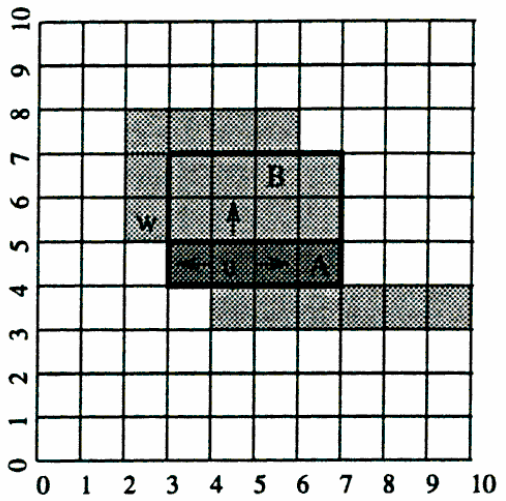
Erzeugung von Cluster-Beschreibungen

- Gegeben: ein Cluster, d.h. eine Menge verbundener dichter Regionen
- Aufgabe: Finden optimaler Überdeckung dieses Clusters durch eine

  Menge von Hyperrechtecken
- Standard-Methoden

  das Problem ist NP-hart

  zu ineffizient für große Werte von *d*

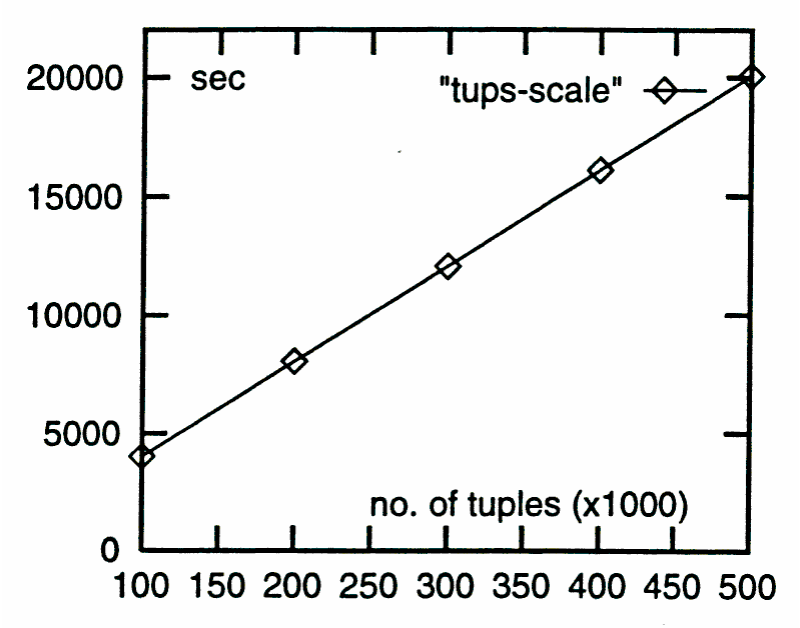


- Heuristische Methode
  1. überdecke das Cluster durch maximale Regionen
  2. entferne redundante Regionen

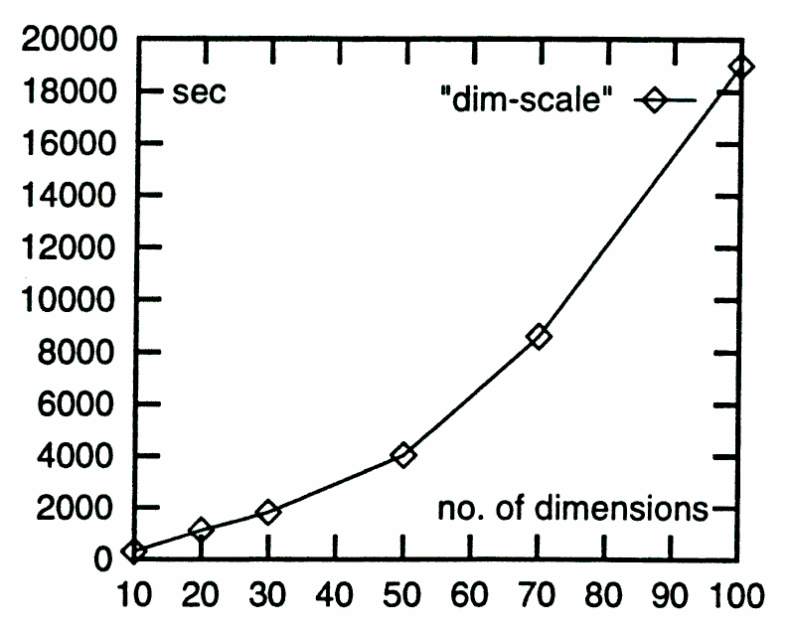
3.5 Subspace Clustering

Experimentelle Untersuchung

Laufzeit



Laufzeit



Laufzeitkomplexität von CLIQUE

linear in n , superlinear in d

3.5 Subspace Clustering

Diskussion

+ automatische Entdeckung von Unterräumen mit Clustern
+ automatische Entdeckung von Clustern
+ keine Annahme über die Verteilung der Daten
+ Unabhängigkeit von der Reihenfolge der Daten
+ gute Skalierbarkeit mit der Anzahl *n* der Datensätze

- Genauigkeit des Ergebnisses hängt vom Parameter ξ ab
- braucht eine Heuristik, um den Suchraum aller Teilmengen der Dimensionen einzuschränken

  ⇨ findet u.U. nicht alle Unterräume mit Clustern