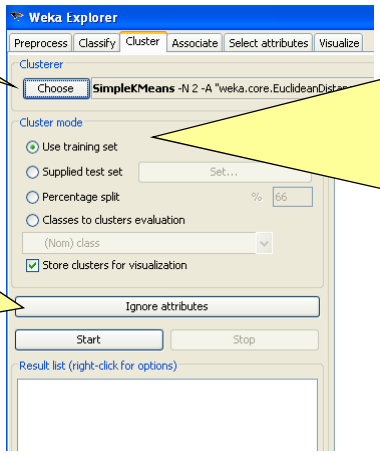
Clustering con Weka
Soluzioni degli esercizi

Prof. Matteo Golfarelli
Alma Mater Studiorum - Università di Bologna

L'interfaccia

Algoritmo utilizzato per il clustering

E' possibile escludere un sottoinsieme degli attributi dal calcolo delle distanze



Modalità di verifica dei risultati: indica il dataset su cui sono calcolati gli indici statistici che può essere diverso da quello in base al quale sono effettivamente costruiti i cluster (es. centroidi di kMeans)

In alternativa è possibile utilizzare un attributo classe per verificare la corrispondenza tra cluster e classe (se questa è nota)

Il data set Iris

- Il data set Iris modella le caratteristiche di una famiglia di piante
  - ✓ 150 istanze
  - ✓ Nessun dato mancante

Attributo	Descrizione
SepalLength	Lunghezza del sepalo
SepalWidth	Larghezza del sepalo
PetalLength	Lunghezza del petalo
PetalWidth	Larghezza del petalo

Pre-processing

- Gli algoritmi di clustering necessitano di una misura di distanza, nei casi che vedremo la distanza euclidea.

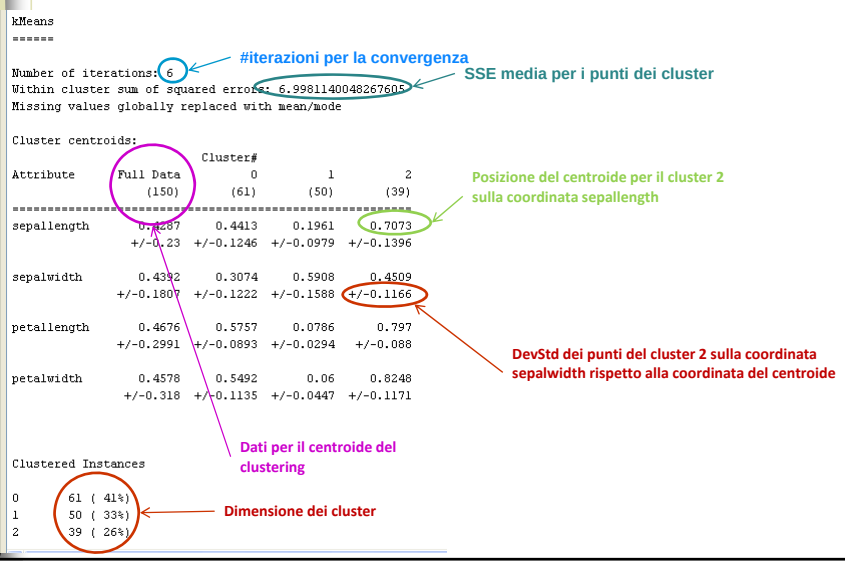
- Nel caso in cui gli attributi coinvolti abbiano range di valore diversi è sempre necessario normalizzare tali range in modo che ognuno di essi abbia la stessa influenza nel calcolo del risultato
  - ✓ Normalizzare gli attributi numerici utilizzando il filtro Unsupervised → Attribute→Normalize

Simple K-means: i parametri

- DisplayStdDev: mostra la deviazione standard delle distanze dei singoli punti rispetto al centro del cluster. La misura è riportata separatamente per ogni attributo
  - ✓ Minore la StdDev maggiore la coesione del cluster rispetto all'attributo.
  - ✓ Permette di scegliere quali attributi utilizzare nel calcolo della similarità.
- Distance function: funzione distanza utilizzata nel calcolo
- MaxIteration: numero massimo di iterazioni per ottenere la convergenza
- NumCluster:valore di k
- Seed: valore random per la scelta dei centroidi iniziali
  - ✓ Cambiandolo cambia il loro posizionamento iniziale

Simple K-means: i risultati

- Eseguire l'algoritmo ponendo DisplayStdDev=true e NumCluster=3



Simple K-means: i risultati

- Rieseguire l'algoritmo selezionando Classes to cluster evaluation

```
Class attribute: class
Classes to Clusters:

  0  1  2  <-- assigned to cluster
  0 50  0 | Iris-setosa
 47  0  3 | Iris-versicolor
 14  0 36 | Iris-virginica

Cluster 0 <-- Iris-versicolor
Cluster 1 <-- Iris-setosa
Cluster 2 <-- Iris-virginica

Incorrectly clustered instances :       17.0      11.3333 %
```

Matrice di confusione

Numero e percentuale degli errori commessi in base alla corrispondenza cluster-classi

Corrispondenza tra cluster e classi determinata in base al numero di elementi del cluster che appartengono alla classe

K-means: analisi del risultato

- Visualizzare il risultato del clustering per le diverse coppie di attributi e discutere il risultato in base al posizionamento dei centroidi e alla dispersione dei punti. Come è possibile migliorare il risultato?

- Risulta evidente che:
  - ✓ Il cluster 1 è meglio separato dagli altri visto il posizionamento dei suoi centroidi e i relativi valori di dispersione
  - ✓ I cluster 0 e 2 risultano poco separati sugli attributi sepallength e sepalwidth
    - 0.4413+0.1246=0.5659≈0.7073-0.1396=0.5677
    - 0.3074+0.1222=0.4296≈0.4509/0.1166=0.3353

- Per migliorare il risultato si possono eliminare gli attributi scarsamente informativi
  - ✓ Verificare l'efficacia attivando la verifica mediante le classi

Il Data set FoodNutrients

- Contiene le informazioni nutrizionali di 25 alimenti
  - ✓ Caricare il file FoodNutrients.arff

Attributo	Descrizione
EnergyCal	Calorie per 100 gr
ProteinGram	Proteine per 100 gr
FatGram	Grassi per 100gr
CalciumMG	Calcio in milligrammi per 100 gr
IronMG	Ferro in milligrammi per 100gr

- Normalizzare i dati e clusterizzarli utilizzando k-means per valori crescenti di k [2,6]
- Analizzare i risultati facendo ipotesi sul significato delle classi in base alle caratteristiche dei centroide e alle StdDev dei cluster

Il Data set FoodNutrients

```
Number of iterations: 2
Within cluster sum of squared errors: 5.069321339929419
Missing values globally replaced with mean/mode

Cluster centroids:
                          Cluster#
Attribute      Full Data          0          1
                    (27)        (9)       (18)
=============================================
EnergyCal         0.4331      0.763     0.2681
                +/-0.2699  +/-0.1442  +/-0.1233

ProteinGram       0.6316     0.6316     0.6316
                +/-0.2238  +/-0.0912  +/-0.2696

FatGram           0.3285     0.6988     0.1433
                +/-0.2962  +/-0.1701   +/-0.108

CalciumMG         0.1076     0.0104     0.1562
                +/-0.2156  +/-0.0018  +/-0.2521

IronMG            0.3421     0.3576     0.3343
                +/-0.2657  +/-0.0386  +/-0.3272
```

```
Number of iterations: 3
Within cluster sum of squared errors: 4.077107847192327
Missing values globally replaced with mean/mode

Cluster centroids:
                          Cluster#
Attribute      Full Data          0          1          2
                    (27)        (8)       (12)        (7)
=====================================================
EnergyCal         0.4331     0.7917     0.3367     0.1886
                +/-0.2699  +/-0.1236   +/-0.102  +/-0.1376

ProteinGram       0.6316     0.6184     0.7982     0.3609
                +/-0.2238  +/-0.0878  +/-0.1286  +/-0.1908

FatGram           0.3285     0.7336     0.1908     0.1015
                +/-0.2962  +/-0.1438   +/-0.125  +/-0.1035

CalciumMG         0.1076     0.0104     0.1192     0.1989
                +/-0.2156   +/-0.002  +/-0.2862  +/-0.1691

IronMG            0.3421     0.3523     0.3379     0.3377
                +/-0.2657  +/-0.0376  +/-0.2607  +/-0.4237
```

- C0 è ben caratterizzato per valori elevati di EnergyCal e FatGram
- Nella soluzione a 3 cluster il C0 rimane invariato mentre la caratterizzazione tra C1 e C2 è rilevante solo per ProteinGram
- In entrambe le soluzioni IronMG è poco caratterizzante

Il Data set FoodNutrients

```
Number of iterations: 3
Within cluster sum of squared errors: 3.229030897655616
Missing values globally replaced with mean/mode

Cluster centroids:
                          Cluster#
Attribute      Full Data          0          1          2          3
                    (27)        (8)       (11)        (7)        (1)
=================================================================
EnergyCal         0.4331     0.7917     0.3345     0.1886       0.36
                +/-0.2699  +/-0.1236  +/-0.1067  +/-0.1376       +/-0

ProteinGram       0.6316     0.6184      0.799     0.3609     0.7895
                +/-0.2238  +/-0.0878  +/-0.1348  +/-0.1908       +/-0

FatGram           0.3285     0.7336      0.189     0.1015     0.2105
                +/-0.2962  +/-0.1438   +/-0.131  +/-0.1035       +/-0

CalciumMG         0.1076     0.0104     0.0392     0.1989          1
                +/-0.2156   +/-0.002  +/-0.0739  +/-0.1691       +/-0

IronMG            0.3421     0.3523     0.3355     0.3377     0.3636
                +/-0.2657  +/-0.0376  +/-0.2733  +/-0.4237       +/-0
```

- L'aggiunta di C3 permette di caratterizzare meglio la differenza tra C1 e C2 in termini di CalciumMG
- C3 è composto da un solo elemento
- IronMG rimane poco caratterizzante

Il Data set FoodNutrients

```
Number of iterations: 4
Within cluster sum of squared errors: 2.750432407251998
Missing values globally replaced with mean/mode

Cluster centroids:
                          Cluster#
Attribute      Full Data          0          1          2          3          4
                    (27)        (7)        (8)        (6)        (1)        (5)
=============================================================================
EnergyCal         0.4331      0.821     0.2883     0.1533       0.36      0.472
                +/-0.2699  +/-0.0991  +/-0.0781  +/-0.1108       +/-0  +/-0.0831

ProteinGram       0.6316      0.609     0.8553     0.3421     0.7895     0.6211
                +/-0.2238  +/-0.0904  +/-0.1043  +/-0.2018       +/-0  +/-0.1012

FatGram           0.3285     0.7669      0.125     0.0746     0.2105     0.3684
                +/-0.2962  +/-0.1171  +/-0.0805  +/-0.0822       +/-0   +/-0.093

CalciumMG         0.1076     0.0103     0.0518     0.2279          1     0.0105
                +/-0.2156  +/-0.0021  +/-0.0844  +/-0.1651       +/-0  +/-0.0092

IronMG            0.3421     0.3481     0.3545     0.3697     0.3636     0.2764
                +/-0.2657  +/-0.0385  +/-0.3115  +/-0.4547       +/-0  +/-0.1462
```

- C4 raccoglie gli alimenti con valori medi di EnergyCal, ProteinGram, FatGram
- Per quanto riguarda CalciumMG C4 è molto simile a C0
- IronMG rimane poco caratterizzante

Il Data set FoodNutrients

```
Number of iterations: 4
Within cluster sum of squared errors: 1.5257151920333285
Missing values globally replaced with mean/mode

Cluster centroids:
                        Cluster#
Attribute      Full Data          0          1          2          3          4          5
                    (27)        (7)        (8)        (2)        (1)        (5)        (4)
=============================================================================================
EnergyCal         0.4331     0.821     0.2883     0.0333       0.36      0.472     0.2133
                +/-0.2699  +/-0.0991  +/-0.0781  +/-0.0471      +/-0  +/-0.0831   +/-0.073

ProteinGram       0.6316      0.609     0.8553     0.1053     0.7895     0.6211     0.4605
                +/-0.2238  +/-0.0904  +/-0.1043  +/-0.1489      +/-0  +/-0.1012  +/-0.0662

FatGram           0.3285     0.7669      0.125          0     0.2105     0.3684     0.1118
                +/-0.2962  +/-0.1171  +/-0.0805      +/-0      +/-0   +/-0.093  +/-0.0756

CalciumMG         0.1076     0.0103     0.0518     0.2017          1     0.0105      0.241
                +/-0.2156  +/-0.0021  +/-0.0844  +/-0.0156      +/-0  +/-0.0092  +/-0.2113

IronMG            0.3421     0.3481     0.3545     0.9455     0.3636     0.2764     0.0818
                +/-0.2657  +/-0.0385  +/-0.3115  +/-0.0771      +/-0  +/-0.1462  +/-0.1055
```

- Con l'aggiunta del nuovo cluster C0, C1 e C4 rimangono invariati
- Gli elementi di C5 sembrano provenire da C2 che si caratterizza ora per valori bassi per calorie, proteine e grassi e valori alti per il calcio e il ferro e ferro

FoodNutrients: ricapitolando....

Clust	Caratterizzazione
C0	cibi grassi altamente proteici ed energetici
C1	cibi proteici ma con pochi grassi e calorie
C2	cibi leggeri ma ricchi di calcio
C3	un solo elemento
C4	C4 cibi con apporto medio di grassi proteine e calorie
C5	cibi leggeri in termini di calorie e grassi ma ricchi di proteine, calcio e ferro

- Verifichiamo caricando il data set FoodNutrientClassified.arff che contiene la classificazione dei cibi in Tipi e Super tipi
  - ✓ Si attivi Classes to cluster evaluation

FoodNutrients: ricapitolando....

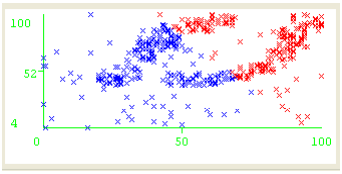
Clust	Caratterizzazione	Super tipo	Tipo
C0	cibi grassi altamente proteici ed energetici	Meat	Pork
C1	cibi proteici ma con pochi grassi e calorie	Meat	Beef
C2	cibi leggeri ma ricchi di calcio	Fish	Clams
C3	un solo elemento	Fish	No class
C4	cibi con apporto medio di grassi proteine e calorie	Meat	Lamb
C5	cibi leggeri in termini di calorie e grassi ma ricchi di proteine, calcio e ferro	Fish	Fish

Il Data set Coordinates

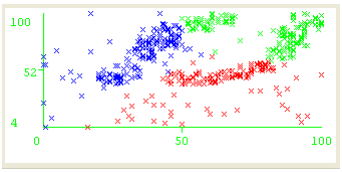
- Contiene le coordinate geografiche di 480 punti
  - ✓ Caricare il file Coordinates.arff
- Classificare i dati utilizzando k-means con un numero di cluster compreso tra 2 e 6
  - ✓ Come varia SSE?
  - ✓ A partire da quale valore di k SSE si stabilizza?
  - ✓ K-means è in grado di catturare i cluster naturali?
    - Perche?

Coordinates con K-means

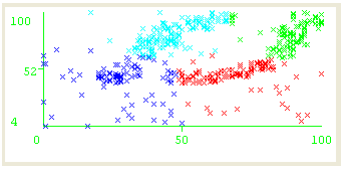
K=2
SSE=29.39



K=3
SSE=19.89

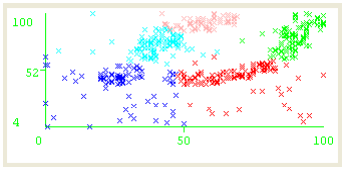


K=4
SSE=12.09

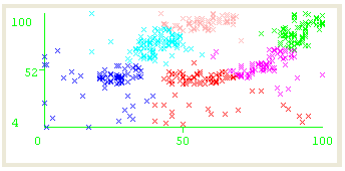


Coordinates con K-means

K=5
SSE=9.54



K=6
SSE=7.87



- SSE si stabilizza con K=5 perché i cluster individuati sono tutte scomposizioni dei singoli cluster naturali
- K-means non è adatto a questo data set poiché la forma allungata dei cluster naturali non può essere catturata

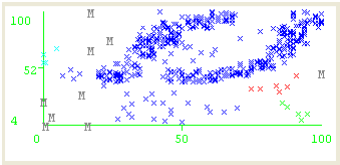
E' preferibile utilizzare DBSCAN

Coordinates con DBSCAN

- Valutare il risultato della classificazione con DBSCAN
- Identificare i corretti valori per epsilon e minpoints

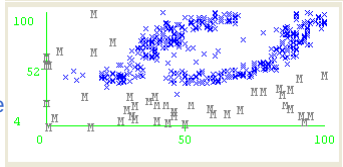
Eps=0.1
MinPts=4

- ✓ I parametri non catturano correttamente il rumore e le separazioni tra i cluster: tutte le zone risultano dense! E' necessario ricercare aree a maggiore densità



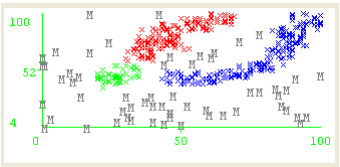
Eps=0.1
MinPts=8

- ✓ Aumentare la densità permette di identificare meglio i punti di rumore ma non consente di differenziare i due cluster naturali



Eps=0.05
MinPts=4

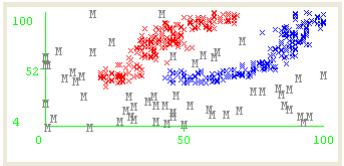
- ✓ Raggio insufficiente



Coordinates con DBSCAN

- Valutare il risultato della classificazione con DBSCAN
- Identificare i corretti valori per epsilon e minpoints

Eps=0.06
MinPts=8



Eps=0.06
MinPts=3

- ✓ Incorretta individuazione dei punti di rumore