Лекция 3

Кластеризация

Екатерина Тузова

Разбор летучки

Мотивирующий пример

Мотивирующий пример

Pokemon with stats (https://www.kaggle.com/abcsds/pokemon)

Датасет

```
In [4]: pokemons.head()
```

Out[4]:

	Name	Type 1	Type 2	Total	HP	Attack	Defense	Sp. Atk	Sp. Def	Speed	Generation	Legendary
0	Bulbasaur	Grass	Poison	318	45	49	49	65	65	45	1	False
1	Ivysaur	Grass	Poison	405	60	62	63	80	80	60	1	False
2	Venusaur	Grass	Poison	525	80	82	83	100	100	80	1	False
3	VenusaurMega Venusaur	Grass	Poison	625	80	100	123	122	120	80	1	False
4	Charmander	Fire	NaN	309	39	52	43	60	50	65	1	False

Постановка задачи кластеризации

Кластеризация – задача разделения объектов одной природы на несколько групп так, чтобы объекты в одной группе обладали одним и тем же свойством.

Постановка задачи кластеризации

Кластеризация – задача разделения объектов одной природы на несколько групп так, чтобы объекты в одной группе обладали одним и тем же свойством.

Кластеризация – это обучение без учителя.

Постановка задачи кластеризации

X – пространство объектов

$\rho : X \times X \to [0, \infty)$ – функция расстояния между объектами

Найти:

Y – множество кластеров

$a : X \to Y$ – алгоритм кластеризации

Степени свободы в постановке задачи

Степени свободы в постановке задачи

– Критерий качества кластеризации

Степени свободы в постановке задачи

- Критерий качества кластеризации
- Число кластеров неизвестно заранее

Степени свободы в постановке задачи

- Критерий качества кластеризации
- Число кластеров неизвестно заранее
- Результат кластеризации существенно зависит от метрики

Цели кластеризации

Цели кластеризации

– Сократить объём хранимых данных

Цели кластеризации

- Сократить объём хранимых данных
- Выделить нетипичные объекты

Цели кластеризации

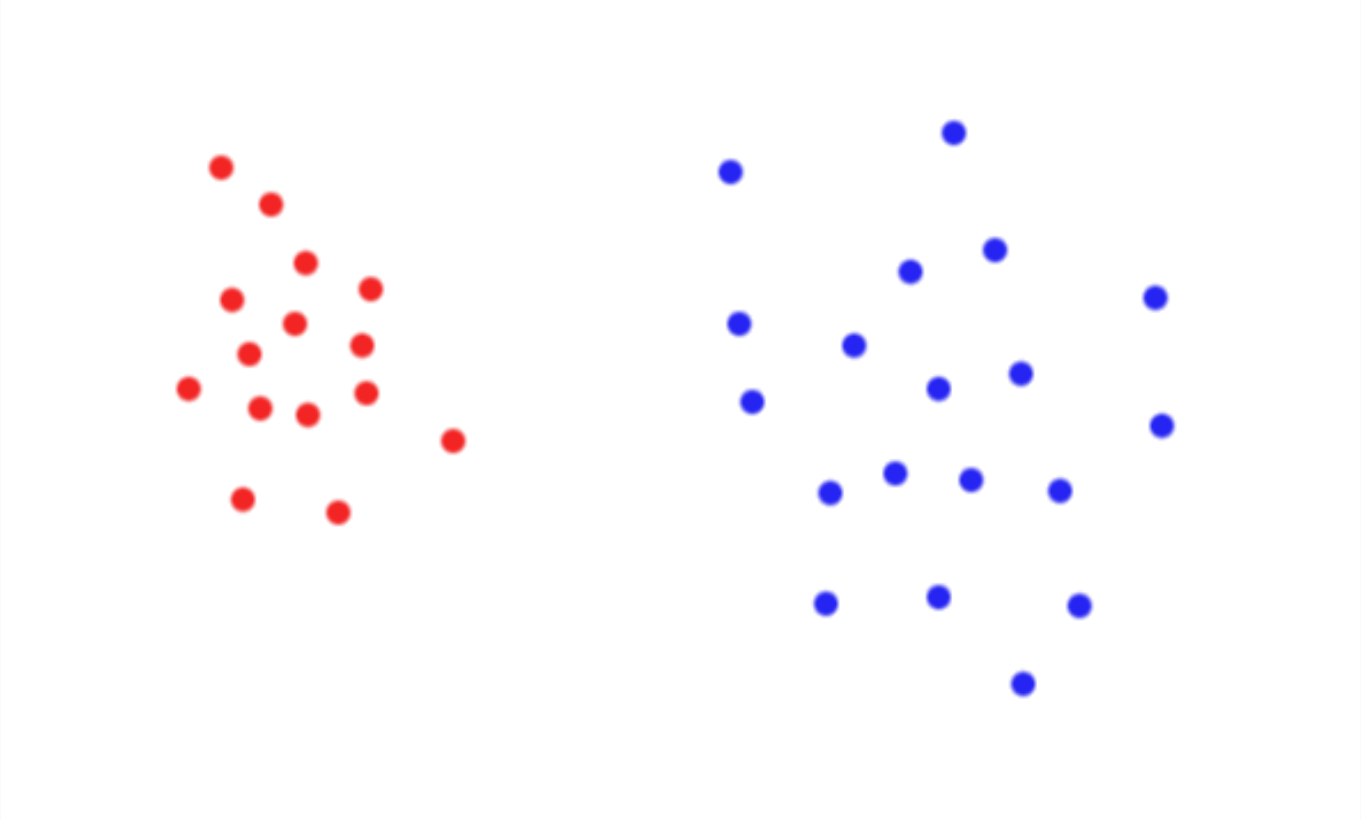
- Сократить объём хранимых данных
- Выделить нетипичные объекты
- Упростить дальнейшую обработку данных

Цели кластеризации

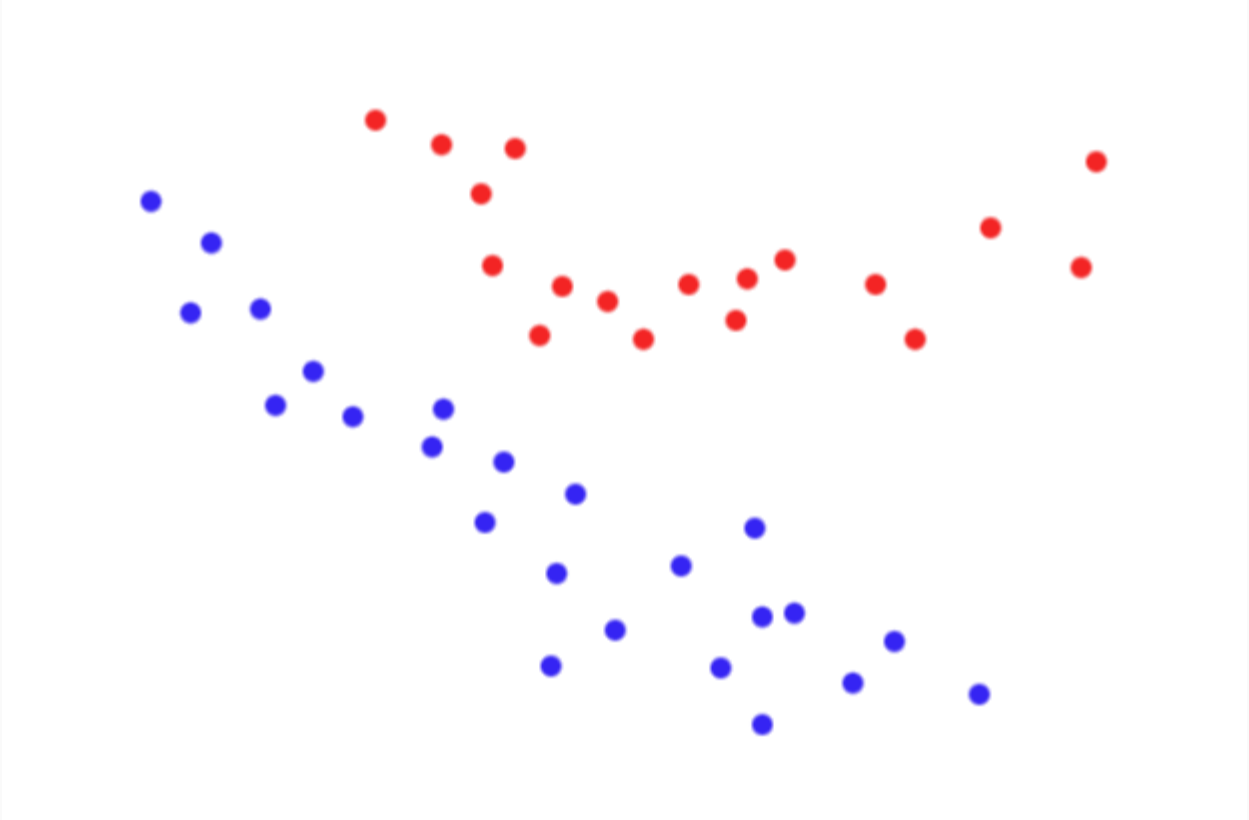
- Сократить объём хранимых данных
- Выделить нетипичные объекты
- Упростить дальнейшую обработку данных
- Построить иерархию множества объектов

Какие бывают кластеры?

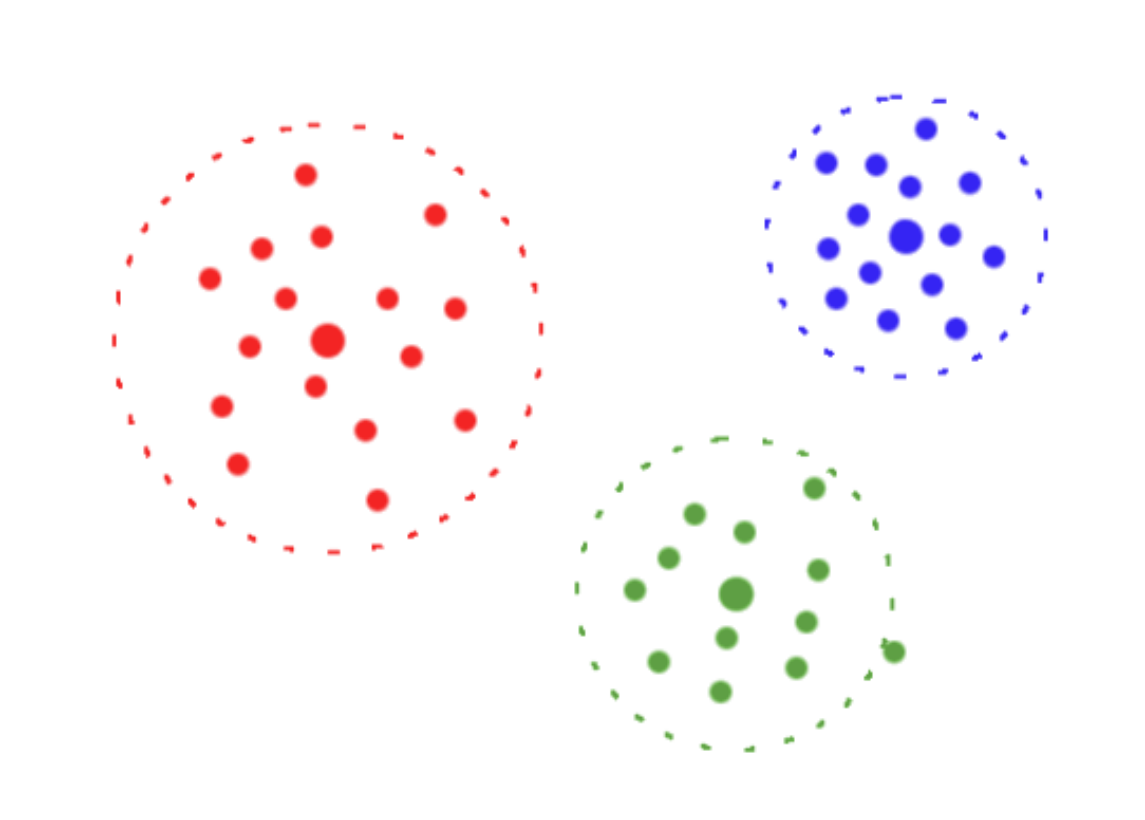
Сгущения



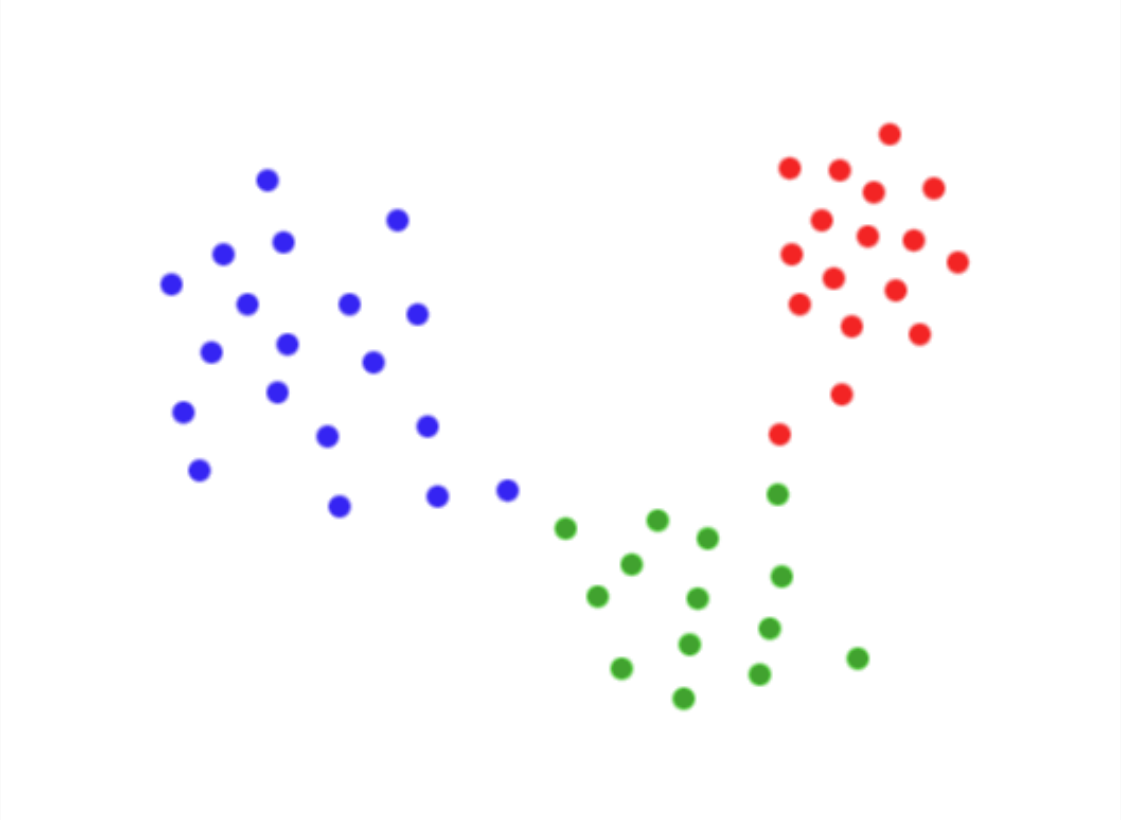
Ленты



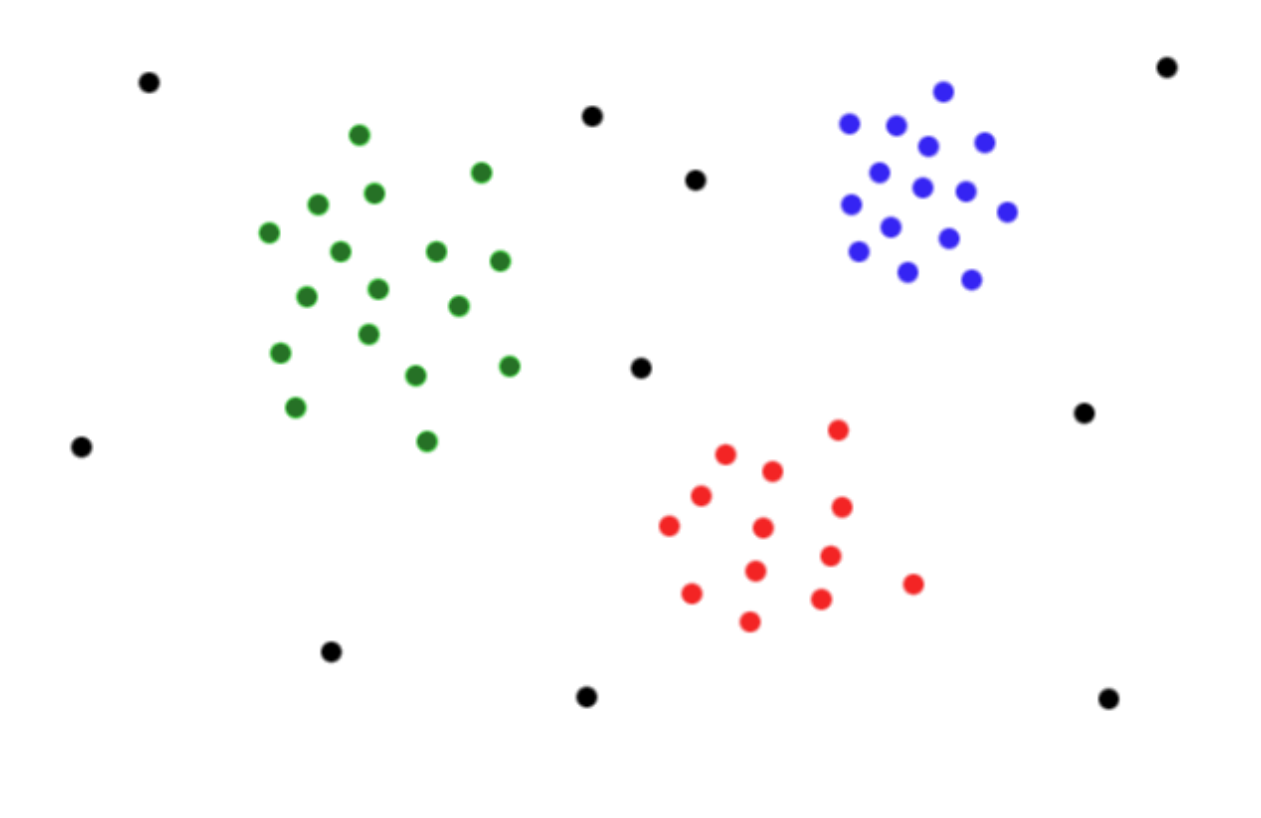
С центром



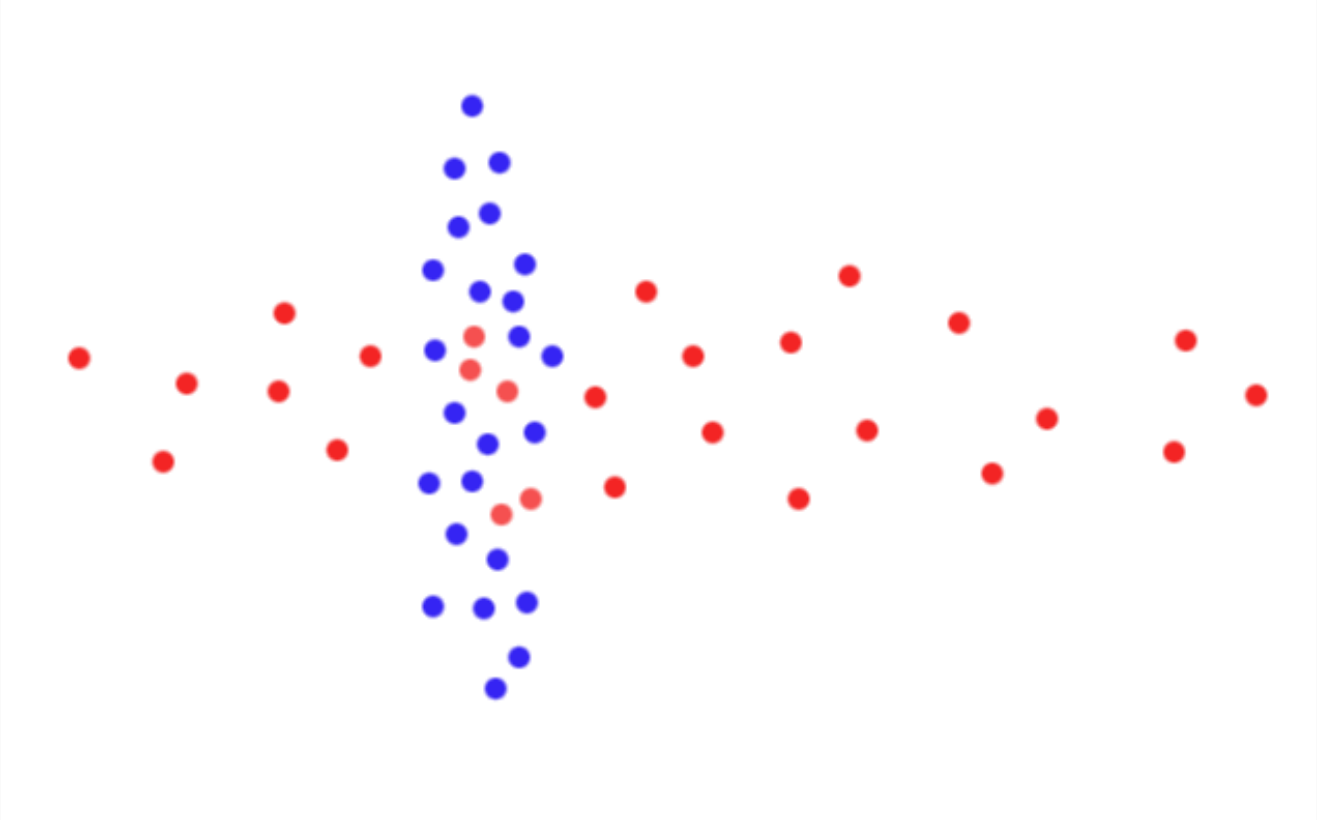
С перемычками



На фоне

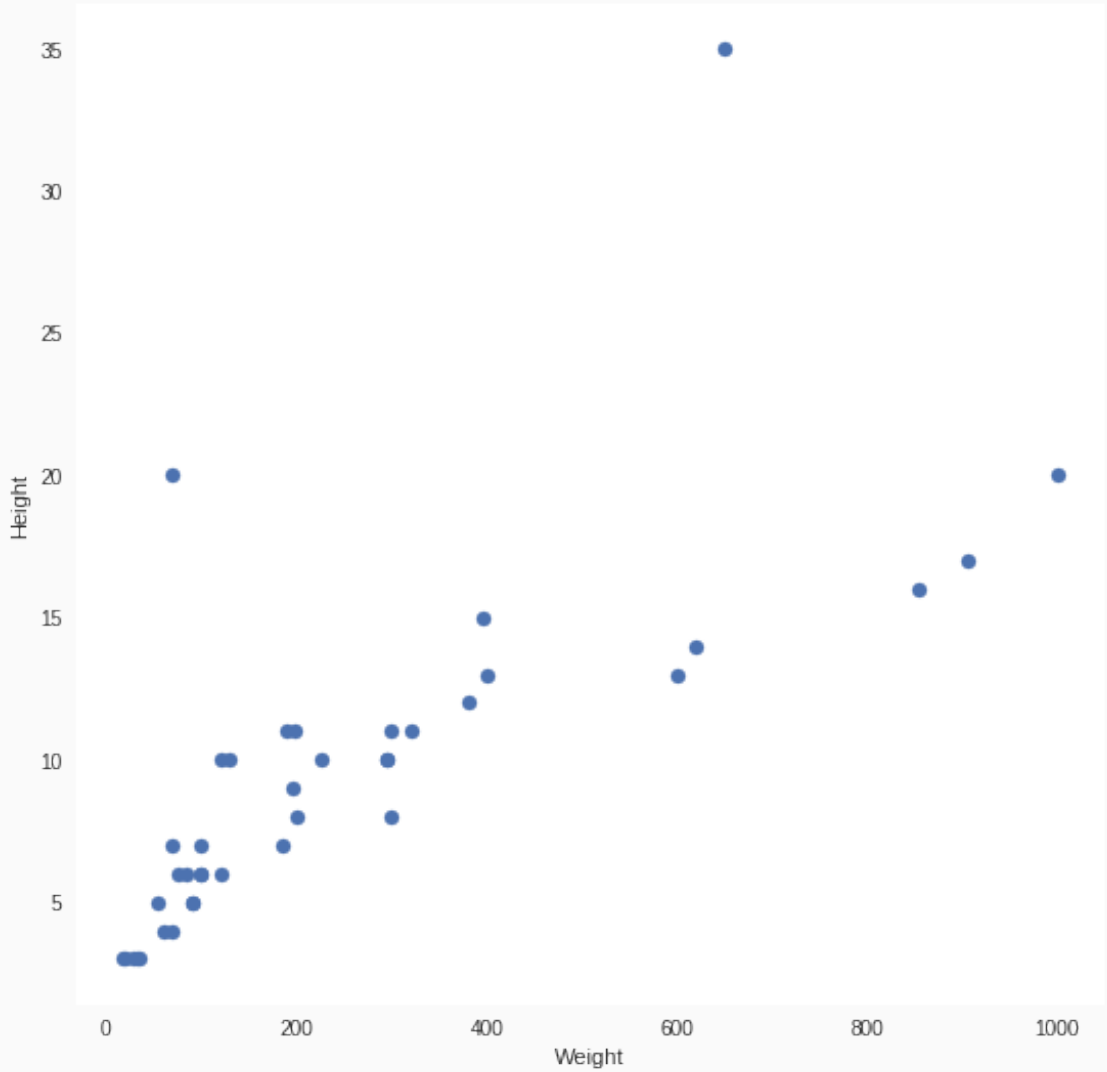


Перекрывающиеся

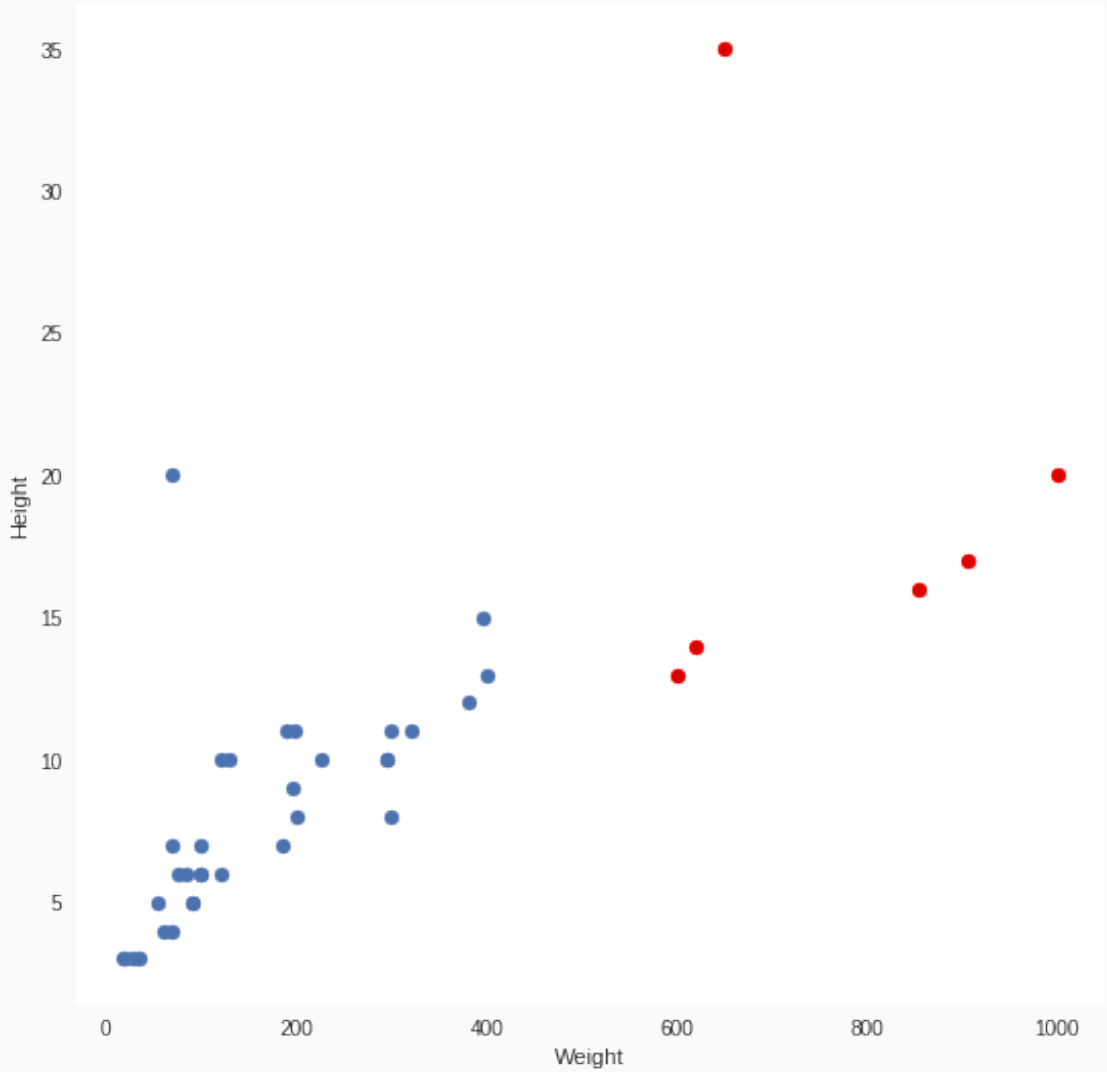


Чувствительность к выбору метрики

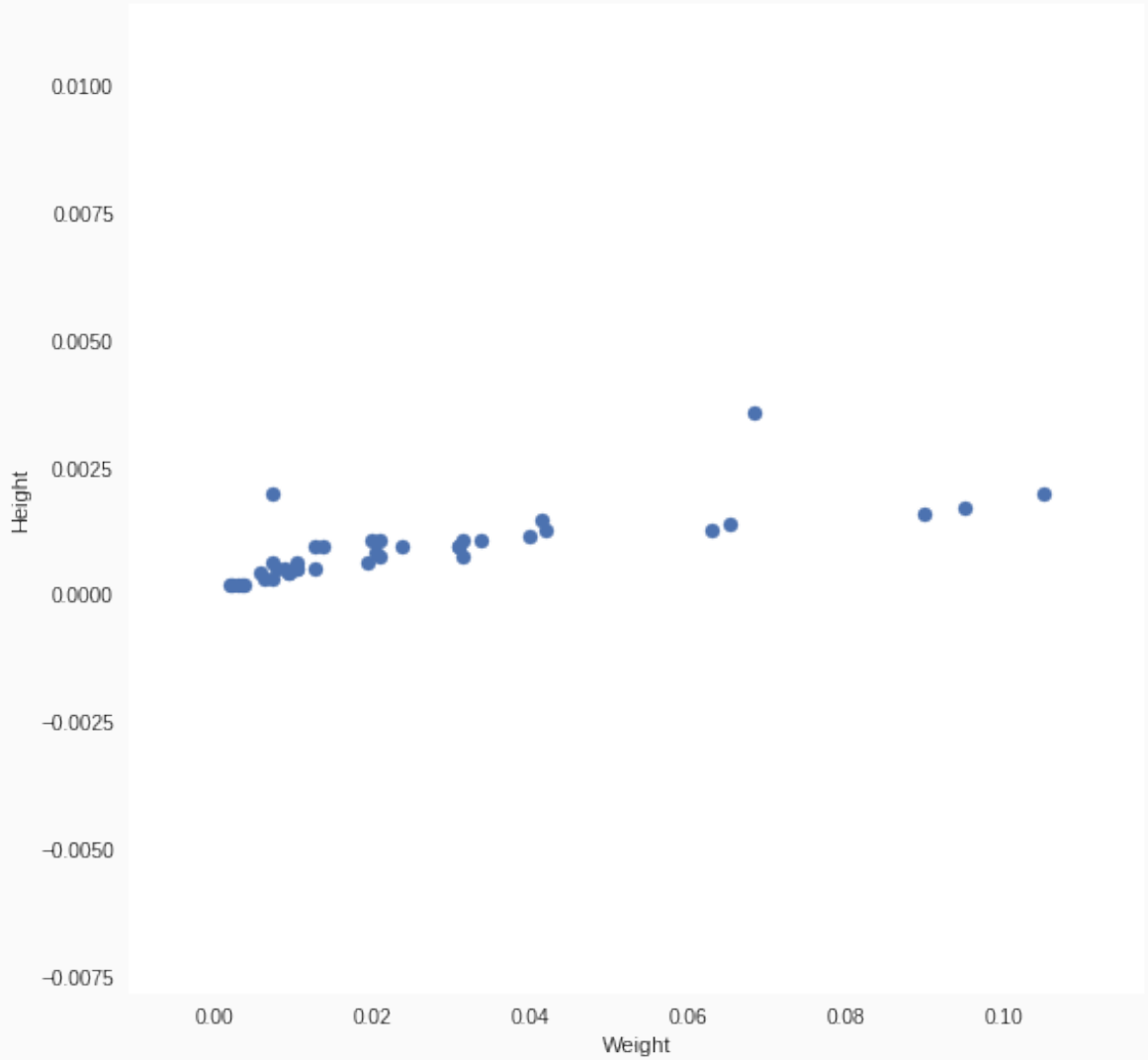
Чувствительность к выбору метрики



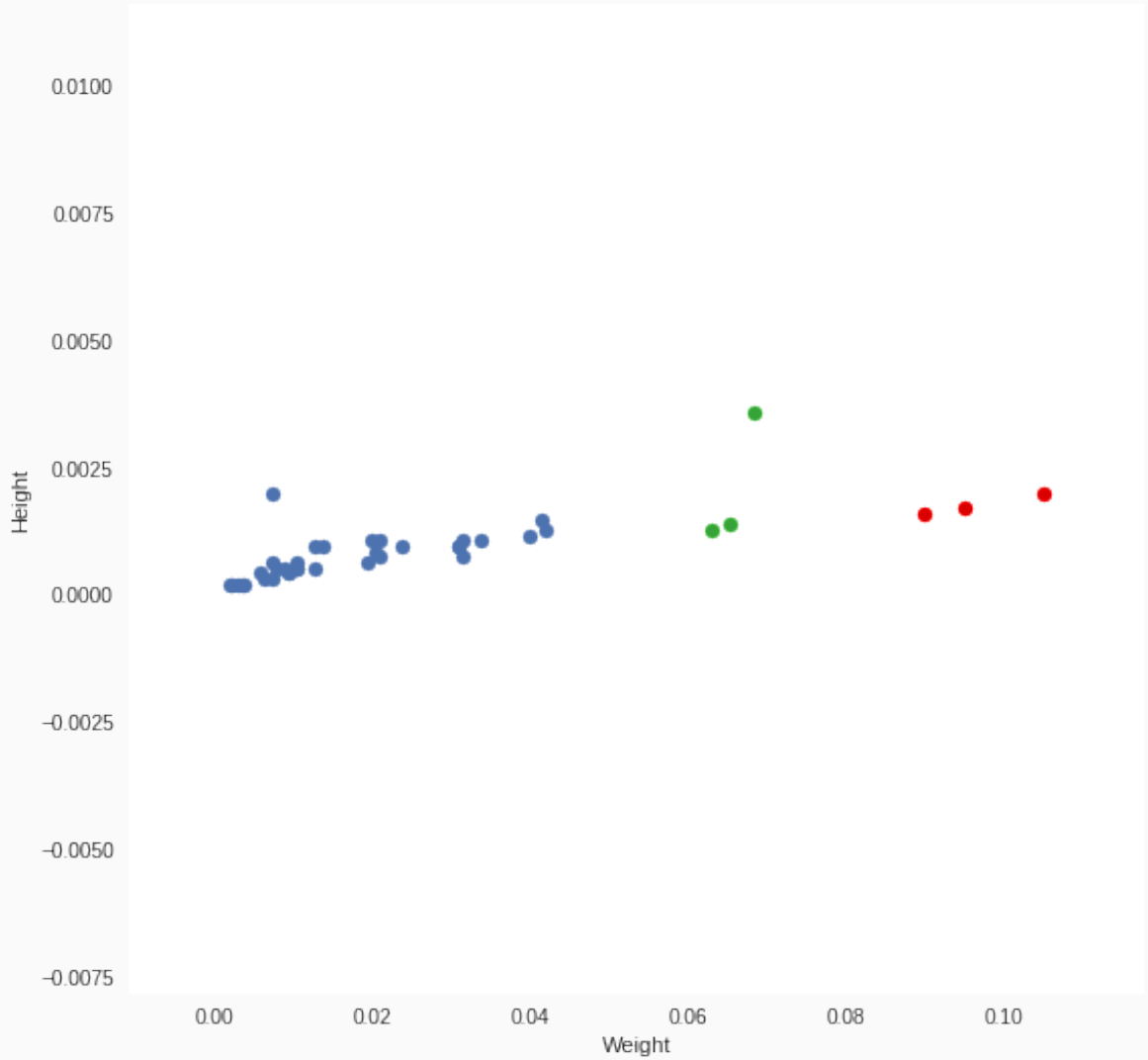
Чувствительность к выбору метрики



Чувствительность к выбору метрики



Чувствительность к выбору метрики



Оценка качества кластеризации

Оценка качества кластеризации

Идея: Минимизировать среднее внутрикластерное расстояние и при этом максимизировать среднее межкластерное расстояние.

Оценка качества кластеризации

Идея: Минимизировать среднее внутрикластерное расстояние и при этом максимизировать среднее межкластерное расстояние.

$$\frac{\sum\limits_{a(x_i)=a(x_j)} \rho(x_i, x_j)}{\sum\limits_{a(x_i)=a(x_j)} 1} \to \min$$

Оценка качества кластеризации

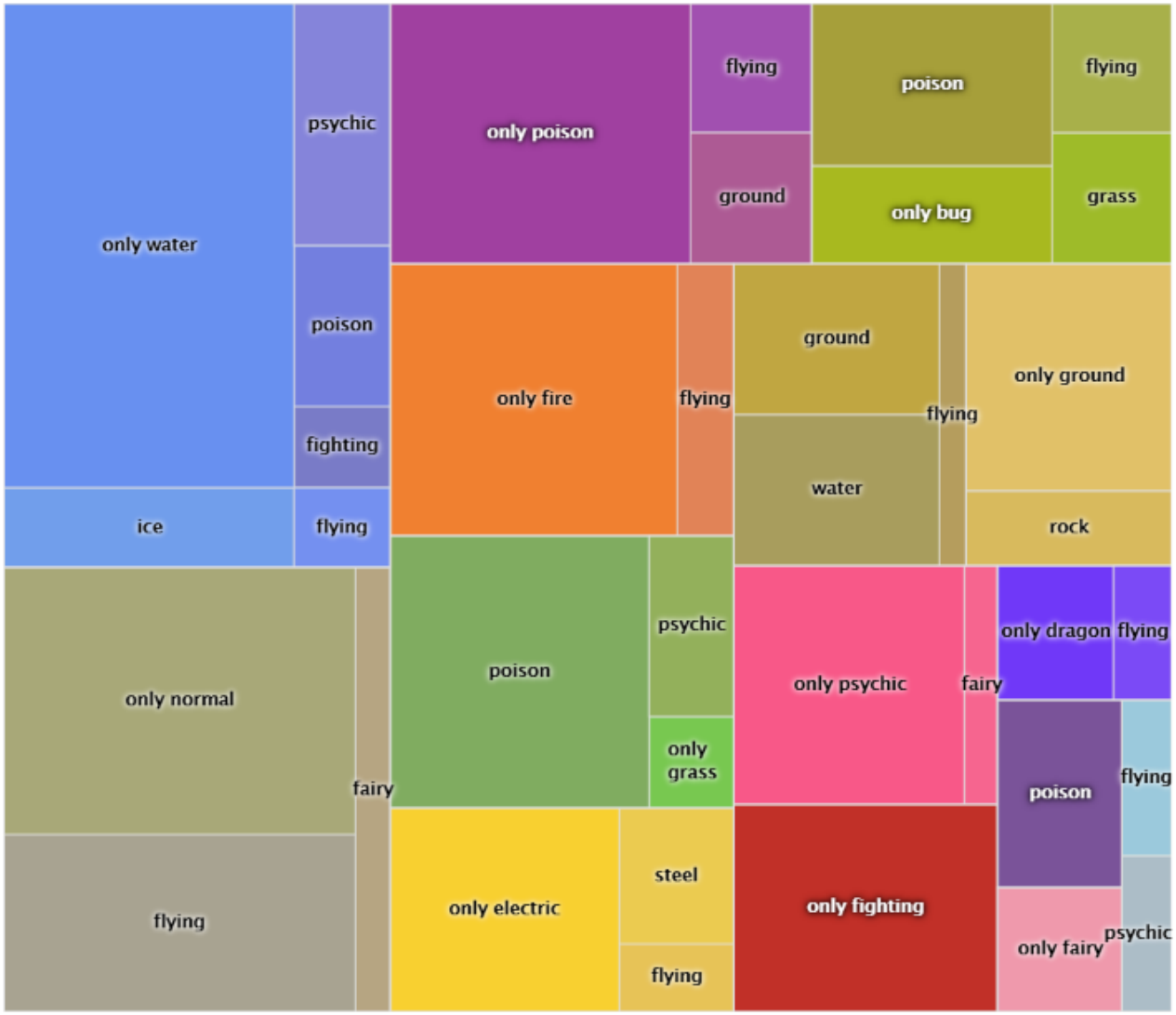
Идея: Минимизировать среднее внутрикластерное расстояние и при этом максимизировать среднее межкластерное расстояние.

$$\frac{\sum\limits_{a(x_i)=a(x_j)} \rho(x_i, x_j)}{\sum\limits_{a(x_i)=a(x_j)} 1} \to \min$$

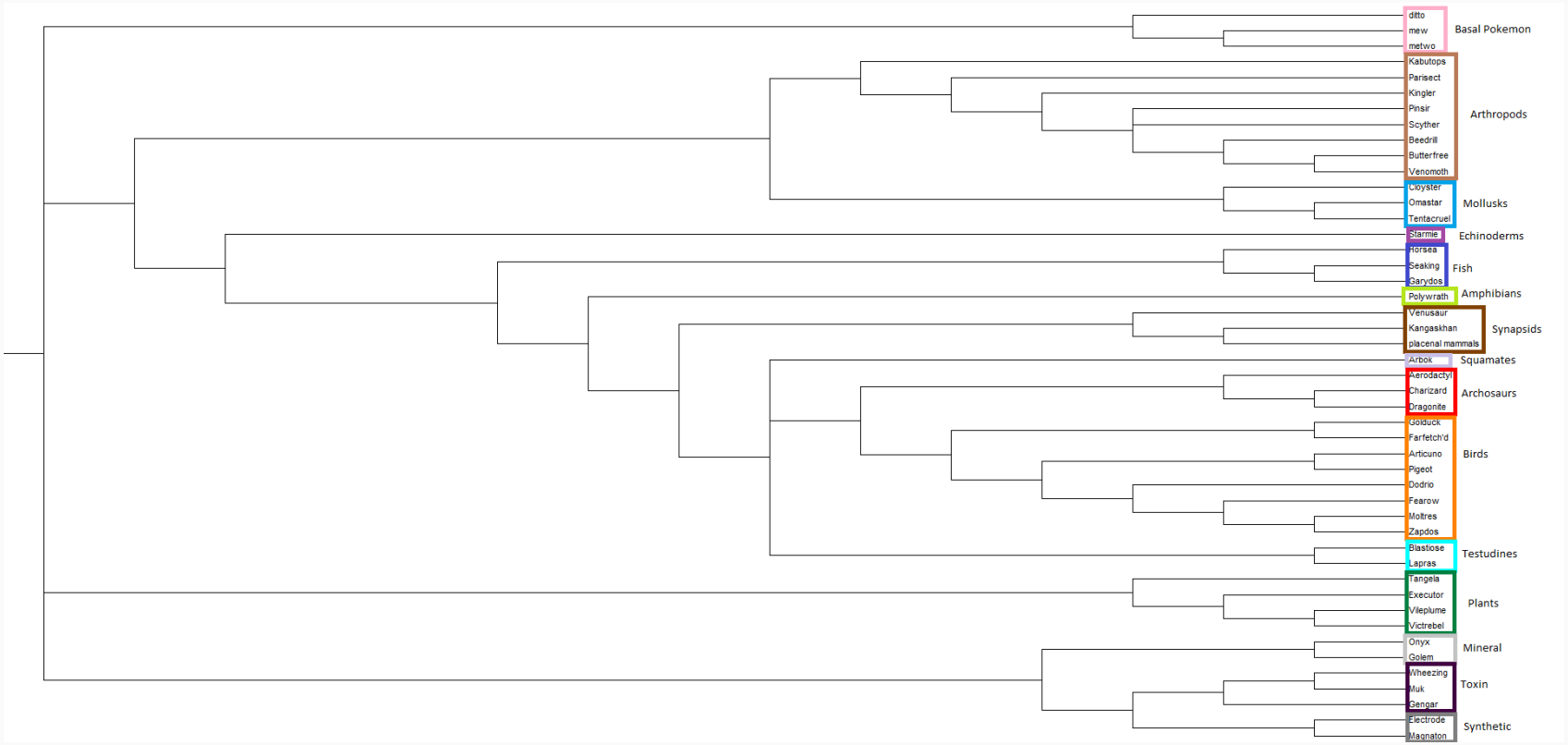
$$\frac{\sum\limits_{a(x_i)\neq a(x_j)} \rho(x_i, x_j)}{\sum\limits_{a(x_i)\neq a(x_j)} 1} \to \max$$

Визуализация кластеров

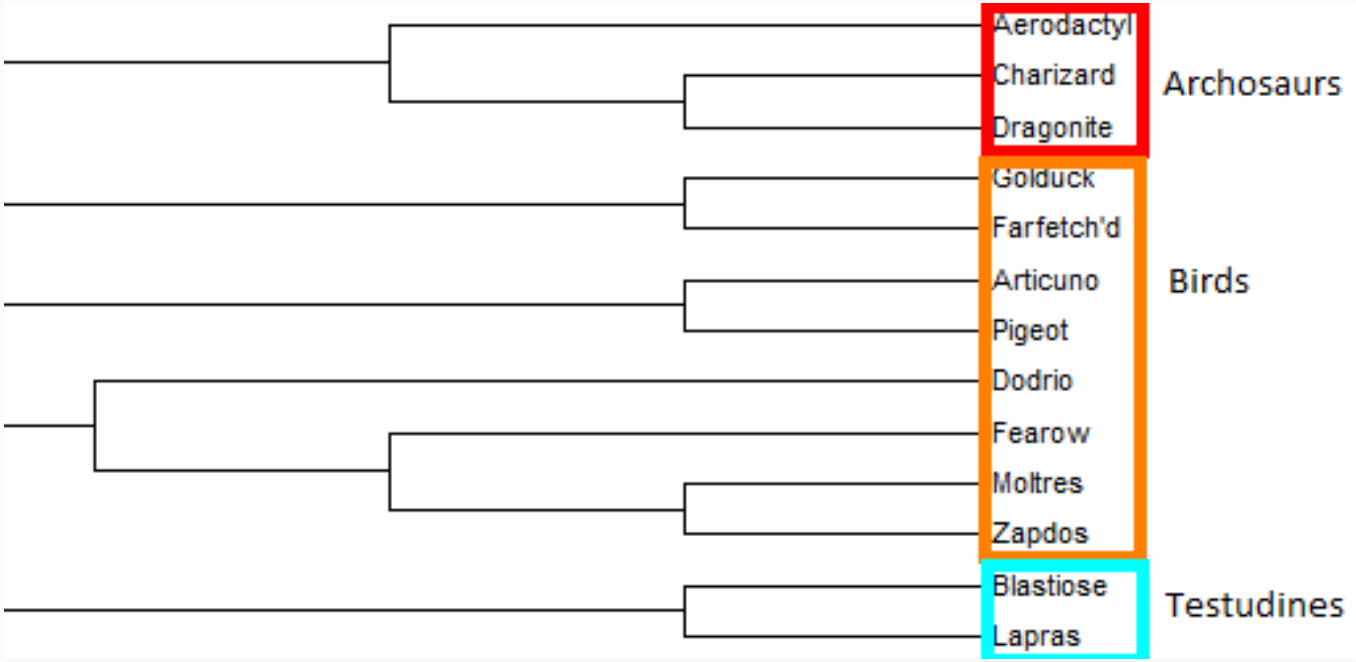
Диаграмма вложения



Дендрограмма



Дендрограмма



Вопрос

Может ли так случиться, что дендрограмма имеет самопересечения?

Свойство монотонности

Кластеризация монотонна, если на каждом шаге расстояние ρ между объединяемыми кластерами не уменьшается.

$$\rho_2 \leq \rho_3 \leq \cdots \leq \rho_l$$

Методы кластеризации

- Статистические
- Графовые
- Иерархические

Статистические алгоритмы

Алгоритм FOREL

Идея:

- Выделить все точки выборки x_i, попадающие внутрь сферы $\rho(x_i, x_0) \leq R$
- Перенести x_0 в центр тяжести выделенных точек
- Повторять пока x_0 не стабилизируется

Алгоритм FOREL

1 **function** FOREL(X, R)
2 $U \leftarrow X$, $C \leftarrow 0$
3 **while** $U \neq 0$ **do**
4 выбрать случайную точку x_0
5 **repeat**[пока x_0 не стабилизируется]
6 $c = \{x \in X | \rho(x, x_0) < R\}$
7 $x_0 = \frac{1}{|c|} \sum_{x_i \in c} x_i$
8 $U = U \setminus c$, $C = C \cup \{c\}$

Алгоритм FOREL

+ Наглядность

Алгоритм FOREL

+ Наглядность
+ Сходимость

Алгоритм FOREL

+ Наглядность
+ Сходимость

– Зависимость от выбора x_0

Алгоритм FOREL

+ Наглядность
+ Сходимость

– Зависимость от выбора x_0
– Плохо работает, если изначальная выборка плохо делится на кластеры

Метод k-средних

Идея: минимизировать меру ошибки

$$E(X, C) = \sum_{i=1}^{n} \|x_i - \mu_i\|^2$$

μ_i – ближайший к x_i центр кластера

Метод k-средних

1 **function** KMEANS(k)

2 Инициализировать μ_i, $i = 1 \dots k$

3 **repeat**[пока c_i не перестанет меняться]

4 $$c_i = \arg\min_{c \in C} \rho(x_i, \mu_c) \qquad i = 1, \dots, l$$

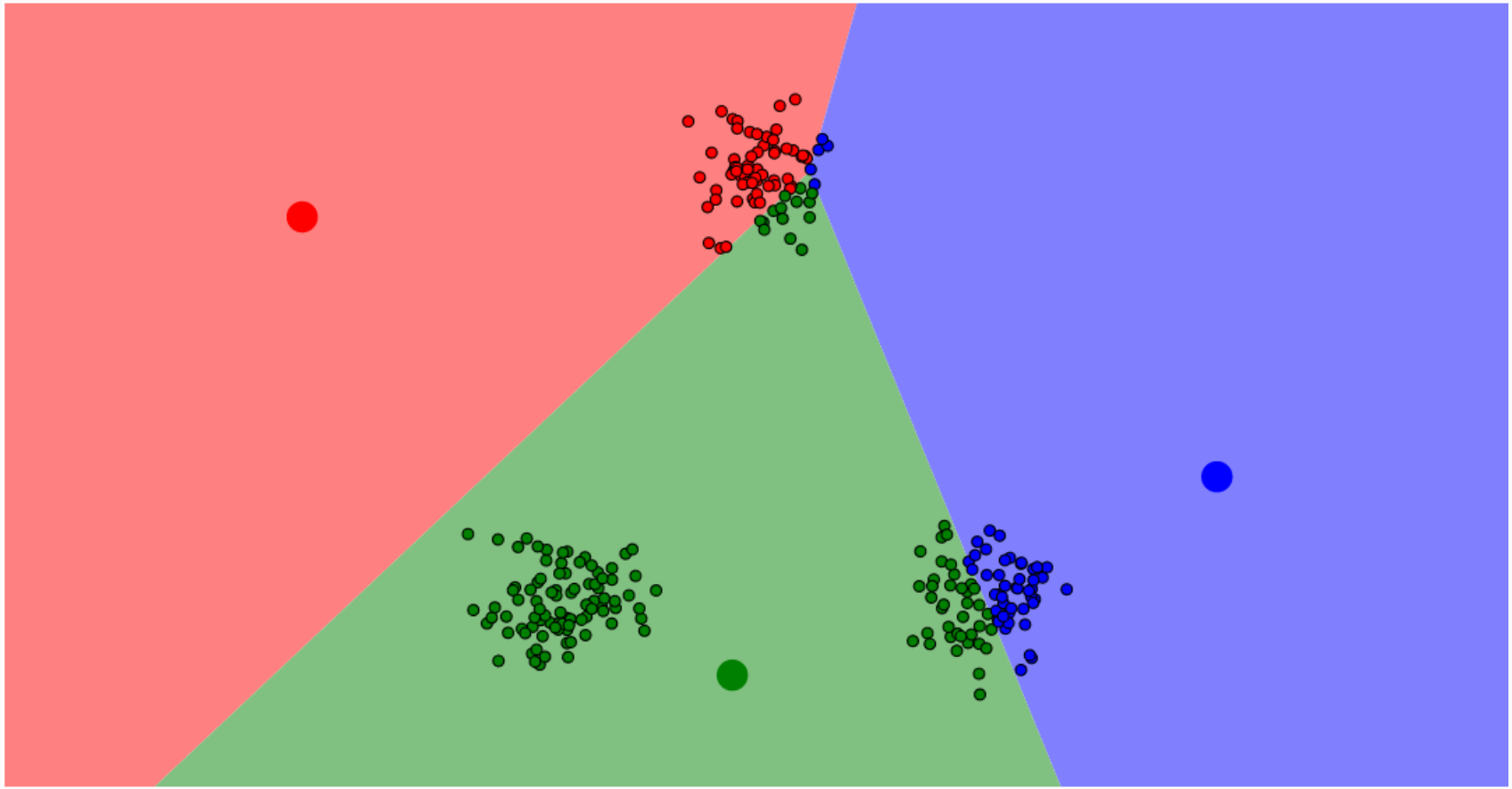
5 $$\mu_c = \frac{\sum\limits_{c_i = c} f_j(x_i)}{\sum\limits_{c_i = c} 1} \qquad j = 1, \dots, n,\ c \in C$$

μ_c – новое положение центров кластеров

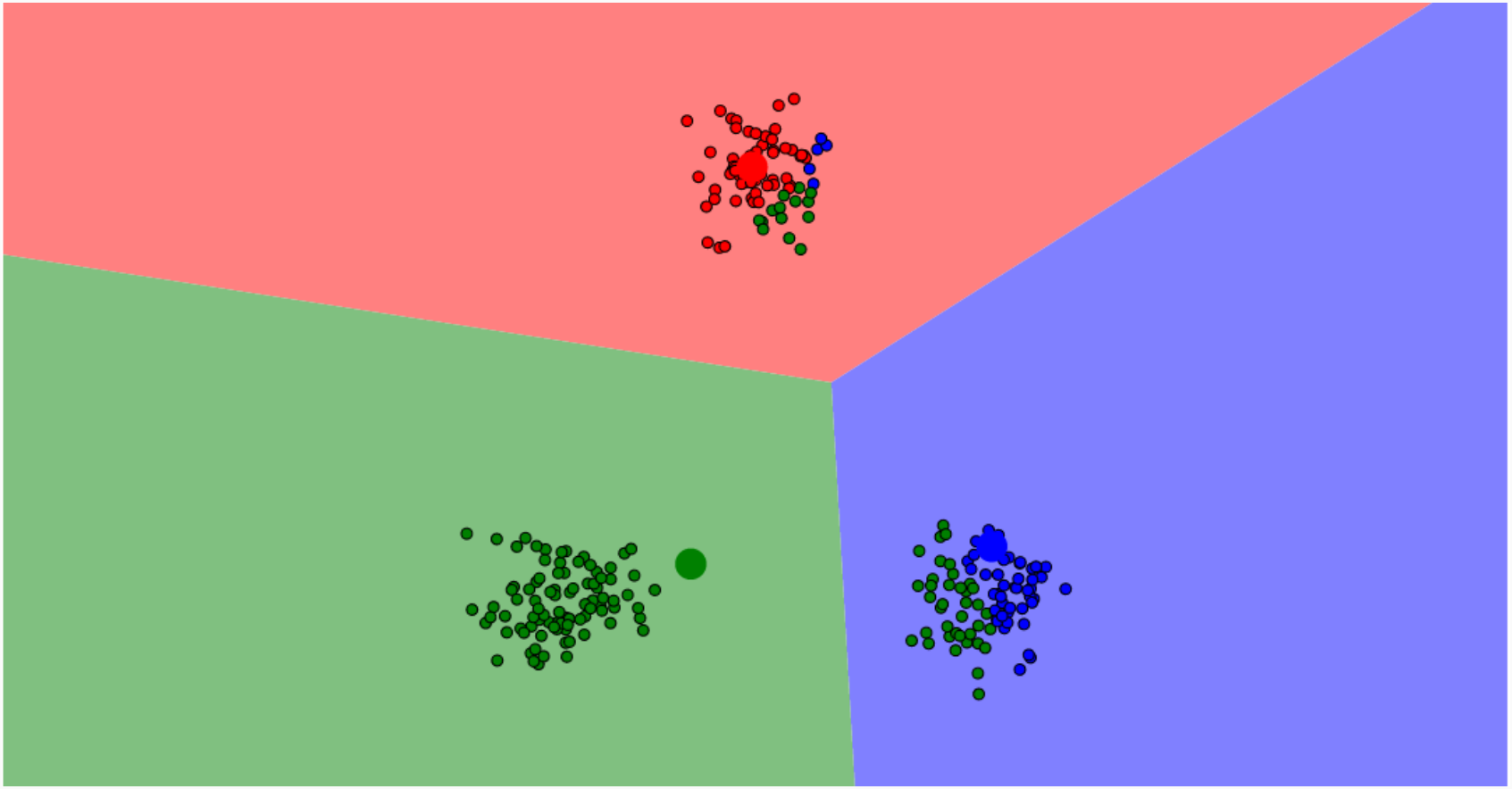
c_i – принадлежность x_i к кластеру

$\rho(x_i, \mu_c)$ – расстояние от x_i до центра кластера μ_c

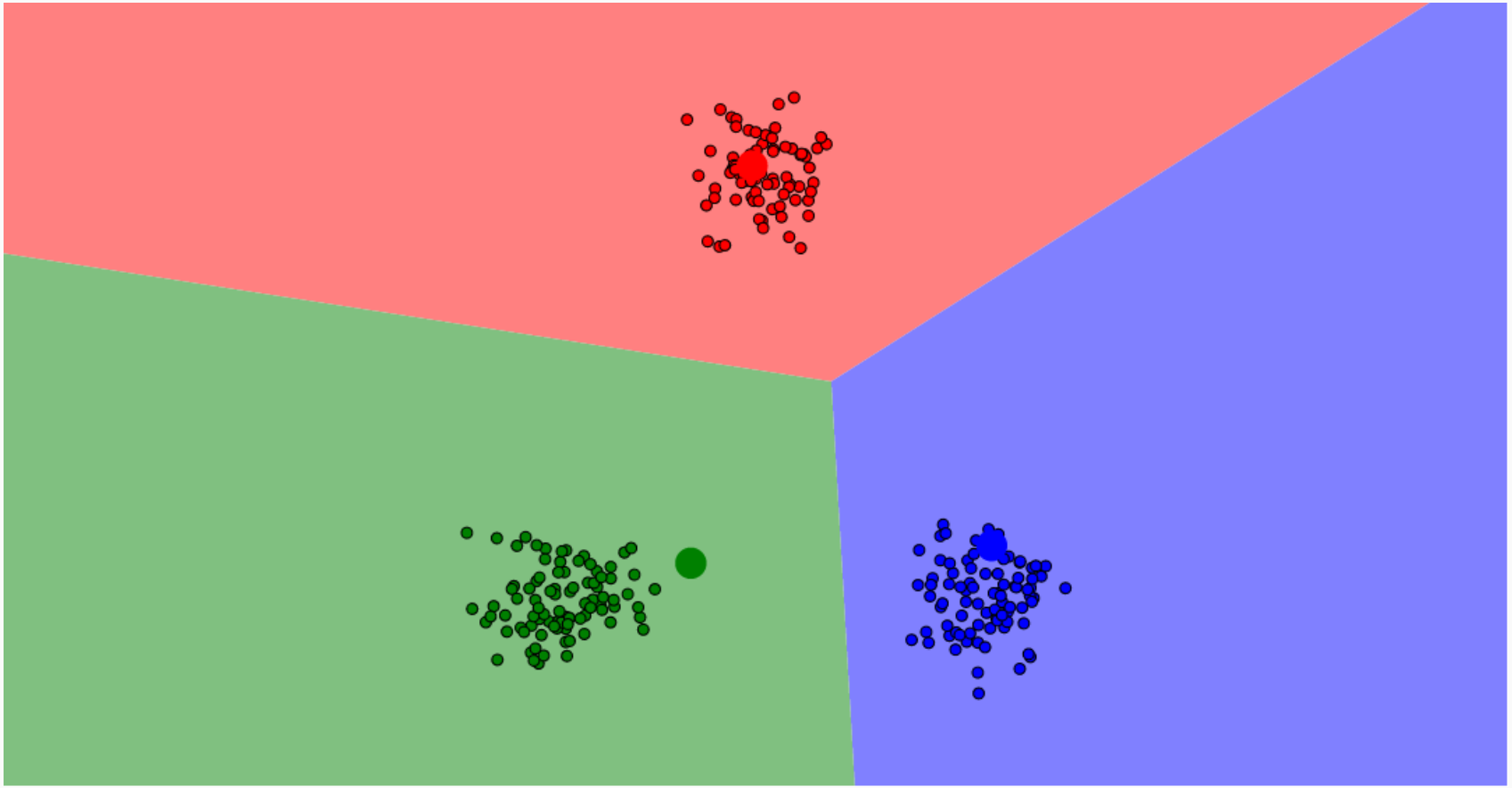
Метод k-средних



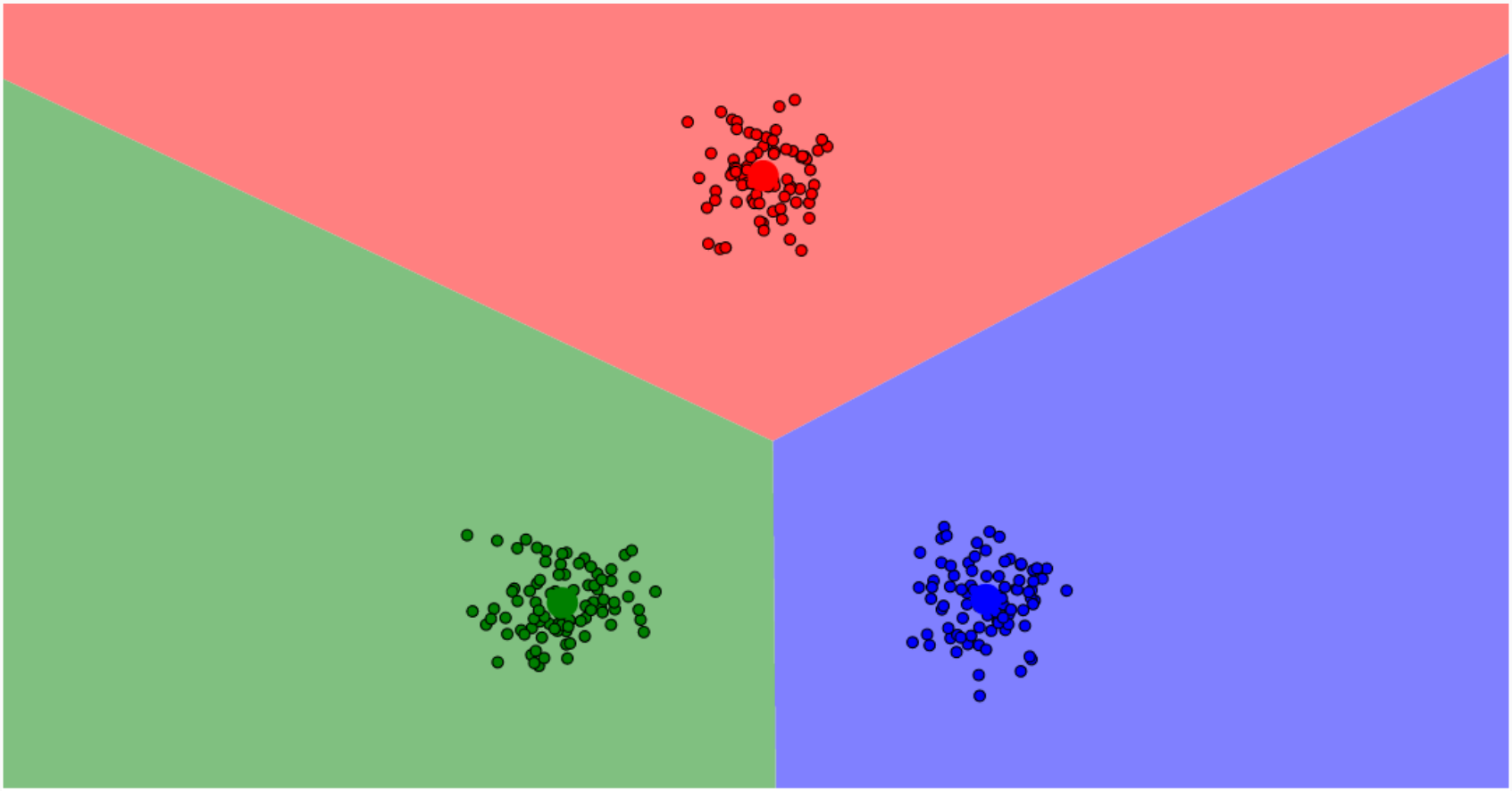
Метод k-средних



Метод k-средних



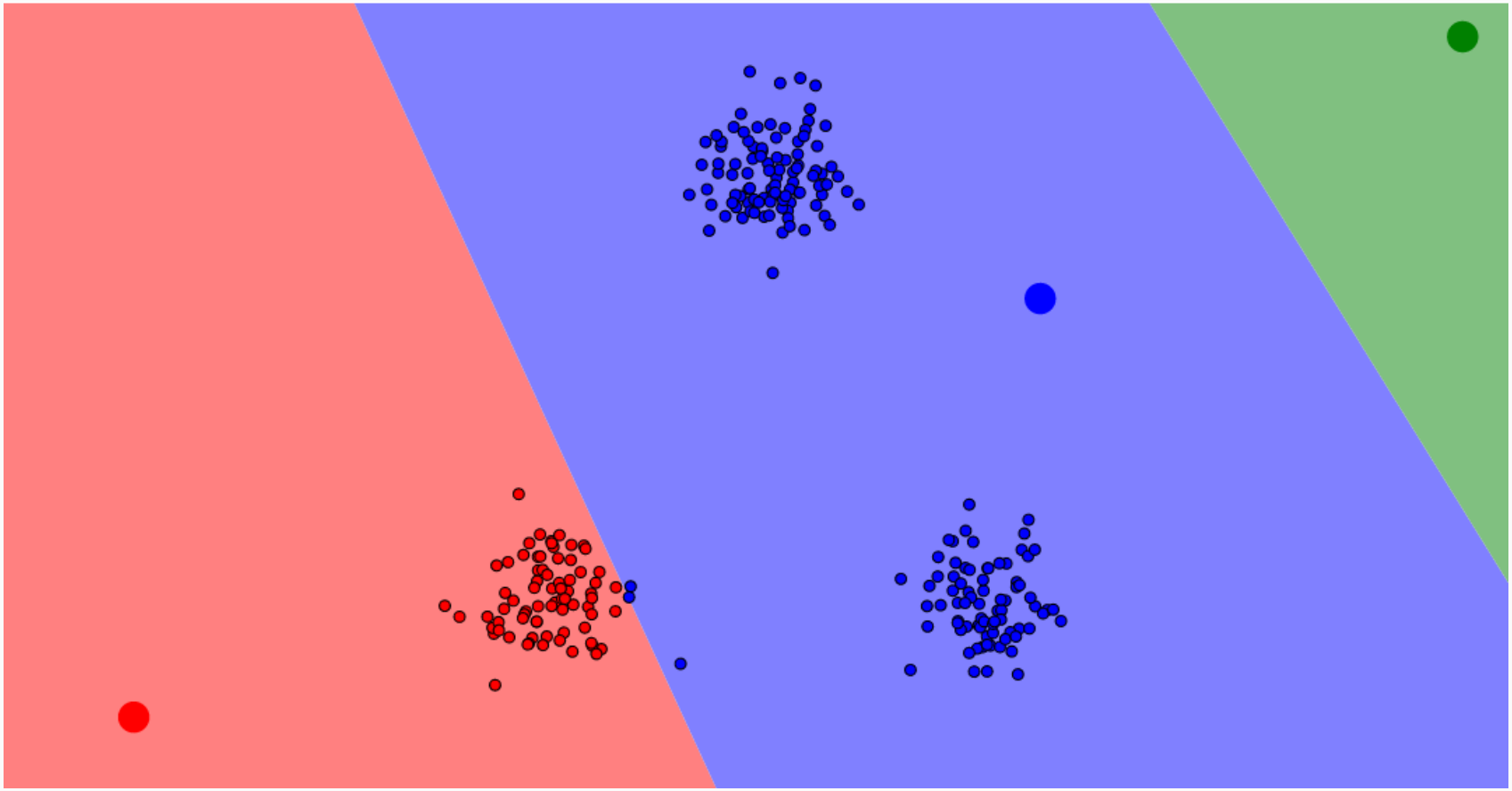
Метод k-средних



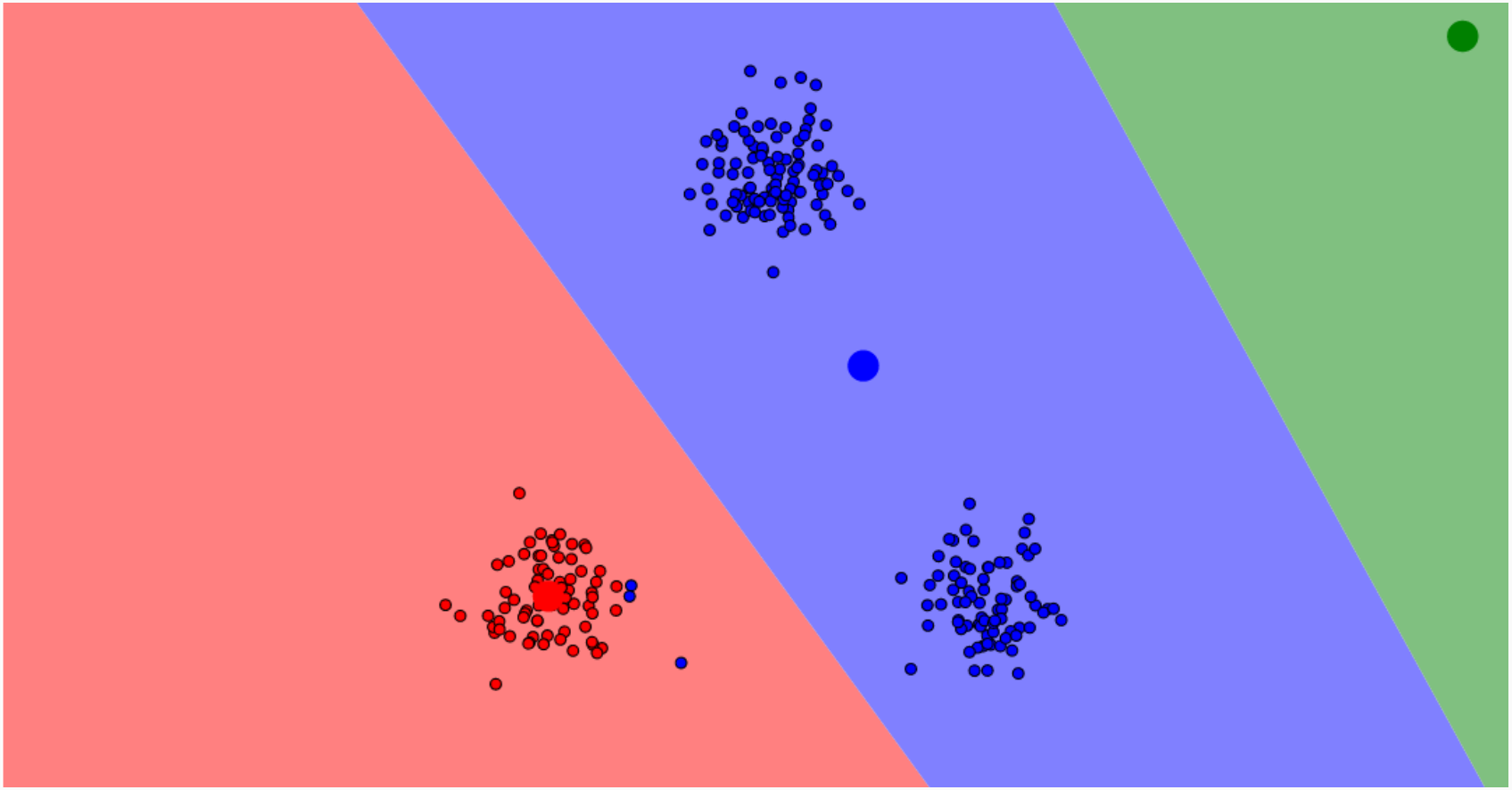
Особенности метода k-средних

– Чувствительность к начальному выбору μ_c
– Необходимость задавать k

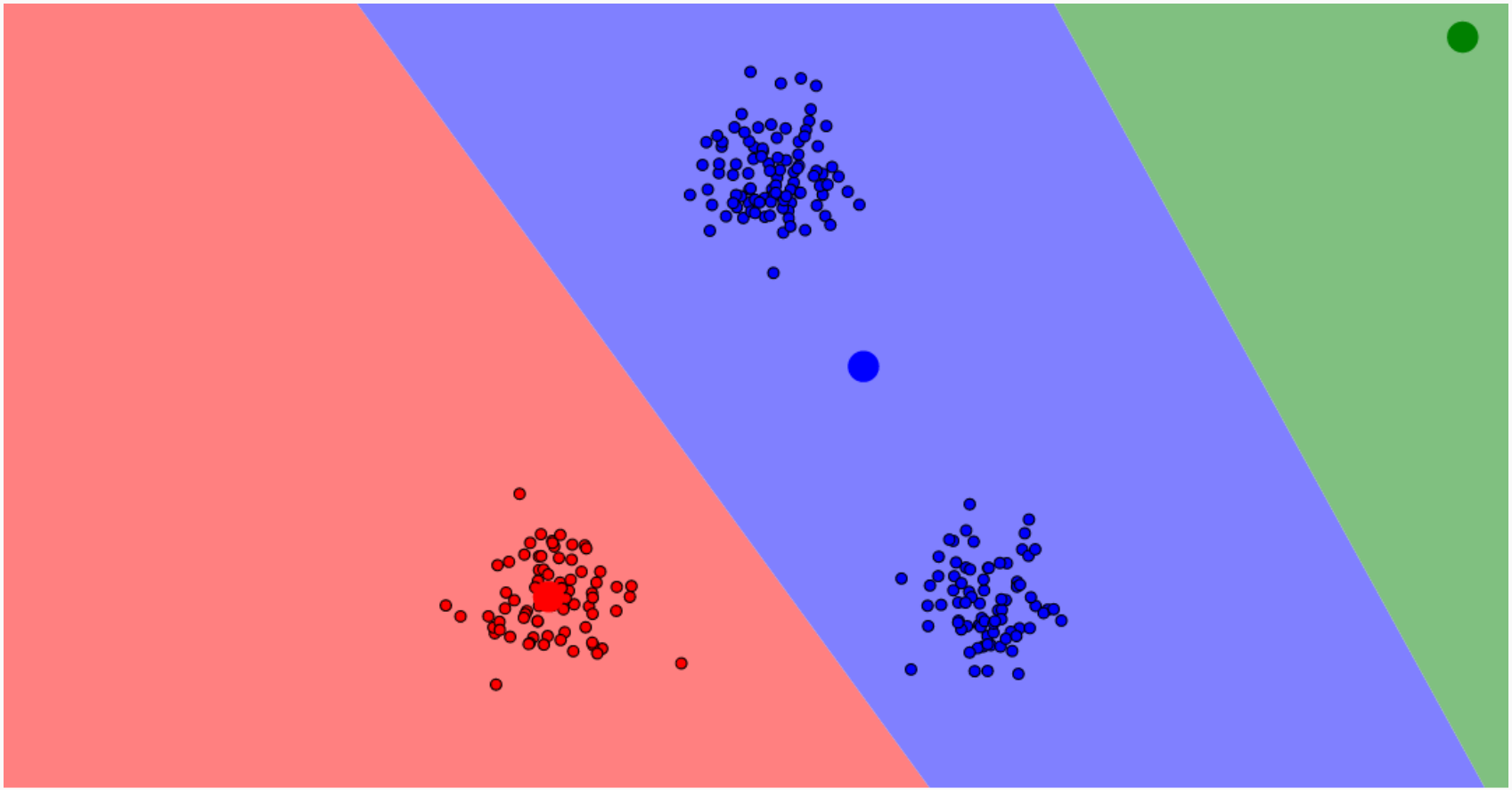
Чувствительность к начальному выбору μ_c



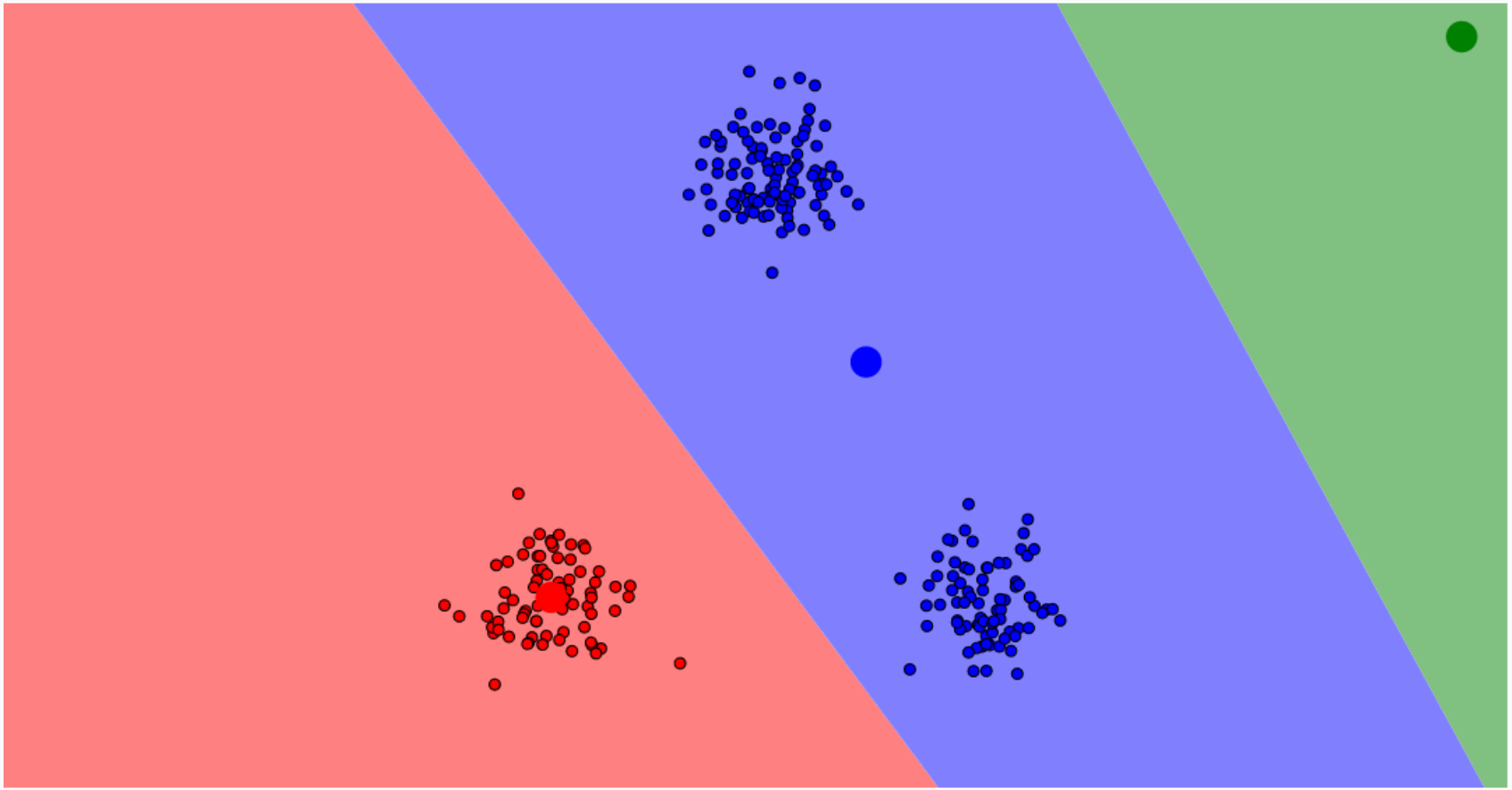
Чувствительность к начальному выбору μ_c



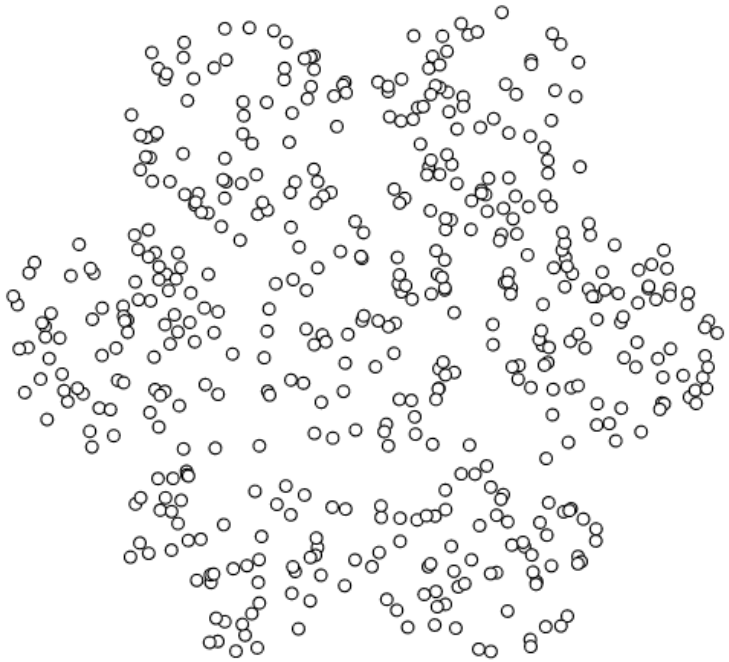
Чувствительность к начальному выбору μ_c



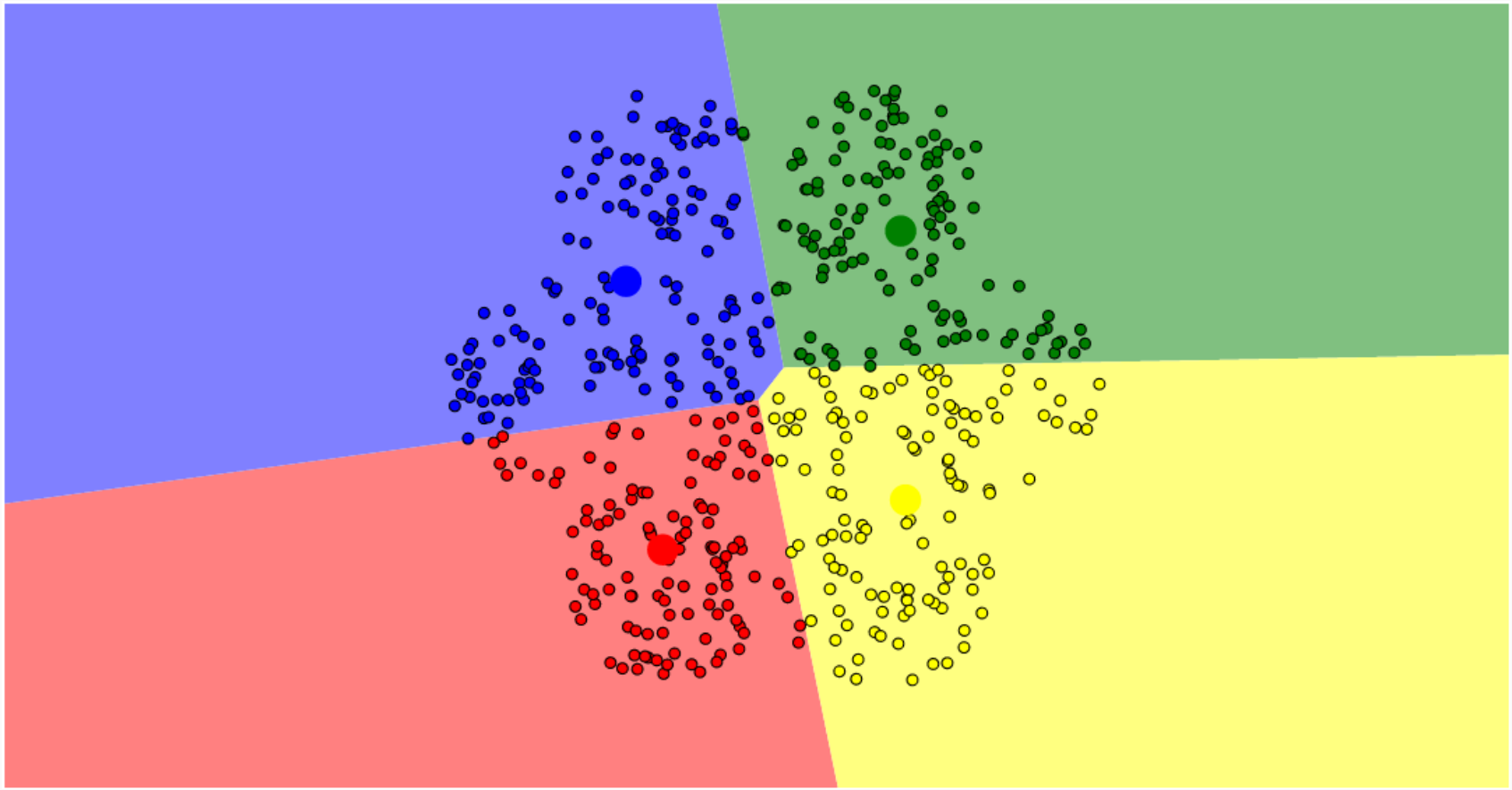
Чувствительность к начальному выбору μ_c



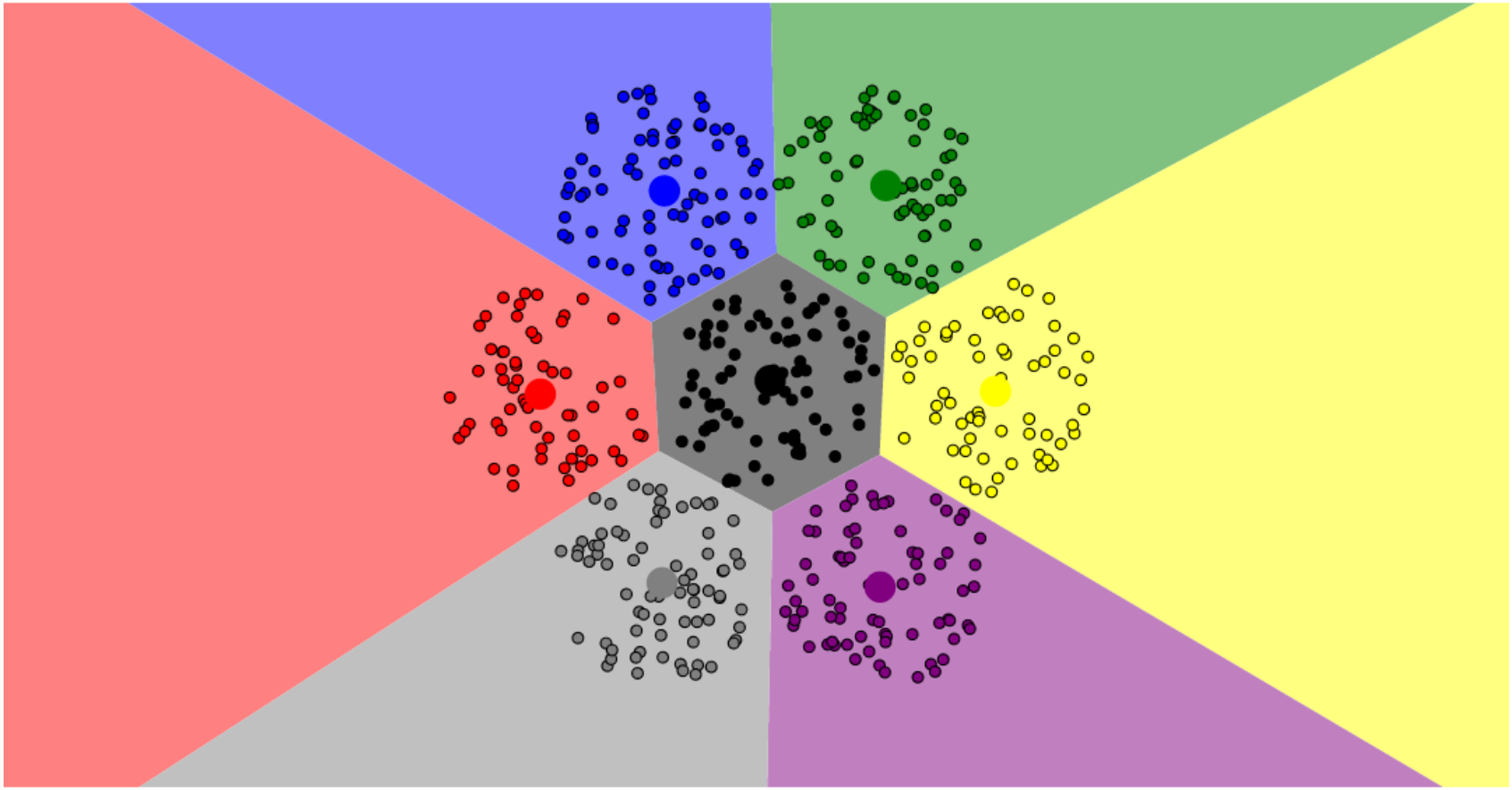
Необходимость задавать k



Необходимость задавать k



Необходимость задавать k

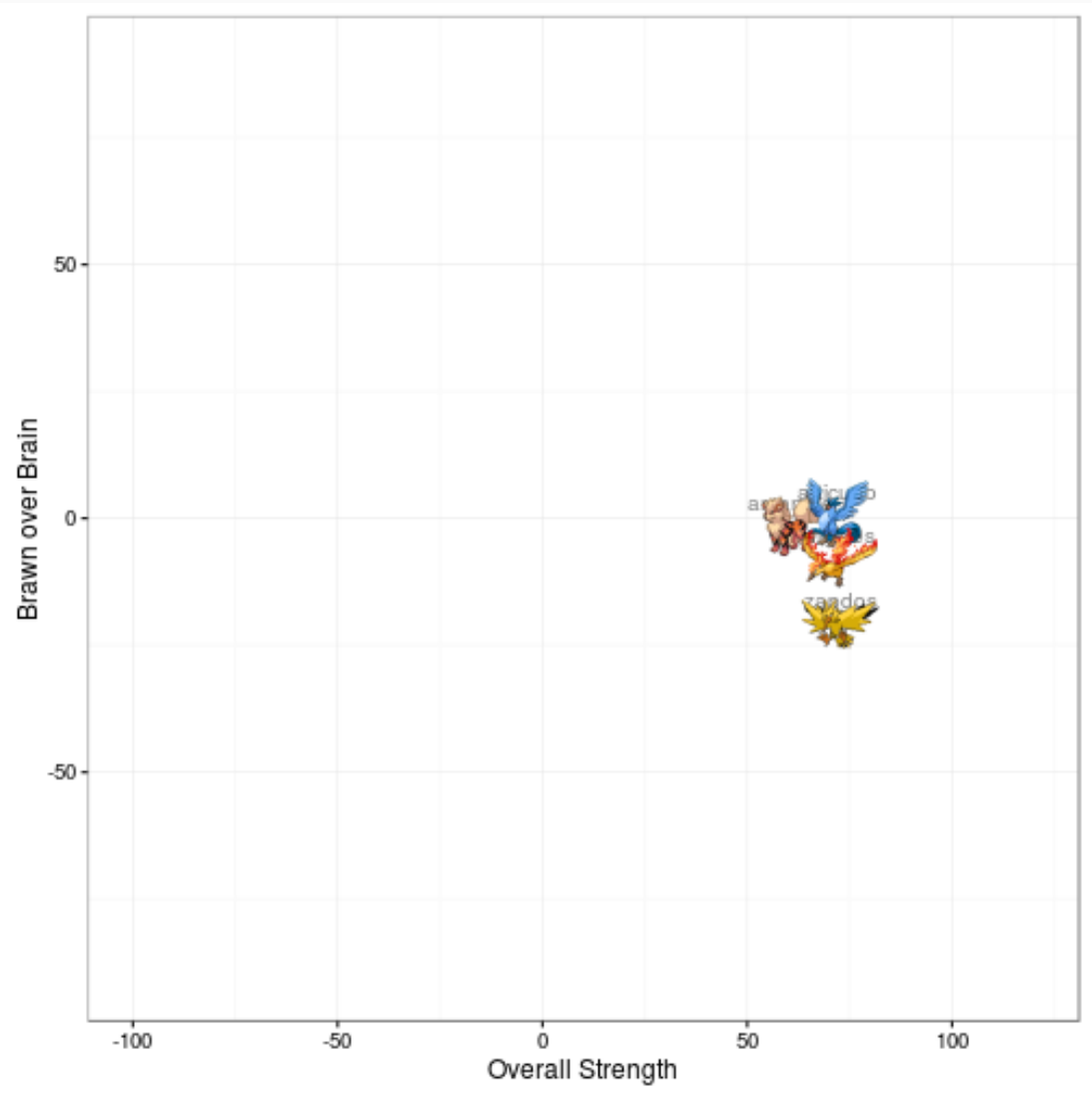


Интересные результаты

Интересные результаты

Arcanine

Интересные результаты



Устранение недостатков

Устранение недостатков

– Несколько случайных кластеризаций

Устранение недостатков

- Несколько случайных кластеризаций
- Постепенное наращивание числа k

Устранение недостатков

- Несколько случайных кластеризаций
- Постепенное наращивание числа k
- Использование k-means++

k-means++

Идея:

1. Выбрать первый центроид случайным образом
2. Для каждой точки найти значение квадрата расстояния до ближайшего центроида.
3. Выбрать из этих точек следующий центроид так, чтобы вероятность выбора точки была пропорциональна вычисленному для неё квадрату расстояния

X-means

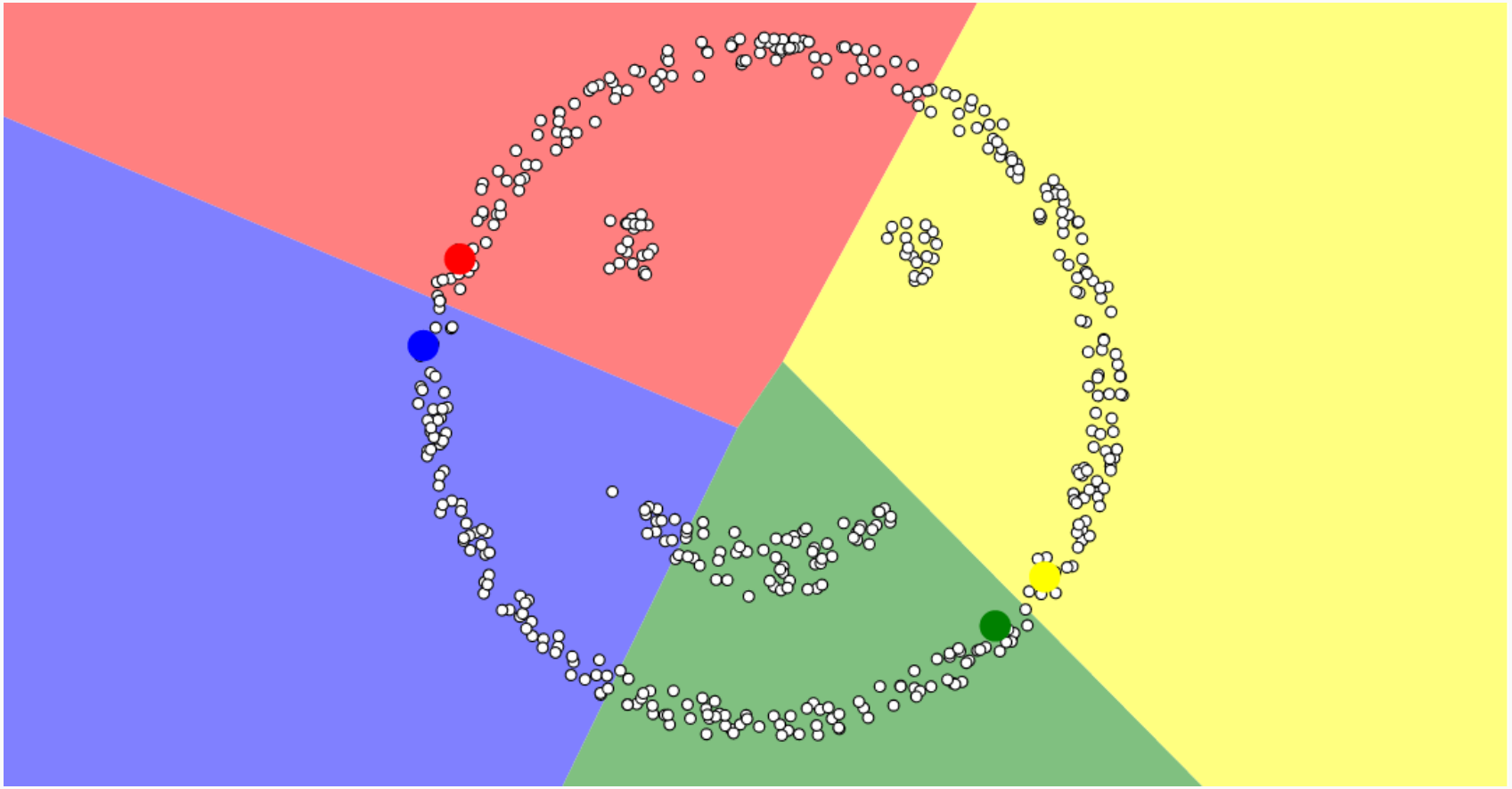
Идея:

1. Получать на вход не k, а диапазон, в котором может находиться k.
2. Запустить k-means на самом маленьком значении из диапазона.
3. Разбить пополам полученные кластеры и проверить, не улучшилась ли кластеризация.

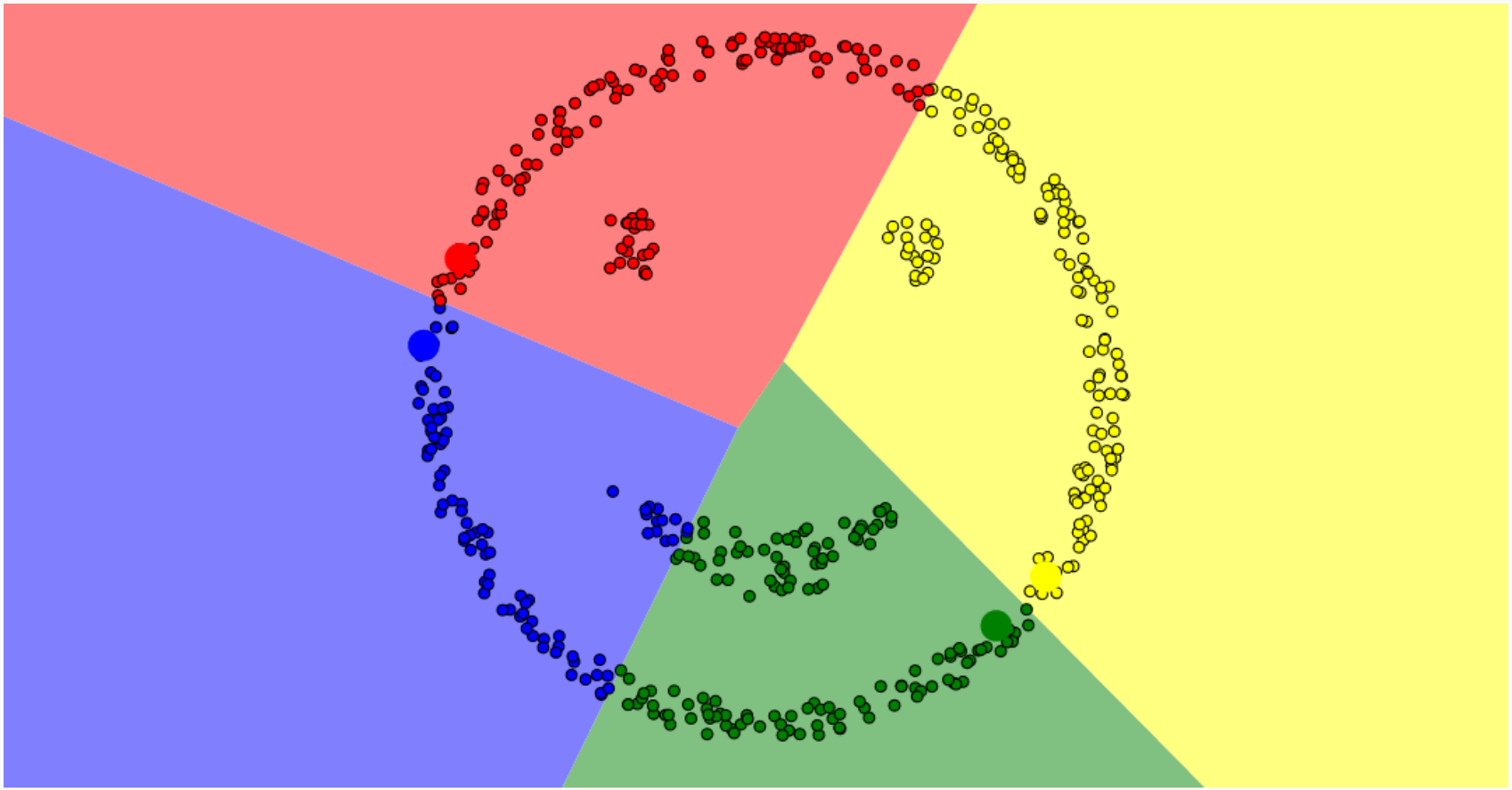
https://www.cs.cmu.edu/ dpelleg/download/xmeans.pdf

Когда k-means работает плохо

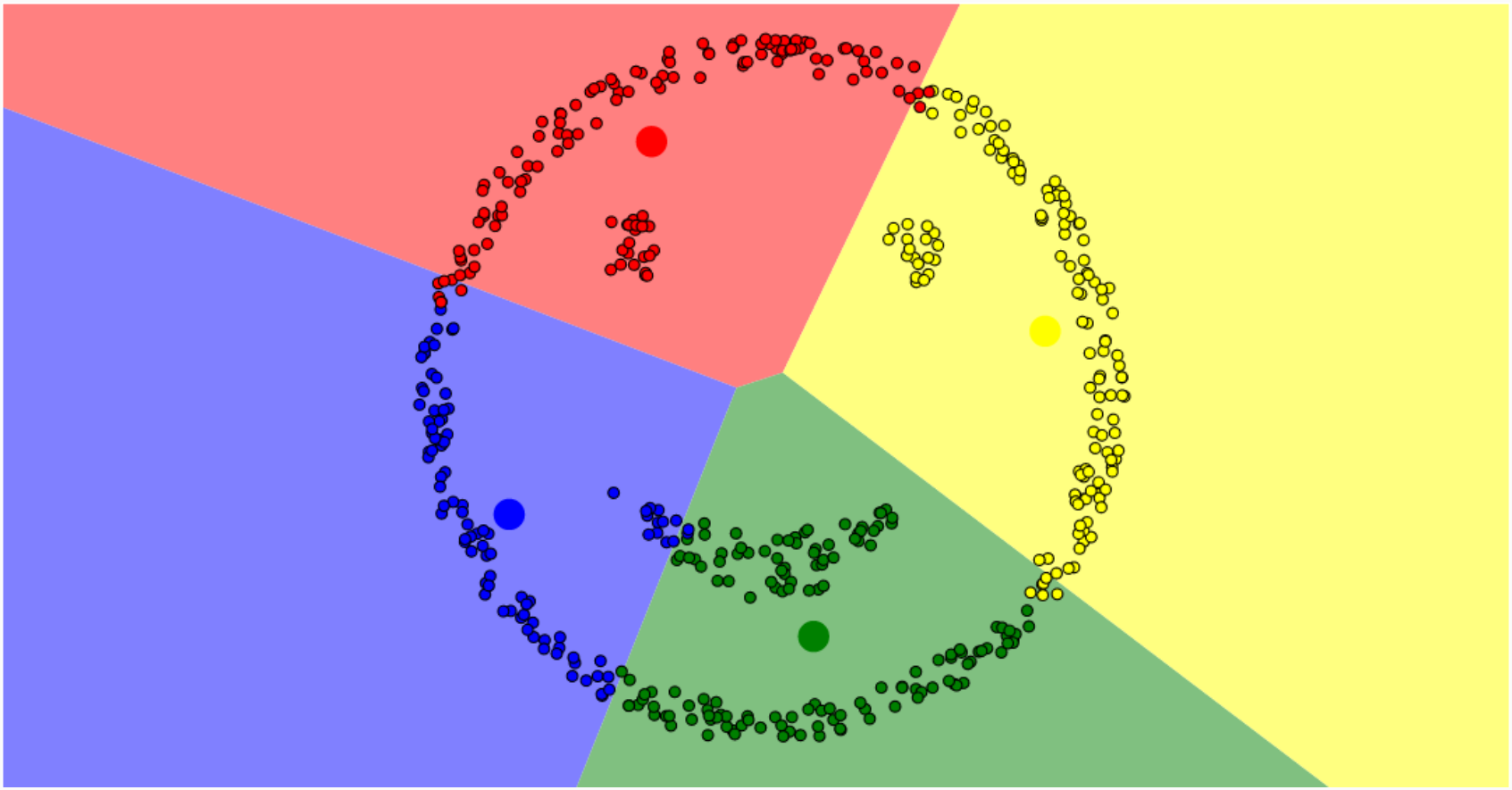
"Не сферические данные"



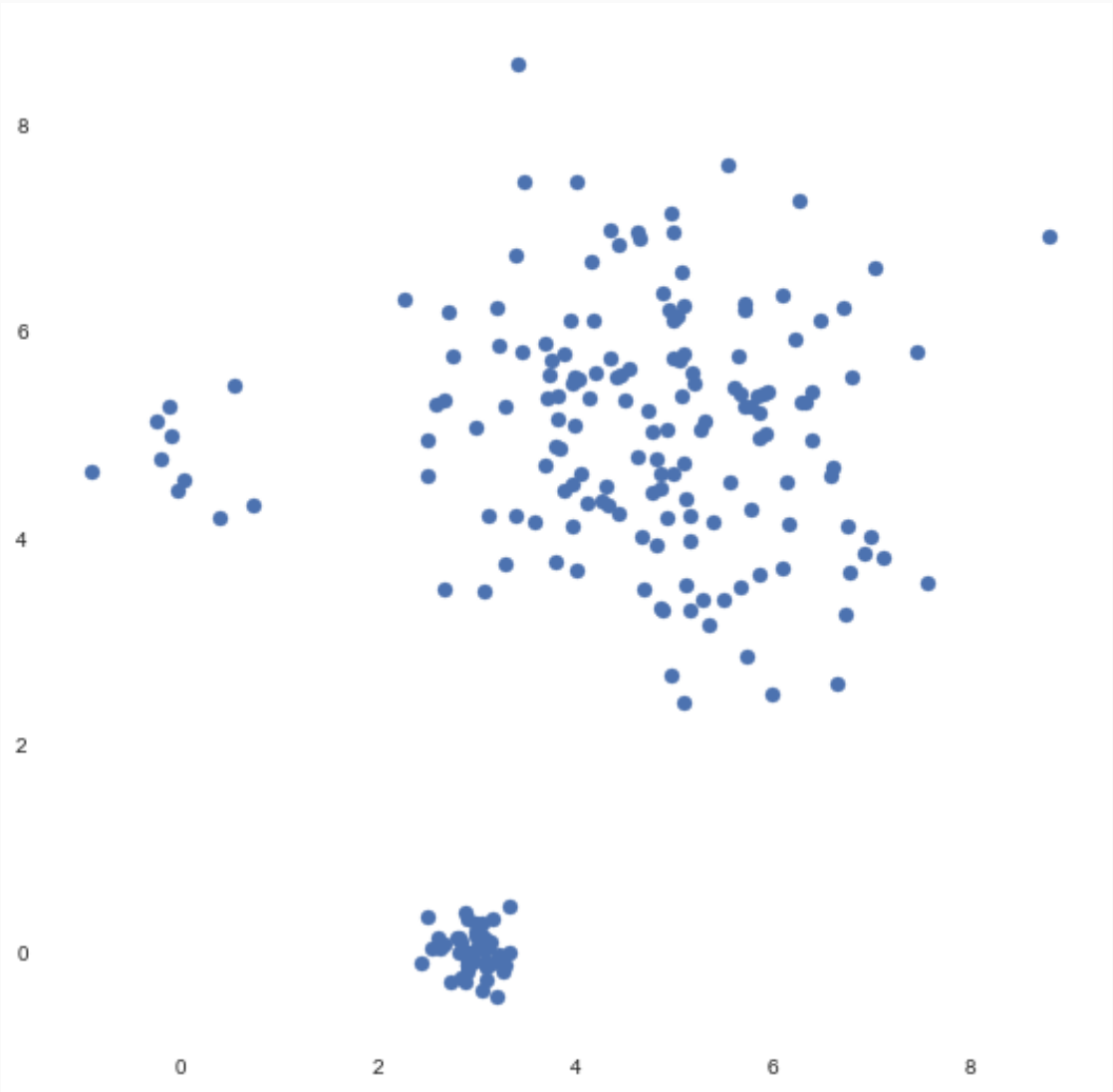
"Не сферические данные"



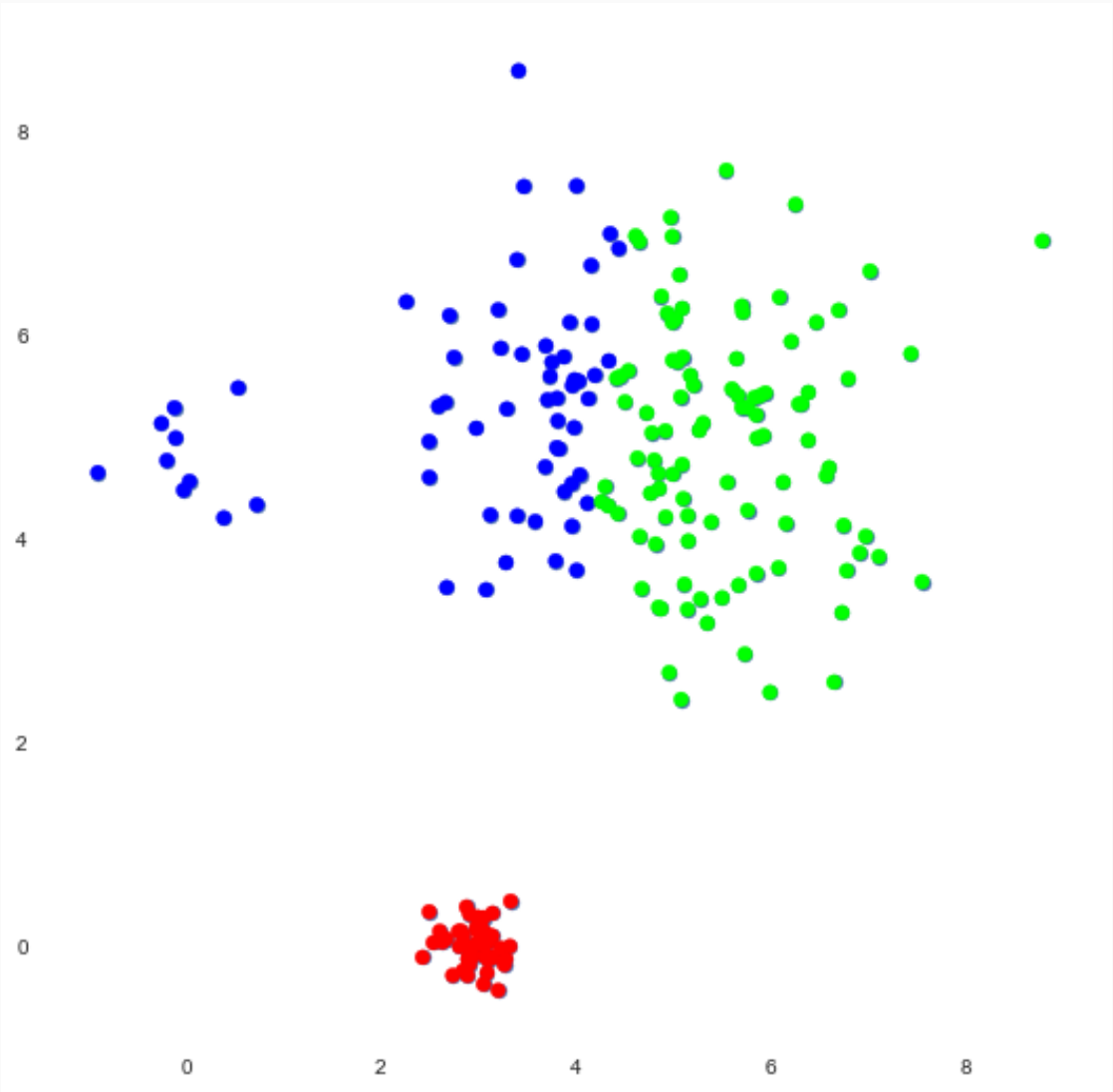
"Не сферические данные"



Разноразмерные кластеры



Разноразмерные кластеры



Метод распространения близости

Идея: Позволим объектам обновлять информацию друг о друге, для того, чтобы выбрать центр кластера.

Метод распространения близости

Идея: Позволим объектам обновлять информацию друг о друге, для того, чтобы выбрать центр кластера.

$s(i,k)$ – "похожесть" объекта x_i на x_k, $s(k,k) < 0$.
$r(i,k)$ – "ответственность", x_i решает насколько x_k подходит для того, чтобы быть центром кластера.
$a(i,k)$ – "доступность", x_k решает насколько x_i подходит для его кластера.

Метод распространения близости

1 **function** AFFINITY_PROPAGATION(S)

2 $R \leftarrow 0,\ A \leftarrow 0$

3 **repeat**[пока c_i не перестанет меняться]

4 $r(i,k) = s(i,k) - \max\limits_{j \neq k}(a(i,j) + s(i,j))$

5 $i \neq k : a(i,k) = \min(0, r(k,k) + \sum\limits_{j \neq i, j \neq k} \max(0, r(i,j)))$

6 $a(k,k) = \sum\limits_{j \neq k} \max(0, r(i,j))$

7 $c_i = \arg\max\limits_{k}(a(i,k) + r(i,k))$

Метод распространения близости

+ Не нужно задавать количество кластеров

Метод распространения близости

+ Не нужно задавать количество кластеров
+ "Выбросы" выделяются в отдельные кластеры

Метод распространения близости

+ Не нужно задавать количество кластеров
+ "Выбросы" выделяются в отдельные кластеры

– Долгое время работы

Метод распространения близости

+ Не нужно задавать количество кластеров
+ "Выбросы" выделяются в отдельные кластеры

– Долгое время работы
– Часто нуждается в постобработке

Графовые алгоритмы

Какие есть две очевидные идеи?

Графовые алгоритмы

Идеи:

1. Выделение связных компонент
2. Минимальное покрывающее дерево

Выделение связных компонент

1. Рисуем полный граф с весами, равными расстоянию между объектами
2. Выбираем лимит расстояния r и выкидываем все ребра длиннее r
3. Компоненты связности полученного графа – наши кластеры

Выделение связных компонент

Как искать компоненты связности?

Минимальное покрывающее дерево

Минимальное остовное дерево – дерево, содержащее все вершины графа и имеющее минимальный суммарный вес ребер.

Минимальное покрывающее дерево

Как использовать минимальное остовное дерево для разбиения на кластеры?

Минимальное покрывающее дерево

Строим минимальное остовное дерево, а потом выкидываем из него ребра максимального веса.

Сколько ребер выбросим – столько кластеров получим.

Иерархическая кластеризация

Агломеративный алгоритм Ланса-Уильямса

Идея:

1. Считаем каждую точку кластером.
2. Затем объединяем ближайшие точки в новый кластер.
3. Повторяем.

Алгоритм Ланса-Уильямса

1 **function** LANCE-WILLIAMS(X^l)
2 $C_1 = \{\{x_1\}, \{x_2\}, \ldots, \{x_l\}\}$
3 **for** $t = 2, \ldots, l$ **do**
4 $(U, V) = \arg\min\limits_{U \neq V} \rho(U, V)$
5 $W = U \cup V$
6 $C_t = C_{t-1} \cup \{W\} \setminus \{U, V\}$
7 **for each** $S \in C_t$ **do**
8 вычислить $\rho(W, S)$

Алгоритм Ланса-Уильямса

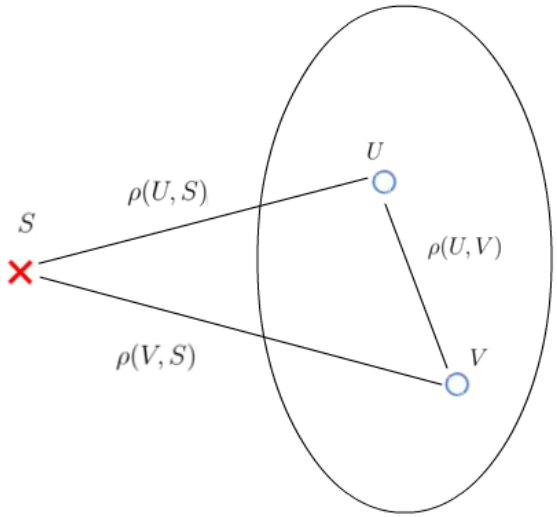
Чего-то не хватает?

Формула Ланса-Уильямса

$W = \{U \cup V\}$

Знаем:
$\rho(U, S), \rho(V, S), \rho(U, V)$

Расстояние $\rho(W, S)$?



Формула Ланса-Уильямса

$W = \{U \cup V\}$

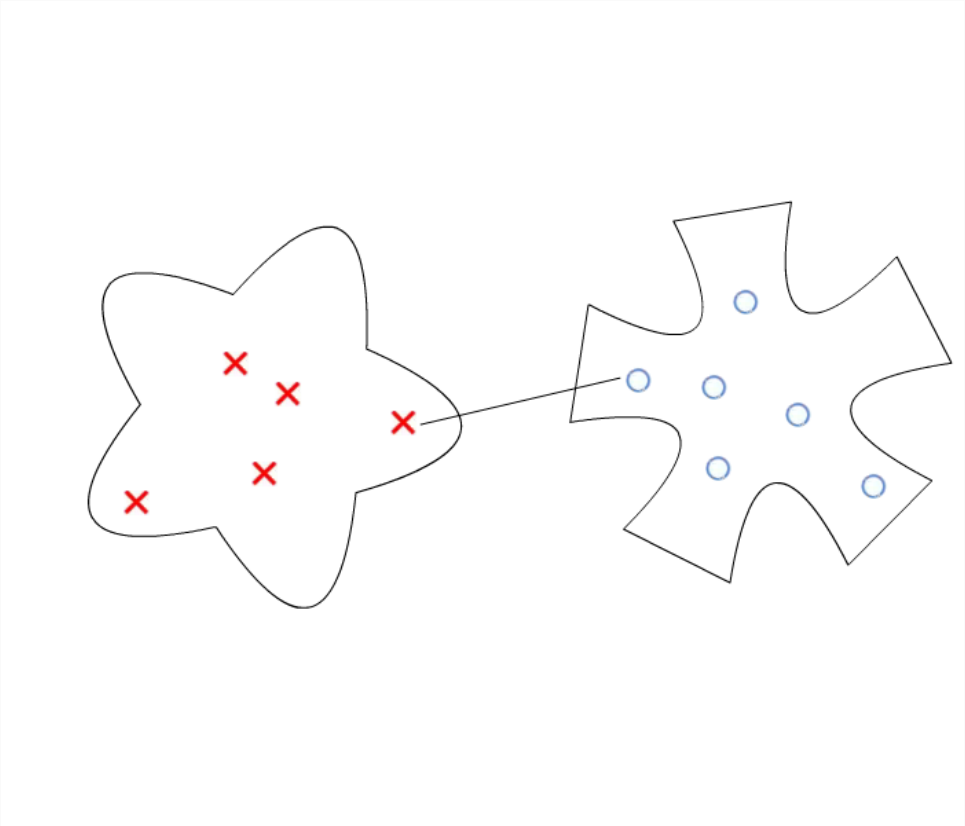
$$\rho(U \cup V, S) = \alpha_U \rho(U, S) + \alpha_V \rho(V, S) + \\ + \beta \rho(U, V) + \gamma |\rho(U, S) - \rho(V, S)|$$

$\alpha_U, \alpha_V, \beta, \gamma$ – числовые параметры

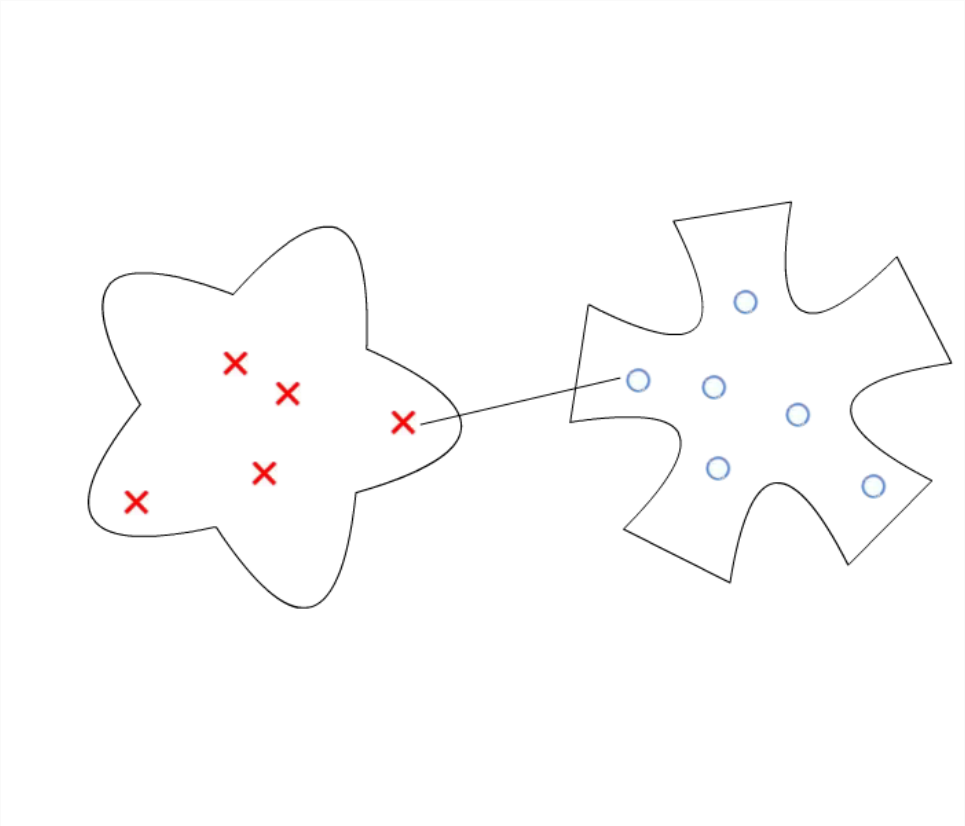
Параметры

Значения параметров $\alpha_U, \alpha_V, \beta, \gamma$?

Расстояние ближнего соседа



Расстояние ближнего соседа

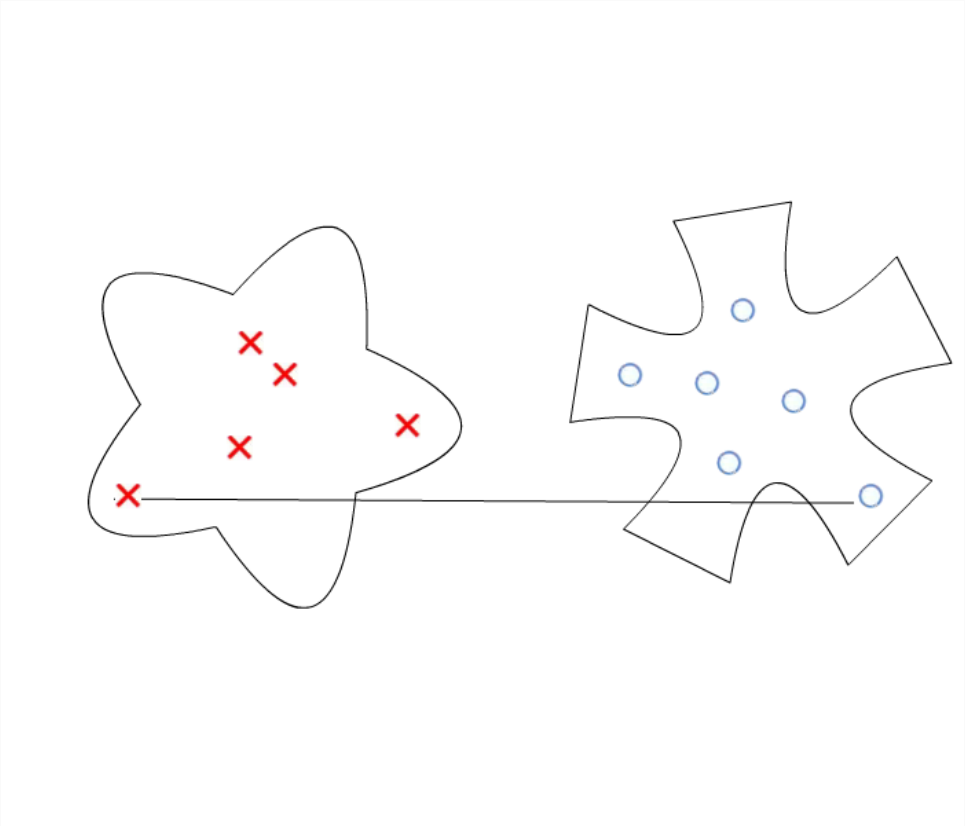


$\alpha_U = \alpha_V = \frac{1}{2}$

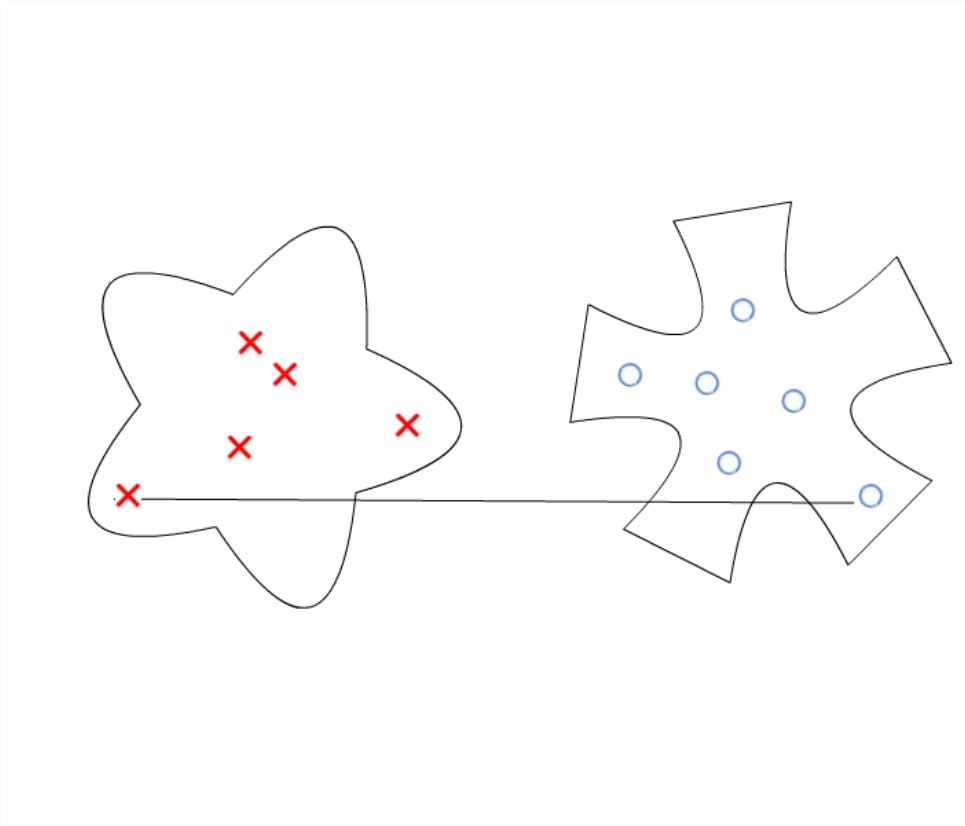
$\beta = 0$

$\gamma = -\frac{1}{2}$

Расстояние дальнего соседа



Расстояние дальнего соседа

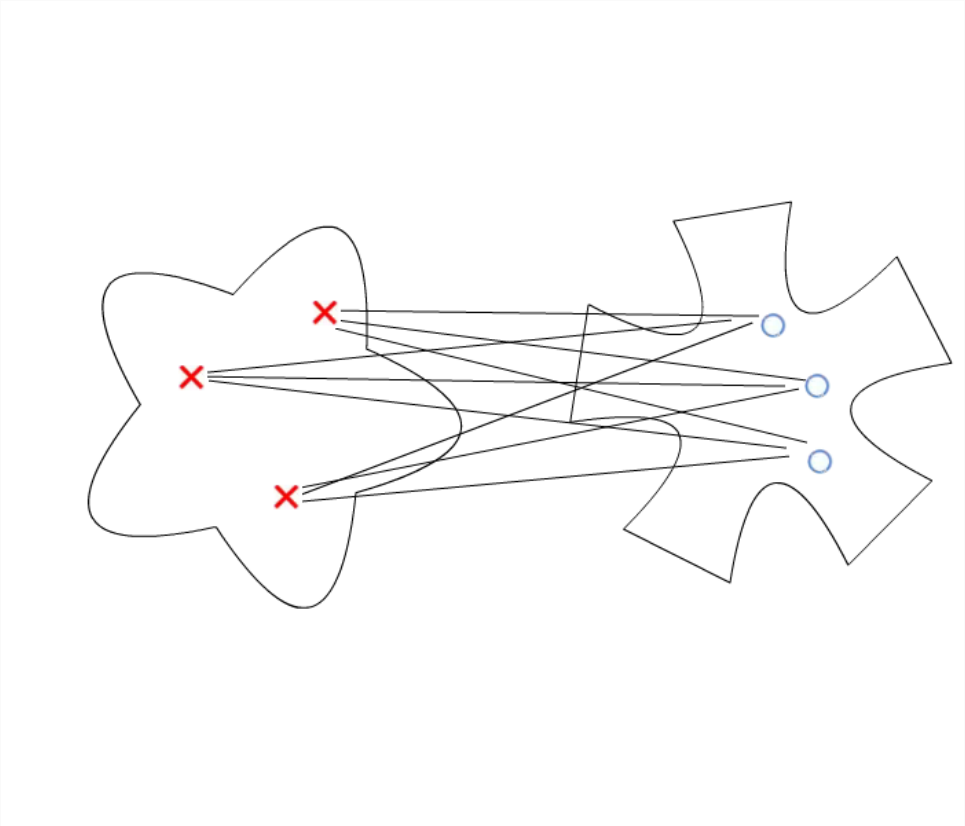


$\alpha_U = \alpha_V = \frac{1}{2}$

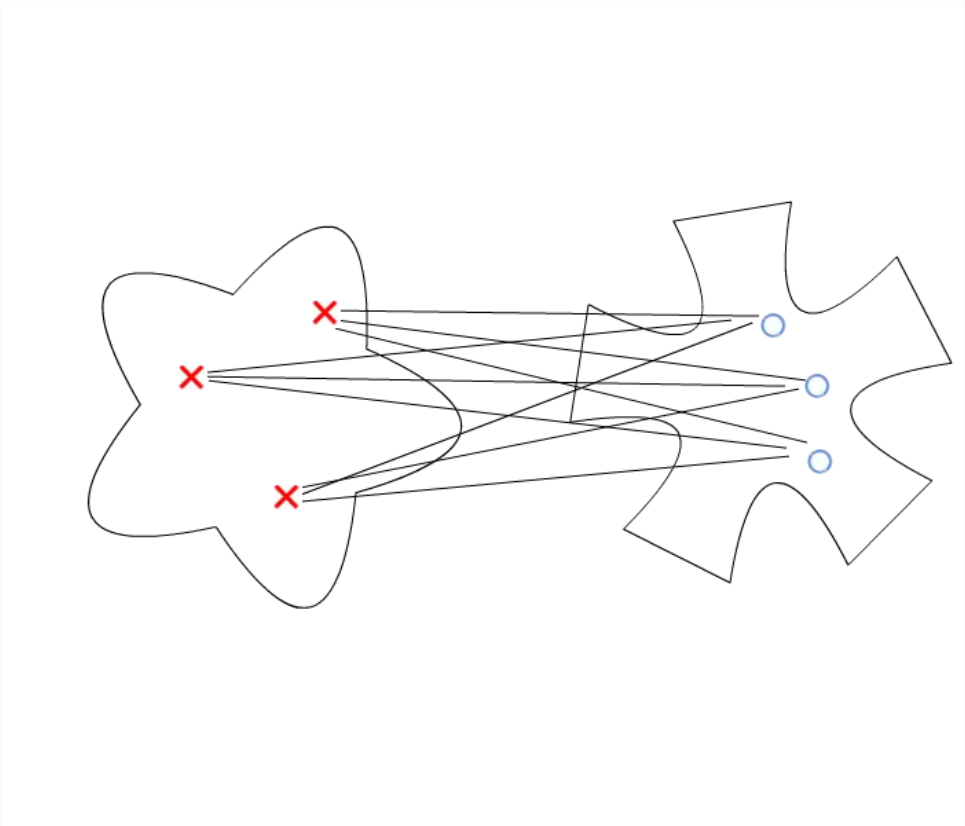
$\beta = 0$

$\gamma = \frac{1}{2}$

Групповое среднее

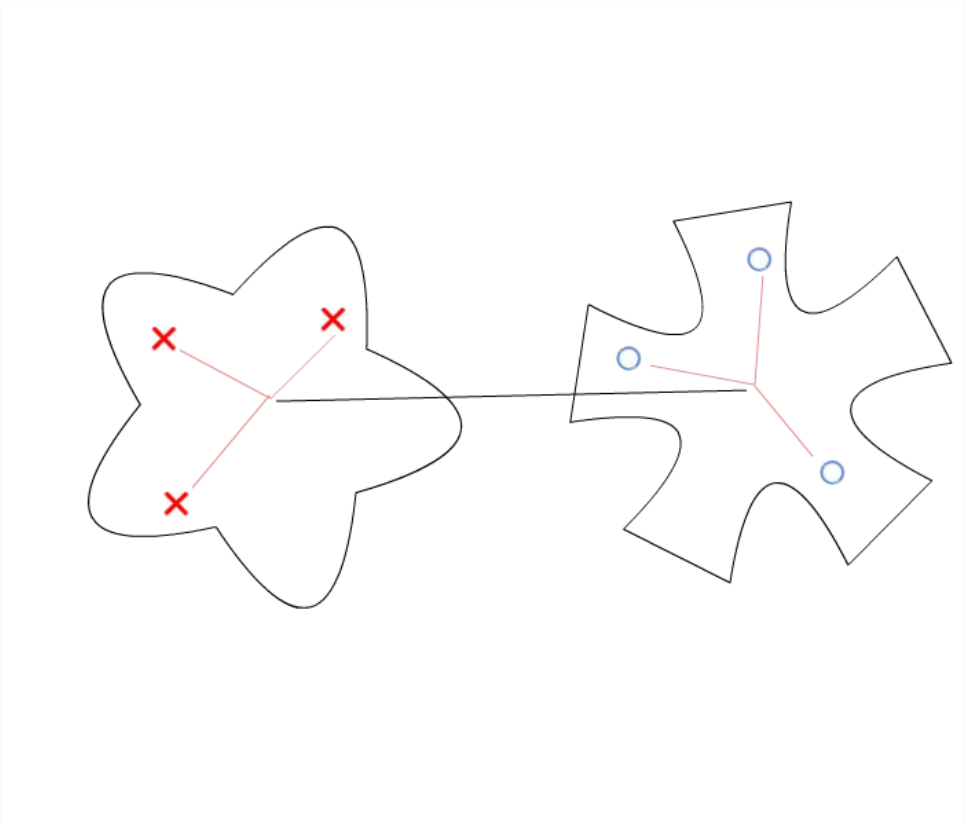


Групповое среднее



$$\alpha_U = \frac{|U|}{|W|}$$
$$\alpha_V = \frac{|V|}{|W|}$$
$$\beta = \gamma = 0$$

Расстояние Уорда



$$\alpha_U = \frac{|S|+|U|}{|S|+|W|}$$
$$\alpha_V = \frac{|S|+|V|}{|S|+|W|}$$
$$\beta = \frac{-|S|}{|S|+|W|}$$
$$\gamma = 0$$

Обучение с частичным привлечением учителя

Вопросы?

Что происходит сейчас в области

ICML'16: Interactive Bayesian Hierarchical Clustering

ICML'16: k-variates++: more pluses in the k-means++

NIPS'16: Clustering with Same-Cluster Queries

NIPS'16: Fast and Provably Good Seedings for k-Means

На следующей лекции

- Деревья принятия решений
- Виды правил
- Поиск информативных закономерностей
- Подрезание деревьев
- Oblivious деревья
- Random forest