

# Машинное обучение

## Лекция 3. Методы кластеризации

Катя Тузова

# Быстрый поиск ближайшего соседа

# k-d дерево

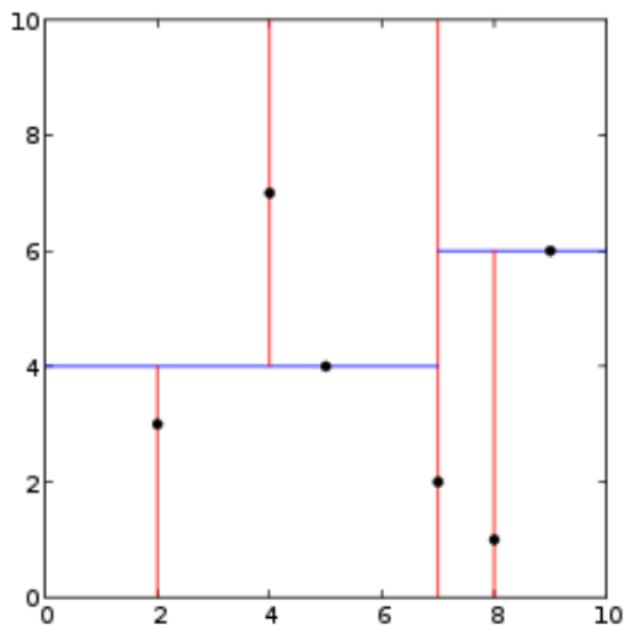
Идея: разложим множество по поперечному будем искать в бинарное дерево с простыми условиями и конкретными точками в узлах.

1. По циклу, или случайно выбираем ось.
2. Ищем медиану (точку, разбивающую множество на как можно более равные части).
3. Повторяем 1-2 для каждого из получившихся подмножеств

Сложность построения:  $O(n \log n)$

Сложность поиска: в лучшем случае  $O(\log n)$ , в худшем –  $O(n)$

# 2-d дерево



# k-d дерево. Особенности

- + Один из наиболее простых методов
- Работает только при малом количестве параметров
- Затратный алгоритм перестроения

# Locality Sensitive Hash

R-соседи – соседи в радиусе R от объекта.

Хэш-функция  $h(R, cR, p1, p2)$ :

$$\|u - v\| \leq R \Rightarrow p(h(u) = h(v)) \geq p_1$$

$$\|u - v\| \geq cR \Rightarrow p(h(u) = h(v)) \leq p_2$$

# Задача кластеризации

# 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

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

Найти:

$Y$  – множество кластеров

$a : X \rightarrow Y$  – алгоритм кластеризации

# Степени свободы в постановке задачи

# Степени свободы в постановке задачи

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

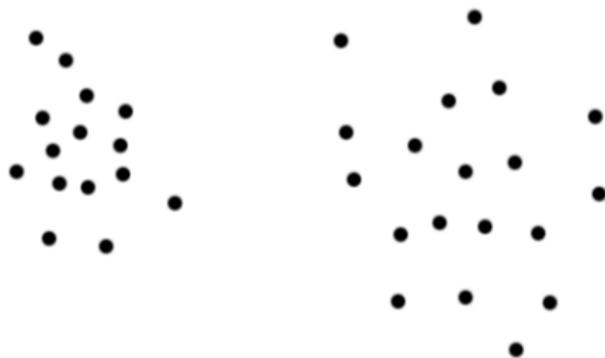
# Цели кластеризации

# Цели кластеризации

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

# Какие бывают кластеры?

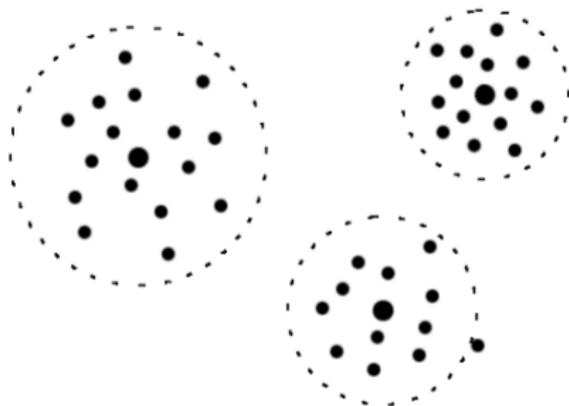
# Типы кластерных структур. Сгущения



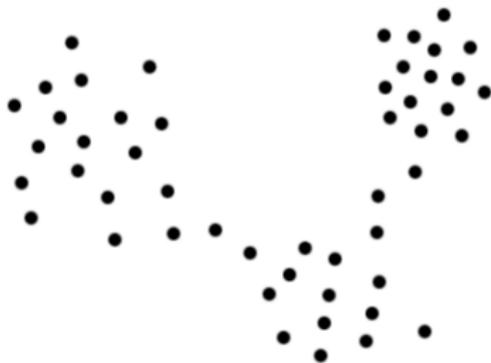
# Типы кластерных структур. Ленты



# Типы кластерных структур. С центром



# Типы кластерных структур. С перемычками



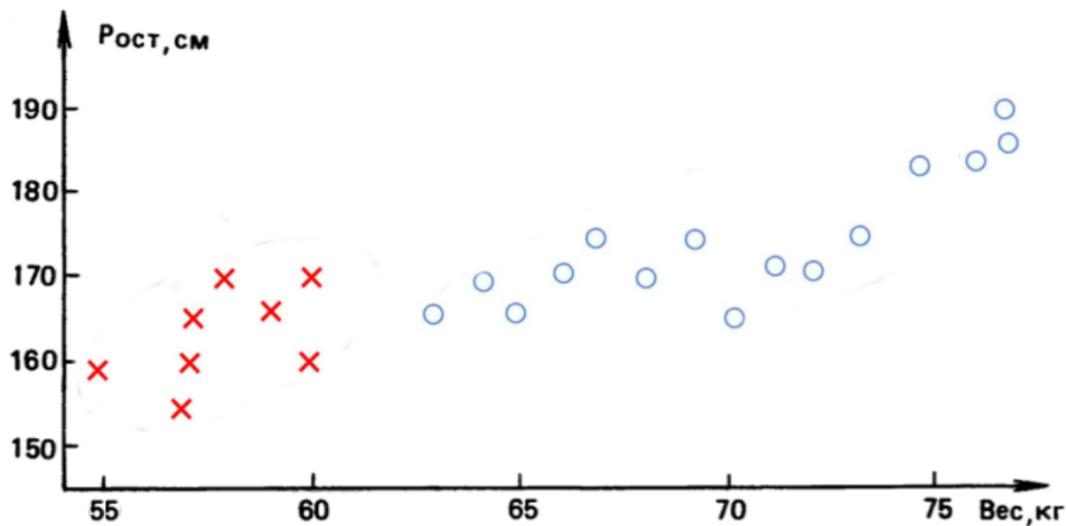
# Типы кластерных структур. На фоне



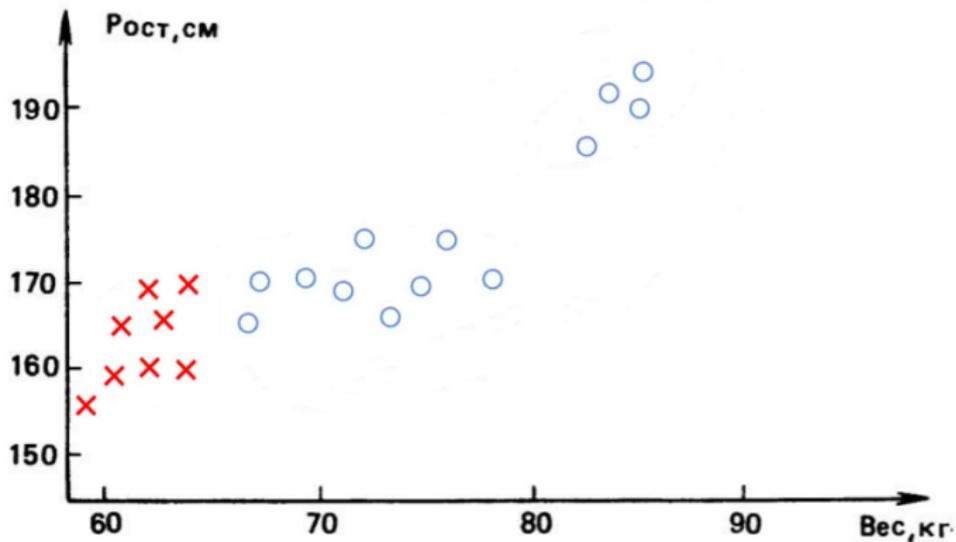
# Типы кластерных структур. Перекрывающиеся



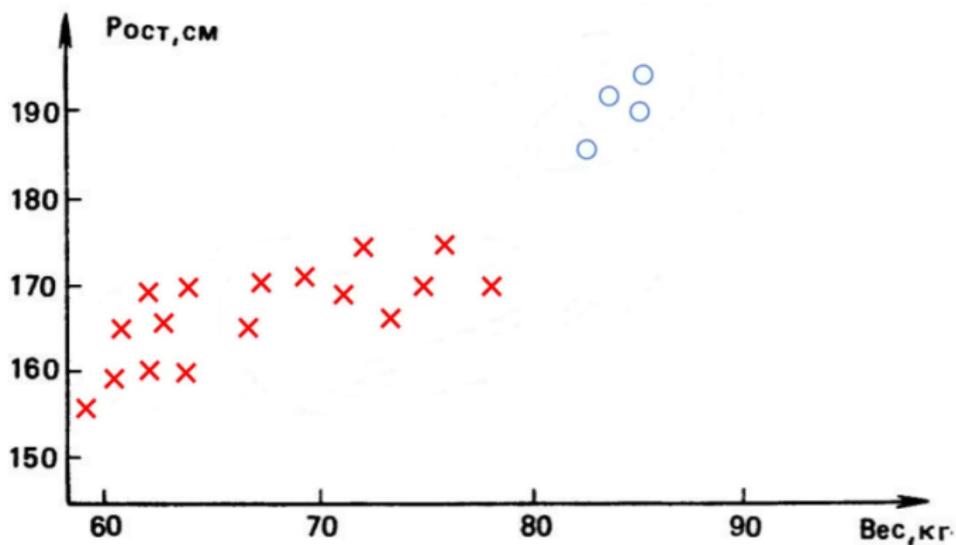
# Чувствительность к выбору метрики



# Чувствительность к выбору метрики



# Чувствительность к выбору метрики



# Оценка качества кластеризации

Есть несколько разбиений на кластеры. Как их сравнить?

# Оценка качества кластеризации

- Минимизировать среднее внутрикластерное расстояние

$$\frac{\sum_{a(x_i)=a(x_j)} \rho(x_i, x_j)}{\sum_{a(x_i)=a(x_j)} 1} \rightarrow \min$$

- Максимизировать среднее межкластерное расстояние

$$\frac{\sum_{a(x_i) \neq a(x_j)} \rho(x_i, x_j)}{\sum_{a(x_i) \neq a(x_j)} 1} \rightarrow \max$$

# Методы кластеризации

- Иерархические
- Графовые
- Статистические

# Иерархическая кластеризация

# Агломеративный алгоритм Ланса-Уильямса

Идея:

- Считаем каждую точку кластером.
- Затем объединяем ближайшие точки в новый кластер.
- Повторяем.

# Алгоритм Ланса-Уильямса

$$C_1 = \{\{x_1\}, \{x_2\}, \dots, \{x_l\}\}$$

for  $t = 2, \dots, l$ :

$$(U, V) = \arg \min_{U \neq V} \rho(U, V)$$

$$W = U \cup V$$

$$C_t = C_{t-1} \cup \{W\} \setminus \{U, V\}$$

foreach  $S \in C_t$

    вычислить  $\rho(W, S)$

# Алгоритм Ланса-Уильямса

Чего не хватает?

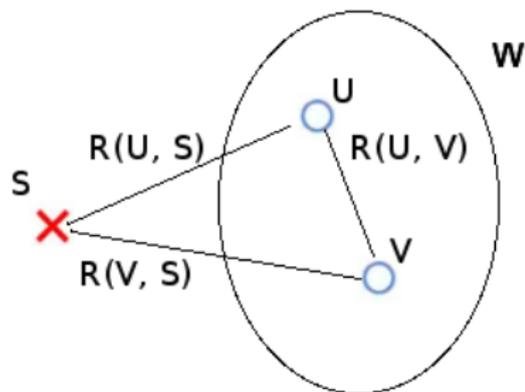
# Формула Ланса-Уильямса

Расстояние  $R(W, S)$ ?

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

Знаем:

$R(U, S), R(V, S), R(U, V)$



# Формула Ланса-Уильямса

Расстояние  $R(W, S)$ ?

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

Знаем:

$$R(U, S), R(V, S), R(U, V)$$

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

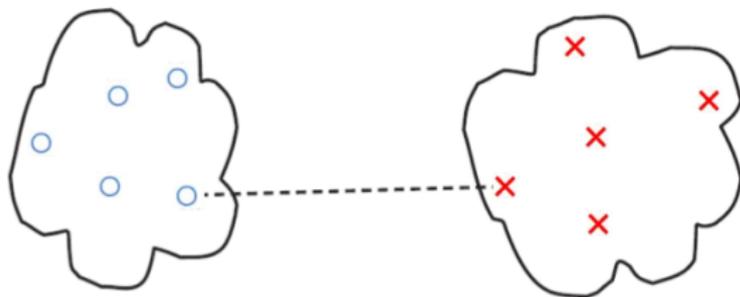
$\alpha_U, \alpha_V, \beta, \gamma$  – числовые параметры

# Формула Ланса-Уильямса

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

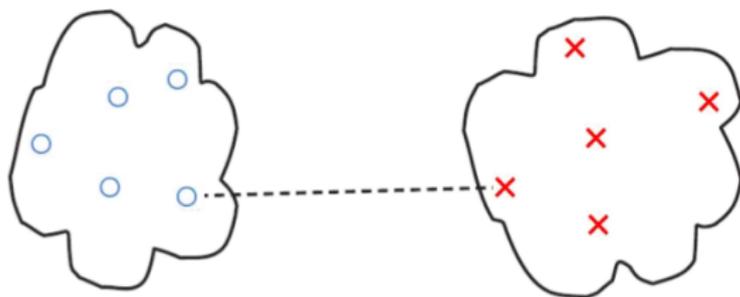
# Формула Ланса-Уильямса

Расстояние ближнего соседа:



# Формула Ланса-Уильямса

Расстояние ближнего соседа:



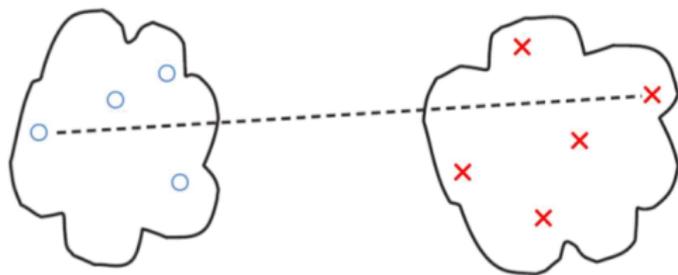
$$\alpha_U = \alpha_V = \frac{1}{2}$$

$$\beta = 0$$

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

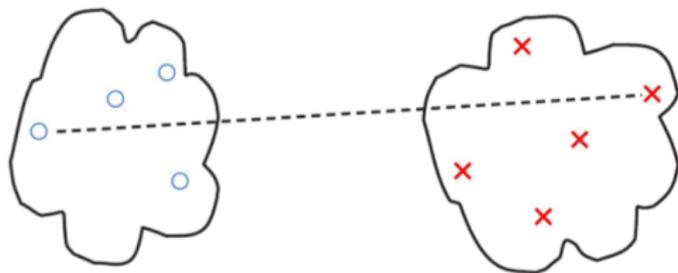
# Формула Ланса-Уильямса

Расстояние дальнего соседа:



# Формула Ланса-Уильямса

Расстояние дальнего соседа:



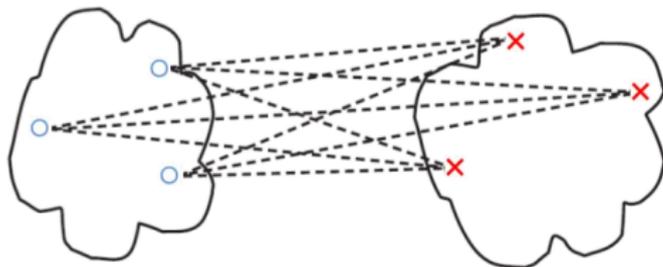
$$\alpha_U = \alpha_V = \frac{1}{2}$$

$$\beta = 0$$

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

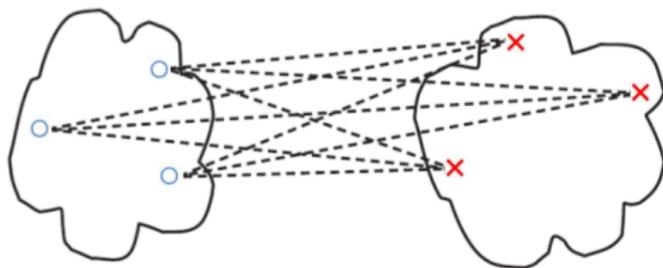
# Формула Ланса-Уильямса

Групповое среднее:



# Формула Ланса-Уильямса

Групповое среднее:



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

Какие есть две очевидные идеи?

Очевидные:

- Выделение связных компонент
- Минимальное покрывающее дерево

# Выделение связанных компонент

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

# Выделение связанных компонент

Как искать компоненты связности?

# Минимальное покрывающее дерево

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

Как найти?

# 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.

# Статистические алгоритмы

# Алгоритм FOREL

$$U = X, C = \emptyset$$

while  $U \neq \emptyset$ :

    выбрать случайную точку  $x_0$

    Повторять пока  $x_0$  не стабилизируется:

$$c = \{x \in X \mid \rho(x, x_0) < R\}$$

$$x_0 = \frac{1}{|c|} \sum_{x \in c} x$$

$$U = U \setminus c, C = C \cup \{c\}$$

# Метод $k$ -средних

Идея:

минимизировать меру ошибки

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

$\mu_i$  – ближайший к  $x_i$  центр кластера

# Метод $k$ -средних

Инициализировать центры  $k$  кластеров

Пока  $c_i$  не перестанет меняться:

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

$$\mu_c = \frac{\sum_{c_i=c} f_j(x_i)}{\sum_{c_i=c} 1} \quad j = 1, \dots, n, c \in C$$

$\mu_c$  – новое положение центров кластеров

$c_i$  – принадлежность  $x_i$  к кластеру

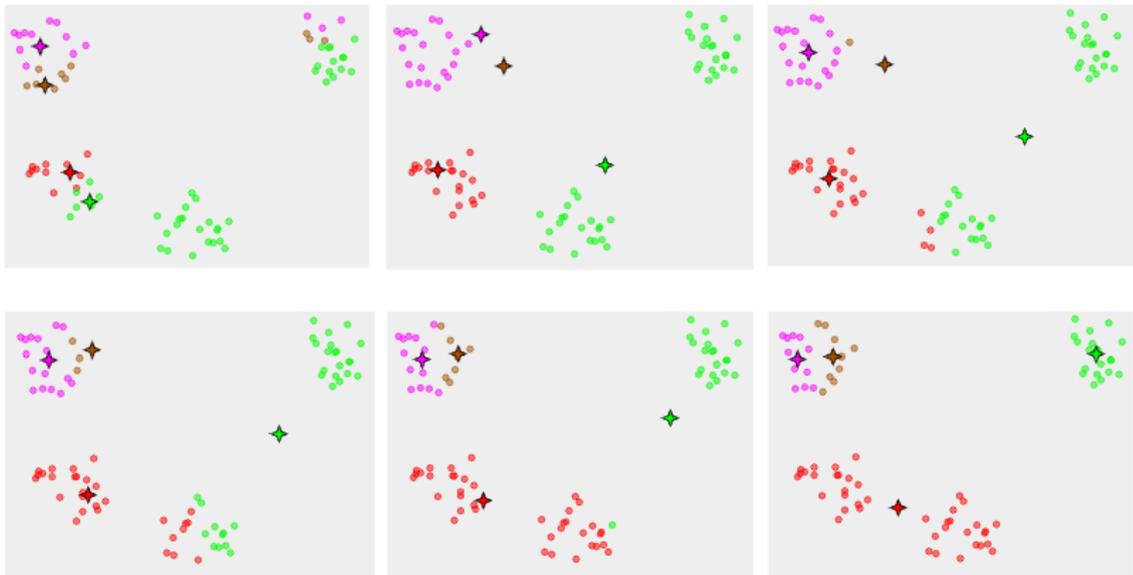
$\rho(x_i, \mu_c)$  – расстояние от  $x_i$  до центра кластера  $\mu_c$

# Особенности метода $k$ -средних

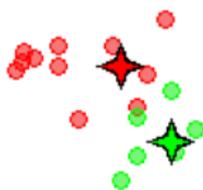
- Чувствительность к начальному выбору  $\mu_c$
- Необходимость задавать  $k$

Как устранить эти недостатки?

# Чувствительность к начальному выбору $\mu_c$



# Необходимость задавать $k$

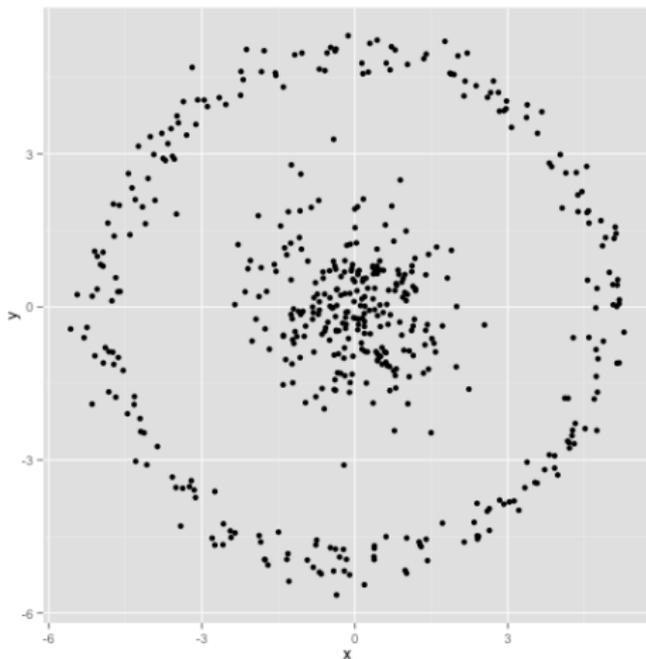


# Устранение недостатков

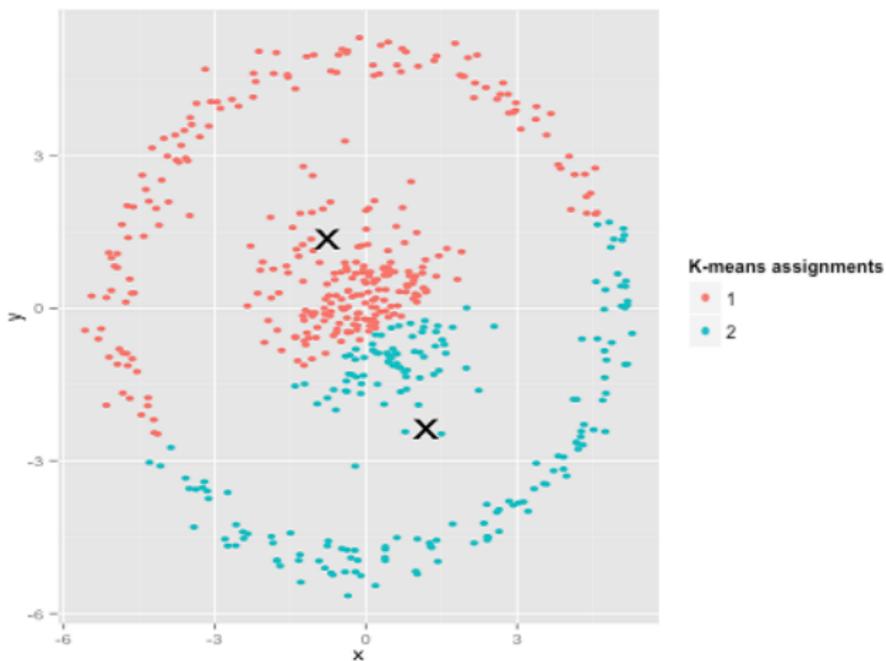
- Несколько случайных кластеризаций
- Постепенное наращивание числа  $k$

# Недостатки k-means

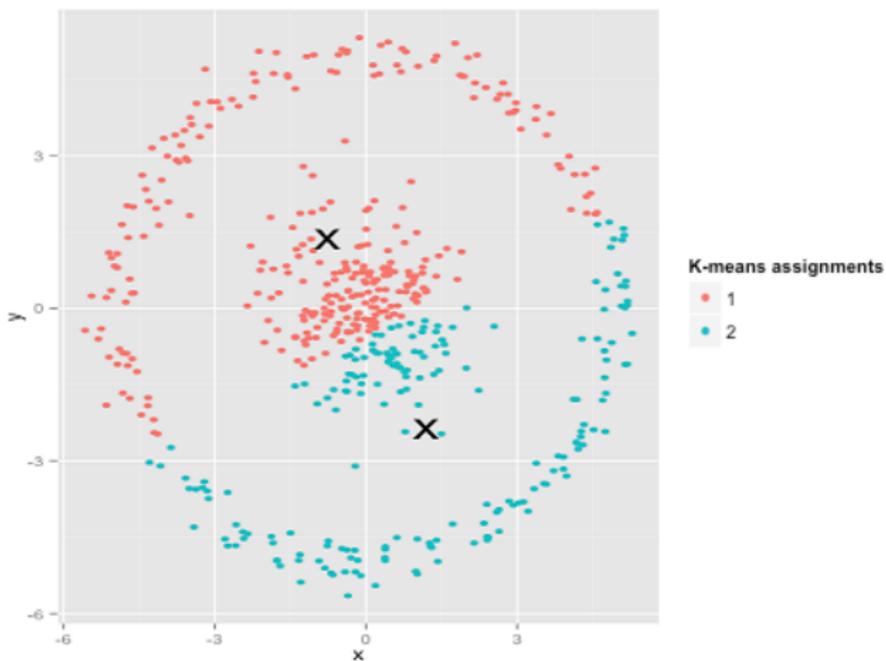
# "Не сферические данные"



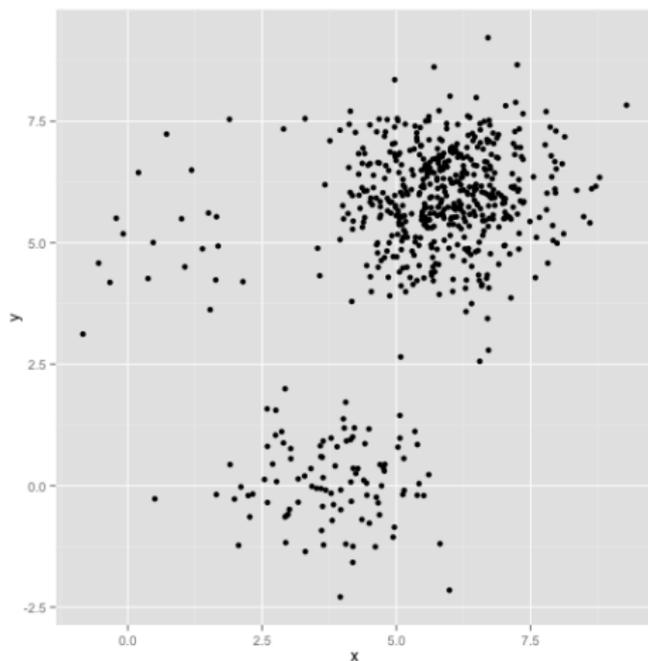
# "Не сферические данные"



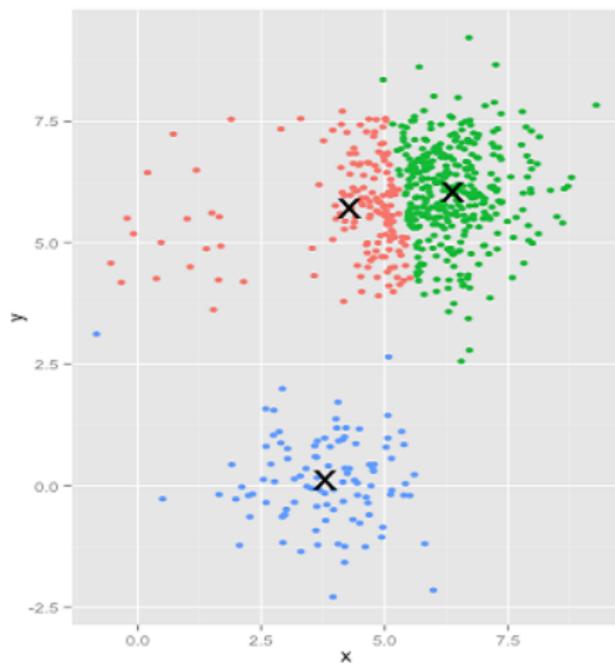
# "Не сферические данные"



# Разноразмерные кластеры



# Разноразмерные кластеры



# На следующей лекции

- Линейные методы классификации
- Минимизация эмпирического риска
- Метод градиентного спуска
- Принцип максимума правдоподобия
- Балансировка ошибок и ROC-кривая