

Машинное обучение

Лекция 3. Методы кластеризации

Катя Тузова

Что такое прецедент?

Разбор летучки

Задача обучения с учителем.

Множество объектов X

Множество допустимых ответов Y

Прецедент - пара объект-ответ (x_i, y_i)

$x_i \in X$ $y_i \in Y$

К какому типу задач относятся:

- Прогнозирования потребительского спроса. У компании есть 1000 продуктов, которые она производит. Требуется предсказать сколько будет продано в следующие полгода.
- Вы владелец фейсбука и пишете алгоритм, который определяет был ли взломан пользователь.
- В задачах медицинской диагностики в роли объектов выступают пациенты. Найти вид заболевания.
- Задача кредитного скоринга (Оценка кредитоспособности клиента, на основании которой принимается решение о выдаче кредита)

К какому типу задач относятся:

- Прогнозирования потребительского спроса. (регрессия)
- Взломан ли пользователь. (бинарная классификация)
- Найти вид заболевания. (классификация)
- Задача кредитного скоринга. (классификация)

Какие из следующих задач являются задачей обучения без учителя?

- Спам фильтр
- Рубрикация текстов (Группировка статей по темам)
- Оценить есть ли у нового пациента диабет
- Прогнозирование времени следующего землетрясения на определенной территории.
- Разделение людей по психотипу.

Какие из следующих задач являются задачей обучения без учителя?

- Спам фильтр
- + Рубрикация текстов (Группировка статей по темам)
- Оценить есть ли у нового пациента диабет
- Прогнозирование времени следующего землетрясения на определенной территории.
- + Разделение людей по психотипу.

Разбор летучки

- Пол
- Средний школьный балл
- Номер школы
- Город школы
- Доля пропущенных лекций
- Оценка по мнению родителей
- Пиво/неделя
- Друзей в ВКонтакте
- Расстояние от дома до универа
- Ряд в аудитории
- Наличие планшета
- Периметр головы

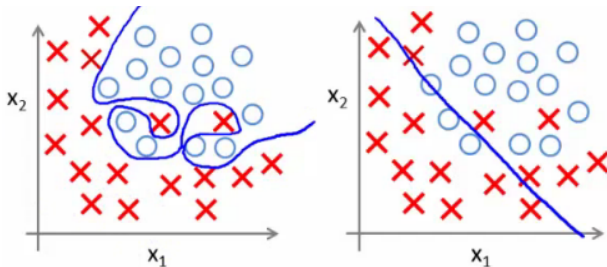
Разбор летучки

- Пол (бинарный)
- Средний школьный балл (количественный)
- Номер школы (номинальный)
- Город школы (номинальный)
- Доля пропущенных лекций (количественный)
- Оценка по мнению родителей (порядковый)
- Пиво/неделя (количественный)
- Друзей в ВКонтакте (количественный)
- Расстояние от дома до универа (количественный)
- Ряд в аудитории (порядковый)
- Наличие планшета (бинарный)
- Периметр головы (количественный)

Приведите пример переобучения и недообучения.

Разбор летучки

Приведите пример переобучения и недообучения.



Что такое k-fold cross validation?

Разбор летучки 2

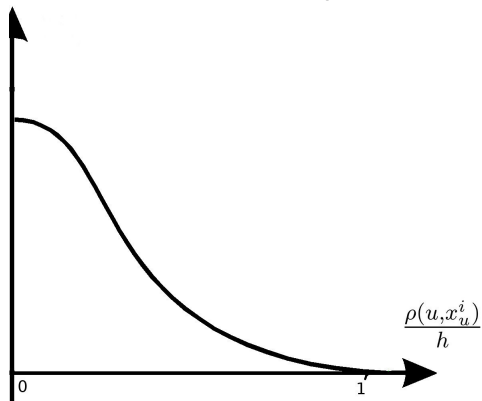
Что такое k-fold cross validation?

Способ разбиения обучающей выборки на два множества L и T .

X разбивается на k частей. Затем на $k - 1$ частях данных производится обучение модели, а оставшаяся часть данных используется для тестирования.

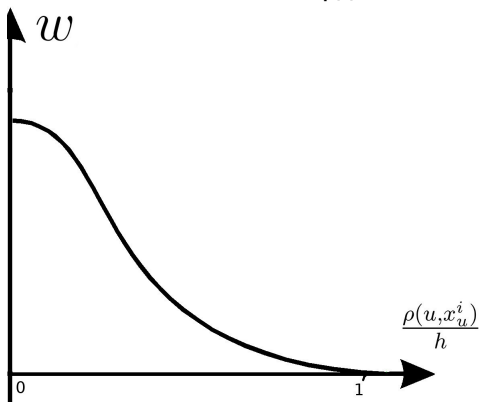
Разбор летучки 2

Что отложено по оси ординат?



Разбор летучки 2

Что отложено по оси ординат?



Разбор летучки 2

Чем эталонный объект отличается от надежно классифицируемого?

Разбор летучки 2

Чем эталонный объект отличается от надежно классифицируемого?

Эталонные объекты имеют большой положительный отступ, плотно окружены объектами своего класса и являются наиболее типичными его представителями.

Надежно классифицируемые (неинформативные) объекты – изъятие этих объектов из выборки не влияет на качество классификации. Фактически, они не добавляют к эталонам никакой новой информации.

Разбор летучки 2

$$a(u, X^l) = \arg \max_{y \in Y} \underbrace{\sum_{i=1}^l [y_u^i = y] w(i, u)}_{\Gamma_y(u)}$$

Смысл параметров w , i , u , $\Gamma_y(u)$

Разбор летучки 2

$$a(u, X^l) = \arg \max_{y \in Y} \underbrace{\sum_{i=1}^l [y_u^i = y] w(i, u)}_{\Gamma_y(u)}$$

$w(i, u)$ - вес i -го соседа u

i - порядковый номер соседа u в упорядоченном множестве

u - объект, для которого проводится классификация

$\Gamma_y(u)$ - оценка близости объекта u к классу y

Разбор летучки 2

Мотивация для использования Парзеновского окна. В чем минусы зависимости веса объекта только от его порядкового номера?

Разбор летучки 2

Мотивация для использования Парзеновского окна. В чем минусы зависимости веса объекта только от его порядкового номера?

Объекты, находящиеся на одинаковом расстоянии будут взяты с разными весами. Далекие объекты могут быть взяты со слишком большим весом.

Гипотеза компактности:

Схожие объекты, как правило, лежат в одном классе.

Разбор летучки 2

Какие проблемы могут встретиться при использовании метода k -nn на реальных данных? Какие решения этих проблем вам известны?

Разбор летучки 2

Какие проблемы могут встретиться при использовании метода k-пп на реальных данных? Какие решения этих проблем вам известны?

- Разные шкалы признаков
- Проблема подбора метрики
- Проклятие размерности
- Хранение выборки
- Быстрый поиск ближайших соседей

Разбор летучки 2

Какими свойствами должна обладать функция K , чтобы использовать ее в качестве ядра?

Разбор летучки 2

Какими свойствами должна обладать функция K , чтобы использовать ее в качестве ядра?

Невозрастающая функция, положительная на отрезке $[0, 1]$

Общие вопросы по домашке

$$\text{Precision} = \frac{TP}{TP + FP} \quad \text{Recall} = \frac{TP}{TP + FN}$$

- TP — это количество элементов, которые классификатор верно отнёс к классу c ,
- FP — количество элементов, которые классификатор неверно отнёс к классу c ,
- FN — количество элементов, которые классификатор неверно отнёс к классу, отличному от c .

Общие вопросы по домашке

- Нужна ли нормировка признаков?
- В чем минус поиска ближайших соседей с помощью сортировки?

Общие вопросы по домашке

```
len(X_train) / (len(X_test) + len(X_train)) == ratio  
len(y_train) / (len(y_test) + len(y_train)) == ratio
```

Как выбрать ratio?

Общие вопросы по домашке

- Надо ли было брать $k = 1$ в функции `loocv`?
- Можно ли не перебирать k от 1 до n ?
- Можно ли остановиться при выборе k как только начнет увеличиваться LOO?
- Надо ли было использовать тестовые данные в функции `loocv`?

Пример зависимости k



картинка с machinelearning.ru

Быстрый поиск ближайшего соседа

k-d дерево

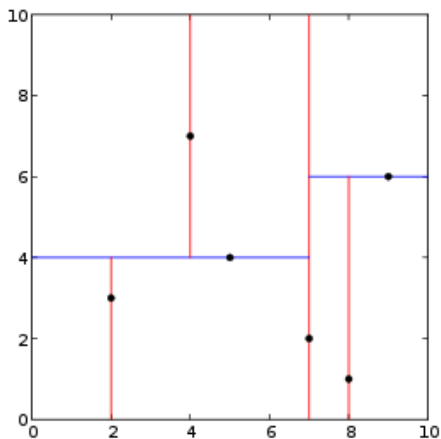
Идея: разложим множество по поперечному будем искать в бинарное дерево с простыми условиями и конкретными точками в узлах.

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

Задача: Найти похожие документы в интернете

Locality Sensitive Hash

Проблема: Сколько сравнений нам понадобится для того, чтобы найти похожие среди N документов?

Locality Sensitive Hash

Проблема: Сколько сравнений нам понадобится для того, чтобы найти похожие среди N документов?

$$C = \frac{N(N-1)}{2}$$

$$N = 10^6 \Rightarrow C = 5 * 10^{11}$$

Locality Sensitive Hash

Идея:

Давайте от каждого документа (строки из нулей и единиц) возьмем хэш h :

- Если документы C_1 и C_2 похожи, то с большой вероятностью $h(C_1) == h(C_2)$
- Иначе – с большой вероятностью $h(C_1) \neq h(C_2)$

Locality Sensitive Hash

Идея:

- Разбить документ на n -граммы
- Взять от каждого n -грамма хэш
- Получим представление документа в виде строки из нулей и единиц. Длина такого вектора = количество всевозможных n -грамм.
- Посчитаем документы похожими, если у них много совпадающих n -грамм

Locality Sensitive Hash

Перестановка

5	3	6
1	2	4
2	4	1
7	1	2
6	7	7
4	5	5
3	6	3

	Документ 1	Документ 2		
1	1	0	1	0
2	1	0	0	1
3	0	1	0	1
4	0	1	0	1
5	0	1	0	1
6	1	0	1	0
7	1	0	1	0

Номер первой строки с единицей в перестановке



2	1	2	1
2	1	4	1
1	2	1	2

Наличие i-го n-грамма



Номер первой строки с единицей в исходной матрице

1	5	1	5
2	3	1	3
6	4	6	4

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

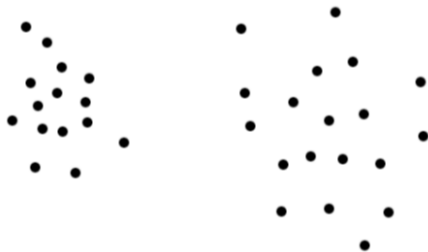
Цели кластеризации

Цели кластеризации

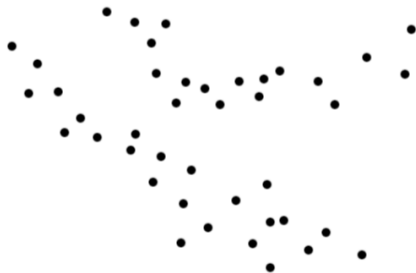
- Сократить объём хранимых данных
- Выделить нетипичные объекты
- Упростить дальнейшую обработку данных
- Построить иерархию множества объектов

Какие бывают кластеры?

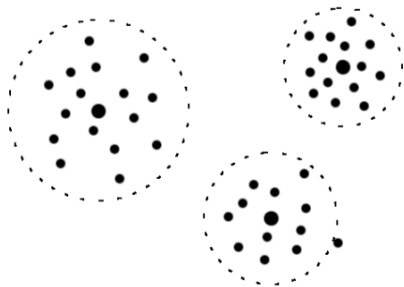
Типы кластерных структур. Сгущения



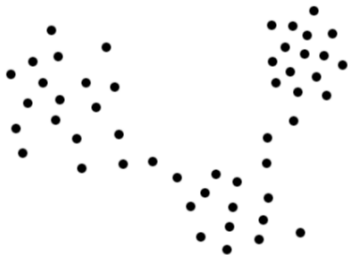
Типы кластерных структур. Ленты



Типы кластерных структур. С центром



Типы кластерных структур. С перемычками



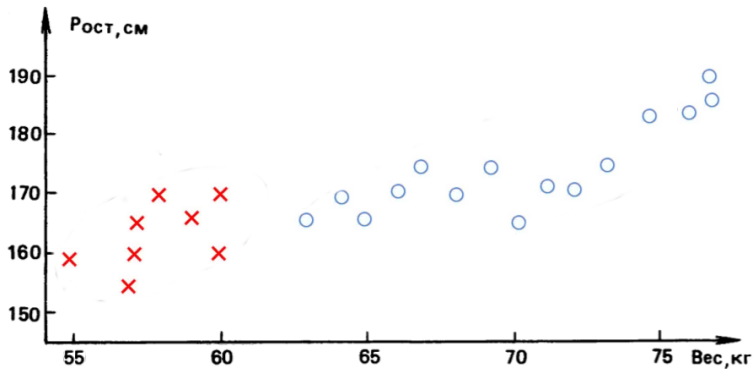
Типы кластерных структур. На фоне



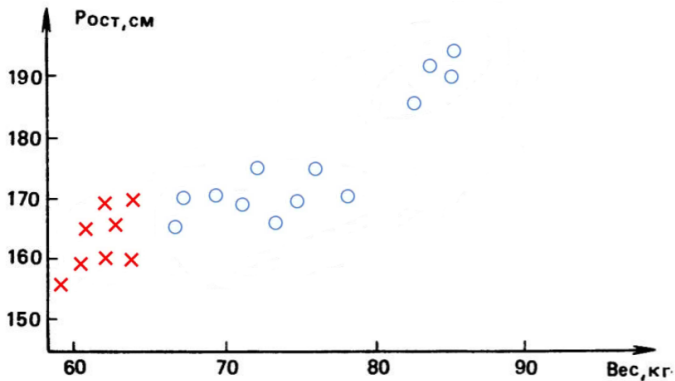
Типы кластерных структур. Перекрывающиеся



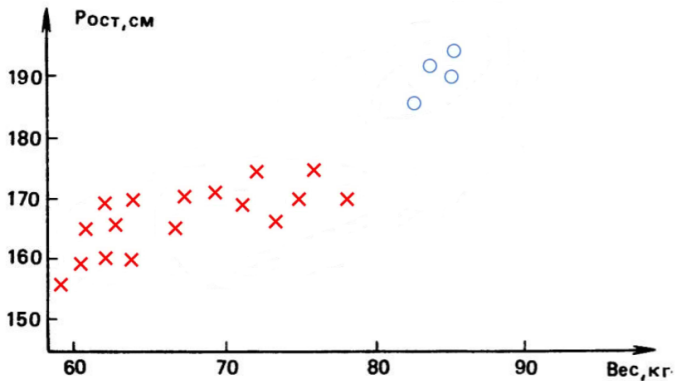
Чувствительность к выбору метрики



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?

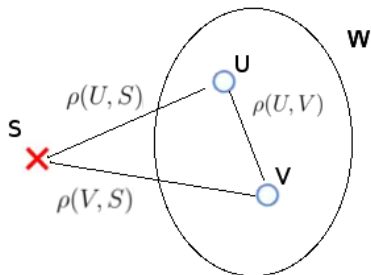
Формула Ланса-Уильямса

Расстояние $\rho(W, S)$?

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

Знаем:

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



Формула Ланса-Уильямса

Расстояние $\rho(W, S)$?

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

Знаем:

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

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

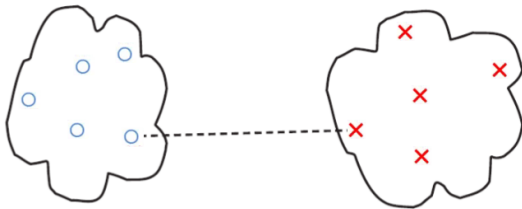
$\alpha_U, \alpha_V, \beta, \gamma$ – числовые параметры

Формула Ланса-Уильямса

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

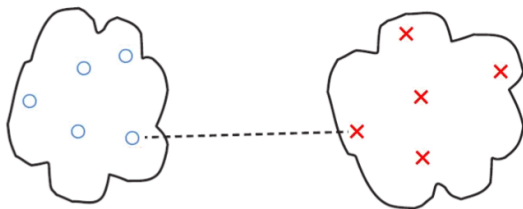
Формула Ланса-Уильямса

Расстояние ближнего соседа:



Формула Ланса-Уильямса

Расстояние ближнего соседа:



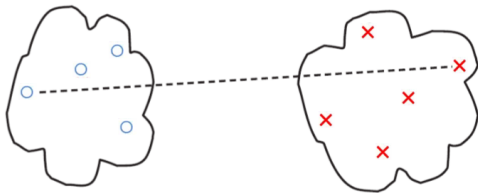
$$\alpha_U = \alpha_V = \frac{1}{2}$$

$$\beta = 0$$

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

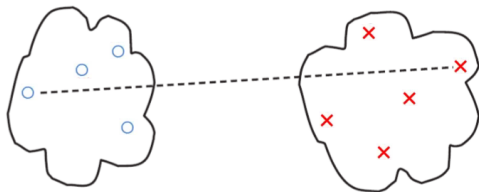
Формула Ланса-Уильямса

Расстояние дальнего соседа:



Формула Ланса-Уильямса

Расстояние дальнего соседа:



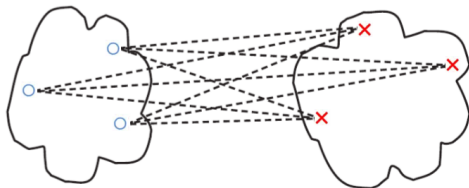
$$\alpha_U = \alpha_V = \frac{1}{2}$$

$$\beta = 0$$

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

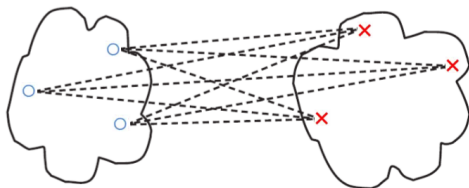
Формула Ланса-Уильямса

Групповое среднее:



Формула Ланса-Уильямса

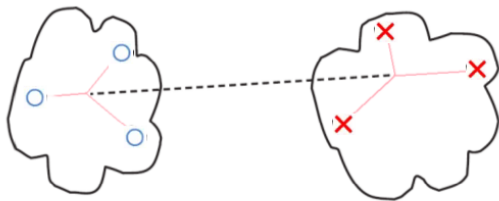
Групповое среднее:



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

Формула Ланса-Уильямса

Расстояние Уорда:



$$\alpha_U = \frac{|S|+|U|}{|S|+|W|}$$

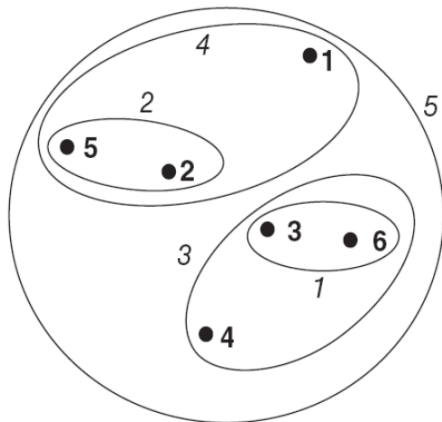
$$\alpha_V = \frac{|S|+|V|}{|S|+|W|}$$

$$\beta = \frac{-|S|}{|S|+|W|}$$

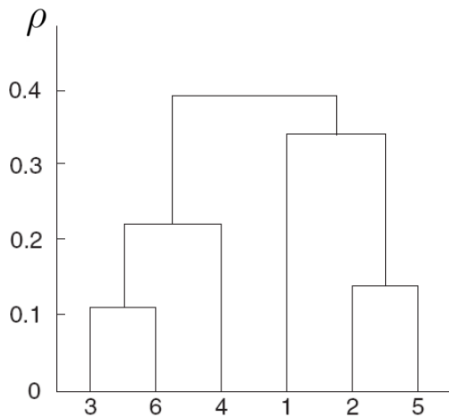
$$\gamma = 0$$

Визуализация кластеров

Диаграмма вложения



Дендрограмма



Дендрограмма

Может ли так случиться, что дендрограмма имеет самопересечения?

Может ли так случиться, что дендрограмма имеет самопересечения?

Как избежать?

Свойство монотонности

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

$$\rho_2 \leq \rho_3 \leq \dots \leq \rho_l$$

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

Input: X, R

$U = X, C = \emptyset$

while $U \neq \emptyset$:

 выбрать случайную точку x_0

 Повторять пока x_0 не стабилизируется:

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

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

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

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

Инициализировать центры k кластеров

Пока c_i не перестанет меняться:

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

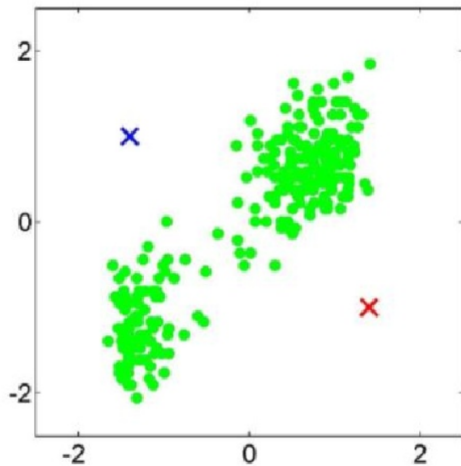
$$\mu_c = \frac{\sum_{c_i=c} f_j(x_i)}{\sum_{c_i=c} 1} \quad j = 1, \dots, n, c \in C$$

μ_c – новое положение центров кластеров

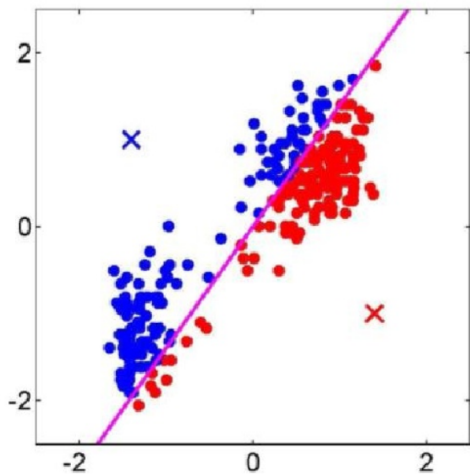
c_i – принадлежность x_i к кластеру

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

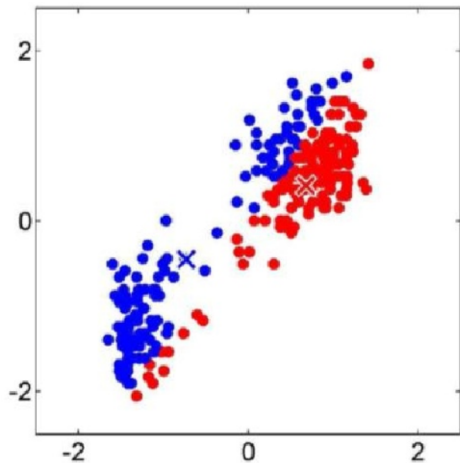
Метод k -средних



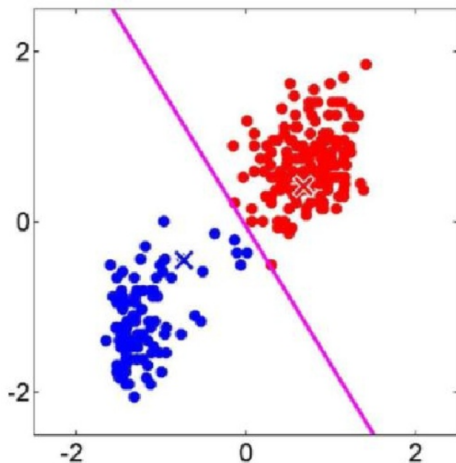
Метод k -средних



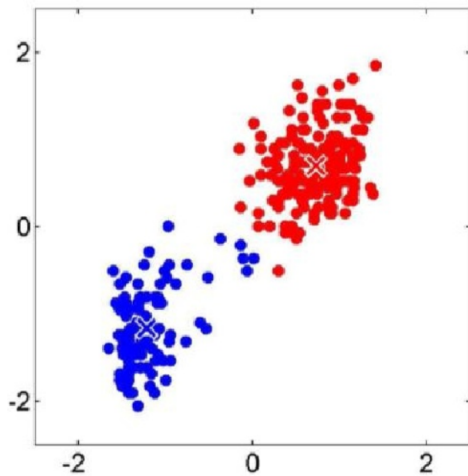
Метод k -средних



Метод k -средних



Метод k -средних

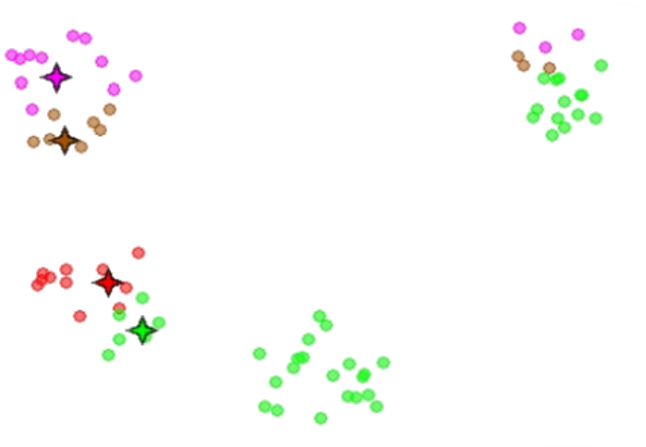


Особенности метода k -средних

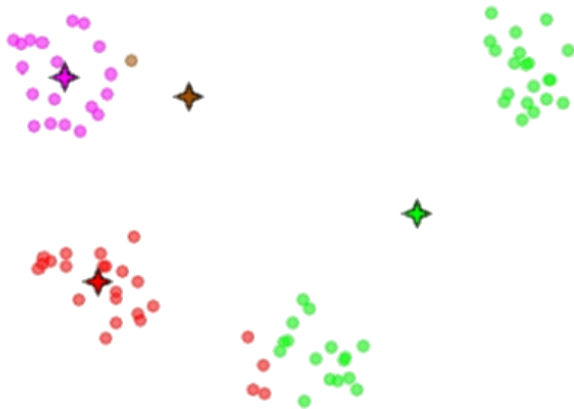
- Чувствительность к начальному выбору μ_c
- Необходимость задавать k

Как устранить эти недостатки?

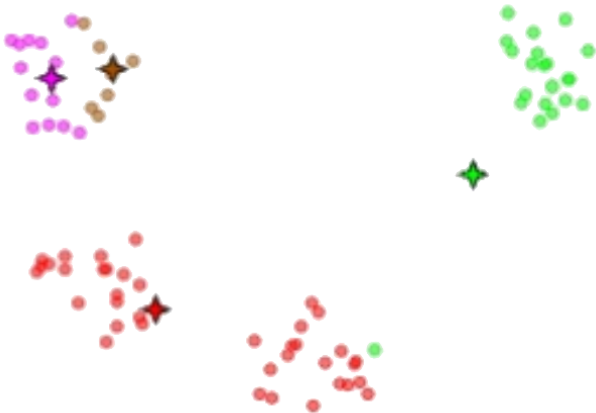
Чувствительность к начальному выбору μ_c



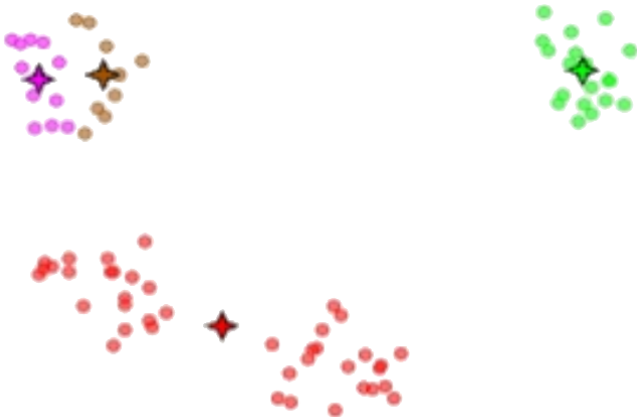
Чувствительность к начальному выбору μ_c



Чувствительность к начальному выбору μ_c



Чувствительность к начальному выбору μ_c



Необходимость задавать k

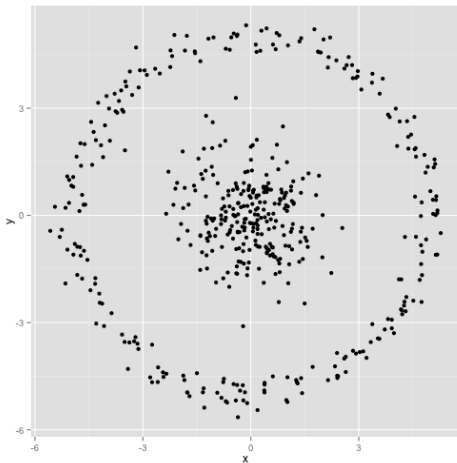


Устранение недостатков

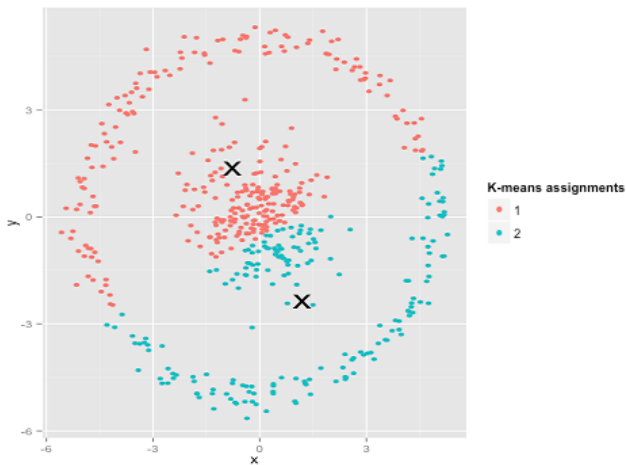
- Несколько случайных кластеризаций
- Постепенное наращивание числа k

Недостатки k-means

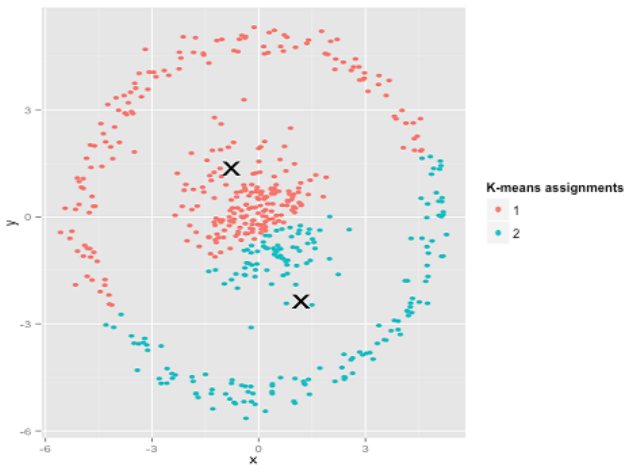
"Не сферические данные"



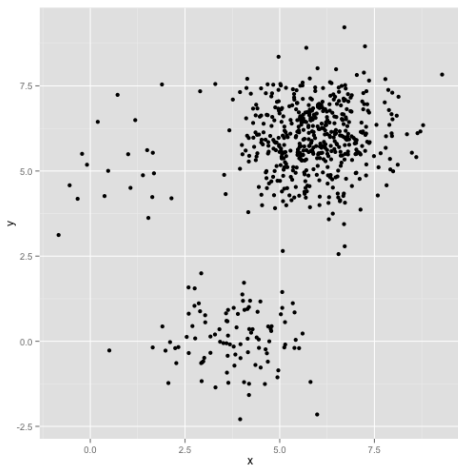
"Не сферические данные"



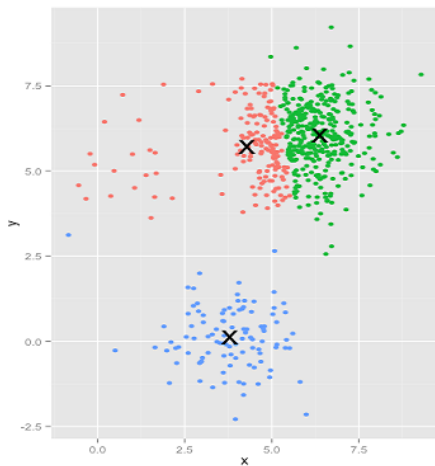
"Не сферические данные"



Разноразмерные кластеры



Разноразмерные кластеры



На следующей лекции

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