Лекция 17
Кластеризация

Е. А. Соколов, А. Гусев, И. Садртдинов
ФКН ВШЭ

21 февраля 2020 г.

Вернемся к одной из задач обучения без учителя — кластеризации. Пусть у нас есть выборка $X = \{x_i\}_{i=1}^l, x_i \in \mathbb{X}$, и мы хотим построить алгоритм $a : \mathbb{X} \to \{1, ..., K\}$, который ставил бы в соотвествие объекту номер кластера. Ранее предлагалось использовать номера кластеров как новый признак для обучения с учителем. Сегодня мы рассмотрим модель, которая будет генерировать для нас сколько угодно таких кластерных признаков.

1 Графовые методы

§1.1 От выборки к графу

В курсе МО-1 мы рассматривали несколько алгоритмов кластеризации, а именно:

- *K-Means* — метрический алгоритм, оптимизирующий внутрикластерное расстояние;
- *DBSCAN* — алгоритм, основанный на плотности расположения объектов;

Попробуем изобрести немного другой подход. Мы можем представить объекты из выборки в виде вершин некоторого неориентированного графа $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$, $\mathcal{V} = X = \{x_1, \ldots, x_l\}$. Рассмотрим несколько вариантов, как в таком представлении можно задать ребра $\mathcal{E}$:

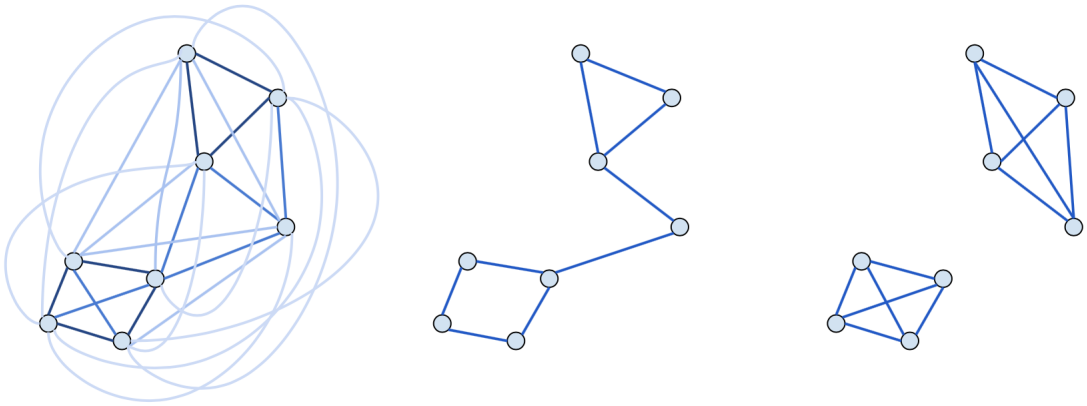
1. Граф G может быть полным с ребрами, вес которых определяется по некоторой формуле, например:

$$w_{ij} = \exp\left(-\frac{\|x_i - x_j\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

   Гиперпараметр σ определяет, насколько нам важны далекие объекты.

2. G можно задать как kNN-граф, то есть объект x_i будет связан с k его ближайшими соседями.

3. Вершина x_i может быть связана с теми вершинами, расстояние до которых меньше выбранного ε, то есть $\rho(x_i, x_j) < \varepsilon$. Такой граф будет называться ε-графом.



Полный взвешенный граф | 2-NN граф | ε-граф

§1.2 Лапласиан графа

Обозначим через W матрицу смежности графа G. Степени вершин будем считать как $d_i = \sum_{j=1}^{l} w_{ij}$. Пусть $D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_l)$. Тогда матрица $L = D - W$ будет называться *лапласианом* графа G. Рассмотрим несколько свойств лапласиана L:

1. Пусть $f \in \mathbb{R}^n$. Тогда имеет место следующая формула:

$$f^\intercal L f = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{l} w_{ij} (f_i - f_j)^2$$

Проверка формулы:

$$\begin{aligned}
f^\intercal L f = f^\intercal D f - f^\intercal W f = \sum_{i=1}^{l} d_i f_i^2 - \sum_{i,j=1}^{l} w_{ij} f_i f_j = \\
= \sum_{i=1}^{l} \left(\sum_{j=1}^{l} w_{ij} \right) f_i^2 - \sum_{i,j=1}^{l} w_{ij} f_i f_j = \sum_{i,j=1}^{l} w_{ij} f_i^2 - \sum_{i,j=1}^{l} w_{ij} f_i f_j = \\
= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{l} w_{ij} f_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{l} w_{ij} f_i^2 - \sum_{i,j=1}^{l} w_{ij} f_i f_j = \\
= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{l} w_{ij} f_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{l} w_{ij} f_j^2 - \sum_{i,j=1}^{l} w_{ij} f_i f_j = \\
= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{l} w_{ij} \left(f_i^2 - 2 f_i f_j + f_j^2 \right) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{l} w_{ij} (f_i - f_j)^2
\end{aligned}$$

2. L — симметричная неотрицательно определенная матрица. Симметричность вытекает из неориентированности графа. Свойство неотрицательной определенности легко следует из первого пункта. Действительно, в обсужденных методах постоения графа $w_{ij} \geq 0$, притом $(f_i - f_j)^2 \geq 0$. Следовательно, $f^\intercal L f \geq 0$, что и означает неотрицательную определенность.

Однако у лапласиана также есть свойство, которое поможет нам в задаче кластеризации. Сформулируем его в виде теоремы.

Теорема 1.1. *Пусть L — лапласиан графа G. Тогда выполнены следующие два пункта:*

1. *Собственное значение $\lambda = 0$ матрицы L имеет кратность, равную числу компонент связности k.*

2. *Пусть $A_1, \ldots, A_k$ — компоненты связности графа G. Тогда векторы $f_1, \ldots, f_k$, определяемые по формуле $f_i = ([x_j \in A_i])_{j=1}^{l}$, будут являться собственными векторами для $\lambda = 0$.*

Доказательство.

Сперва рассмотрим случай $k = 1$. Поймем, почему $\lambda = 0$ вообще является собственным значением матрицы L. Для этого рассмотрим вектор $f = (1, \ldots, 1)$:

$$Lf = Df - Wf = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & \cdots & w_{1l} \\ w_{21} & w_{22} & \cdots & w_{2l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{l1} & w_{l2} & \cdots & w_{ll} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_l \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} w_{11} + \cdots + w_{1l} \\ \vdots \\ w_{l1} + \cdots + w_{ll} \end{pmatrix} = 0$$

Теперь предположим, что существует собственный вектор $f' \in \mathbb{R}^n : \exists p \neq q \to f'_p \neq f'_q$, то есть неконстантный вектор, соответствующий $\lambda = 0$. Тогда $Lf' = 0 \Rightarrow f'^\intercal L f' = 0$. Но рассматриваемый граф является связным. Значит существует путь $p = i_0 \to i_1 \to \cdots \to i_{n-1} \to i_n = q$. Поскольку вершины i_r и i_{r+1} соединены ребром, то $w_{i_r i_{r+1}} > 0$, а значит, $f'_{i_r} = f'_{i_{r+1}}$ (иначе получим $f'^\intercal L f' > 0$). Отсюда $f'_p = f'_{i_1} = \cdots = f'_{i_{n-1}} = f'_q$ - константный вектор. Получили противоречие $\Rightarrow f'$ не является собственным вектором для $\lambda = 0$. Значит, мы доказали оба пункта для $k = 1$.

Теперь пусть $k > 1$. Можно упорядочить вершины так, чтобы лапласиан L стал блочно-диагональной матрицей:

$$L = \begin{pmatrix} L_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & L_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & L_k \end{pmatrix}$$

Блоки $L_1, \ldots, L_k$ будут являться лапласианами компонент связности графа $G \Rightarrow \lambda = 0$ имеет кратность k, а собственные векторы $f_1, \ldots, f_k$ задаются по формуле

$$f_i = ([x_j \in A_i])_{j=1}^{l}$$

■

Гипотеза 1.1. *Пусть есть похожие объекты x_j и x_k, то есть расстояние между ними невелико. Тогда у собственных векторов f_i, соответствующих маленьким собственным значениям, выполнено $f_{ij} \approx f_{ik}$.*

Эта гипотеза имеет лишь эмпирическое доказательство. Однако алгоритм, построенный на этой гипотезе, позволяет достигать успеха в задаче кластеризации. Данный алгоритм называется *спектральной кластеризацией*.

§1.3 Спектральная кластеризация

Алгоритм спектральной кластеризации: *Сложность шага*

1. Строим по объектам граф G и лапласиан $L = D - W$. $\mathcal{O}(l^2)$
2. Находим нормированные собственные векторы $u_1, \ldots, u_m$ матрицы L, соответствующие m наименьшим собственным значениям. $\mathcal{O}(l^3)$
3. Составляем матрицу $U \in \mathbb{R}^{l \times m}$: $U = (u_1 | \ldots | u_m)$. $\mathcal{O}(lm)$
4. Обучаем на этой матрице алгоритм K-Means с k кластерами. $\mathcal{O}(l^{mk+1})$

Если мы верим в нашу гипотезу, то для похожих объектов соответствующие координаты векторов $u_1, \ldots, u_m$ будут близки. Матрица U имеет размерность $l \times m$, поэтому можно посмотреть на нее, как на матрицу объекты-признаки. При этом новыми признаками будут как раз собственные вектора $u_1, \ldots, u_m$. В описанном выше алгоритме предлагается обучать на них K-Means, но никто не запрещает использовать эти признаки для других задач.

Как видно, алгоритм обладает высокой вычислительной сложностью. Но утверждается, что он позволяет достигать впечатлящих результатов в задаче кластеризации. Однако как оценить, насколько хорошо алгоритм справляется с задачей классификации? Этому вопросу посвящен остаток лекции.

2 Оценка качества кластеризации

§2.1 Метрика на разметке

Пусть существует разметка $(y_1, \ldots, y_l)$, не участвующая при обучении. Мы не использовали эту разметку в качестве дополнительного признака, так как нам не хочется мотивировать модель данным признаком. Тогда предлагается ввести оценку качества алгоритма кластеризации при помощи этой разметки, саму же разметку тогда называют *gold standard*. Введем несколько требований к внешней метрике качества Q:

1. *Гомогенность.* Базовое свойство разделения разных объектов в разные кластеры:

$$Q\left(\begin{array}{ccc} & \diamond & \diamond \\ \times & & \diamond \\ \times & \times & \end{array}\right) < Q\left(\begin{array}{ccc} & \diamond & \diamond \\ \times & & \diamond \\ \times & \times & \end{array}\right)$$

2. *Полнота.* Один кластер не должен дробиться на несколько маленьких:

$$Q\left(\begin{array}{ccc} & \times & \times \\ \times & & \times \\ \times & \times & \end{array}\right) < Q\left(\begin{array}{ccc} & \times & \times \\ \times & & \times \\ \times & \times & \end{array}\right)$$

3. *Rag-bag.* Весь мусор должен быть в одном "мусорном"кластере, чтобы остальные кластеры были "чистыми":

$$Q\left(\begin{array}{cccc} \times & \times & \bullet & \circ \\ \times & \times & \triangleright & \star \\ \times & * & \odot & \square \end{array}\right) < Q\left(\begin{array}{cccc} \times & \times & \bullet & \circ \\ \times & \times & \triangleright & \star \\ \times & * & \odot & \square \end{array}\right)$$

4. *Cluster size vs. quantity.* Лучше испортить один кластер с целью улучшить качество множества других:

$$Q\left(\begin{array}{ccc} \times & \circ & \circ \\ \times & \star & \star \\ \times & \triangleright & \triangleright \\ \times & \odot & \odot \end{array}\right) < Q\left(\begin{array}{ccc} \times & \circ & \circ \\ \times & \star & \star \\ \times & \triangleright & \triangleright \\ \times & \odot & \odot \end{array}\right)$$

§2.2 BCubed

Единственной известной на данный момент метрикой, обладающей всеми четыремя названными свойствами является BCubed. Она считается следующим способом. Пусть $L(x)$ — gold standard, $C(x)$ — номер кластера, выдаваемый рассматриваемым алгоритмом. Тогда рассмотрим несколько величин:

$$\mathsf{Correctness}(x, x') = \begin{cases} 1 & , \ C(x) = C(x') \wedge L(x) = L(x') \\ 0 & , \ otherwise \end{cases}$$

$$\mathsf{Precision\text{-}BCubed} = \mathsf{Avg}_x \left[\mathsf{Avg}_{x':C(x)=C(x')}\mathsf{Correctness}(x, x')\right]$$

$$\mathsf{Recall\text{-}BCubed} = \mathsf{Avg}_x \left[\mathsf{Avg}_{x':L(x)=L(x')}\mathsf{Correctness}(x, x')\right]$$

Тогда F-мера от определенных точности и полноты будет удволетворять всем нужным нам требованиям.

Пример 2.1.

$$\begin{array}{ccc} & \times & \times \\ \times & & \times \\ \times & \times & \end{array} \quad \mathsf{Precision\text{-}BCubed} = 1, \quad \mathsf{Recall\text{-}BCubed} = \frac{1}{2}, \quad \mathsf{BCubed} = \frac{1 \cdot \frac{1}{2}}{1 + \frac{1}{2}} = \frac{1}{3}$$