

Кластеризация

RS School Machine Learning course

- 1 Векторные и метрические пространства
- 2 Методы кластеризации
 - Иерархическая кластеризация
 - Алгоритм k средних
 - DBSCAN
- 3 Оценивание качества кластеризации
 - Силуэт
 - Adjusted Rand index

- Когда целевой переменной нет или её значения неизвестны, говорят, что перед нами задача машинного обучения «без учителя» (unsupervised learning).
- Типичный пример – кластеризация: разбить данные на несколько групп (классов, кластеров) наблюдений, похожих между собой.
- Количество кластеров иногда известно, иногда нет.
- Приложения кластеризации:
 - ▷ Сегментация аудитории
 - ▷ Опознавание аномалий в поведении пользователей
 - ▷ Моделирование тематики текстов
 - ▷ ...

Векторные пространства

- Данные для кластеризации (наблюдения, точки) обычно заданы в \mathbb{R}^d , вещественном d -мерном пространстве.
- Это одно из векторных пространств – объектов с богатой алгебраической и геометрической структурой.
- Элементы векторного пространства обычно называют векторами или точками.
- Обычная евклидова плоскость \mathbb{R}^2 – модельный пример, которым можно пользоваться, обсуждая свойства векторных пространств.

Векторные пространства

Алгебраические свойства:

- ▶ Векторы можно складывать.
- ▶ Можно умножать на число (будем считать, что из \mathbb{R}).
- ▶ Поэтому линейная комбинация векторов из какого-нибудь векторного пространства V принадлежит этому пространству:

$$\forall a, b \in \mathbb{R}, u, v \in V : au + bv \in V$$

Векторные пространства

Геометрические свойства:

- ▶ В некоторых векторных пространствах, в частности, в \mathbb{R}^d , определено скалярное произведение:

$$\langle u, v \rangle = \sum_{i=1}^d u_i v_i \quad (u, v \in \mathbb{R}^d)$$

- ▶ Скалярное произведение порождает норму:

$$\|u\| = \sqrt{\langle u, u \rangle}$$

- ▶ Норма порождает метрику (берётся линейная комбинация векторов):

$$\rho(u, v) = \|u - v\|$$

Метрические пространства

- Метрическим пространством называется пара (X, ρ) , где X – произвольное множество;
 $\rho : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ – функция с набором хороших свойств (далее о них).
- Элементы множества X называют точками.
- Функцию ρ называют метрикой.
- О величине $\rho(x, y)$ можно думать как о расстоянии или длине кратчайшего пути между точками x и y .

Метрические пространства

Свойства метрики:

❶ Неотрицательность:

$$\forall x, y \in X \quad \rho(x, y) \geq 0$$

(У любого пути неотрицательная длина.)

❷ Условие обращения в ноль:

$$\forall x, y \in X \quad \rho(x, y) = 0 \Leftrightarrow x = y$$

(У пути нулевой длины совпадают начало и конец, и наоборот.)

❸ Симметричность:

$$\forall x, y \in X \quad \rho(x, y) = \rho(y, x)$$

(Путь между точками имеет одинаковую длину в обе стороны.)

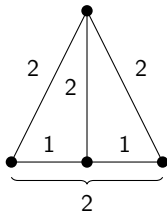
❹ Неравенство треугольника:

$$\forall x, y, z \in X \quad \rho(x, y) + \rho(y, z) \geq \rho(x, z)$$

(Путь через промежуточный пункт не бывает короче, чем напрямик.)

Метрические пространства

- Таким образом, векторное пространство со скалярным произведением (такое, как \mathbb{R}^d) сразу является метрическим пространством.
- Но не на любом метрическом пространстве можно задать структуру векторного пространства.
- Есть метрические пространства, которые невозможно вложить в \mathbb{R}^d при любом d :



Опять к кластеризации

- Метрическая структура «беднее», чем векторная
⇒ больше разных объектов обладают ею.
- Алгоритмы, о которых мы будем говорить:
 - работают в произвольных метрических пространствах
 - либо нуждаются для этого в незначительных изменениях
- Поэтому мы можем считать, что наблюдения живут в метрическом пространстве (X, ρ) .
- Совокупность данных обозначим $U = \{x_1, \dots, x_n\}$.
- У многих алгоритмов кластеризации один настраиваемый параметр k – количество кластеров, которое нужно получить.

Иерархическая кластеризация

- ▷ Инициализируем n кластеров, в каждом по одному наблюдению.
- ▷ На каждом шаге будем брать два кластера, самых близких друг к другу, и объединять их.
- ▷ Таким образом, на каждом шаге число кластеров уменьшается на единицу.
- ▷ Когда останется ровно k кластеров, остановимся.
 - Это иерархическая (или агломеративная) кластеризация.
 - **Проблема:** Что такое «кластеры, самые близкие друг к другу»?

Критерии близости кластеров

- Как задать «расстояние» D между двумя кластерами M и N ?

▷ Single-linkage clustering:

$$D(M, N) = \min \{ \rho(x, y) \mid x \in M, y \in N \}$$

▷ Complete-linkage clustering:

$$D(M, N) = \max \{ \rho(x, y) \mid x \in M, y \in N \}$$

▷ Average-linkage clustering:

$$D(M, N) = \frac{1}{|M||N|} \sum_{x \in M} \sum_{y \in N} \rho(x, y)$$

- Эти и другие критерии близости кластеров можно представить как частные случаи формулы Ланса–Уильямса (мы не будем её обсуждать подробнее).

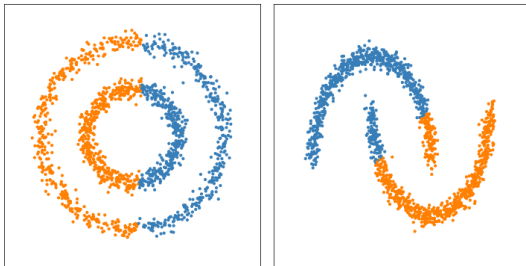
Алгоритм k средних

- Будем считать, что наблюдения даны в \mathbb{R}^d .
- ▷ Случайным образом выберем k наблюдений x_{i_1}, \dots, x_{i_k} в качестве центров.
- ▷ Сформируем k кластеров: в кластер с центром x_i входят наблюдения, которые ближе к x_i , чем к любому другому из центров.
- ▷ На каждом шаге:
 - Пересчитаем центры, усреднив каждый кластер.
 - Переформируем кластеры относительно новых центров.
- ▷ Когда кластеры перестают меняться, остановимся.

Алгоритм k средних

- Это алгоритм k средних (k -means).
- Модификация для произвольного метрического пространства: центрами могут быть только точки, представленные в данных (алгоритм k -medoids).
- **Проблема:** При разном выборе начальных точек получаются разные результаты.
- Улучшенный способ первоначального выбора центров:
 - ▷ Первый центр выберем случайно (равномерно по всем наблюдениям).
 - ▷ Каждый следующий будем выбирать с вероятностью, прямо пропорциональной квадрату расстояния данной точки до ближайшего уже выбранного центра.
- Этот способ инициализации называется k -means++.

- В некоторых ситуациях (кластеры сложной формы, зашумлённые данные) иерархическая кластеризация и алгоритм k средних работают плохо.



- Не будем фиксировать число кластеров, посмотрим на локальную структуру данных.

- ▶ Введём два параметра: радиус ε и минимальная плотность m .
- ▶ Для каждой точки x_i рассмотрим её окрестность $U_\varepsilon(x_i) = \{x_j \in U \mid i \neq j, \rho(x_i, x_j) \leq \varepsilon\}$.
- ▶ Подразделим все точки на:
 - центральные: $|U_\varepsilon(x_i)| \geq m$
 - периферийные: $1 \leq |U_\varepsilon(x_i)| < m$
 - шумовые: $|U_\varepsilon(x_i)| = 0$
- ▶ На всех центральных точках построим граф: две точки в окрестности друг друга соединяются ребром.
- ▶ Одна связная компонента графа = один кластер.
- ▶ Каждую периферийную точку относим к тому же кластеру, что и ближайшая центральная.
- ▶ Шумовые точки не кластеризуем.

- Это алгоритм DBSCAN.
- ⊕ На практике обычно даёт хорошие результаты.
- ⊖ Не параметризуется число кластеров.
- Можно использовать для фильтрации шума в данных, т. е. сами кластеры отбрасываются.

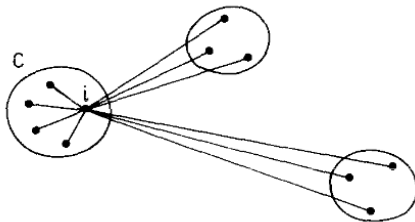
Оценивание качества кластеризации

- Для подбора параметров нужно уметь оценивать, насколько кластеризация хороша.
- Геометрические характеристики: насколько плотные кластеры, далеко ли отстоят друг от друга...
- Если есть размеченные данные, можно сравнить с эталонной кластеризацией.

- Пусть выборка x_1, \dots, x_N разбита на кластеры.
- Для точки x_i , отнесённой к кластеру C , рассмотрим две величины:

a_i – среднее расстояние от x_i до других точек в C ;

b_i – минимум, по всем остальным кластерам C' , среднего расстояния от x_i до точек в C' .



- Силуэтом (silhouette) x_i называется разность $b_i - a_i$, нормированная до отрезка $[-1, 1]$.
- Усредняем по всей выборке.
- Интуитивно, тем ближе к 1,
 - чем ближе расположены точки внутри кластеров;
 - чем дальше кластеры друг от друга.

Adjusted Rand index

- Пусть для выборки x_1, \dots, x_N есть эталонная кластеризация \mathcal{C} , а мы построили кластеризацию \mathcal{D} .
- Насколько наша кластеризация близка к эталону?
 - ▷ Количество и нумерация кластеров могут различаться.
- Рассмотрим всевозможные пары точек x_i, x_j , их всего $\binom{N}{2}$.
- Обозначим:
 - a – # пар, которые в \mathcal{C} попадают в один кластер и в \mathcal{D} тоже;
 - b – # пар, которые в \mathcal{C} попадают в разные кластеры и в \mathcal{D} тоже;
 - c – # пар, которые в \mathcal{C} попадают в один кластер, а в \mathcal{D} в разные;
 - d – # пар, которые в \mathcal{C} попадают в разные кластеры, а в \mathcal{D} в один.

Adjusted Rand index

- Индексом Рэнда называется величина

$$\frac{a + b}{a + b + c + d} = \frac{a + b}{\binom{N}{2}}.$$

- Заключён между 0 и 1, равен 1 для разбиений, которые различаются только нумерацией кластеров.
- «Исправленный» индекс Рэнда: вычитается математическое ожидание суммы $a + b$ по всевозможным парам разбиений, однотипных с \mathcal{C} и \mathcal{D} по численности кластеров.