

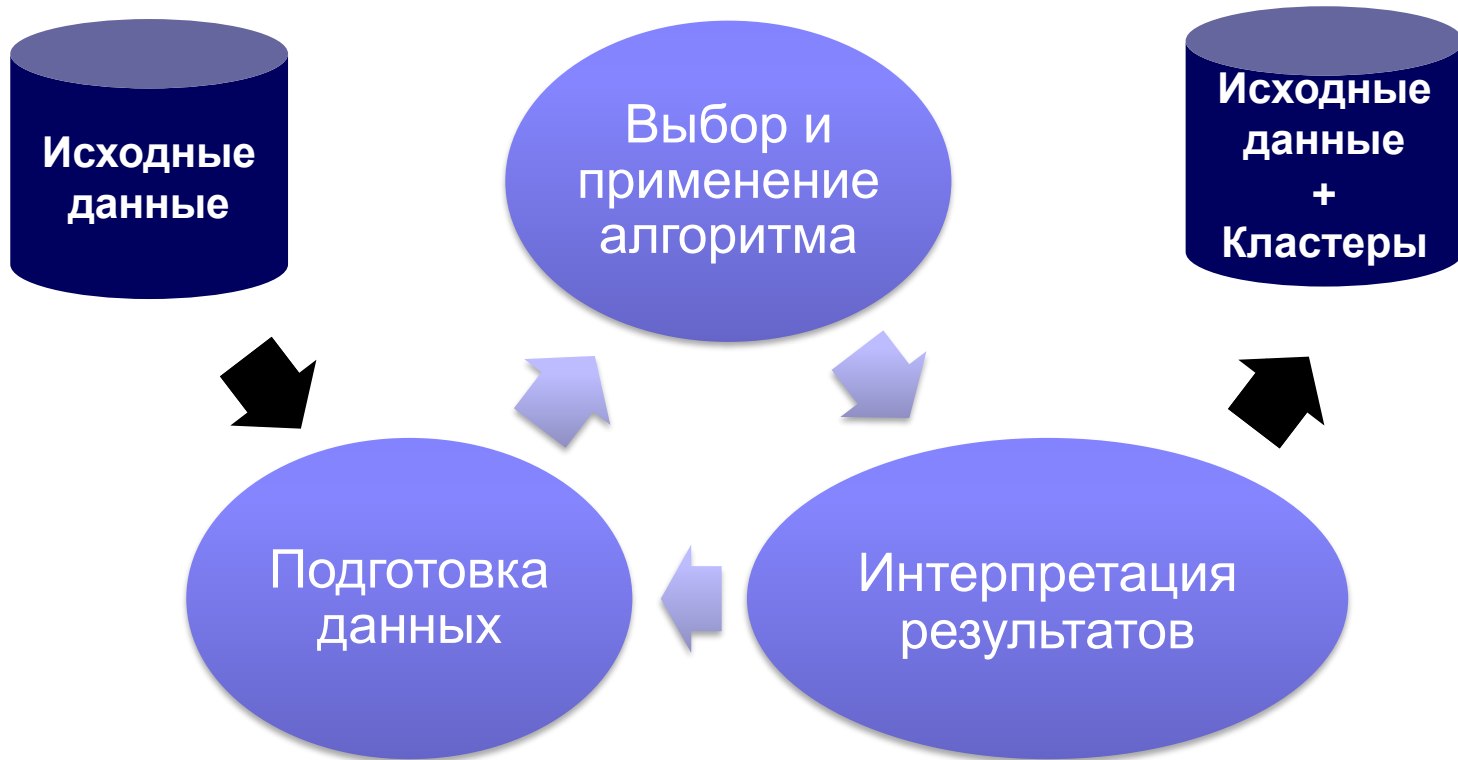


# Лекция 15: Кластеризация

# Что есть кластер?

- Кластер: группа «похожих» объектов
  - «похожих» между собой в группе (внутриклассовое расстояние)
  - «не похожих» на объекты других групп
  - определение неформальное, формализация зависит от метода
- Кластерный анализ -
  - разбиение множество объектов на группы (кластеры)
- Тип моделей:
  - «описательный» (descriptive) => одна из задач - наглядное представление кластеров
  - «прогнозный» (predictive) => разбиение на кластеры, а затем «классификация» новых объектов
- Тип обучения - всегда «без учителя» (unsupervised) => тренировочный набор не размечен
- Много приложений:
  - Предобработка данных
  - Группировка и профилирование
  - Разведочный анализ

# Этапы кластерного анализа



# Постановка задачи кластеризации

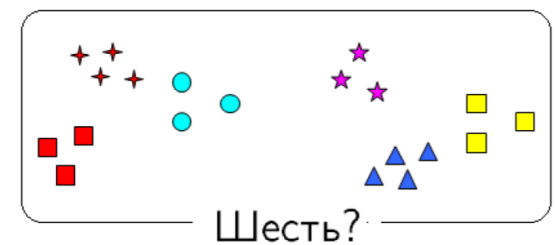
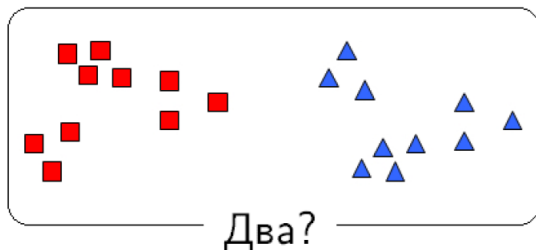
- Дано:
  - $X$  – пространство объектов;
  - $X^l = \{x_1, \dots, x_l\}$  – обучающая выборка;
  - $\rho: X \times X \rightarrow [0, \infty)$  – функция расстояния между объектами.
- Найти:
  - $Y$  – множество кластеров;
  - $a: X \rightarrow Y$  – алгоритм кластеризации,
  - такие, что:
    - каждый кластер состоит из близких объектов;
    - объекты разных кластеров существенно различны.
- Это задача обучения без учителя (unsupervised learning).

# Характеристики метода кластеризации

- Масштабируемость
- Поддержка различных типов атрибутов и структур данных
- Возможность находить кластеры сложной формы
- Отсутствие обязательных требований к наличию априорных знаний о выборке (например, о распределениях)
- Устойчивость к «шуму» и выбросам
- Возможность работы с высокой размерностью и с большой выборкой
- Возможность включать пользовательские ограничения и зависимости
- Интерпретируемость и наглядность (прототипы, границы, правила, функции принадлежности и т.п.)
- Интуитивность параметров кластеризации

# Качество кластеризации

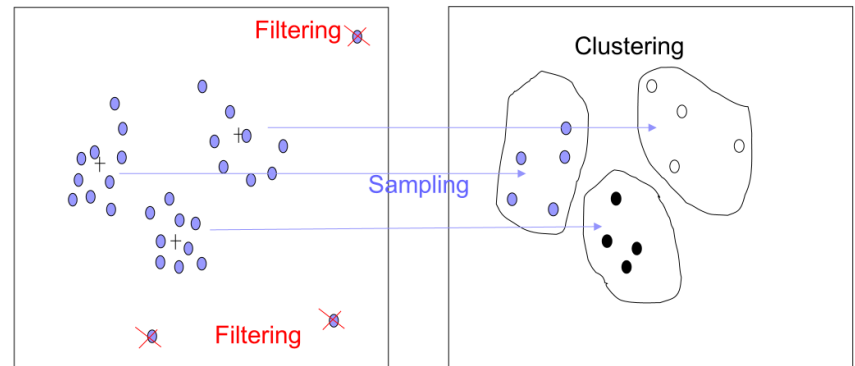
- Хороший метод кластеризации находит кластеры
  - ☐ с высоким «внутриклассовым» сходством объектов
  - ☐ и низким «межклассовым» сходством объектов
- Оценка качества кластеризации (нет понятия «точность»)
  - ☐ необходима, так как влияет на выбор параметров метода
  - ☐ определяется либо экспертом – субъективная величина
  - ☐ либо «перекрестной» проверкой целевой функции кластеризации
- Качество кластеризации зависит:
  - ☐ от метода кластеризации и меры сходства (или расстояния)



# Подготовка данных для кластеризации

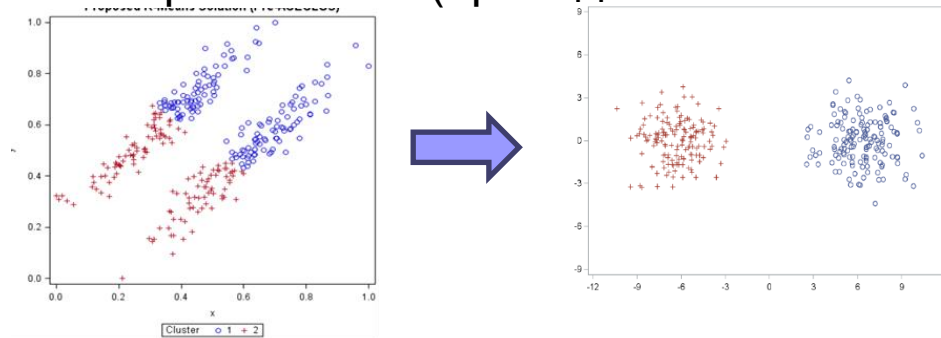
## ■ Отбор наблюдений

- ☐ Что я разбиваю на кластеры?
- ☐ Исключить выбросы
- ☐ Уменьшить выборку



## ■ Отбор и трансформация переменных

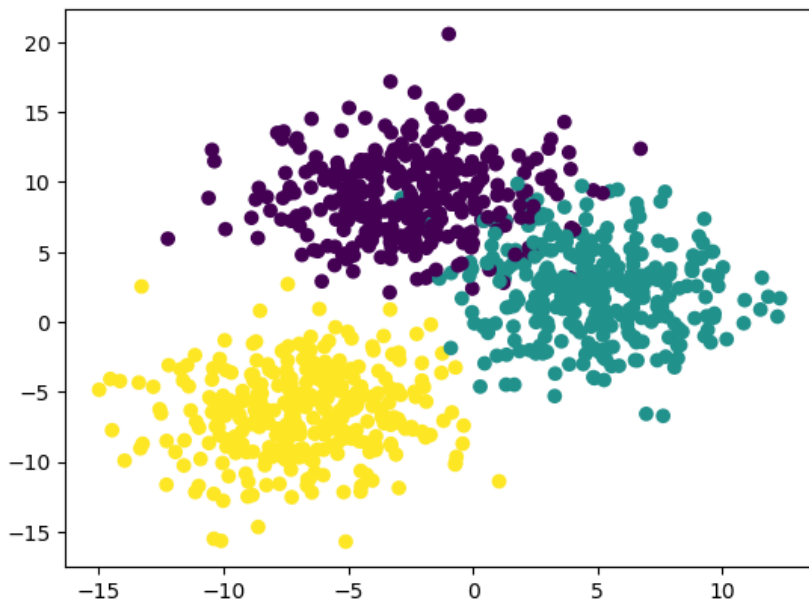
- ☐ Какие характеристики объектов важны? Выбирает эксперт.
- ☐ Переменные коррелируют? (методы отбора)
- ☐ Распределения переменных симметричны? (преобразования)
- ☐ Сравнимы ли масштабы переменных? (приведение к близкимшкалам)



# Модельные пример данных

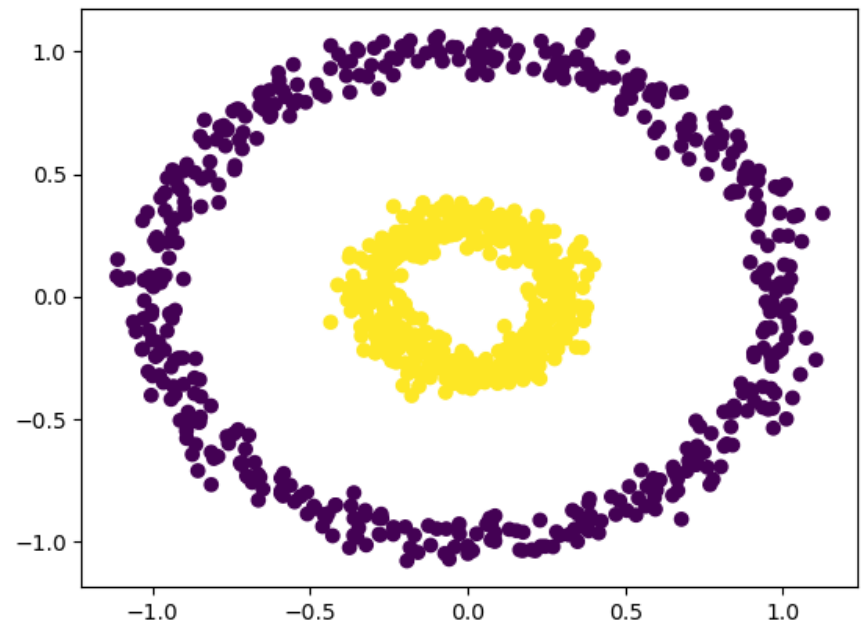
```
# Генерация данных 3х облаков точек
from sklearn.datasets import make_blobs

n_samples = 1000
X_blob, y_blob = make_blobs(n_samples=n_samples,
                             centers=3, cluster_std=3,
                             random_state=42)
plt.scatter(X_blob[:, 0], X_blob[:, 1], c=y_blob)
```



```
# Генерация данных концентрических кругов
from sklearn.datasets import make_circles

n_samples = 1000
X_c1, y_c1 = make_circles(n_samples=n_samples, factor=0.3,
                           noise=0.05, random_state=0)
plt.scatter(X_c1[:, 0], X_c1[:, 1], c=y_c1)
```





# Представление исходных данных

- Матрица признаков:

- ☐ Числовые
- ☐ Бинарные
- ☐ Номинальные (категориальные)
- ☐ Упорядоченные шкалы
- ☐ Нелинейные шкалы

$$\begin{bmatrix} x_{11} & \dots & x_{1f} & \dots & x_{1p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{i1} & \dots & x_{if} & \dots & x_{ip} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n1} & \dots & x_{nf} & \dots & x_{np} \end{bmatrix}$$

- Матрица различия (или сходства):

- ☐ «Естественные» расстояния предметной области
- ☐ Экспертные оценки (противоречивы, нетранзитивны, недостоверны)

$$\begin{bmatrix} 0 & & & & \\ d(2,1) & 0 & & & \\ d(3,1) & d(3,2) & 0 & & \\ : & : & : & & \\ d(n,1) & d(n,2) & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

# Основные типы алгоритмов кластеризации

- Иерархические:
  - Создается иерархическая декомпозиция исходного множества объектов в соответствии с некоторой стратегией «объединения» (восходящая кластеризация) или «разбиения» (нисходящая)
- На основе группировки (partitioning):
  - Направленный перебор вариантов разбиения исходного множества объектов, выбор лучшего по некоторому критерию
  - Обычно на основе прототипов - k-means, k-medoids
- На основе связности или непараметрической оценки плотности:
  - Кластеры ищутся в виде связных областей с помощью локальной оценки числа ближайших соседей или ядерной оценки плотности
- Моделе-ориентированные (статистические):
  - Выбирается некоторая гипотеза (параметрическая модель) о структуре кластеров и находятся, параметры, наилучшим образом приближающие эту модель

# Natural Grouping Criterion

Мера похожести объектов



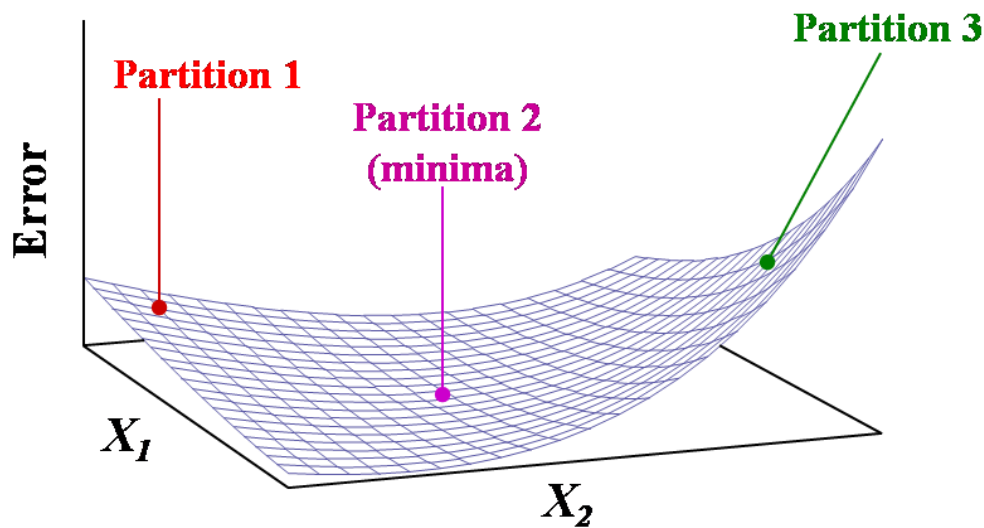
Малое внутрикластерное расстояние  
→ F уменьшается

$$F = \frac{\sum_k \sum_{l,m} \Phi_1 \left( \begin{array}{c} \text{расстояние между} \\ \text{наблюдениями } x_l \text{ и } x_m \text{ в кластере } k \end{array} \right)}{\sum_{i,j} \Phi_2(\text{расстояние между кластерами } i \text{ и } j)}$$



Мера близости кластеров

Большое межкластерное расстояние  
→ F уменьшается



# Качество кластеризации в метрическом и векторном пространствах

- Пусть известны только попарные расстояния между объектами.

- $a_i = a(x_i)$  – кластеризация объекта  $x_i$

- Среднее внутрикластерное расстояние:

$$F_1 = \frac{\sum_{i < j} [a_i = a_j] \rho(x_i, x_j)}{\sum_{i < j} [a_i = a_j]} \rightarrow \min$$

- Среднее межкластерное расстояние:

$$F_2 = \frac{\sum_{i < j} [a_i \neq a_j] \rho(x_i, x_j)}{\sum_{i < j} [a_i \neq a_j]} \rightarrow \max.$$

- Пусть объекты  $x_i$  задаются векторами  $(f_1(x_i), \dots, f_n(x_i))$ .

- Сумма средних внутрикластерных расстояний:

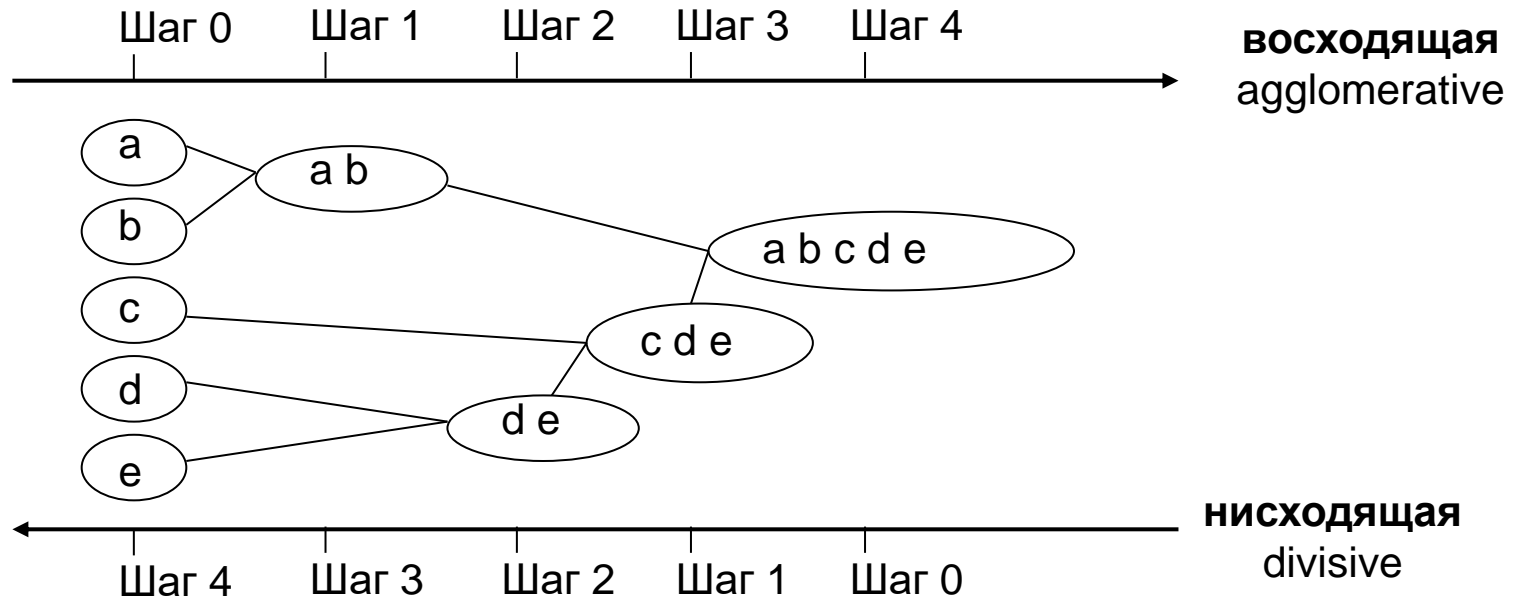
$$F_1 = \sum_{a \in Y} \frac{1}{|X_a|} \sum_{i: a_i = a} \rho(x_i, \mu_a) \rightarrow \min,$$

$X_a = \{x_i \in X^l | a_i = a\}$  – кластер  $a$ ,  $\mu_a$  – центр масс кластера  $a$ .

- Сумма межкластерных расстояний:  $F_2 = \sum_{a, b \in Y} \rho(\mu_a, \mu_b) \rightarrow \max.$

- Отношение пары функционалов:  $NGC = \frac{F_1}{F_2} \rightarrow \min.$

# Иерархическая кластеризация



- **Параметры:**

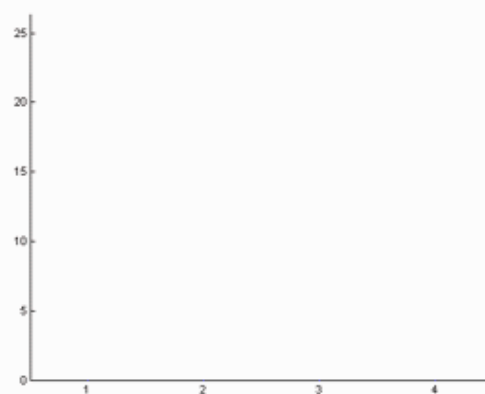
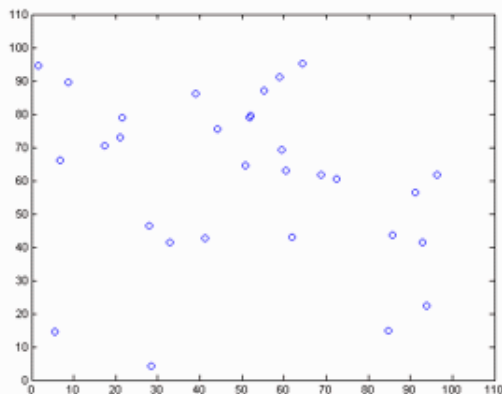
- Обычно используется только матрица сходства (различия) и не требуется дополнительных параметров (например, числа кластеров)

- **Процесс:**

- «Пошаговое» объединение ближайших кластеров (восходящая) или разбиение наиболее удаленных (нисходящая)

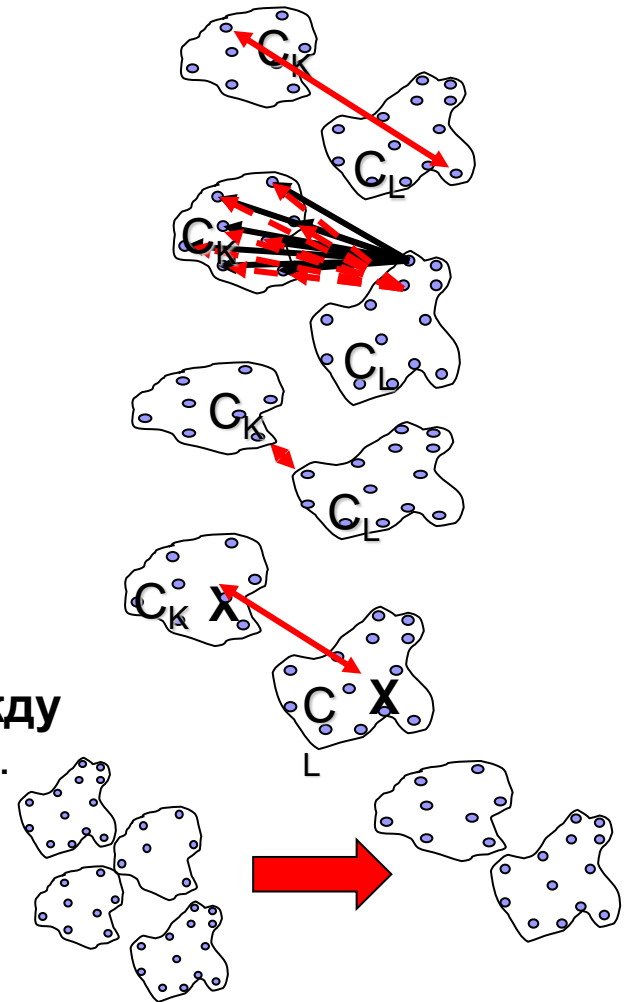
# Агломеративная иерархическая кластеризация

- Алгоритм иерархической кластеризации (Ланс, Уильямс, 1967):
  - Итеративный пересчет расстояний  $R_{UV}$  между кластерами  $U, V$ .
  - $C_1 := \{\{x_1\}, \dots, \{x_l\}\}$  – все кластеры 1-элементные;
  - $R_{\{x_i\}\{x_j\}} := \rho(x_i, x_j)$  – расстояния между ними;
- Для всех  $t = 2, \dots, l$  ( $t$  – номер итерации):
  - Найти в  $C_{t-1}$  пару кластеров  $(U, V)$  с минимальным  $R_{UV}$ ;
  - Слить их в один кластер:  $W := U \cup V$ ;  $C_t := C_{t-1} \cup \{W\} \setminus \{U, V\}$ ;
  - Для всех  $S \in C_t$  найти  $R_{wS} := \alpha_U R_{US} + \alpha_V R_{VS} + \beta R_{UV} + \gamma |R_{US} - R_{VS}|$



# Оценка близости кластеров

- Расчет расстояния на основе попарных расстояний между элементами различных кластеров:
  - **Полное связывание (расстояние дальнего соседа):** наибольшее попарное расстояние. Дает компактные сферические кластеры.
  - **Среднее связывание (групповое среднее расстояние):** усредненное попарное расстояние. Редко используется.
  - **Единственное связывание (расстояние ближайшего соседа):** наименьшее попарное расстояние. Дает «растянутые» кластеры сложной формы.
  - **Центроидное связывание (расстояние между центрами):** расстояние между центрами (мат. ожидание) кластеров.
  - **Метод Ward'a** – минимизирует внутрикластерные дисперсии



# Частные случаи формулы Ланса-Уильямса

$$R_{ws} := \alpha_U R_{US} + \alpha_V R_{VS} + \beta R_{UV} + \gamma |R_{US} - R_{VS}|$$

- Расстояние ближнего соседа:

$$R_{WS}^{\text{б}} = \min_{w \in W, s \in S} \rho(w, s); \alpha_U = \alpha_V = \frac{1}{2}, \beta = 0, \gamma = -\frac{1}{2}.$$

- Расстояние дальнего соседа:

$$R_{WS}^{\text{д}} = \max_{w \in W, s \in S} \rho(w, s); \alpha_U = \alpha_V = \frac{1}{2}, \beta = 0, \gamma = \frac{1}{2}.$$

- Групповое среднее расстояние:

$$R_{WS}^{\text{г}} = \frac{1}{|W||S|} \sum_{w \in W} \sum_{s \in S} \rho(w, s); \alpha_U = \frac{|U|}{|W|}, \alpha_V = \frac{|V|}{|W|}, \beta = \gamma = 0.$$

- Расстояние между центрами:

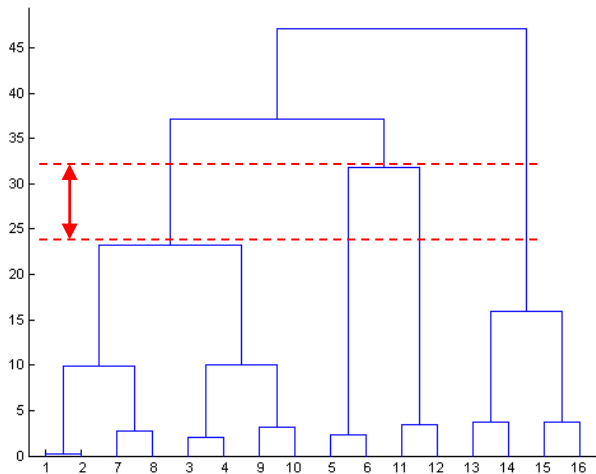
$$R_{WS}^{\text{ц}} = \rho^2 \left( \sum_{w \in W} \frac{w}{|W|}, \sum_{s \in S} \frac{s}{|S|} \right); \alpha_U = \frac{|U|}{|W|}, \alpha_V = \frac{|V|}{|W|}, \beta = -\alpha_U \alpha_V, \gamma = 0.$$

- Расстояние Уорда:

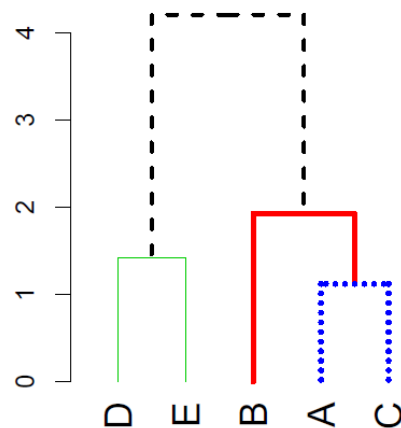
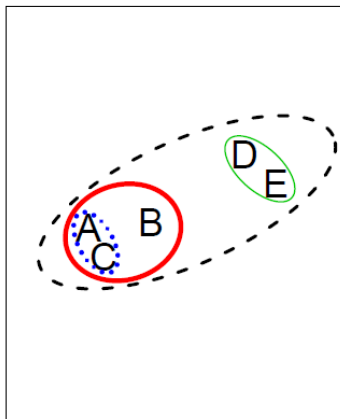
$$R_{WS}^{\text{у}} = \frac{|S||W|}{|S|+|W|} \rho^2 \left( \sum_{w \in W} \frac{w}{|W|}, \sum_{s \in S} \frac{s}{|S|} \right); \alpha_U = \frac{|S|+|U|}{|S|+|W|}, \alpha_V = \frac{|S|+|V|}{|S|+|W|}, \gamma = 0, \beta = \frac{-|S|}{|S|+|W|}.$$



# Представление иерархических кластеров - Дендрограмма



Dendrogram



- бинарное дерево, описывающее все шаги разбиения
- корень – общий кластер, листья – отдельные объекты
- «высота» ветвей (до пересечения) – порог расстояния «склейки» («разделения»)
- результат кластеризации – «срез» дендрограммы
- можно выбирать лучший  $C_t$  по

$$\max_t |R_t - R_{t-1}|$$

# Основные свойства иерархической кластеризации

## ■ Монотонность:

- дендрограмма не имеет самопересечений, при каждом слиянии расстояние между объединяемыми кластерами только увеличивается:  $R_2 \leq R_3 \leq \dots < R_l$ .

## ■ Свойства разных типов расстояний:

- Сжимающее расстояние:  $R_t \leq \rho(\mu_U, \mu_V), \forall t$ .
- Растягивающее расстояние:  $R_t \geq \rho(\mu_U, \mu_V), \forall t$ .
- $R^{\flat}$  – сжимающее;  $R^{\Delta}, R^{\gamma}$  – растягивающие.

## ■ Теорема (Миллиган, 1979)

- Кластеризация монотонна, если выполняются условия
- $\alpha_U \geq 0, \alpha_V \geq 0, \alpha_U + \alpha_V + \beta \geq 1, \min\{\alpha_U, \alpha_V\} + \gamma \geq 0$

## ■ $R^{\square}$ не монотонно; $R^{\flat}, R^{\Delta}, R^{\Gamma}, R^{\gamma}$ – монотонны.

# Обсуждение иерархической кластеризации

## ■ Достоинства:

- Очень просто и понятно, легко реализовать
- Наглядные дендрограммы
- Нет метопараметров кроме междасстерного расстояния

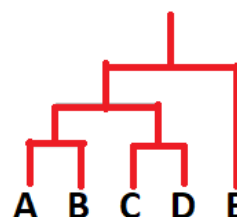
## ■ Недостатки:

- не масштабируется: временная квадратичная сложность от числа кластеризуемых объектов
- жадный алгоритм - локальная оптимальность с точки зрения NGC
- относительно слабая интерпретируемость результата и многое зависит от расстояния

	A	B	C	D	E
A	0	1	2	2	3
B	1	0	2	4	3
C	2	2	0	1	5
D	2	4	1	0	3
E	3	3	5	3	0

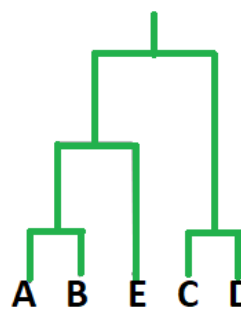


Single Link



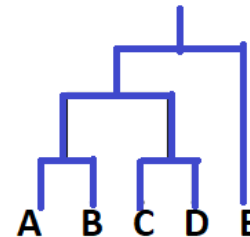
3  
2  
1  
0

Complete Link



5  
4  
3  
2  
1  
0

Average Link



5  
4.5  
4  
3.5  
3  
2.5  
2  
1.5  
1  
0.5  
0

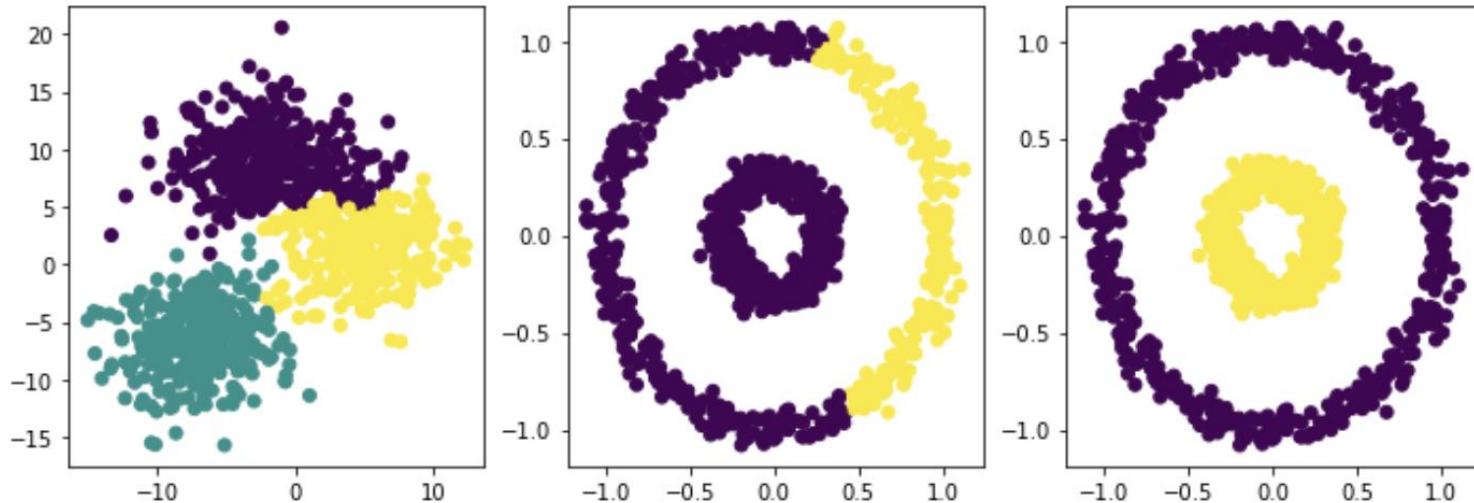
# Пример использования

```
from sklearn.cluster import AgglomerativeClustering

fig, axes = plt.subplots(ncols=3, figsize=(12,4))
agg_b1 = AgglomerativeClustering(n_clusters=3)
axes[0].scatter(X_blob[:, 0], X_blob[:, 1], c=agg_b1.fit_predict(X_blob))

agg_cl = AgglomerativeClustering(n_clusters=2)
axes[1].scatter(X_cl[:, 0], X_cl[:, 1], c=agg_cl.fit_predict(X_cl))

agg_cl1 = AgglomerativeClustering(n_clusters=2, linkage="single")
axes[2].scatter(X_cl[:, 0], X_cl[:, 1], c=agg_cl1.fit_predict(X_cl))
```



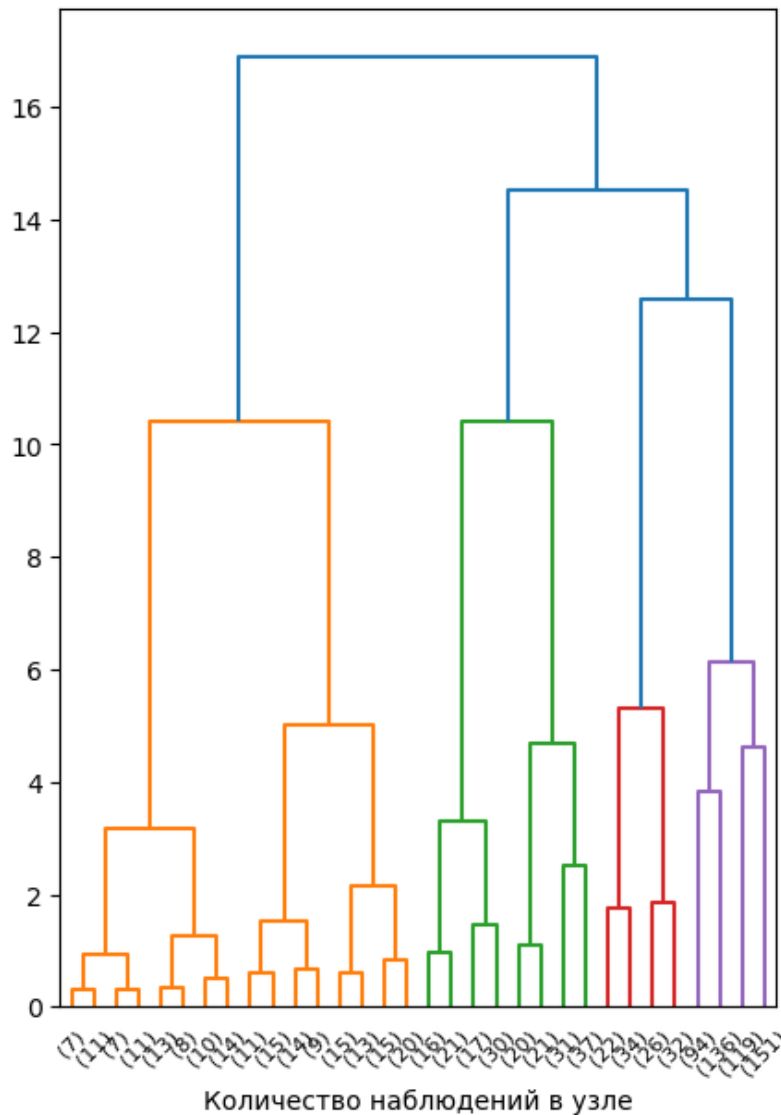
# Пример использования дендрограммы

```
from scipy.cluster.hierarchy import dendrogram

def plot_dendrogram(model, **kwargs):
    counts = np.zeros(model.children_.shape[0])
    n_samples = len(model.labels_)
    for i, merge in enumerate(model.children_):
        current_count = 0
        for child_idx in merge:
            if child_idx < n_samples:
                current_count += 1
            else:
                current_count += counts[child_idx - n_samples]
        counts[i] = current_count

    linkage_matrix = np.column_stack(
        [model.children_, model.distances_, counts]
    ).astype(float)
    dendrogram(linkage_matrix, **kwargs)
    plt.xlabel("Количество наблюдений в узле")

model = AgglomerativeClustering(distance_threshold=0,
                                n_clusters=None)
model = model.fit(X_cl)
plot_dendrogram(model, truncate_mode="level", p=4)
```



# Пример использования с матрицей данных и матрицей расстояний на основе Jaccard

```
df = pd.read_csv("C:\\SAS\\edu\\course\\DM 2017\\assc_TRANSACTION.csv")
df=df.groupby("CUSTOMER")["PRODUCT"].value_counts().unstack(fill_value=0)
df.head(5)
```

PRODUCT	apples	artichok	avocado	baguette	bordeaux	bourbon	chicken	coke	corned_b	cracker	ham	heineken	hering	ice_crea	olives	peppers
CUSTOMER																
0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0	1	0	1	1	1
1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	1	0	1	1	0	1
2	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	1	0	0	1	1
4	1	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0	1

*#расчет матрицы сходства на основе коэф Jaccard'a*

```
from sklearn.metrics import jaccard_score as js
```

```
N = df.axes[0].values.size
```

```
dist_matrix=np.zeros(N*N)
```

```
dist_matrix=dist_matrix.reshape(N,N)
```

```
for i in range(1,N):
```

```
    for j in range(0,i):
```

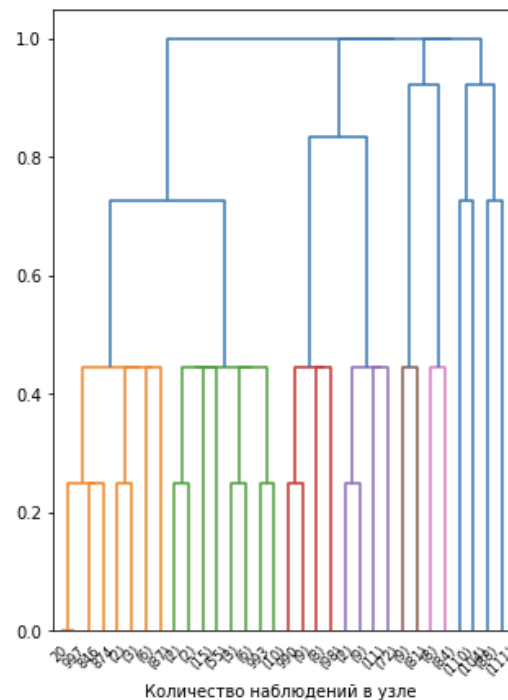
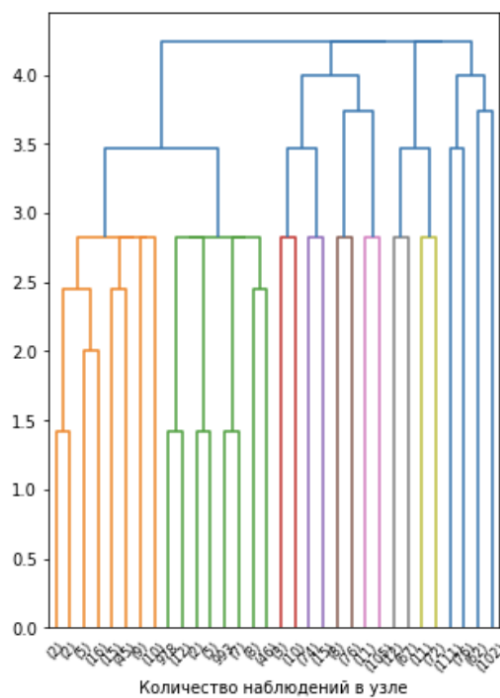
```
        dist_matrix[i,j]=dist_matrix[j,i]=1-js(df.iloc[j]>0,df.iloc[i]>0)
```

```
pd.DataFrame(dist_matrix).head(5)
```

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9 ...	991	992	993	994	995	
0	0.000000	0.727273	0.833333	0.444444	0.600000	0.833333	0.600000	0.727273	0.833333	0.727273	...	0.600000	0.916667	0.727273	0.923077	0.833333
1	0.727273	0.000000	0.833333	0.923077	0.727273	0.923077	0.833333	0.727273	0.444444	0.727273	...	0.833333	0.818182	0.600000	0.727273	0.444444
2	0.833333	0.833333	0.000000	0.833333	0.833333	0.727273	0.833333	0.923077	0.833333	0.923077	...	0.923077	0.375000	0.833333	0.727273	0.833333
3	0.444444	0.923077	0.833333	0.000000	0.833333	0.600000	0.444444	0.727273	0.727273	0.833333	...	0.444444	0.916667	0.923077	1.000000	0.923077
4	0.600000	0.727273	0.833333	0.833333	0.000000	1.000000	0.727273	0.923077	0.923077	0.833333	...	0.727273	0.916667	0.444444	0.727273	0.833333

# Пример использования с матрицей данных и матрицей расстояний на основе Jaccard

```
model = AgglomerativeClustering(distance_threshold=0, linkage="complete",  
                                n_clusters=None)  
model = model.fit(df)  
plot_dendrogram(model, truncate_mode="level", p=4)  
  
model = AgglomerativeClustering(affinity="precomputed", linkage="complete",  
                                distance_threshold=0, n_clusters=None)  
model = model.fit(dist_matrix)  
plot_dendrogram(model, truncate_mode="level", p=4)
```



# Кластеризация на основе группировки (partitioning) с прототипами

- Основная постановка задачи  $F_1 \rightarrow \min$  при фиксированном числе кластеров  $K$ : найти разбиение  $X = \{x_i\}_{i=1}^l$  на  $K$  непересекающихся подмножеств  $\{C_k\}_{k=1}^K$ , покрывающих  $X$  так, чтобы минимизировать внутриклассовое расстояние:

$$\min_{C_i \cap C_j = \emptyset, \cup C_k = X} \sum_{k=1}^K \sum_{x_i \in C_k} \sum_{x_j \in C_k} \rho(x_i, x_j)$$

- Точное решение – перебор с отсечением (число комбинаций велико):  $S(l, K) = \frac{1}{K!} \sum_{k=1}^K (-1)^{K-k} \binom{K}{k} K^l$
- Аппроксимация ( $\mu_k$  - прототипы кластеров):

$$\min_{C_i \cap C_j = \emptyset, \cup C_k = X} \sum_{k=1}^K \sum_{x_j \in C_k} \rho(\mu_k, x_j)$$



# Метод К-средних (K-means) для кластеризации в векторном пространстве

- Минимизация суммы квадратов внутрикластерных расстояний:

$$\sum_{i=1}^l \|x_i - \mu_{a_i}\|^2 \rightarrow \min_{\{a_i\}, \{\mu_a\}}, \quad \|x_i - \mu_a\|^2 = \sum_{j=1}^n (f_j(x_i) - \mu_{aj})^2$$

- Алгоритм Ллойда

- Вход:  $X^l, K = |Y|$ ; выход: центры кластеров  $\mu_a, a \in Y$ ;
- $\mu_a :=$  начальное приближение центров, для всех  $a \in Y$ ;
- Повторять

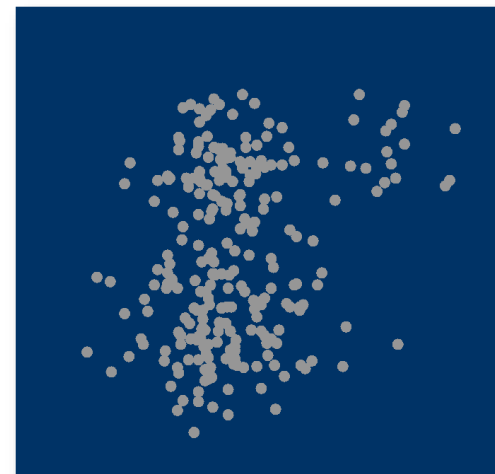
Отнести каждый  $x_i$  к ближайшему центру:

$$a_i := \arg \min_{a \in Y} \|x_i - \mu_a\|$$

Вычислить новые положения центров:

$$\mu_a := \frac{\sum_{i=1}^l [a_i = a] x_i}{\sum_{i=1}^l [a_i = a]}, \quad a \in Y;$$

- Пока  $a_i$  не перестанут изменяться.



# Метод К-средних (K-means) для кластеризации в векторном пространстве

- Минимизация суммы квадратов внутрикластерных расстояний:

$$\sum_{i=1}^l \|x_i - \mu_{a_i}\|^2 \rightarrow \min_{\{a_i\}, \{\mu_a\}}, \quad \|x_i - \mu_a\|^2 = \sum_{j=1}^n (f_j(x_i) - \mu_{aj})^2$$

- Алгоритм Ллойда

- Вход:  $X^l, K = |Y|$ ; выход: центры кластеров  $\mu_a, a \in Y$ ;
- $\mu_a :=$  начальное приближение центров, для всех  $a \in Y$ ;
- Повторять

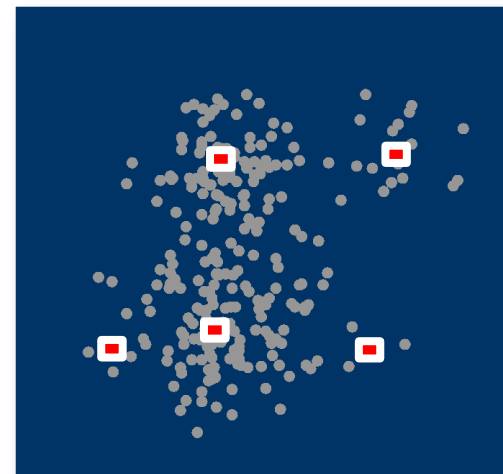
Отнести каждый  $x_i$  к ближайшему центру:

$$a_i := \arg \min_{a \in Y} \|x_i - \mu_a\|$$

Вычислить новые положения центров:

$$\mu_a := \frac{\sum_{i=1}^l [a_i = a] x_i}{\sum_{i=1}^l [a_i = a]}, \quad a \in Y;$$

- Пока  $a_i$  не перестанут изменяться.



# Метод К-средних (K-means) для кластеризации в векторном пространстве

- Минимизация суммы квадратов внутрикластерных расстояний:

$$\sum_{i=1}^l \|x_i - \mu_{a_i}\|^2 \rightarrow \min_{\{a_i\}, \{\mu_a\}}, \quad \|x_i - \mu_a\|^2 = \sum_{j=1}^n (f_j(x_i) - \mu_{aj})^2$$

- Алгоритм Ллойда

- Вход:  $X^l, K = |Y|$ ; выход: центры кластеров  $\mu_a, a \in Y$ ;
- $\mu_a :=$  начальное приближение центров, для всех  $a \in Y$ ;
- Повторять

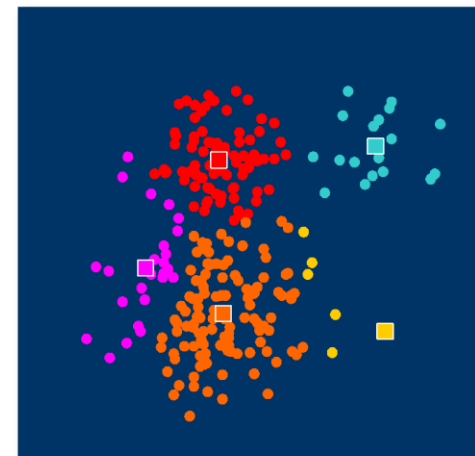
**Отнести каждый  $x_i$  к ближайшему центру:**

$$a_i := \arg \min_{a \in Y} \|x_i - \mu_a\|$$

**Вычислить новые положения центров:**

$$\mu_a := \frac{\sum_{i=1}^l [a_i = a] x_i}{\sum_{i=1}^l [a_i = a]}, \quad a \in Y;$$

- Пока  $a_i$  не перестанут изменяться.



# Метод К-средних (K-means) для кластеризации в векторном пространстве

- Минимизация суммы квадратов внутрикластерных расстояний:

$$\sum_{i=1}^l \|x_i - \mu_{a_i}\|^2 \rightarrow \min_{\{a_i\}, \{\mu_a\}}, \quad \|x_i - \mu_a\|^2 = \sum_{j=1}^n (f_j(x_i) - \mu_{aj})^2$$

- Алгоритм Ллойда

- Вход:  $X^l, K = |Y|$ ; выход: центры кластеров  $\mu_a, a \in Y$ ;
- $\mu_a :=$  начальное приближение центров, для всех  $a \in Y$ ;
- Повторять

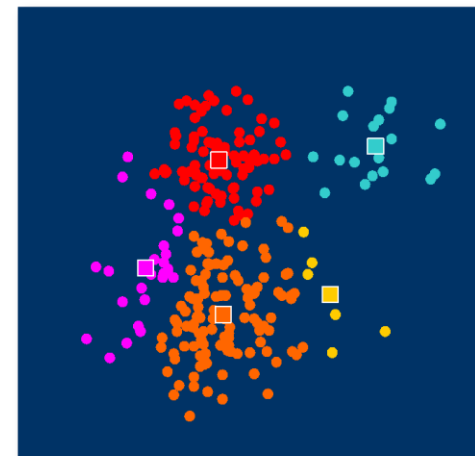
Отнести каждый  $x_i$  к ближайшему центру:

$$a_i := \arg \min_{a \in Y} \|x_i - \mu_a\|$$

**Вычислить новые положения центров:**

$$\mu_a := \frac{\sum_{i=1}^l [a_i = a] x_i}{\sum_{i=1}^l [a_i = a]}, a \in Y;$$

- Пока  $a_i$  не перестанут изменяться.



# Метод К-средних (K-means) для кластеризации в векторном пространстве

- Минимизация суммы квадратов внутрикластерных расстояний:

$$\sum_{i=1}^l \|x_i - \mu_{a_i}\|^2 \rightarrow \min_{\{a_i\}, \{\mu_a\}}, \quad \|x_i - \mu_a\|^2 = \sum_{j=1}^n (f_j(x_i) - \mu_{aj})^2$$

- Алгоритм Ллойда

- Вход:  $X^l, K = |Y|$ ; выход: центры кластеров  $\mu_a, a \in Y$ ;
- $\mu_a :=$  начальное приближение центров, для всех  $a \in Y$ ;
- Повторять

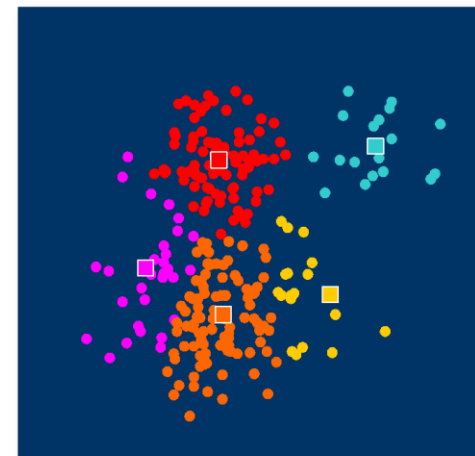
**Отнести каждый  $x_i$  к ближайшему центру:**

$$a_i := \arg \min_{a \in Y} \|x_i - \mu_a\|$$

**Вычислить новые положения центров:**

$$\mu_a := \frac{\sum_{i=1}^l [a_i = a] x_i}{\sum_{i=1}^l [a_i = a]}, \quad a \in Y;$$

- Пока  $a_i$  не перестанут изменяться.



# Метод К-средних (K-means) для кластеризации в векторном пространстве

- Минимизация суммы квадратов внутрикластерных расстояний:

$$\sum_{i=1}^l \|x_i - \mu_{a_i}\|^2 \rightarrow \min_{\{a_i\}, \{\mu_a\}}, \quad \|x_i - \mu_a\|^2 = \sum_{j=1}^n (f_j(x_i) - \mu_{aj})^2$$

- Алгоритм Ллойда

- Вход:  $X^l, K = |Y|$ ; выход: центры кластеров  $\mu_a, a \in Y$ ;
- $\mu_a :=$  начальное приближение центров, для всех  $a \in Y$ ;
- Повторять

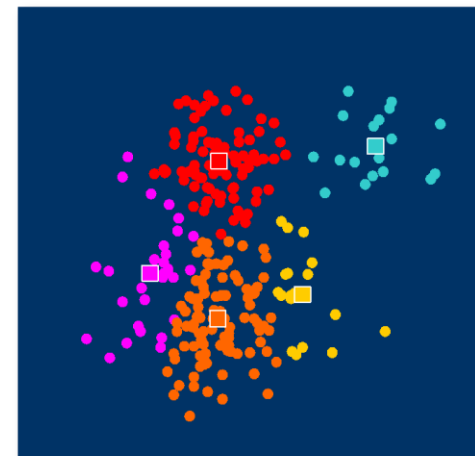
Отнести каждый  $x_i$  к ближайшему центру:

$$a_i := \arg \min_{a \in Y} \|x_i - \mu_a\|$$

**Вычислить новые положения центров:**

$$\mu_a := \frac{\sum_{i=1}^l [a_i = a] x_i}{\sum_{i=1}^l [a_i = a]}, \quad a \in Y;$$

- Пока  $a_i$  не перестанут изменяться.



# Метод К-средних (K-means) для кластеризации в векторном пространстве

- Минимизация суммы квадратов внутрикластерных расстояний:

$$\sum_{i=1}^l \|x_i - \mu_{a_i}\|^2 \rightarrow \min_{\{a_i\}, \{\mu_a\}}, \quad \|x_i - \mu_a\|^2 = \sum_{j=1}^n (f_j(x_i) - \mu_{aj})^2$$

- Алгоритм Ллойда

- Вход:  $X^l, K = |Y|$ ; выход: центры кластеров  $\mu_a, a \in Y$ ;
- $\mu_a :=$  начальное приближение центров, для всех  $a \in Y$ ;
- Повторять

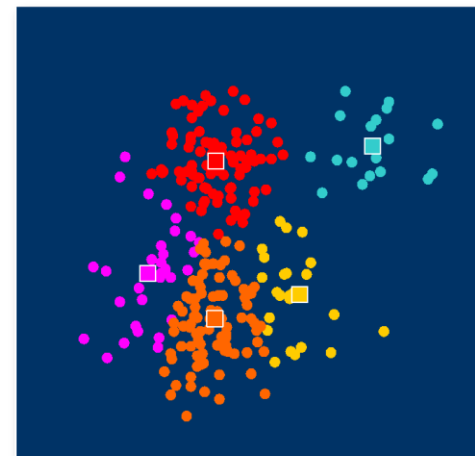
**Отнести каждый  $x_i$  к ближайшему центру:**

$$a_i := \arg \min_{a \in Y} \|x_i - \mu_a\|$$

**Вычислить новые положения центров:**

$$\mu_a := \frac{\sum_{i=1}^l [a_i = a] x_i}{\sum_{i=1}^l [a_i = a]}, \quad a \in Y;$$

- Пока  $a_i$  не перестанут изменяться.



# Метод К-средних (K-means) для кластеризации в векторном пространстве

- Минимизация суммы квадратов внутрикластерных расстояний:

$$\sum_{i=1}^l \|x_i - \mu_{a_i}\|^2 \rightarrow \min_{\{a_i\}, \{\mu_a\}}, \quad \|x_i - \mu_a\|^2 = \sum_{j=1}^n (f_j(x_i) - \mu_{aj})^2$$

- Алгоритм Ллойда

- Вход:  $X^l, K = |Y|$ ; выход: центры кластеров  $\mu_a, a \in Y$ ;
- $\mu_a :=$  начальное приближение центров, для всех  $a \in Y$ ;
- Повторять

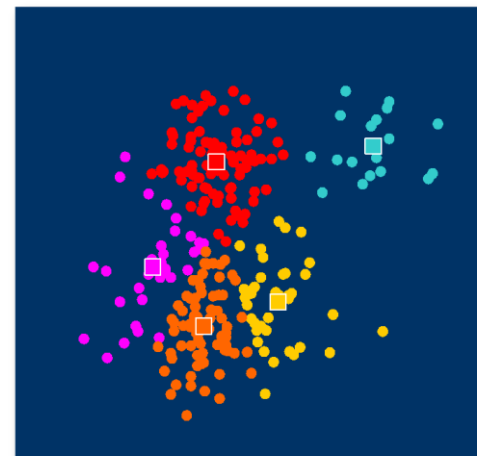
Отнести каждый  $x_i$  к ближайшему центру:

$$a_i := \arg \min_{a \in Y} \|x_i - \mu_a\|$$

Вычислить новые положения центров:

$$\mu_a := \frac{\sum_{i=1}^l [a_i = a] x_i}{\sum_{i=1}^l [a_i = a]}, \quad a \in Y;$$

- Пока  $a_i$  не перестанут изменяться.





# Метод К-средних – упрощение ЕМ-алгоритма для GMM

- ЕМ-алгоритм: максимизация правдоподобия для разделения смеси гауссиан (GMM, Gaussian Mixture Model)

- Начальное приближение  $w_a, \mu_a, \Sigma_a$  для всех  $a \in Y$
- Повторять

- Е-шаг: отнести каждый  $x_i$  к ближайшим центрам:

$$g_{ia} := P(a|x_i) \equiv \frac{w_a p_a(x_i)}{\sum_y w_y p_y(x_i)}, a \in Y, i = 1, \dots, l;$$

$$a_i := \operatorname{argmax}_{a \in Y} g_{ia}, i = 1, \dots, l;$$

- М-шаг: вычислить новые положения центров:

$$\mu_{ad} := \frac{1}{lw_a} \sum_{i=1}^l g_{ia} f_d(x_i), a \in Y, d = 1, \dots, n;$$

$$\sigma_{ad}^2 := \frac{1}{lw_a} \sum_{i=1}^l g_{ia} (f_d(x_i) - \mu_{ad})^2, a \in Y, d = 1, \dots, n; w_a := \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l g_{ia}, a \in Y$$

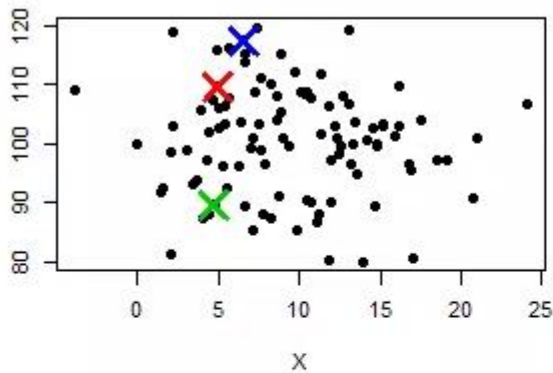
- Пока  $a_i$  не перестанут изменяться.

# Особенности K-Means

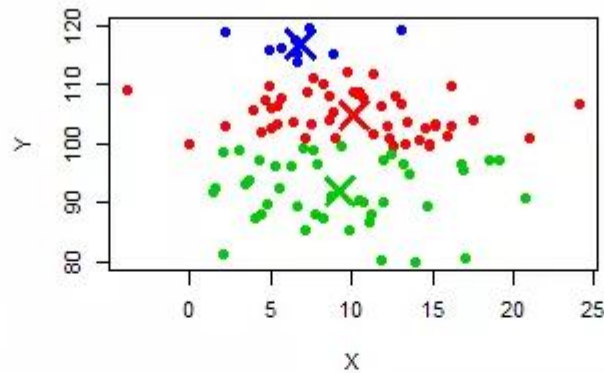
- GMM-EM vs K-means:
  - Принадлежность: GMM-EM – нечеткая (мягкая), K-means – строгая
  - Форма кластера: GMM-EM – эллиптическая (адаптируется) , K-means – сферическая (не адаптируется)
  - Упрощение GMM-EM (усложнение k-means) – сферический или выровненные по осям гауссианы, жесткий E-шаг
- Жадный алгоритм - локальный экстремум:
  - Глобальный можно искать «разумным» перебором: множественная инициализация, имитация отжига, генетические алгоритмы и т.д.
- Недостатки:
  - Числовые признаки (иначе как найти центр?)
  - Необходимо задавать K заранее (есть методы «отбора» K)
  - Чувствительность к шуму и выбросам, кластеры сферической формы

# k-Means алгоритм для профилирования (не кластеризации)

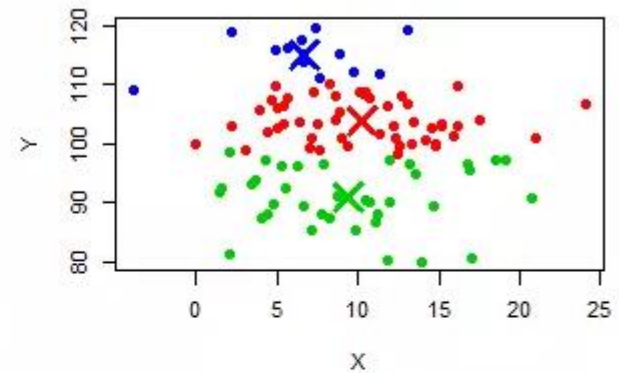
Iteration 1



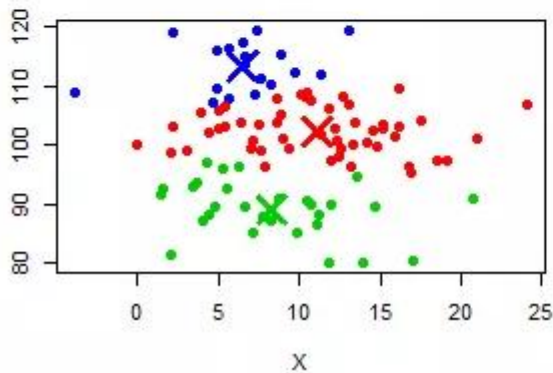
Iteration 2



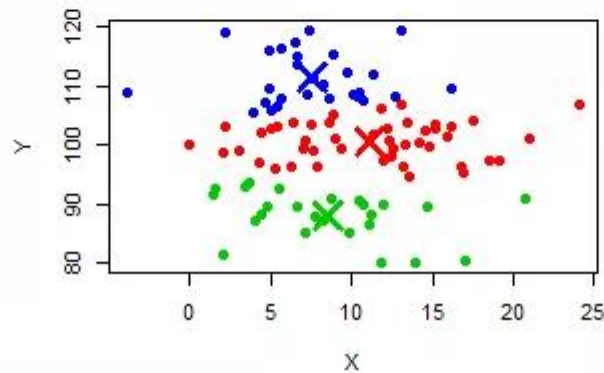
Iteration 3



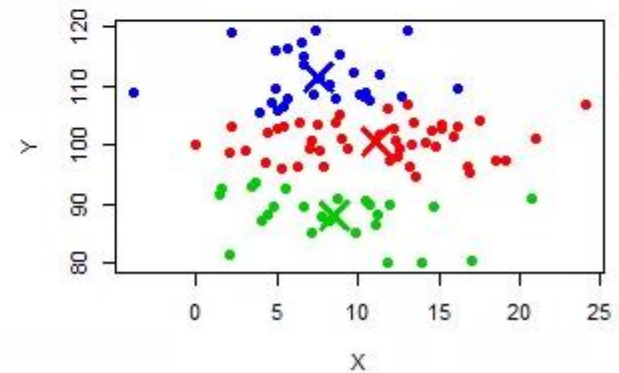
Iteration 6



Iteration 9



Converged!

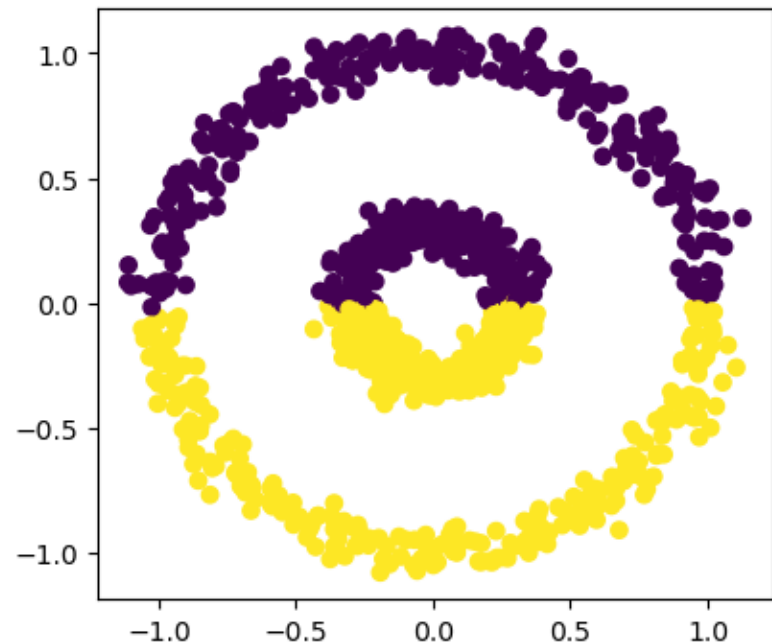
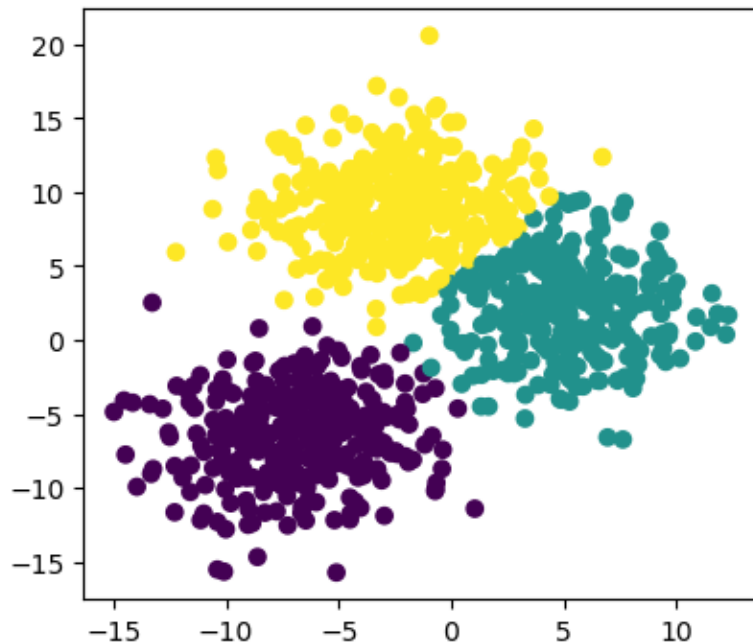


# Пример использования

```
from sklearn.cluster import KMeans

fig, axes = plt.subplots(ncols=2, figsize=(10,4))
km_b1 = KMeans(n_clusters=3)
axes[0].scatter(X_blob[:, 0], X_blob[:, 1],
                c=km_b1.fit_predict(X_blob))

km_c1 = KMeans(n_clusters=2)
axes[1].scatter(X_c1[:, 0], X_c1[:, 1],
                c=km_c1.fit_predict(X_c1))
```



# K-Medoids

## ■ K-Medoids:

- Идея: вместо мат. ожидания кластера ищется представительный («наиболее центральный») объект – medoid
- Процесс: случайная инициализация, SWAP шаг - перебор и переход к новому медоиду, который максимально улучшает целевую функцию:

$$\min_{C_i \cap C_j = \emptyset, \cup C_k = X} \sum_{k=1}^K \sum_{x_j \in C_k} \rho(\mu_k, x_j), \forall k: \mu_k \in X$$

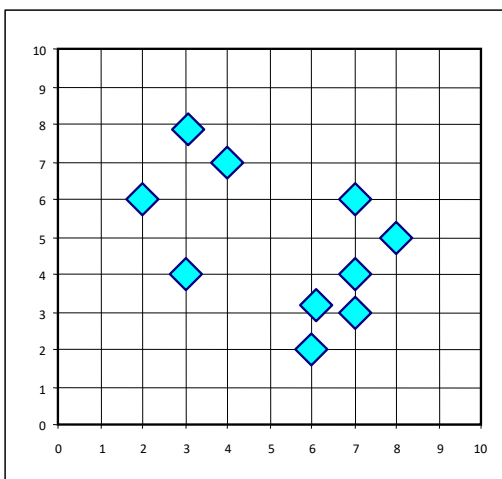
## ■ Достоинства:

- Робастный, реальные прототипы, не только числовые признаки

## ■ Недостатки:

- жадный
- не масштабируется и вычислительно неэффективный  $O(K(l - K)^2)$  для каждой итерации
- все еще сферические кластеры

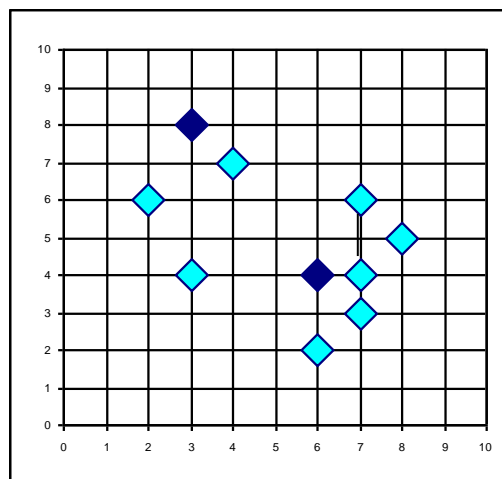
# Алгоритм K-Medoids



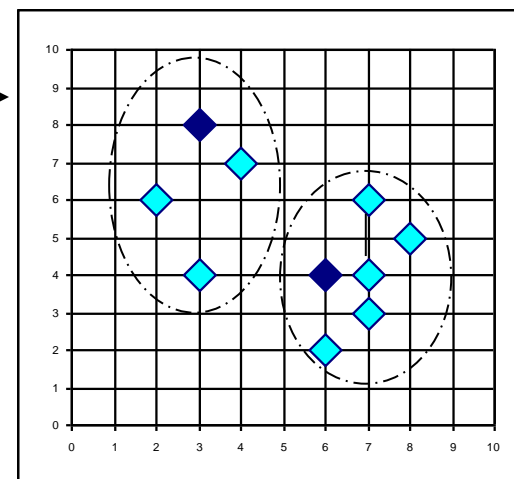
$K=2$

Пока есть  
изменения

Случайн.  
K medoids

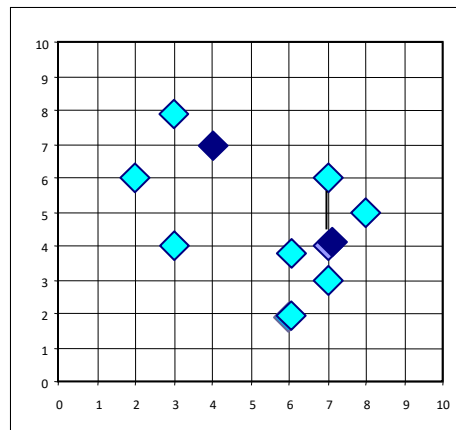


Каждый  
объект к  
ближ.  
medoid

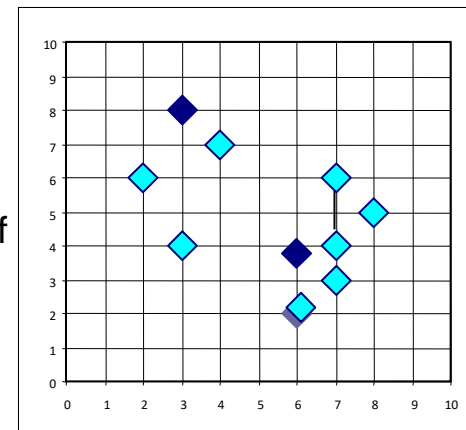


Если качество кластеризац.  
улучш., то переход к нов. medoid

Перебор всех кандидатов  
на замену medoid



Расчет  
стоимости  
перехода  
(total cost of  
swapping)

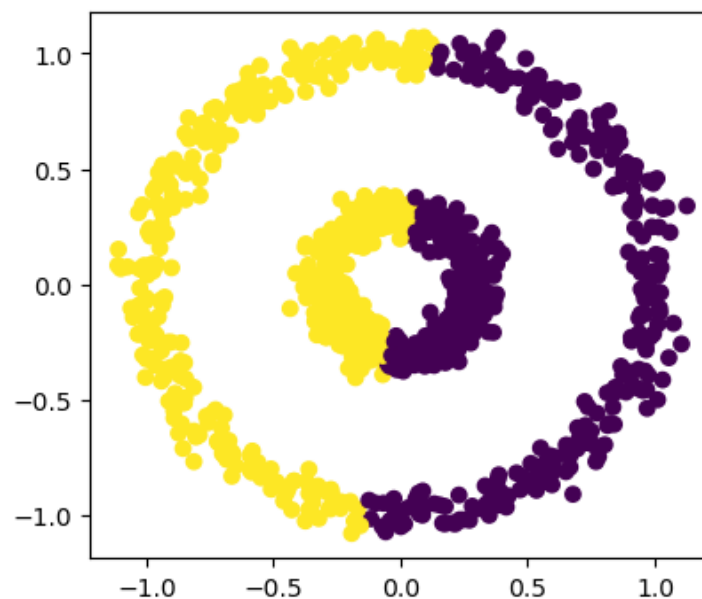
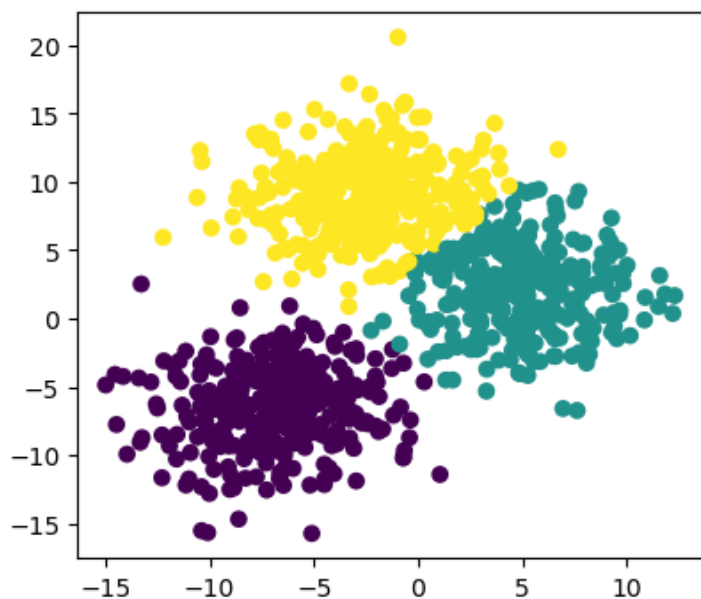


# Пример использования

```
# Расширенный функционал scikit-learn
# Установка: "pip install scikit-learn-extra"
from sklearn_extra.cluster import KMedoids

fig, axes = plt.subplots(ncols=2, figsize=(10,4))
km_b1 = KMedoids(n_clusters=3)
axes[0].scatter(X_blob[:, 0], X_blob[:, 1],
                c=km_b1.fit_predict(X_blob))

km_c1 = KMedoids(n_clusters=2)
axes[1].scatter(X_cl[:, 0], X_cl[:, 1],
                c=km_c1.fit_predict(X_cl))
```



# Определение числа кластеров

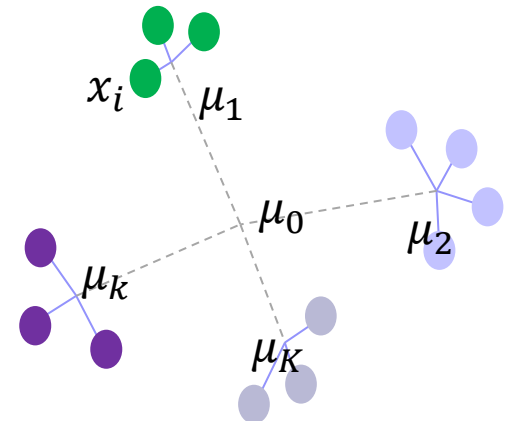
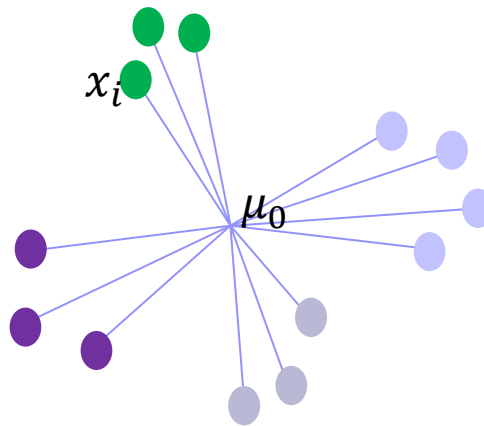
## ■ Перебор моделей:

- последовательно меняя число кластеров в исходном алгоритме или по последовательной кластеризации (обычно иерархической)
- выбор числа кластеров по некоторому критерию, (CCC, Pseudo-F, др.)

## ■ Обозначения:

- $\mu_0$  - центр масс распределения всей выборки,  $\mu_k$  - прототип кластера  $k$
- Total Sum of Squares:  $TSS = \sum_{i=1}^l \rho(\mu_0, x_i)^2$
- Between-cluster Sum of Squares:  $BSS = \sum_{k=1}^K \rho(\mu_k, \mu_0)^2$
- Within-cluster Sum of Squares:  $WSS = \sum_{k=1}^K \sum_{x_i \in C_k} \rho(\mu_k, x_i)^2$

$$TSS = WSS + BSS$$



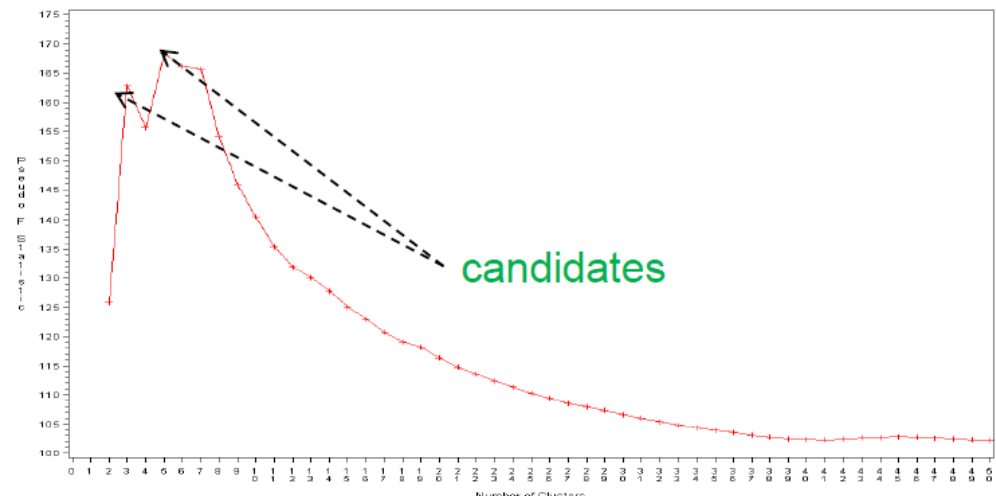


# Определение числа кластеров с помощью pseudo-F

- Псевдо критерий Фишера (Calinski and Habarasz, 1974):
  - эвристическое применение статистики Фишера
  - отношение «средней» (деленной на число степеней свободы) общей вариации к «средней» внутрикластерной

$$F = \frac{TSS/(l-1)}{BSS/(l-K)}$$

- Исходный статистический тест в дисперсионном анализе применяется для проверки гипотезы о равенстве групповых средних, чем больше  $F$  тем больше отличаются кластеры
- **локальные максимумы** – модели-кандидаты

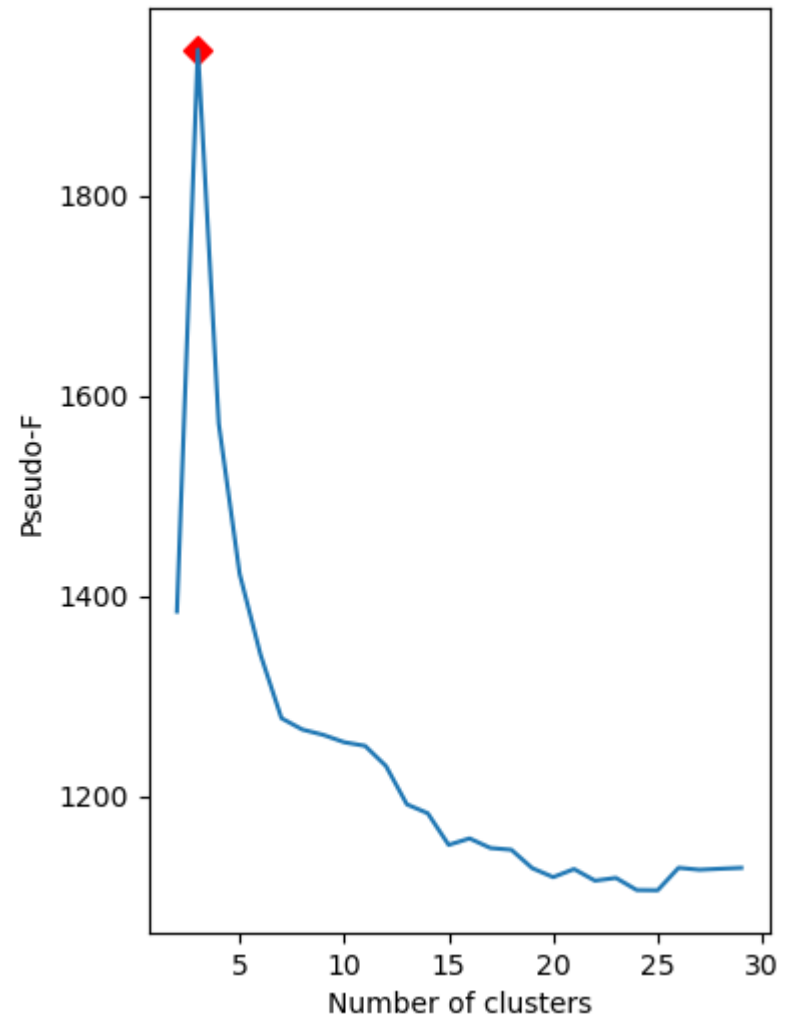


# Пример использования

```
def sum_dist_to_center(X):
    center = np.mean(X, axis = 0)
    return ((X - center)**2).sum()

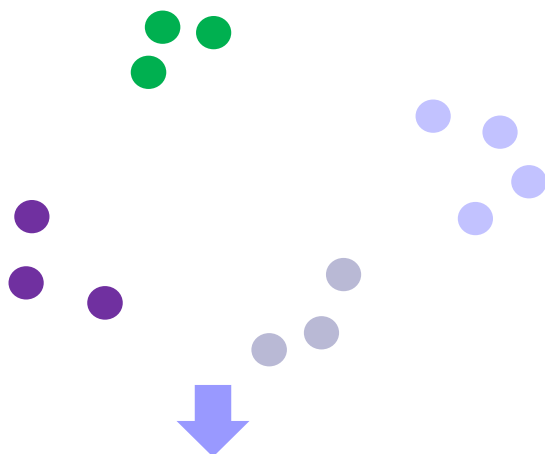
def choose_num_clusters(X, max_clust = 30):
    N = X.shape[0]
    Q = sum_dist_to_center(X)
    pseudo_f = np.array([])
    for G in range(2, max_clust):
        clustering = KMeans(n_clusters = G).fit(X)
        W = 0
        for l in range(G):
            elems = X[clustering.labels_ == l]
            W += sum_dist_to_center(elems)
        fisher_stat = ((Q - W)/(G - 1))/(W/(N - G))
        pseudo_f = np.append(pseudo_f, fisher_stat)
    plt.plot(range(2, max_clust), pseudo_f)
    ind_best_clust = np.argmax(pseudo_f)
    plt.scatter(ind_best_clust + 2,
               pseudo_f[ind_best_clust],
               color="r", marker="D", s=50)
    plt.xlabel("Number of clusters")
    plt.ylabel("Pseudo-F")
    return ind_best_clust + 2

k = choose_num_clusters(X_blob)
```



# Определение числа кластеров по ССС

Разбиение исходной выборки

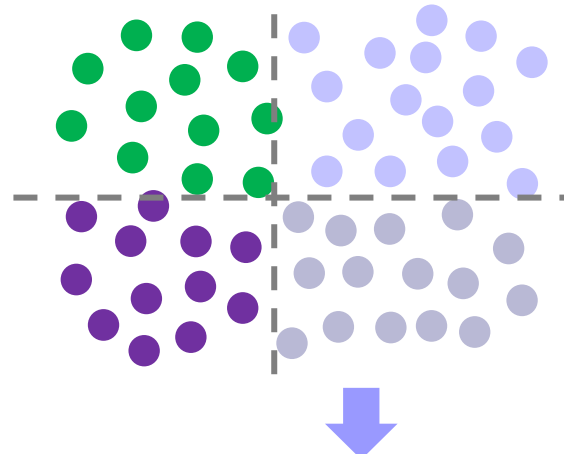


$$R^2 = \frac{BSS}{TSS}$$

$$CCC = \ln \left[ \frac{1 - \mathbb{E}(R^2)}{1 - R} \right] * k(\mathbb{E}(R^2))$$

$$\mathbb{E}(R^2) = \frac{BSS}{TSS}$$

Разбиение выборки, из  
равномерного распределения



**CCC – Cubic Cluster Criterion**

## ■ Значительное упрощение (недостаток):

- для сравнения всегда используется равномерное распределение, причем используются кластеры одинакового размера с границами параллельными осям. Эти недостатки устранены в ABC (см. далее).

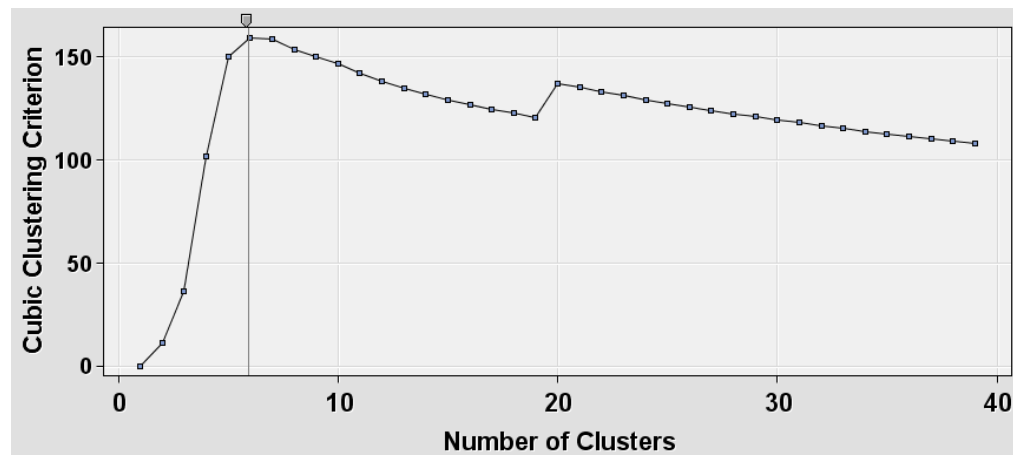
# Процедура применения ССС

## ■ Процедура:

- Случайно выбираются центры для большого числа кластеров
- Все наблюдения объединяются в эти случайные кластеры
- Решается задач восходящей иерархической кластеризации, на каждом шаге считается  $ССС$
- Выбирается число кластеров, соответствующее первому локальному пику:

## Дополнительные эвристики:

- $ССС > 2$  – решение можно считать хорошим
- $0 < СССР \leq 2$  – решение требует доп. проверки
- $ССС \leq 0$  – в выборке присутствуют выбросы



# Определение числа кластеров – ABC

## ■ Процедура:

- Строим разбиение исходной выборки (на  $K$  кластеров) считаем  $WSS_K$
- Определяем границы кластеров (опционально используем PCA)
- Методом Монте-Карло делаем

$B$  итераций - генерируем новые точки  $\{x_i^{(b)}\}$  из распределения каждого кластера (внутри границ)

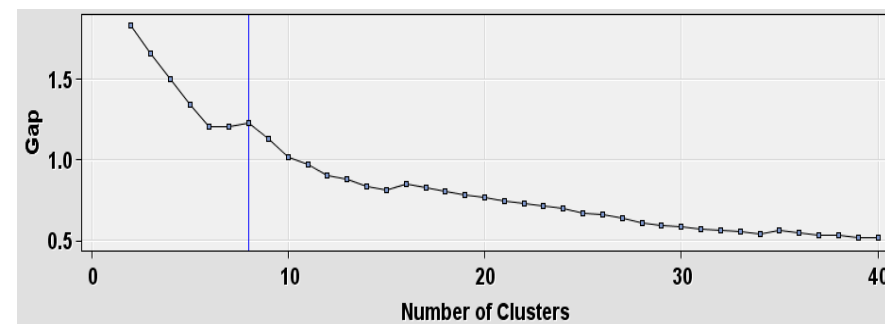
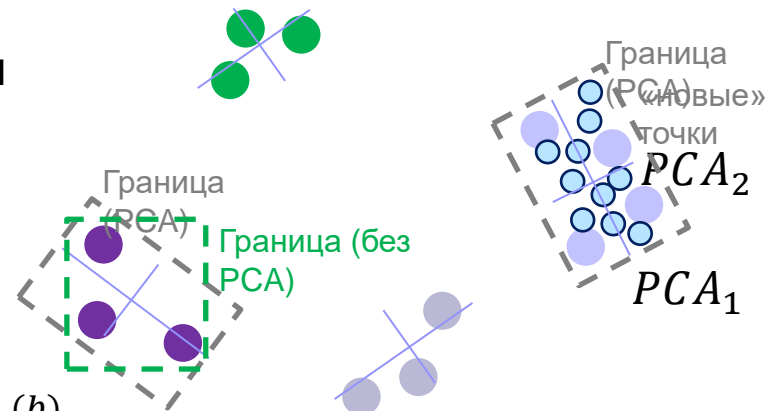
- На «новых» точках строится новое разбиение и считается:

$$WSS_K^{(b)} = \sum_{k=1}^K \sum_{x_i \in C_k} \rho(\mu_k^{(b)}, x_i^{(b)})^2$$

- Усредняются по итерациям  $B$ :

$$WSS_k^* = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^B WSS_k^{(b)}$$

- Считаем статистику  $Gap(k) = \log(WSS_k^*) - \log(WSS_k)$  и берем 1 лок. пик



# Качество кластеризации - коэффициент силуэта (анализ ошибок кластеризации)

- Распределение качества кластеризации по объектам / кластерам
- Среднее расстояние до объектов своего кластера:

$$r_i = \frac{1}{|X_{a_i}| - 1} \sum_{x \in X_{a_i} \setminus x_i} \rho(x, x_i)$$

- Минимальное среднее расстояние до чужого кластера:

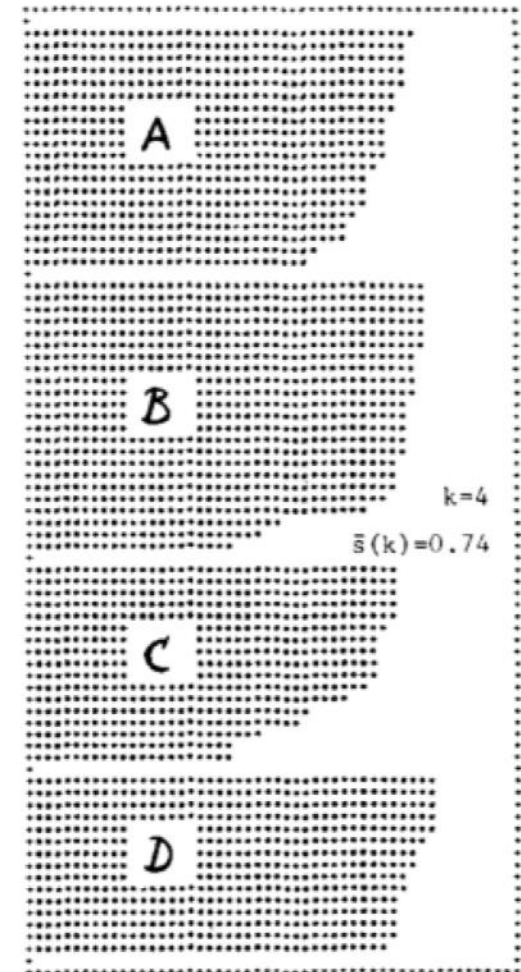
$$R_i = \min_{a \in Y \setminus a_i} \frac{1}{|X_a|} \sum_{x \in X_a} \rho(x, x_i)$$

- Коэффициент силуэта объекта:

$$s_i = \frac{R_i - r_i}{\max(R_i, r_i)} \in [-1, +1]$$

- Интерпретация:

□  $s_i \rightarrow 1$  – «свой»,  $s_i \rightarrow -1$  – «чужой»,  $s_i \rightarrow 0$  – «граничный»



# Однородность и компактность кластеризации (если есть эталоны)

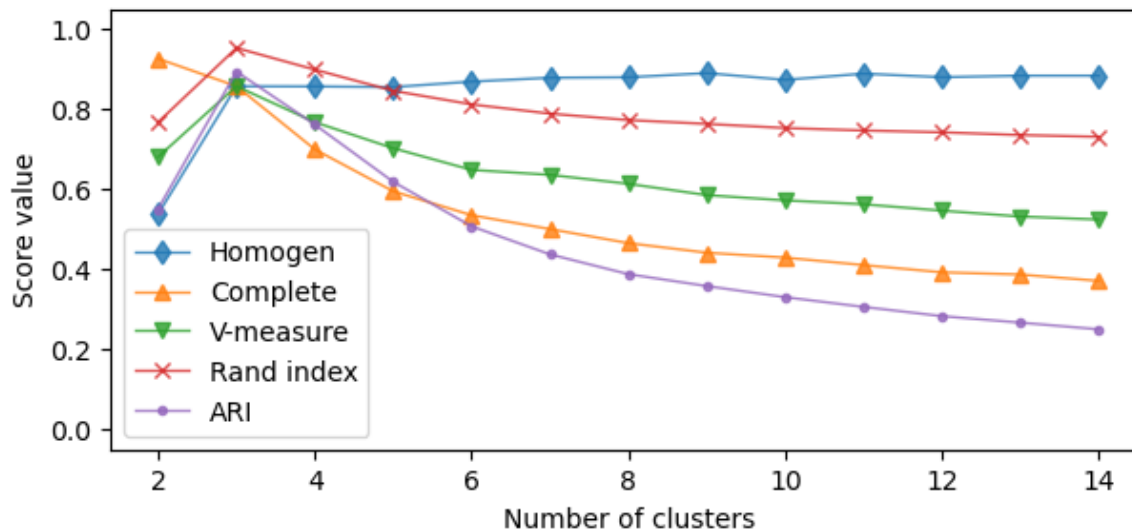
- Пусть есть эталоны – истинные группы:
  - $n$  – число наблюдений,  $C$  – число кластеров- эталонов,  $K$  – число найденных кластеров
  - $n_{c,k}$  - число наблюдений эталона  $c$  в кластере  $k$
  - $H(C) = - \sum_{c=1}^C \frac{n_c}{n} \log(\frac{n_c}{n})$  – энтропия эталонов (разнородность)
  - $H(C|K) = - \sum_{c=1}^C \sum_{k=1}^K \frac{n_{c,k}}{n} \log(\frac{n_{c,k}}{n_k})$  – условная энтропия эталонов (оставшаяся разнородность после кластеризации)
- Тогда:
  - Homogeneity – кластер содержит только примеры одного эталона
$$h = 1 - \frac{H(C|K)}{H(C)}$$
  - Completeness – все одинаковые эталоны относятся к одному и тому же кластеру
$$c = 1 - \frac{H(K|C)}{H(K)}$$

# Пример использования

```
def apply_clustering(X, y, score_func, cl_range):
    scores = np.zeros(len(cl_range))
    for i, n_clust in enumerate(cl_range):
        cl = KMeans(n_clusters = n_clust).fit(X)
        scores[i] = score_func(y, cl.labels_)
    return scores

cl_range = range(2, 15)
plots, names = [], []

for marker, (name, func) in zip("d^vx.",",", score_funcs):
    scores = apply_clustering(X_blob, y_blob, func, cl_range)
    plots.append(plt.errorbar(cl_range, scores, alpha=0.8,
                             linewidth=1, marker=marker)[0])
    names.append(name)
```



Индекс Рэнда:

$$RI = \frac{a + b}{C_2^n}$$

a – кол-во пар где  $C = K$

b – кол-во пар где  $C \neq K$

$C_2^n$  – кол-во всех пар

Скорректированный  $RI$ :

$$ARI = \frac{RI - E[RI]}{\max(RI) - E[RI]}$$

V-measure – гармоническое

$$\text{среднее } v = 2 \frac{hc}{h+c}$$



# Точность и полнота кластеризации в сравнении с эталоном

## ■ Обозначения:

- $y_i \in Y_0$  – эталонная классификация объектов,  $i = 1, \dots, l$ ,
- $Y_0$  может не совпадать с  $Y$  по мощности
- $P_i = \{k: a_k = a_i\}$  – кластер объекта  $x_i$
- $Q_i = \{k: y_k = y_i\}$  – эталонный класс объекта  $x_i$

## ■ VCubed-меры точности и полноты кластеризации:

- $Precision = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l \frac{|P_i \cap Q_i|}{|P_i|}$  – средняя точность
- $Recall = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l \frac{|P_i \cap Q_i|}{|Q_i|}$  – средняя полнота
- $F_1 = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l \frac{|P_i \cap Q_i|}{|P_i| + |Q_i|}$  – средняя  $F_1$ -мера

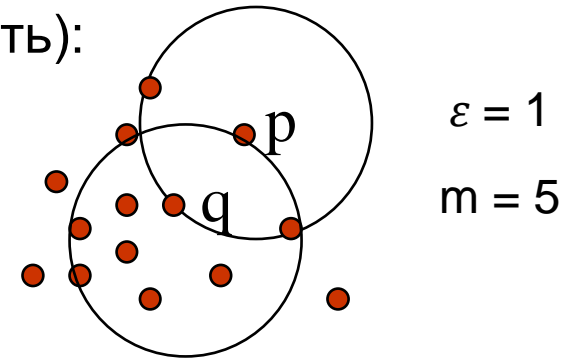
# Непараметрическая кластеризация на основе связности DBSCAN

- Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise
- Основные свойства:
  - Произвольная форма кластеров (без прототипов и вероятностных моделей)
  - Работа в условиях шума (объекты делятся на ядровые, шумовые и граничные)
  - Один проход базы, всего  $O(l^2)$  операций, а если использовать поисковый индекс для ближайших соседей, то  $O(l \cdot \log(l))$
- Недостатки:
  - нужны не интуитивные параметры для «тонкой настройки»
  - жадные, нестабильные, не интерпретируемые модели кластеризации

# DBSCAN: основные определения

- Важные параметры (что есть «плотная» область):

- $\varepsilon$ : радиус области поиска ближайших соседей
- $m$ : минимальное число соседей в  $\varepsilon$ -области



- Множество ближайших соседей точки  $p \in U$ :

$$U_\varepsilon(p) = \{q \in U | \rho(p, q) < \varepsilon\}$$

- Непосредственно достижимые точки:

- Точка  $p$  **непосредственно достижима**

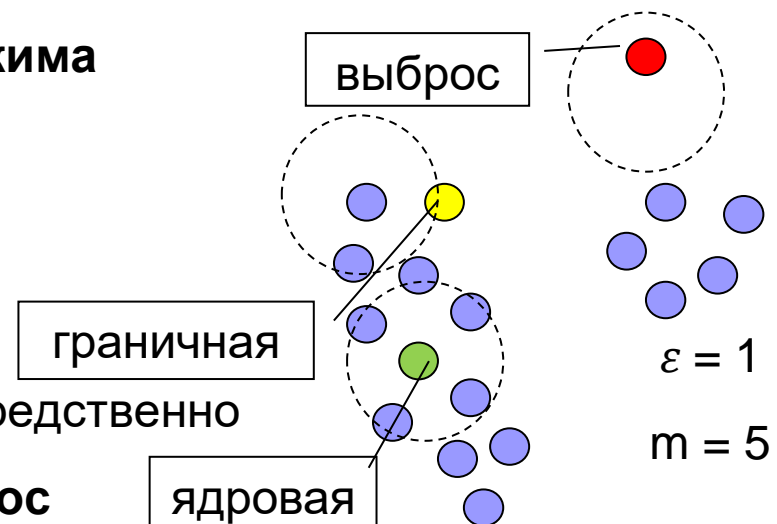
из  $q$  с учетом  $\varepsilon$ , если  $p \in U_\varepsilon(q)$

- Типы точек:

- **ядровая** точка:  $|U_\varepsilon(q)| \geq m$

- **граничная** - не ядровая, но непосредственно

достижима из ядровой, иначе - **выброс**



# DBSCAN: основные определения

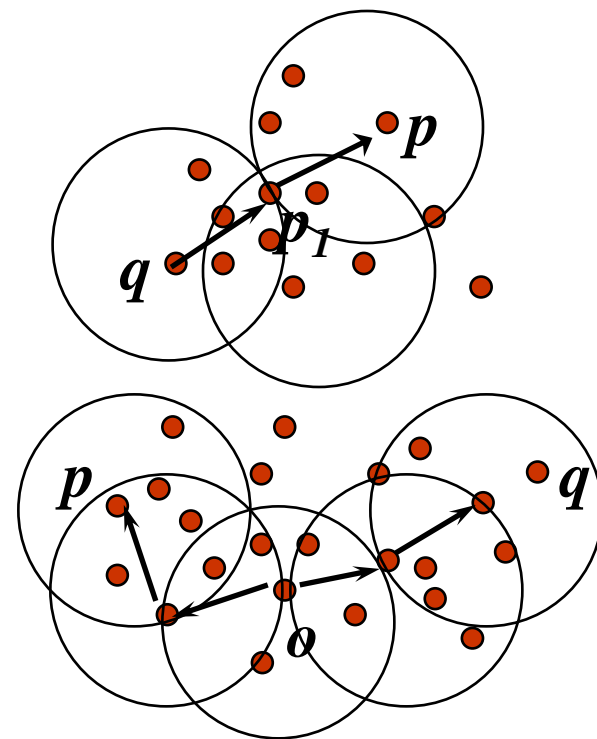
## ■ Достижимость:

- Точка  $p$  достижима из  $q$  с учетом  $\varepsilon$  и  $m$ , если существует путь  $p_1, \dots, p_n$ ,  $p_1 = q$ ,  $p_n = p$  такой, что  $p_{i+1}$  **непосредственно достижима** из  $p_i$

## ■ Связность:

- Точка  $p$  **связана** с  $q$  с учетом  $\varepsilon$  и  $m$ , если существует точка  $o$  такая, что обе точки  $p$  и  $q$  достижимы из  $o$  с учетом  $\varepsilon$  и  $m$ .

## ■ Кластер определен как максимальное множество связанных точек



### Процедура:

1. Выбор произвольной точки  $p$  и всех связанных с  $p$ .
2. Если  $p$  – ядровая, то новый кластер сформирован, если  $p$  граничная или выброс, то обработка следующей точки пока не будут выбраны все

# Алгоритм кластеризации DBSCAN

- Вход: выборка  $X^l = \{x_1, \dots, x_l\}$ ; параметры  $\varepsilon$  и  $m$ ;
- Выход: разбиение выборки на кластеры и шумовые выбросы;
- $U := X^l$  – **непомеченные**;  $a := 0$
- Пока в выборке есть непомеченные точки,  $U \neq \emptyset$ :
  - Взять *случайную* точку  $x \in U$ ;
  - Если  $|U_\varepsilon(x)| < m$ , то пометить  $x$  как, возможно, шумовой;
  - Иначе

Создать новый кластер:  $K := U_\varepsilon(x)$ ;  $a := a + 1$

Для всех  $x' \in K$ , не помеченных или шумовых

- Если  $|U_\varepsilon(x')| \geq m$  то  $K := K \cup U_\varepsilon(x')$ ;
- Иначе пометить  $x'$  как граничный кластера  $K$ ;

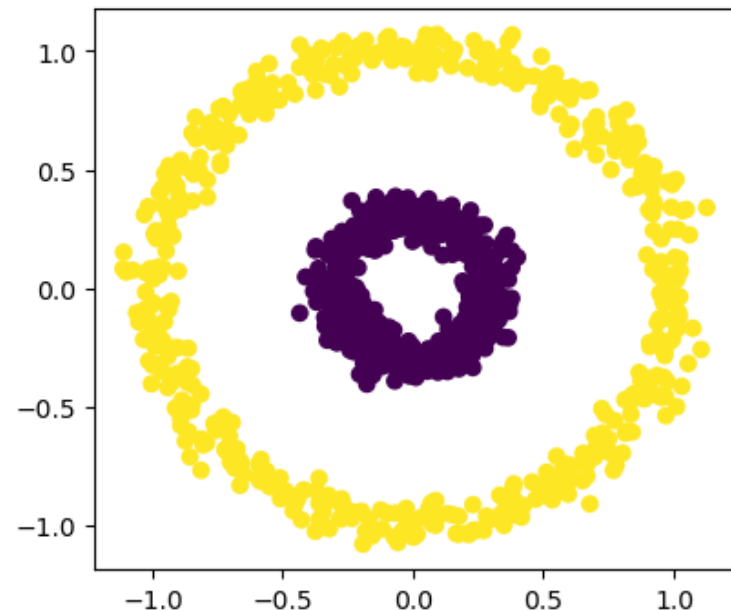
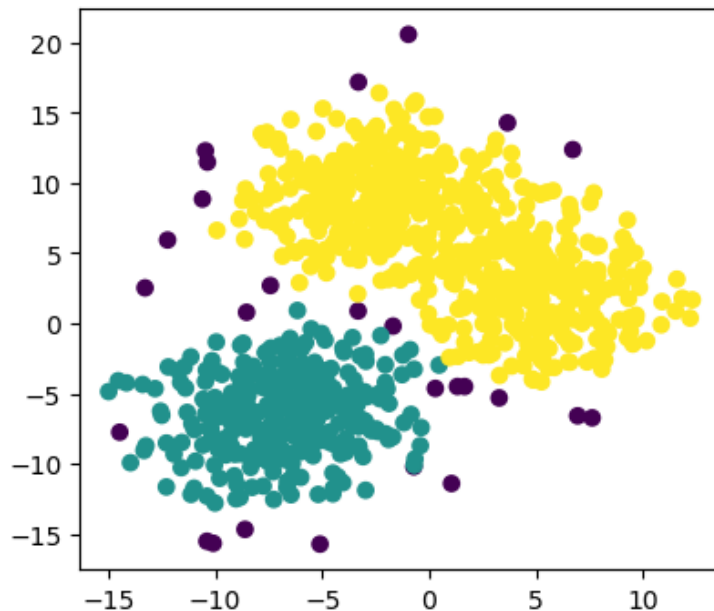
$a_i := a$  для всех  $x_i \in K$ ;  $U := U \setminus K$

# Пример использования

```
from sklearn.cluster import DBSCAN

fig, axes = plt.subplots(ncols=2, figsize=(10,4))
gbsc_b1 = DBSCAN(eps=1.5, min_samples=5)
axes[0].scatter(X_blob[:, 0], X_blob[:, 1],
                c=gbsc_b1.fit_predict(X_blob))

gbsc_cl = DBSCAN(eps=0.1)
axes[1].scatter(X_cl[:, 0], X_cl[:, 1],
                c=gbsc_cl.fit_predict(X_cl))
```



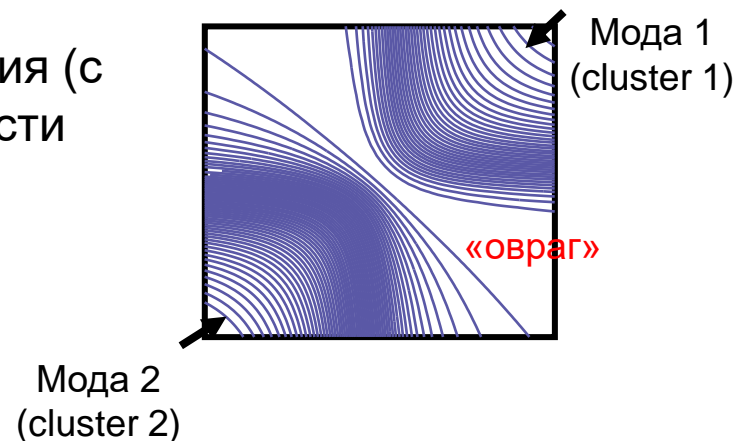
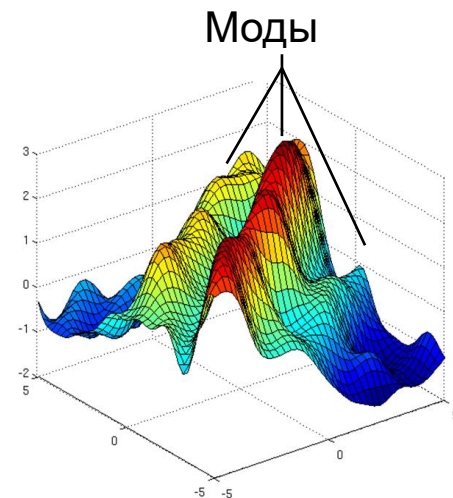
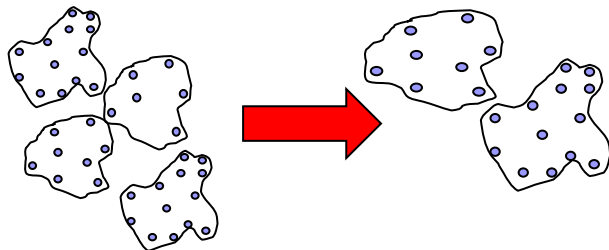
# Непараметрическая кластеризация на основе ядерной оценки плотности

- Восстановление плотности:

$$\hat{p}_h(x) = \frac{1}{lV(h)} \sum_{i=1}^l K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right)$$

- Основная идея кластеризации:

- Локальные пики (моды) плотности – кандидаты в «ядровые точки» кластеров
- Надо найти пики (градиентом по  $\hat{p}_h(x)$ )
- Привязать к ним ближайшие наблюдения (с учетом окрестности) и при необходимости «склеить» близкие кластеры



# Непараметрическая кластеризация на основе ядерной оценки плотности

- Много методов с разными предположениями и ограничениями:
  - DENSity--based CLUstEring, ModeClus (SAS), Mean shift, ...
- Основная идея Mean shift (в цикле):

- Берем  $x$  и ее окрестность

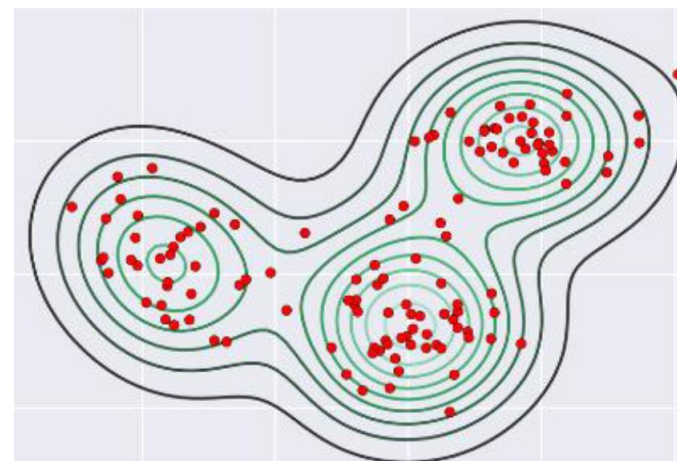
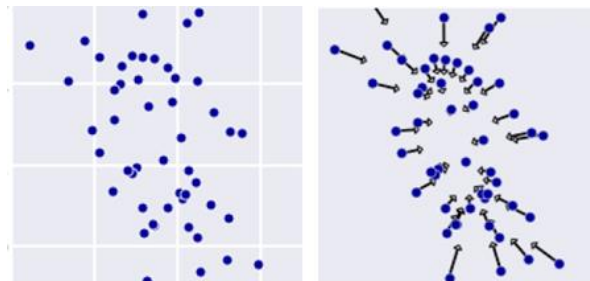
$$U_{\varepsilon}(x) = \{x' \in U \mid \rho(x, x') < \varepsilon\}$$

- Найдем центр масс окрестности

$$m(x) = \frac{\sum_{x_i \in U_{\varepsilon}(x)} K(x - x_i) x_i}{\sum_{x_i \in U_{\varepsilon}(x)} K(x - x_i)}$$

- Сдвигаем точку в сторону центра масс окрестности с шагом  $\eta$ :  $x \leftarrow x + \eta(m(x) - x)$

- или сразу  $x \leftarrow x + \eta \nabla \hat{p}_{\varepsilon}(x)$





# Непараметрическая кластеризация на основе ядерной оценки плотности

- Много методов с разными предположениями и ограничениями:

- DENSity--based CLUstEring, ModeClus (SAS), Mean shift, ...

- Основная идея Mean shift (в цикле):

- Берем  $x$  и ее окрестность

$$U_\varepsilon(x) = \{x' \in U \mid \rho(x, x') < \varepsilon\}$$

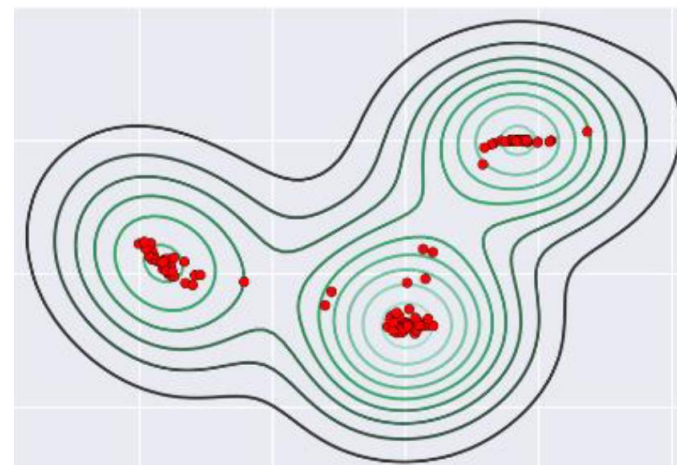
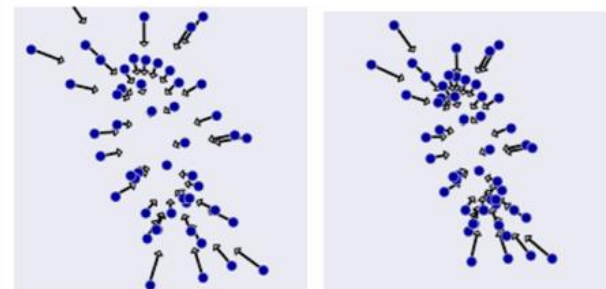
- Найдем центр масс окрестности

$$m(x) = \frac{\sum_{x_i \in U_\varepsilon(x)} K(x - x_i) x_i}{\sum_{x_i \in U_\varepsilon(x)} K(x - x_i)}$$

- Сдвигаем точку в сторону центра масс

окрестности с шагом  $\eta$ :  $x \leftarrow x + \eta(m(x) - x)$

- или сразу проще  $x \leftarrow x + \eta \nabla \hat{p}_\varepsilon(x)$



# Пример использования

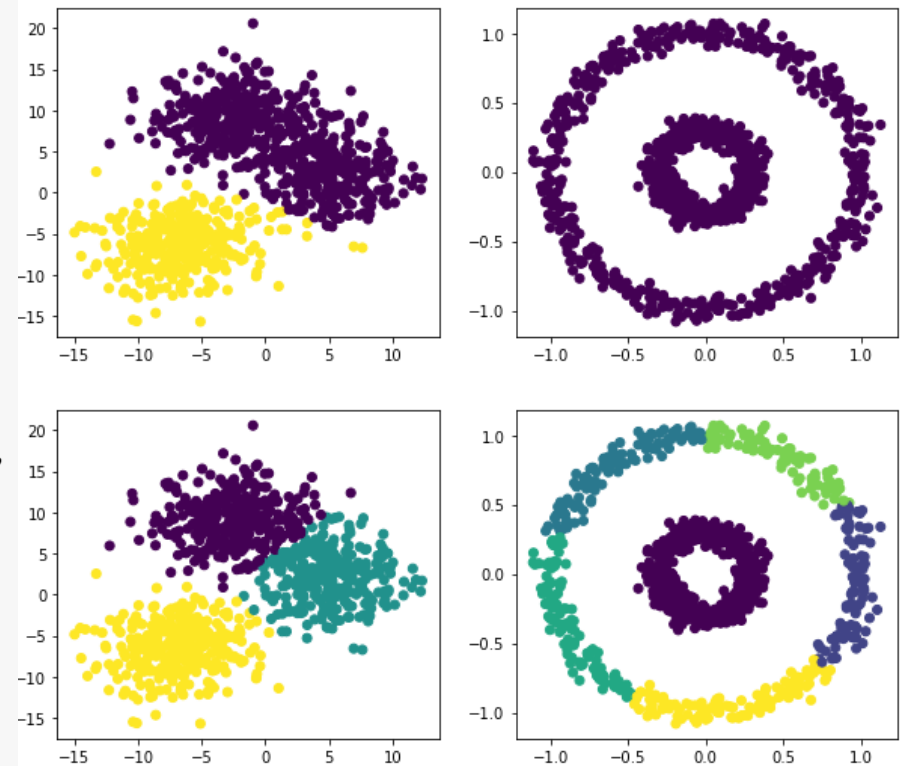
```
from sklearn.cluster import MeanShift
from sklearn.cluster import estimate_bandwidth

fig, axes = plt.subplots(ncols=2, figsize=(10,4))
gbsc_b1 = MeanShift()
axes[0].scatter(X_blob[:, 0], X_blob[:, 1],
               c=gbsc_b1.fit_predict(X_blob))

gbsc_c1 = MeanShift()
axes[1].scatter(X_cl[:, 0], X_cl[:, 1],
               c=gbsc_c1.fit_predict(X_cl))

fig, axes = plt.subplots(ncols=2, figsize=(10,4))
gbsc_b1 = MeanShift(bandwidth = estimate_bandwidth(X_blob,
                                                  quantile=0.2, n_samples=500))
axes[0].scatter(X_blob[:, 0], X_blob[:, 1],
               c=gbsc_b1.fit_predict(X_blob))

gbsc_c1 = MeanShift(bandwidth = estimate_bandwidth(X_cl,
                                                  quantile=0.2, n_samples=500))
axes[1].scatter(X_cl[:, 0], X_cl[:, 1],
               c=gbsc_c1.fit_predict(X_cl))
```



# Параметрическая вероятностная кластеризация – обычно ЕМ алгоритм

- Вход:  $X^l = \{x_1, \dots, x_l\}$ ,  $k$  – число кластеров,  $\varphi(x_i, \theta)$  – параметрическая вероятностная модель в кластере;
- Выход:  $(w_j, \theta_j)_{j=1}^k$  – априорные вероятности кластеров и параметры вероятностных моделей в кластерах;
- Инициализировать  $(\theta_j)_{j=1}^k$ ,  $w_j := \frac{1}{k}$ , и повторять:
  - **Е-шаг:** расчет  $P(j|x_i)$  ф-ции принадлежности наблюдения  $x_i$  кластеру  $j$ :

$$g_{ij} := \frac{w_j \varphi(x_i, \theta_j)}{\sum_{s=1}^k w_s \varphi(x_i, \theta_s)}$$

- **М-шаг:** пересчет априорных вероятностей кластеров и параметры вероятностных моделей в каждом:

$$w_j := \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l g_{ij}, \theta_j := \arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^l g_{ij} \ln \varphi(x_i, \theta)$$

# Gaussian Mixture Model (GMM)

- Вход:  $X^l = \{x_1, \dots, x_l\}$ ,  $k$ ;
- Выход:  $(w_j, \mu_j, \Sigma_j)_{j=1}^k$  – параметры смеси гауссиан;
- Инициализировать  $(\mu_j, \Sigma_j)_{j=1}^k, w_j := \frac{1}{k}$

- Повторять

- Е-шаг (expectation): для всех  $i = 1, \dots, l, j = 1, \dots, k$

$$g_{ij} := \frac{w_j N(x_i; \mu_j, \Sigma_j)}{\sum_{s=1}^k w_s N(x_i; \mu_s, \Sigma_s)}$$

- М-шаг (maximization): для всех  $j = 1, \dots, k$

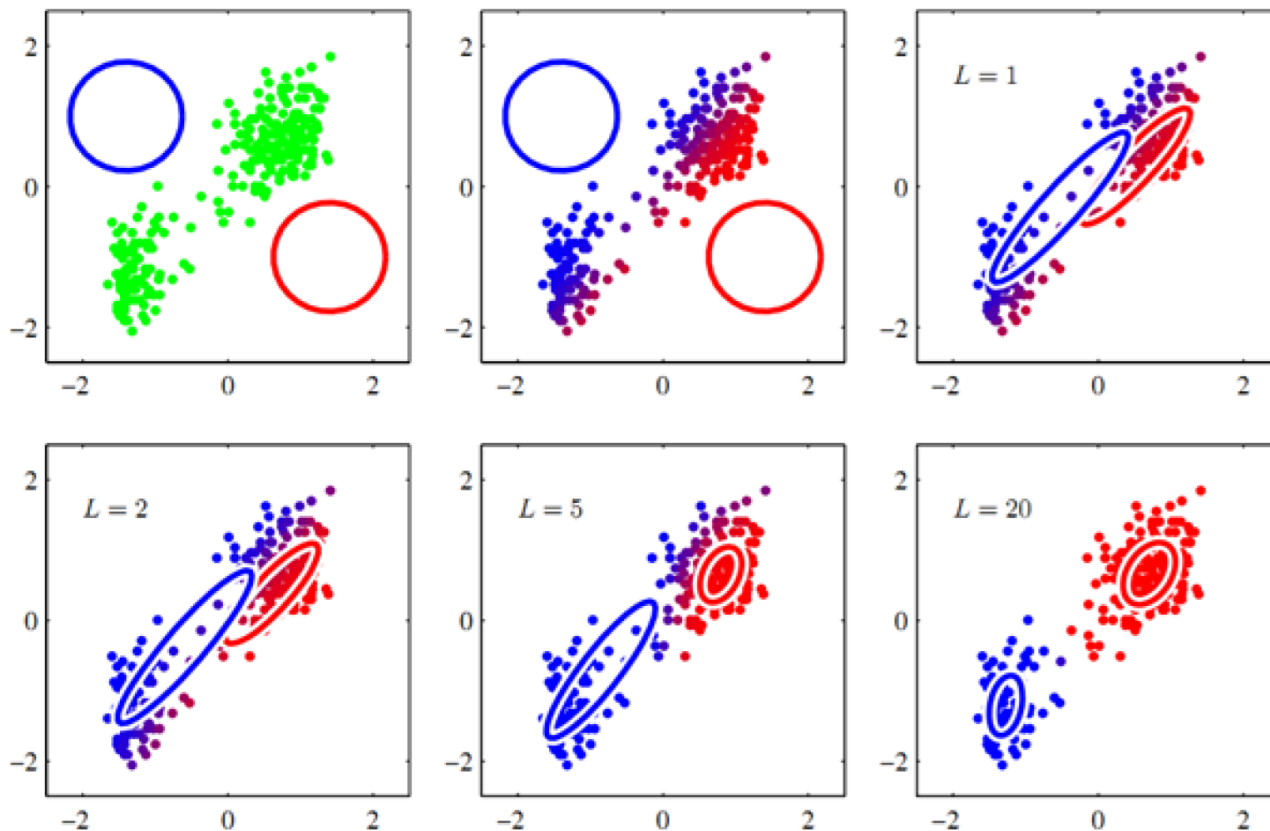
$$w_j := \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l g_{ij},$$

$$\mu_j := \frac{1}{lw_j} \sum_{i=1}^l g_{ij} x_i, \Sigma_j := \frac{1}{lw_j} \sum_{i=1}^l g_{ij} (x_i - \mu_j)(x_i - \mu_j)^T$$

- Пока  $(w_j, \mu_j, \Sigma_j)$  и / или  $g_{ij}$  не сошлись.

# Демо-пример

- Две гауссовские компоненты  $k = 2$  в пространстве  $X = \mathbb{R}^2$ .
- Расположение компонент в зависимости от номера итерации  $L$

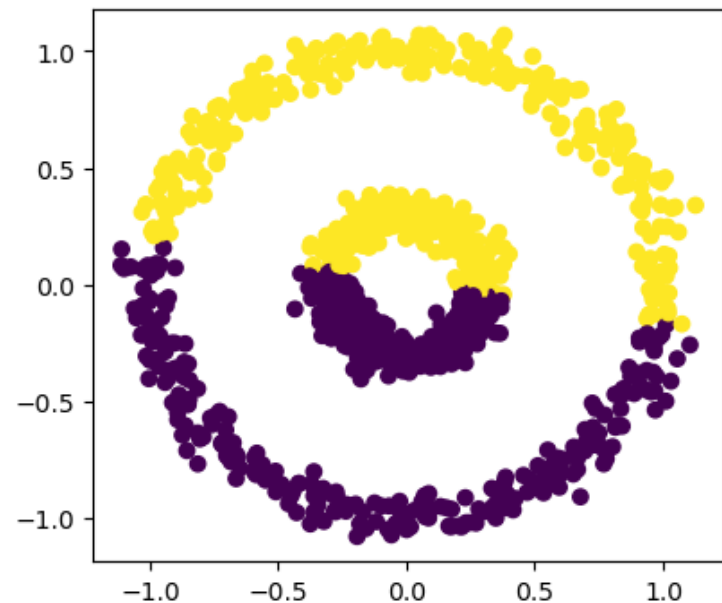
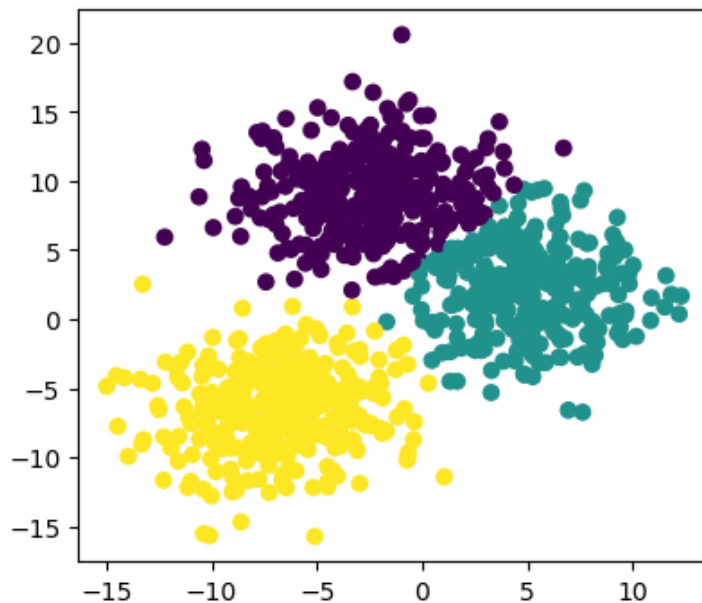


# Пример использования

```
from sklearn.mixture import GaussianMixture

fig, axes = plt.subplots(ncols=2, figsize=(10,4))
gmm_b1 = GaussianMixture(n_components=3)
axes[0].scatter(X_blob[:, 0], X_blob[:, 1],
                c=gmm_b1.fit_predict(X_blob))

km_c1 = GaussianMixture(n_components=2)
axes[1].scatter(X_cl[:, 0], X_cl[:, 1],
                c=km_c1.fit_predict(X_cl))
```



# Выводы по кластеризации

- Кластеризация:
  - Важный инструмент для решения практических задач, предобработки данных, разведочного анализа
  - Задача обучения без учителя, некорректно поставленная, нет объективной меры качества, ориентируются на NGC
- Основные типы алгоритмов кластеризации:
  - Иерархические
  - Основанные на прототипах
  - На основе связности и непараметрической оценки плотности
  - Параметрические вероятностные
- Особенности:
  - Для разных задач подходят разные алгоритмы, надо учитывать требования задачи
  - Все сильно зависит от предобработки данных, метрики сходства или различия, признакового пространства и стратегии выбора метапараметров