

Лекция 12

Кластеризация и визуализация данных.

Юлия Конюшенко

ТГ: @ko_iulia

koniushenko.iun@phystech.edu

ВШЭ, 2023

КЛАСТЕРИЗАЦИЯ

- постановка задачи
- алгоритмы кластеризации:
 - a) k-means
 - b) иерархическая кластеризация
 - c) density-based clustering

КЛАСТЕРИЗАЦИЯ

Даны объекты $x_1, \dots, x_l, x_i \in X$.

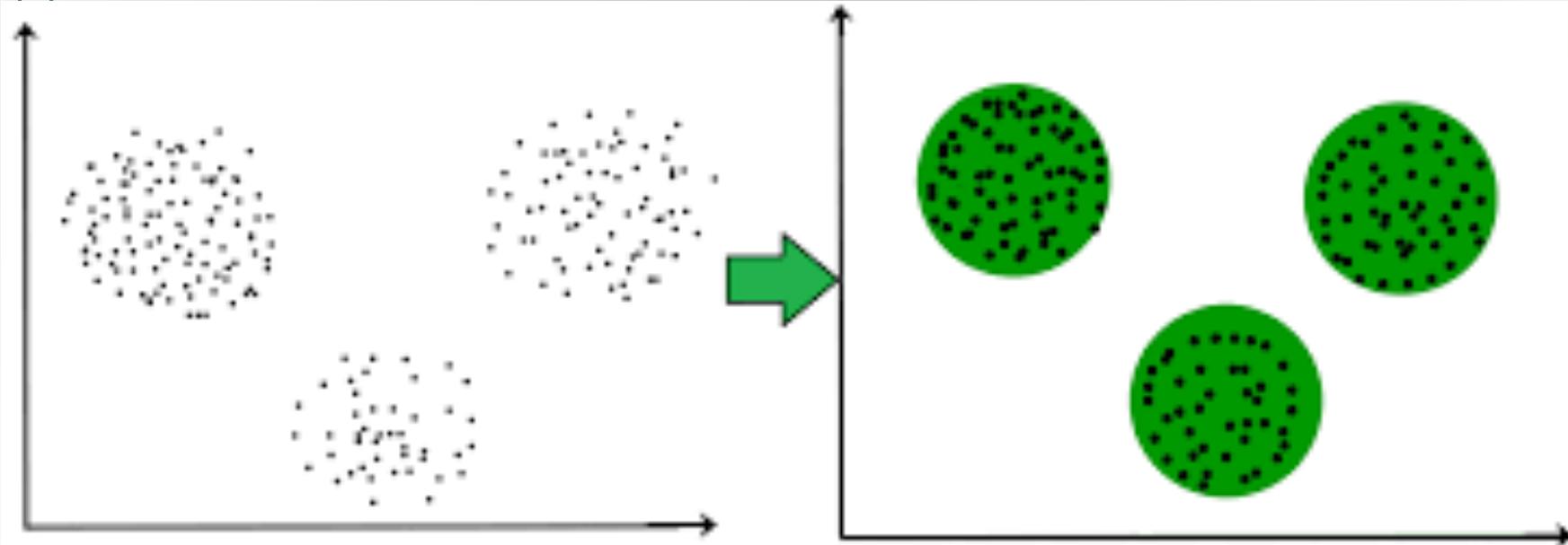
- Требуется выявить в данных K кластеров – таких областей, что объекты внутри одного кластера похожи друг на друга, а объекты из разных кластеров друг на друга не похожи.

КЛАСТЕРИЗАЦИЯ

Даны объекты $x_1, \dots, x_l, x_i \in X$.

- Требуется выявить в данных K кластеров – таких областей, что объекты внутри одного кластера похожи друг на друга, а объекты из разных кластеров друг на друга не похожи.
- Формализация задачи: необходимо построить алгоритм $a: X \rightarrow \{1, \dots, K\}$, сопоставляющий каждому объекту x номер кластера.

КЛАСТЕРИЗАЦИЯ



МЕТРИКИ КАЧЕСТВА КЛАСТЕРИЗАЦИИ

- *Внешние метрики* – используют информацию об истинных метках объектов
- *Внутренние метрики* – оценивают качество кластеризации, основываясь только на наборе данных.

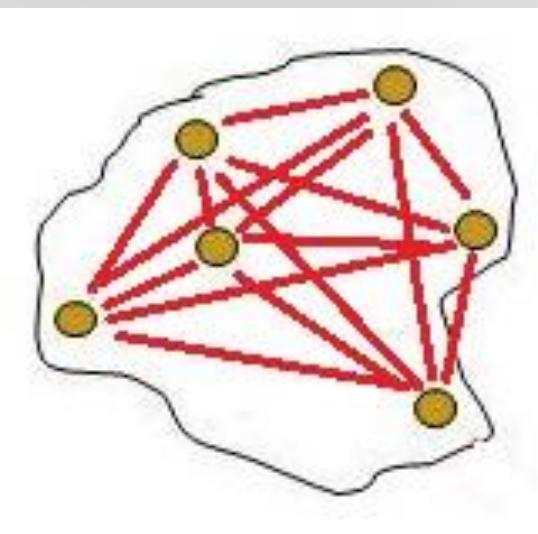
ВНУТРЕННИЕ МЕТРИКИ КАЧЕСТВА КЛАСТЕРИЗАЦИИ

ВНУТРИКЛАСТЕРНОЕ РАССТОЯНИЕ

Пусть c_k - центр k -го кластера

Внутри кластера все объекты максимально похожи, поэтому наша **цель – минимизировать внутрикластерное расстояние:**

$$\sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^l [a(x_i) = k] \rho(x_i, c_k) \rightarrow \min_a$$

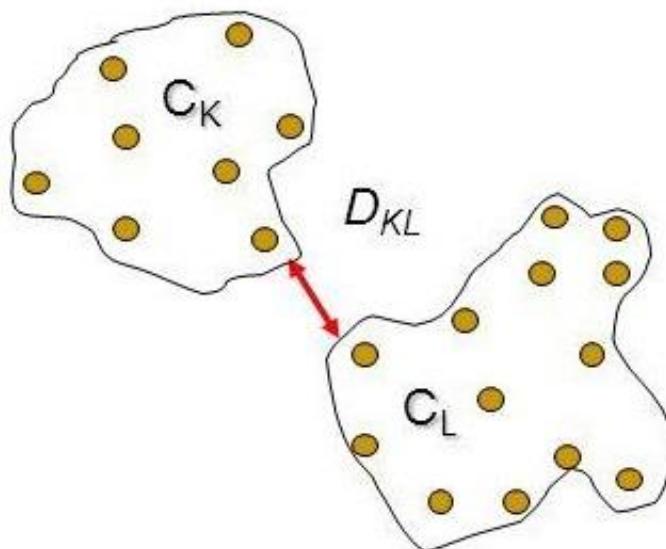


Что еще можно автоматизировать в задаче кластеризации?

МЕЖКЛАСТЕРНОЕ РАССТОЯНИЕ

Объекты из разных кластеров должны быть как можно менее похожи друг на друга, поэтому мы **максимизируем межкластерное расстояние**:

$$\sum_{i,j=1}^l [a(x_i) \neq a(x_j)] \rho(x_i, x_j) \rightarrow \max_a$$



Хотим
сочетать обе
оптимизации

ИНДЕКС ДАННА (DUNN INDEX)

Хотим **минимизировать внутрикластерное расстояние и одновременно максимизировать межклластерное расстояние:**

$$\frac{\min_{1 \leq k < k' \leq K} d(k, k')}{\max_{1 \leq k \leq K} d(k)} \rightarrow \max_a$$

$d(k, k')$ – расстояние между кластерами k и k' ,

$d(k)$ – внутрикластерное расстояние для k -го кластера.

ИНДЕКС ДАННА (DUNN INDEX)

Хотим **минимизировать внутрикластерное расстояние и одновременно максимизировать межкластерное расстояние:**

$$\frac{\min_{1 \leq k < k' \leq K} d(k, k')}{\max_{1 \leq k \leq K} d(k)} \rightarrow \max_a$$

$d(k, k')$ – расстояние между кластерами k и k' ,

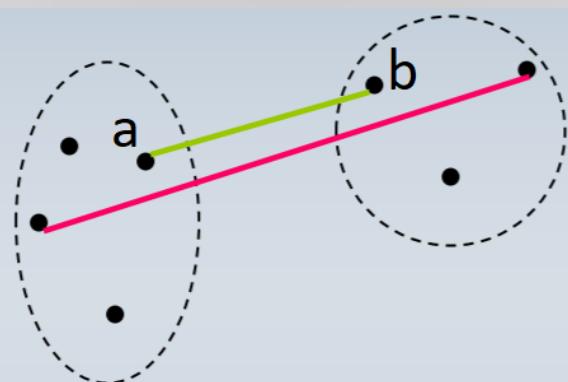
$d(k)$ – внутрикластерное расстояние для k -го кластера.



ВИДЫ РАССТОЯНИЙ МЕЖДУ ОБЪЕКТАМИ

- **Евклидово расстояние** – расстояние между точками в общепринятом понимании, то есть геометрическое расстояние между двумя точками.

$$\rho(a, b) = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}$$



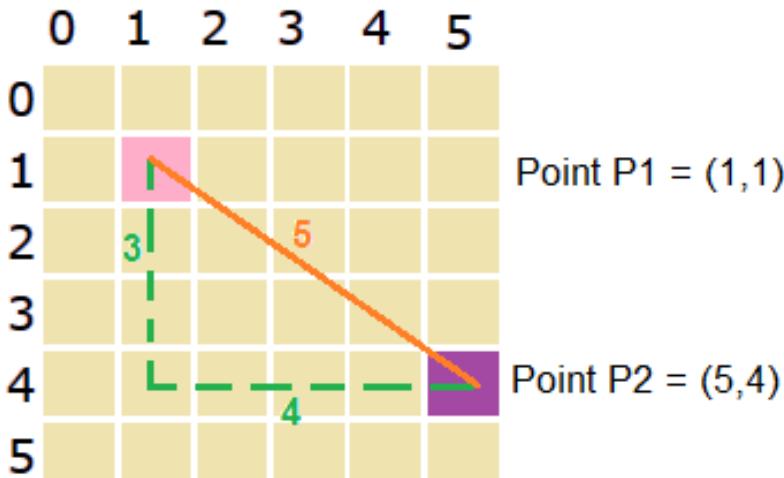
ВИДЫ РАССТОЯНИЙ МЕЖДУ ОБЪЕКТАМИ

- **Евклидово расстояние** – расстояние между точками в общепринятом понимании, то есть геометрическое расстояние между двумя точками.

$$\rho(a, b) = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}$$

- **Манхэттенское расстояние** (расстояние городских кварталов):

$$\rho(a, b) = |x_1 - x_2| + |y_1 - y_2|$$



$$\text{Euclidean distance} = \sqrt{(5-1)^2 + (4-1)^2} = 5$$

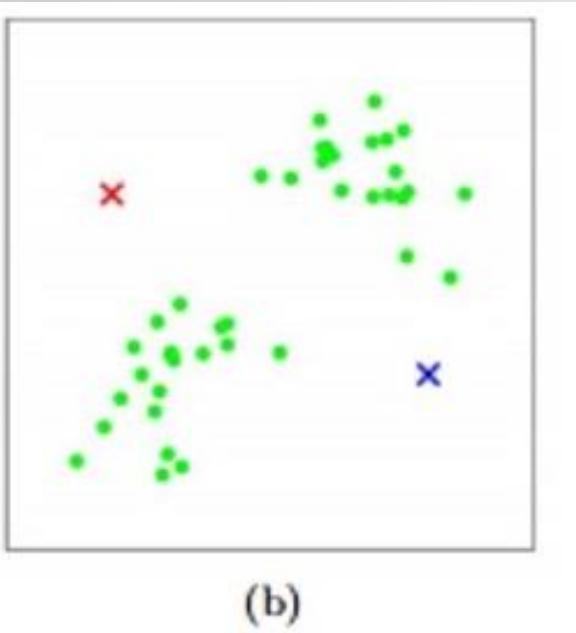
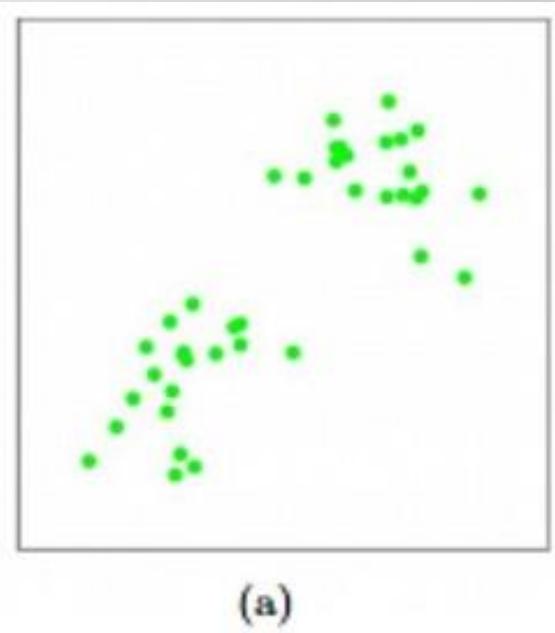
$$\text{Manhattan distance} = |5-1| + |4-1| = 7$$

1) K-MEANS

Дано: выборка x_1, \dots, x_l

Параметр: число кластеров K

Начало: случайно выбрать центры кластеров c_1, \dots, c_K



K-MEANS

Дано: выборка x_1, \dots, x_l

Параметр: число кластеров K

Начало: случайно выбрать центры кластеров c_1, \dots, c_K

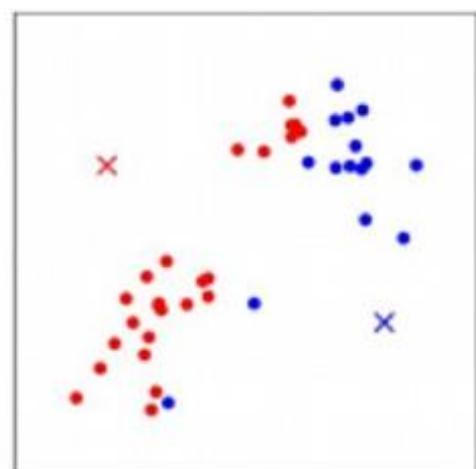
**1) каждый объект отнести к ближайшему к нему центру
кластера**



(a)



(b)



(c)

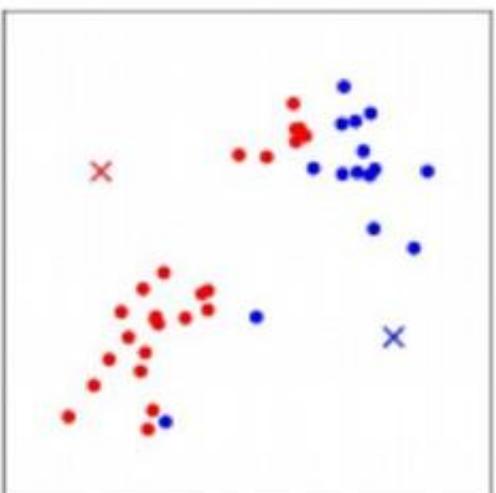
K-MEANS

Дано: выборка x_1, \dots, x_l

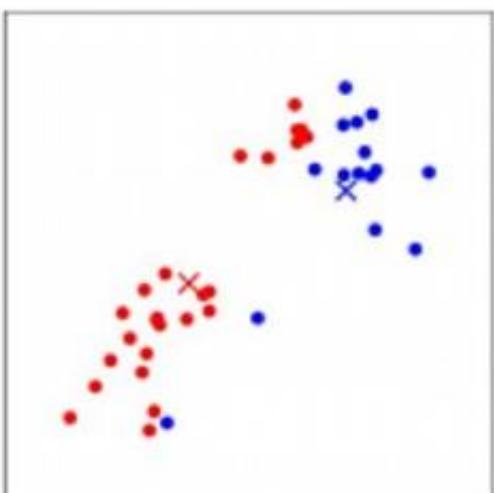
Параметр: число кластеров K

Начало: случайно выбрать центры кластеров c_1, \dots, c_K

- 1) каждый объект отнести к ближайшему к нему центру кластера
- 2) пересчитать центры полученных кластеров



(c)



(d)

K-MEANS

Дано: выборка x_1, \dots, x_l

Параметр: число кластеров K

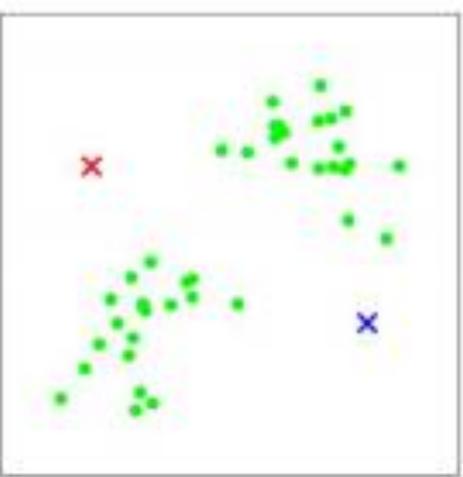
Начало: случайно выбрать центры кластеров c_1, \dots, c_K

- 1) каждый объект отнести к ближайшему к нему центру кластера
- 2) пересчитать центры полученных кластеров
- 3) повторить шаги 1 и 2 несколько раз до стабилизации кластеров**

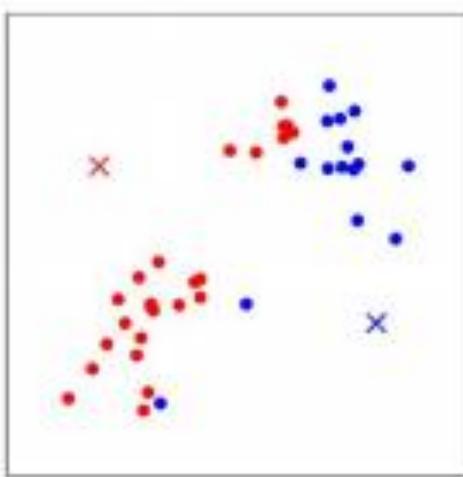
K-MEANS (ДВА КЛАСТЕРА)



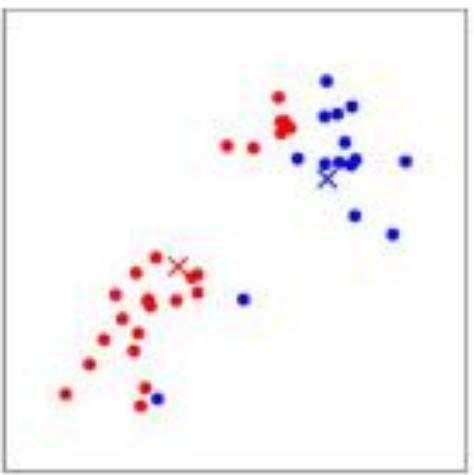
(a)



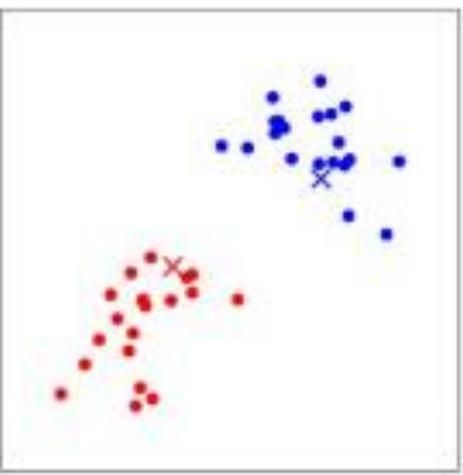
(b)



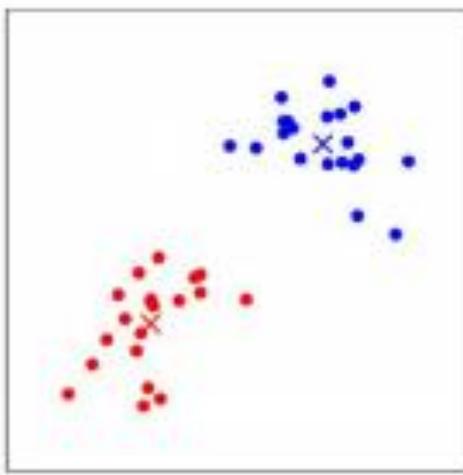
(c)



(d)



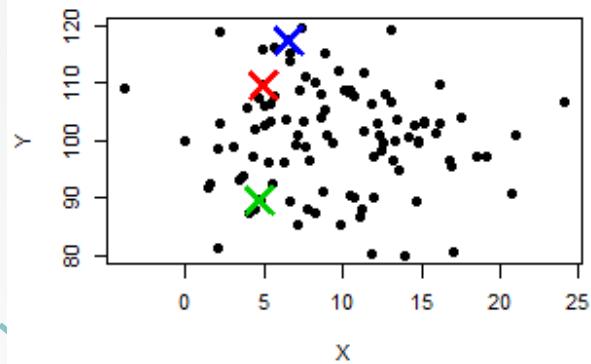
(e)



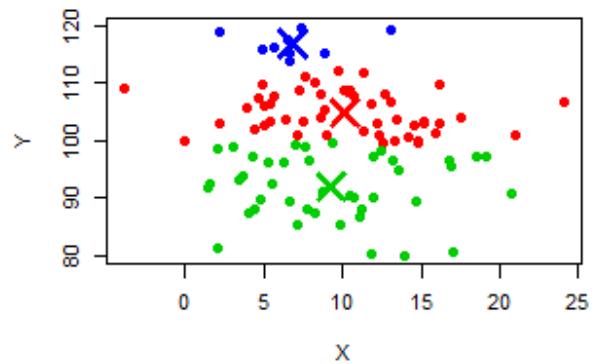
(f)

K-MEANS (ТРИ КЛАСТЕРА)

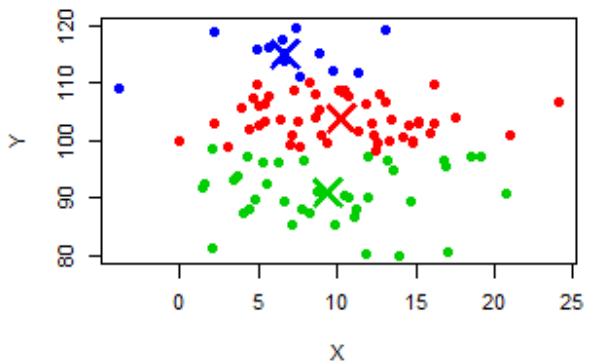
Iteration 1



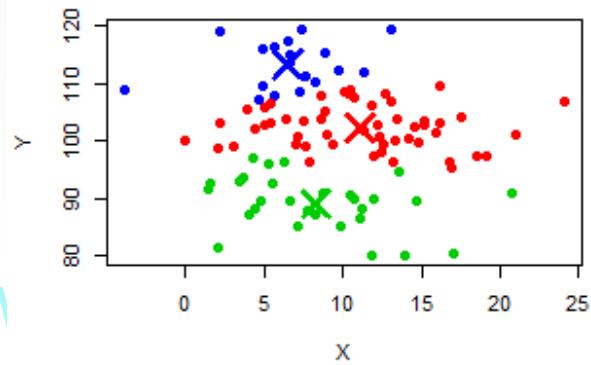
Iteration 2



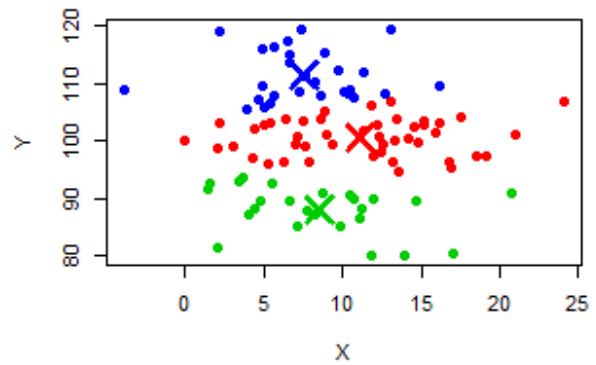
Iteration 3



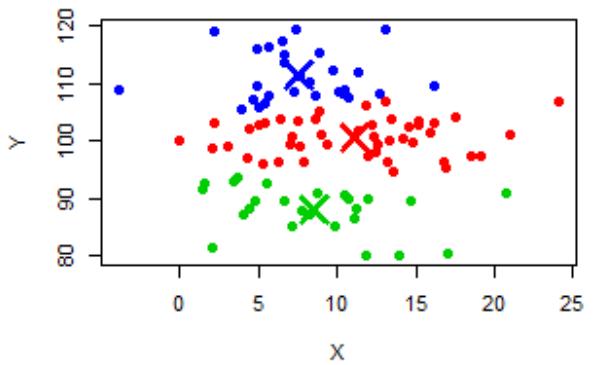
Iteration 6



Iteration 9



Converged!



Количество кластеров задаётся заранее.

K-MEANS

Дано: выборка x_1, \dots, x_l

Параметр: число кластеров K

*Идея метода - минимизация внутрикластерного
расстояния*

$$\sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^l [a(x_i) = k] \rho(x_i, c_k) \rightarrow \min_a$$

с $\rho(a, b) = (a - b)^2$, т.е.

$$\sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^l [a(x_i) = k] (x_i - c_k)^2 \rightarrow \min_a$$

Центр классера - среднее

k -ый

классер

(при минимизации)

$$\sum_{i=1}^e (x_i - c_k)^2 \rightarrow \min c_k.$$

$$\Rightarrow c_k = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_e}{e}$$



иначе из-за этого

дела подсчета c_k

используется не медиана

или чтобы c_k получал
группы

Но почему метод
мы оптимиз.

в принципе сходится,
когда группировка. У неё есть экспре-
нум!

K-MEANS

Дано: выборка x_1, \dots, x_l

Параметр: число кластеров K

Начало: случайно выбрать центры кластеров c_1, \dots, c_K

Повторять по очереди до сходимости:

- отнести каждый объект к ближайшему центру

$$y_i = \operatorname{argmin}_{j=1, \dots, K} \rho(x_i, c_j)$$

- переместить центр каждого кластера в центр тяжести

$$c_j = \frac{\sum_{i=1}^l x_i [y_i = j]}{\sum_{i=1}^l [y_i = j]}$$

нагальнай инициализации очень важно !

К-MEANS ДЛЯ СЖАТИЯ ИЗОБРАЖЕНИЙ

↑ закрашиваем
"похожие" цвета
одним цветом

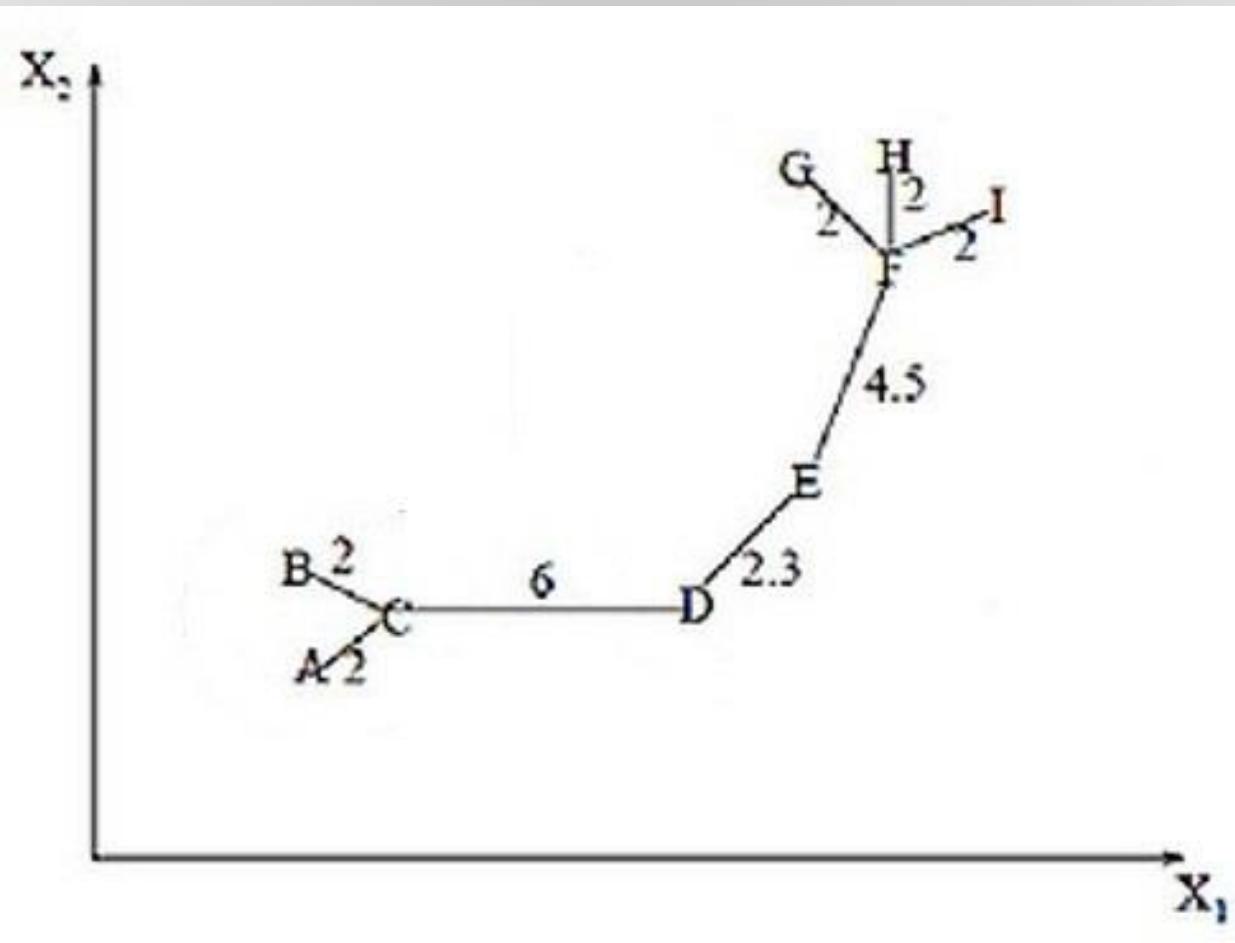






ГРАФОВЫЕ МЕТОДЫ КЛАСТЕРИЗАЦИИ

- выборка представляется в виде графа, где в вершинах стоят объекты, а на рёбрах – расстояния между ними



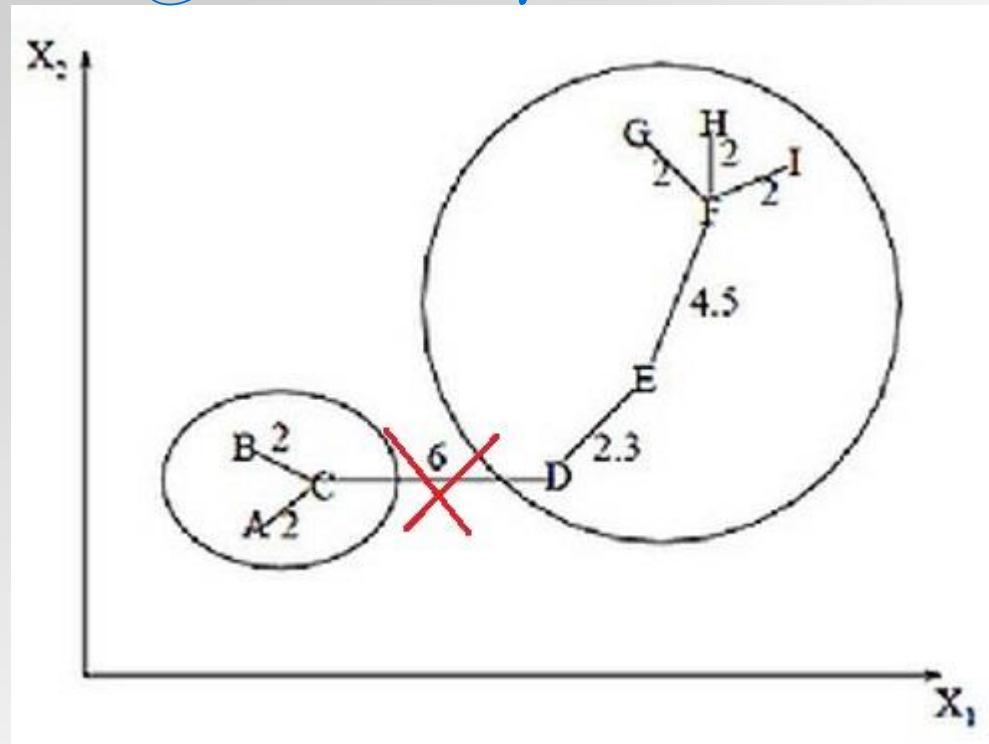
ГРАФОВЫЕ МЕТОДЫ КЛАСТЕРИЗАЦИИ

- выборка представляется в виде графа, где в вершинах стоят объекты, а на рёбрах – расстояния между ними

Алгоритм выделения связных компонент:

1) из графа удаляются все ребра, для которых расстояния больше некоторого значения R \leftarrow *всё бирал*

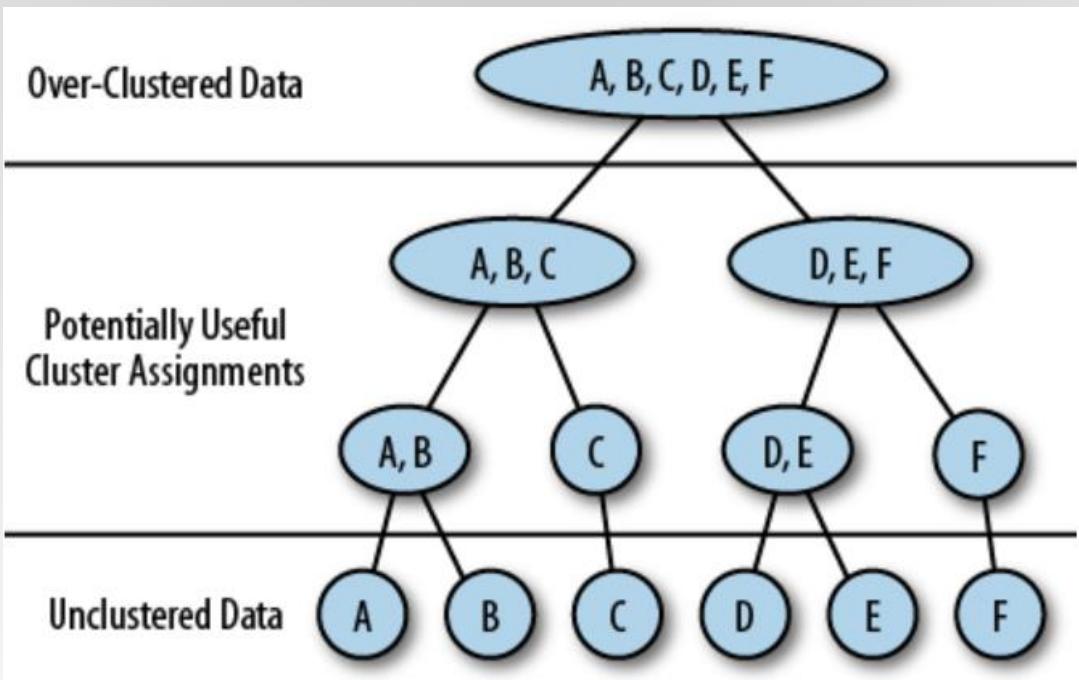
2) Кластеры – объекты, попадающие в одну компоненту связности



2) ИЕРАРХИЧЕСКАЯ КЛАСТЕРИЗАЦИЯ

Иерархия кластеров:

- на нижнем уровне - l кластеров, каждый из которых состоит из одного объекта
- на верхнем уровне – один большой кластер



ИЕРАРХИЧЕСКАЯ КЛАСТЕРИЗАЦИЯ

Алгоритм Ланса-Уильямса:

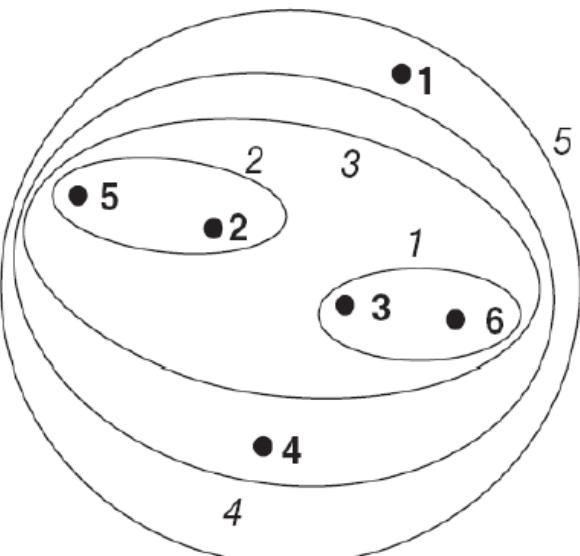
- первый шаг: один кластер = один объект
- на каждом следующем шаге объединяем два наиболее похожих кластера (по некоторой мере схожести d) с предыдущего шага

ИЕРАРХИЧЕСКАЯ КЛАСТЕРИЗАЦИЯ

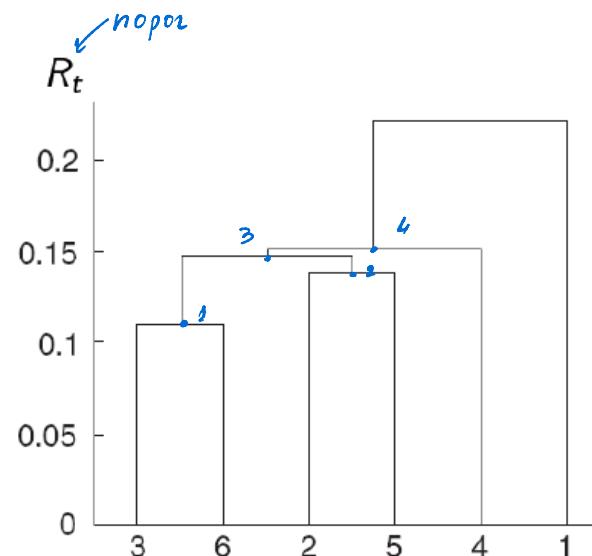
Алгоритм Ланса-Уильямса:

- первый шаг: один кластер = один объект
- на каждом следующем шаге объединяем два наиболее похожих кластера (по некоторой мере схожести d) с предыдущего шага

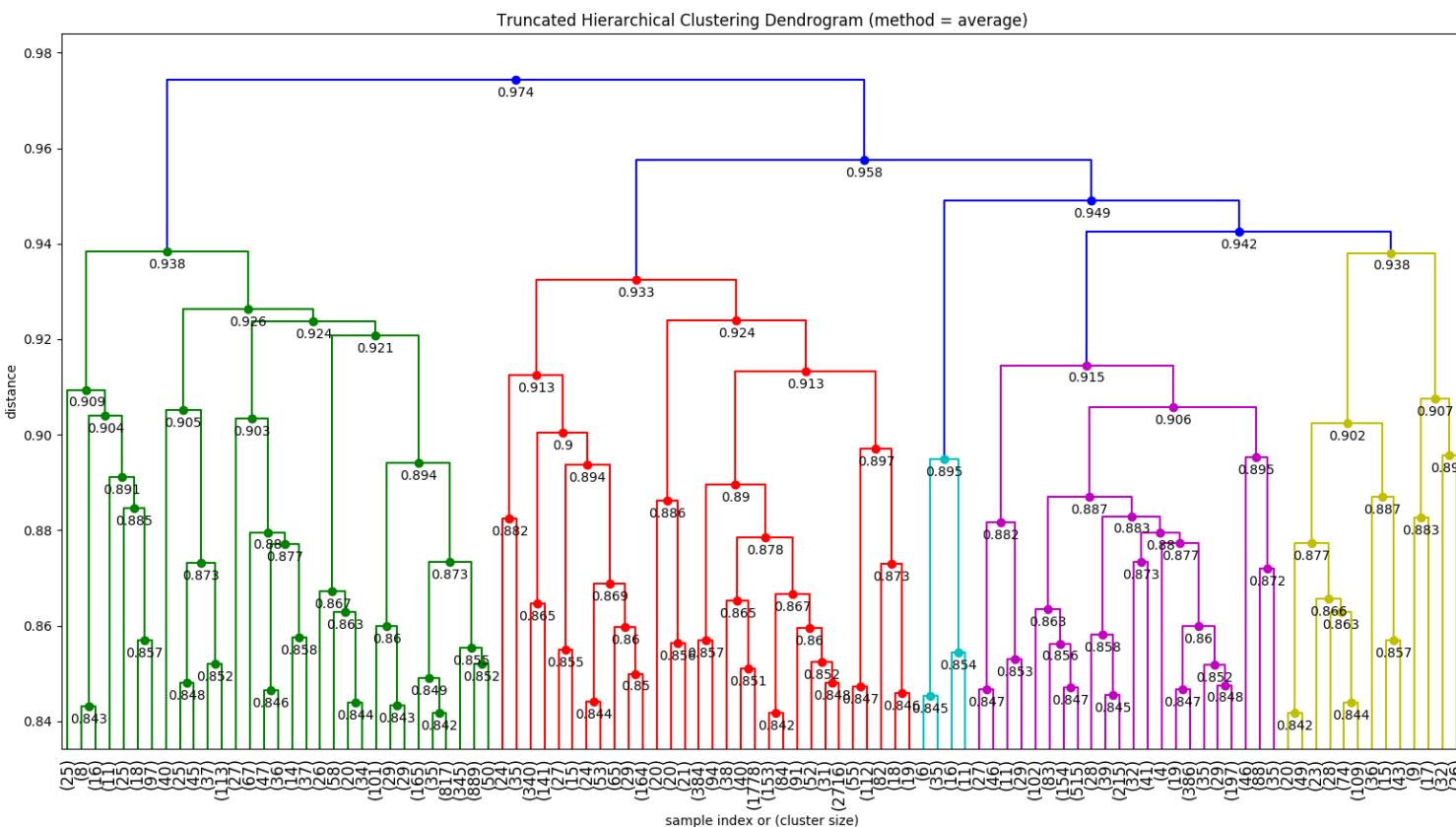
Диаграмма вложения



Дендрограмма

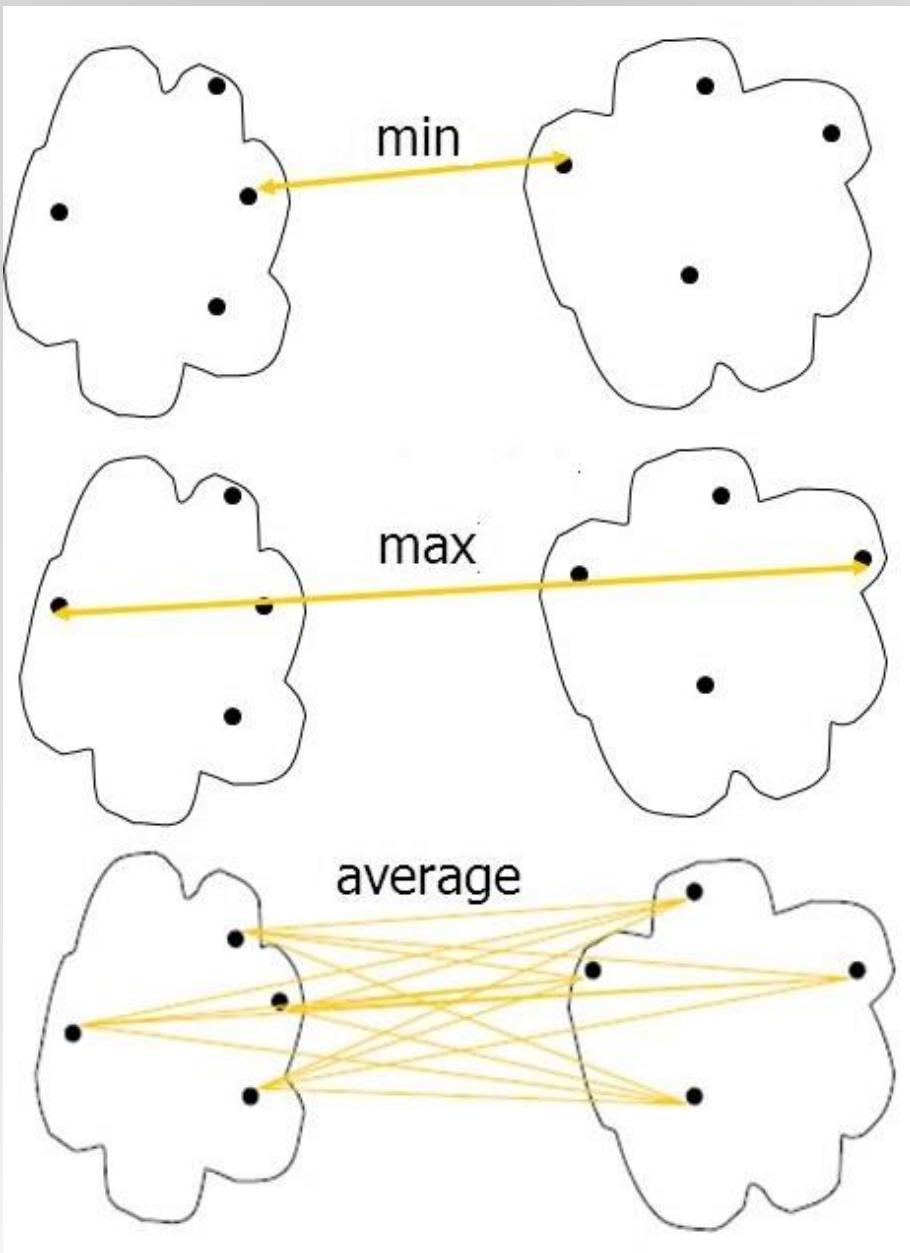


ВЫБОР ЧИСЛА КЛАСТЕРОВ



но дендрограмме
числом
можна
кластеров
определить с

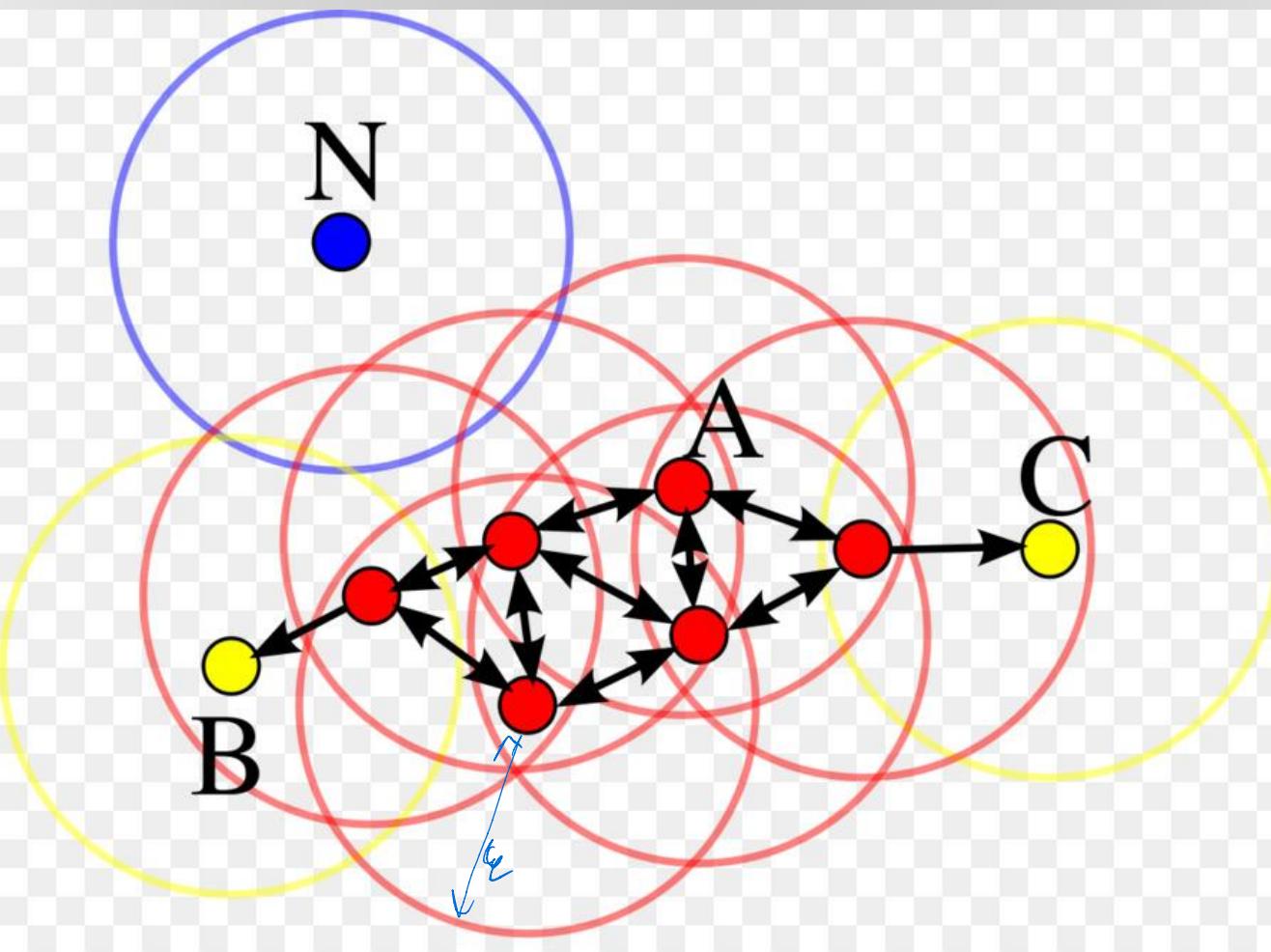
РАССТОЯНИЕ МЕЖДУ КЛАСТЕРАМИ



DENSITY-BASED CLUSTERING

ТИПЫ ОБЪЕКТОВ В DBSCAN

Объекты: основные, граничные, шумовые.



ПАРАМЕТРЫ МЕТОДА

- `eps` – размер окрестности
- `min_samples` – минимальное число объектов в окрестности (включая сам объект), для определения основных точек

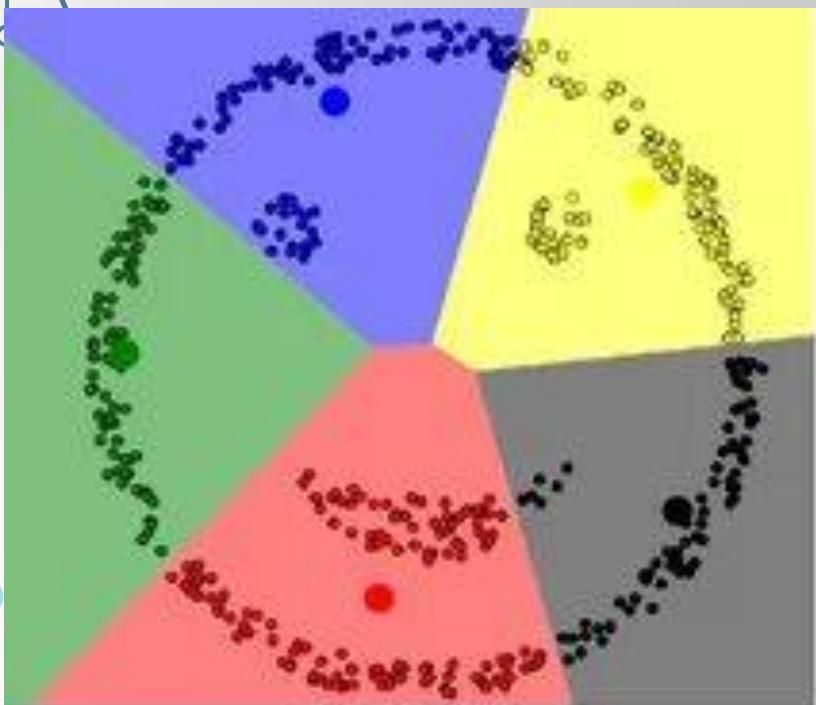
АЛГОРИТМ DBSCAN

1. Выбрать точку без метки
2. Если в окрестности меньше, чем min_pts точек, то пометить её как шумовую
3. Создать кластер, поместить в него текущую точку (если это не шум, см. п.2)
4. Для всех точек из окрестности S :
 - если точка шумовая, то отнести к данному кластеру, но не использовать для расширения
 - если точка основная, то отнести к данному кластеру, а её окрестность добавить к S
5. Перейти к шагу 1.

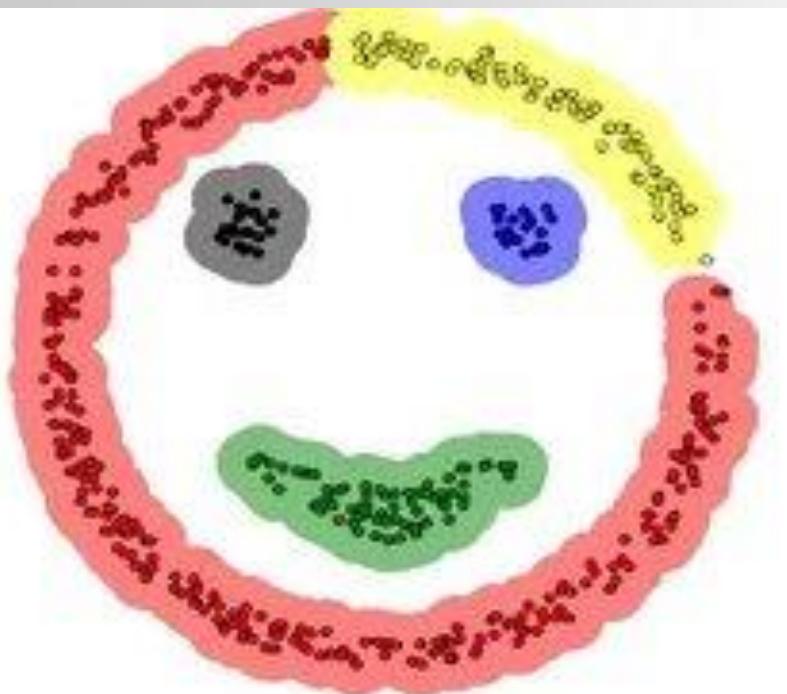
DBSCAN DEMO

<https://www.naftaliharris.com/blog/visualizing-dbscan-clustering/>

KMEANS AND DBSCAN



KMeans($K=5$)



DBSCAN($\text{MinPts}=4$, $\text{eps}=1.0$)

МЕТРИКИ КАЧЕСТВА КЛАСТЕРИЗАЦИИ

RAND INDEX (RI)

- Предполагается, что известны истинные метки объектов.

Мера зависит не от самих значений меток, а от разбиения выборки на кластеры.

- a – число пар объектов с одинаковыми метками и находящихся в одном кластере, b – число пар объектов с различными метками и находящихся в разных кластерах, N – число объектов в выборке

$$RI = \frac{a + b}{C_N^2} = \frac{2(a + b)}{N(N - 1)}$$

RI – доля объектов, для которых исходное и полученное разбиения согласованы. Выражает похожесть двух различных разбиений выборки.

ADJUSTED RAND INDEX (ARI)

RI нормируется так, чтобы величина всегда принимала значения из отрезка $[-1; 1]$ независимо от числа объектов N и числа кластеров, получается ARI :

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

- $ARI > 0$ – разбиения похожи ($ARI = 1$ – совпадают)
- $ARI \approx 0$ – случайные разбиения
- $ARI < 0$ – непохожие разбиения

MUTUAL INFORMATION (AMI)

Метрика похожа на ARI.

Индекс MI – это взаимная информация для двух разбиений выборки на кластеры:

$$MI(U, V) = \sum_{i=1}^{|U|} \sum_{j=1}^{|V|} P_{UV}(i, j) \frac{\log P_{UV}(i, j)}{P_U(i) \cdot P_V(j)},$$

где

- $P_{UV}(i, j)$ – вероятность, что объект принадлежит кластеру $U_i \subset U$ и кластеру $V_j \subset V$
- $P_U(i)$ – вероятность, что объект принадлежит кластеру $U_i \subset U$
- $P_V(j)$ – вероятность, что объект принадлежит кластеру $V_j \subset V$

ADJUSTED MUTUAL INFORMATION (AMI)

Индекс MI – это взаимная информация для двух разбиений выборки на кластеры:

$$MI(U, V) = \sum_{i=1}^{|U|} \sum_{j=1}^{|V|} P_{UV}(i, j) \frac{\log P_{UV}(i, j)}{P_U(i) \cdot P_V(j)}.$$

- Взаимная информация измеряет долю информации, общей для обоих разбиений: насколько информация об одном из них уменьшает неопределенность относительно другого.
- $AMI \in [0; 1]$ - нормировка MI ; чем ближе к 1, тем более похожи разбиения.

ГОМОГЕННОСТЬ, ПОЛНОТА, V-МЕРА

Пусть H – энтропия: $H = -\sum_{i=1}^{|U|} P(i) \log P(i)$. Тогда

$$h = 1 - \frac{H(C|K)}{H(C)}, c = 1 - \frac{H(K|C)}{H(K)},$$

где K – результат кластеризации, C – истинное разбиение выборки на классы.

- h (гомогенность) измеряет, насколько каждый кластер состоит из объектов одного класса
- c (полнота) измеряет, насколько объекты одного класса относятся к одному кластеру

ГОМОГЕННОСТЬ, ПОЛНОТА, V-МЕРА

- Гомогенность и полнота принимают значения из отрезка $[0; 1]$. Большие значения соответствуют более точной кластеризации.

Эти метрики не нормализованы (как ARI и AMI), т.е. они зависят от числа кластеров!

- При большом числе кластеров и малом числе объектов лучше использовать ARI и AMI
- При более 1000 объектов и числе кластеров меньше 10 проблема не так сильно выражена, поэтому её можно игнорировать.

ГОМОГЕННОСТЬ, ПОЛНОТА, V-МЕРА

V-мера – учитывает и гомогенность и полноту, это их среднее гармоническое:

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

V-мера показывает, насколько два разбиения схожи между собой.

СИЛУЭТ (SILHOUETTE)

Не требует знания истинных меток! (значит, это внутренняя метрика качества кластеризации)

- Пусть a – среднее расстояние от объекта до всех объектов из того же кластера, b – среднее расстояние от объекта до объектов из ближайшего (не содержащего объект) кластера.
Тогда *силуэт данного объекта*:

$$s = \frac{b - a}{\max(a, b)}$$

- Силуэт выборки (S)* – средняя величина силуэта по объектам.
Силуэт показывает, насколько среднее расстояние до объектов своего кластера отличается от среднего расстояния до объектов других кластеров.

СИЛУЭТ (SILHOUETTE)

$$S \in [-1; 1].$$

- S близкий к -1 – плохие (разрозненные) кластеризации
- $S \approx 0$ – кластеры накладываются друг на друга
- S близкий к 1 – четко выраженные кластеры

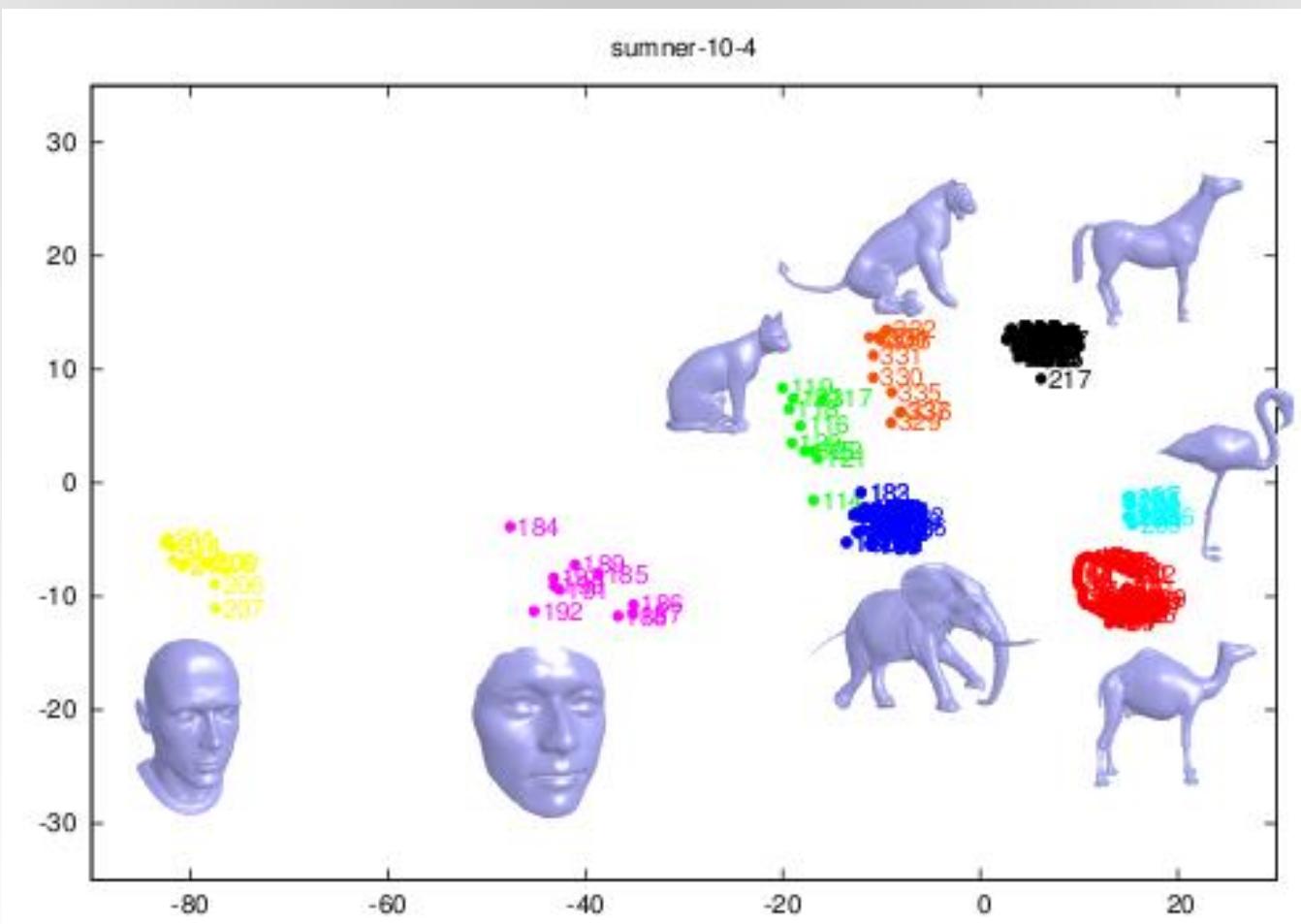
С помощью силуэта можно выбирать число кластеров k (если оно заранее неизвестно) – выбирается k , для которого метрика максимальна.

- Силуэт зависит от формы кластеров и достигает больших значений на более выпуклых кластерах.

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ

Задача визуализации состоит в отображении объектов в 2х- или 3хмерное пространство с сохранением отношений между ними.



MULTIDIMENSIONAL SCALING (MDS)

Идея метода – **минимизация квадратов отклонений между исходными и новыми попарными расстояниями:**

$$\sum_{i \neq j}^l (\rho(x_i, x_j) - \rho(z_i, z_j))^2 \rightarrow \min_{z_1, \dots, z_l}$$

↑
исходное
пространство

↑
новое
пространство

TSNE

t-SNE – t-distributed stochastic neighbor embedding

- При проекции нам важно не сохранение расстояний между объектами, а сохранение пропорций:

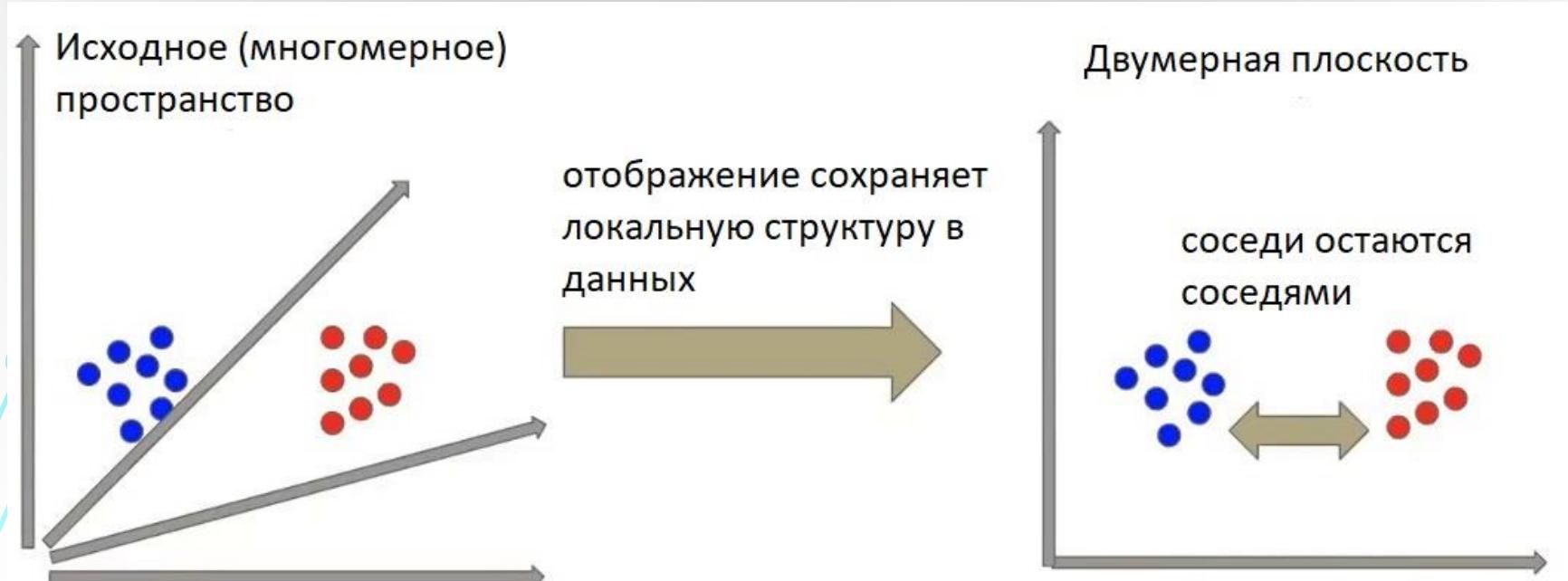
$$\rho(x_1, x_2) = \alpha \rho(x_1, x_3) \Rightarrow \rho(z_1, z_2) = \alpha \rho(z_1, z_3)$$

TSNE

t-SNE – t-distributed stochastic neighbor embedding

- При проекции нам важно не сохранение расстояний между объектами, а сохранение пропорций:

$$\rho(x_1, x_2) = \alpha \rho(x_1, x_3) \Rightarrow \rho(z_1, z_2) = \alpha \rho(z_1, z_3)$$



БЛИЗОСТЬ ОБЪЕКТОВ В ИСХОДНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

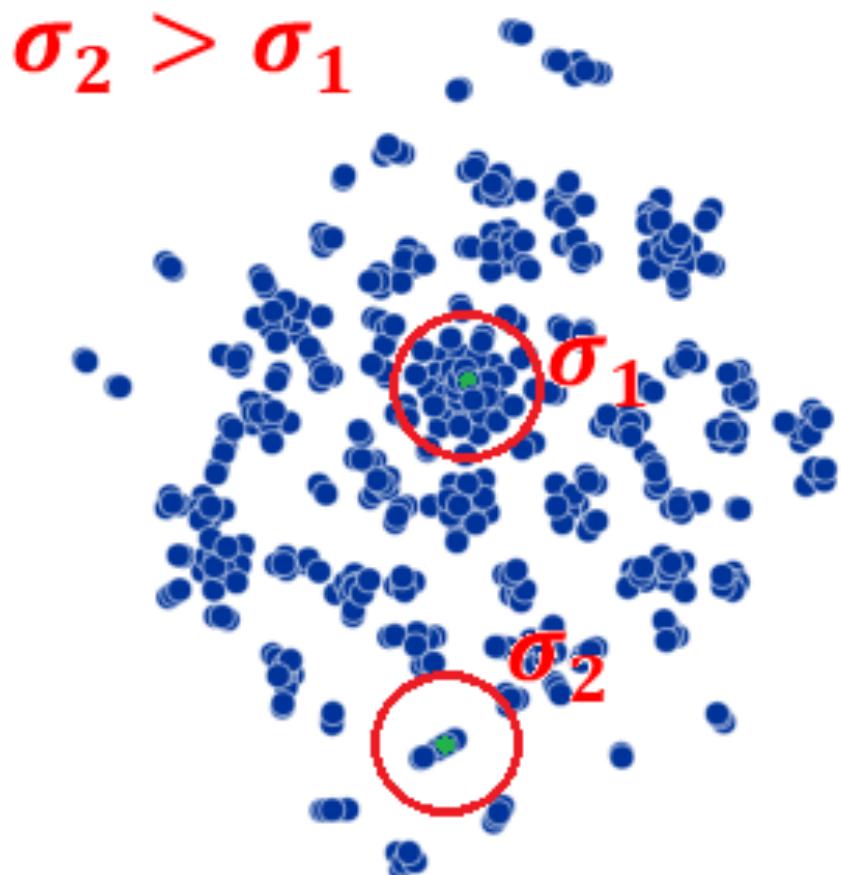
$$p(i|j) = \frac{\exp(-\|x_i - x_j\|^2 / 2\sigma_j^2)}{\sum_{k \neq j} \exp(-\|x_k - x_j\|^2 / 2\sigma_j^2)}$$

(затем симметризуем $p(i|j)$)

- объекты из окрестности x_j

приближаются нормальным
распределением

- чем кучнее объекты
из этой окрестности,
тем меньше берётся
значение σ_j^2



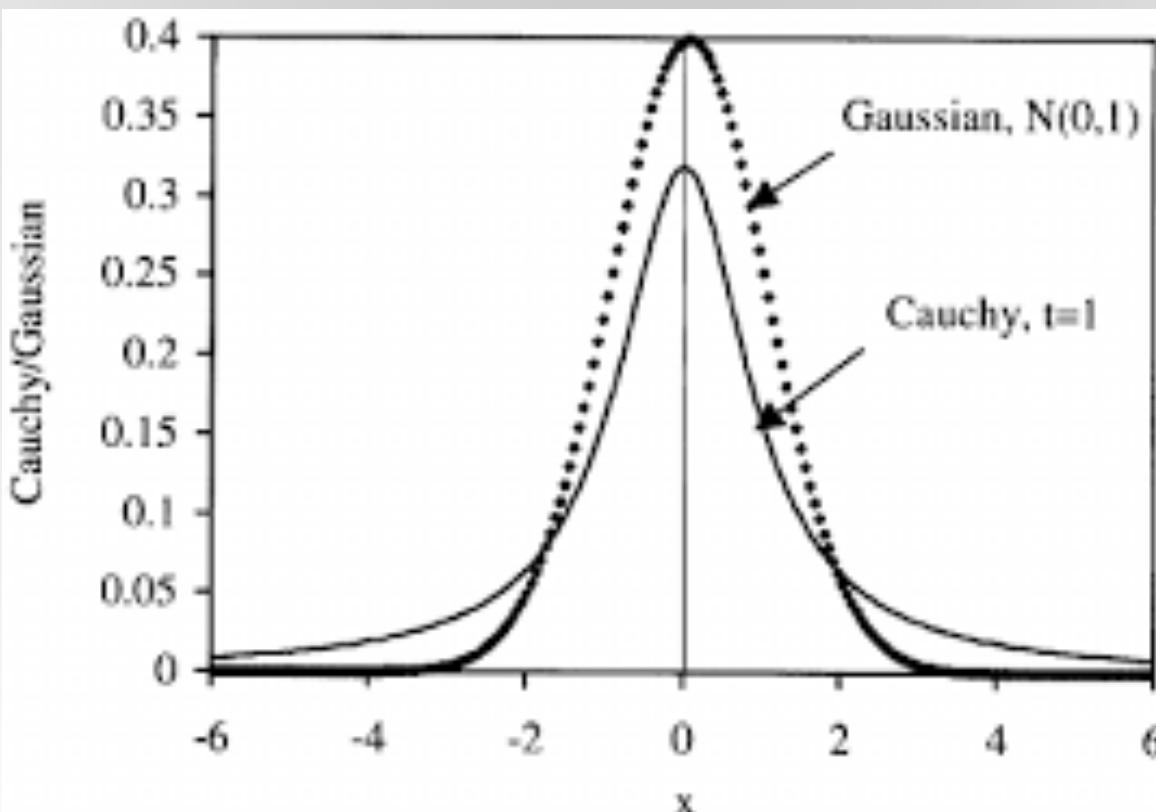
БЛИЗОСТЬ ОБЪЕКТОВ В НОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

- *В пространстве большой размерности можно разместить несколько объектов так, чтобы расстояния между ними были малы, но сохранить это свойство в низкоразмерном пространстве довольно сложно.*
- Будем измерять сходство объектов в новом пространстве с помощью распределения Коши, так как оно не так сильно штрафует за увеличение расстояний между объектами:

$$q_{ij} = \frac{\left(1 + \|z_i - z_j\|^2\right)^{-1}}{\sum_{k \neq j} \left(1 + \|z_k - z_j\|^2\right)^{-1}}$$

НОРМАЛЬНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ И РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КОШИ

- Будем измерять сходство объектов в новом пространстве с помощью распределения Коши, так как оно не так сильно штрафует за увеличение расстояний между объектами:



ОБУЧЕНИЕ TSNE

- Для построения проекций z_i объектов x_i будем минимизировать расстояние между исходным и полученным распределениями (минимизируем дивергенцию Кульбака-Лейблера).

$$KL(p||q) = \sum_{i \neq j} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ij}} \rightarrow \min_{z_1, \dots, z_l}$$

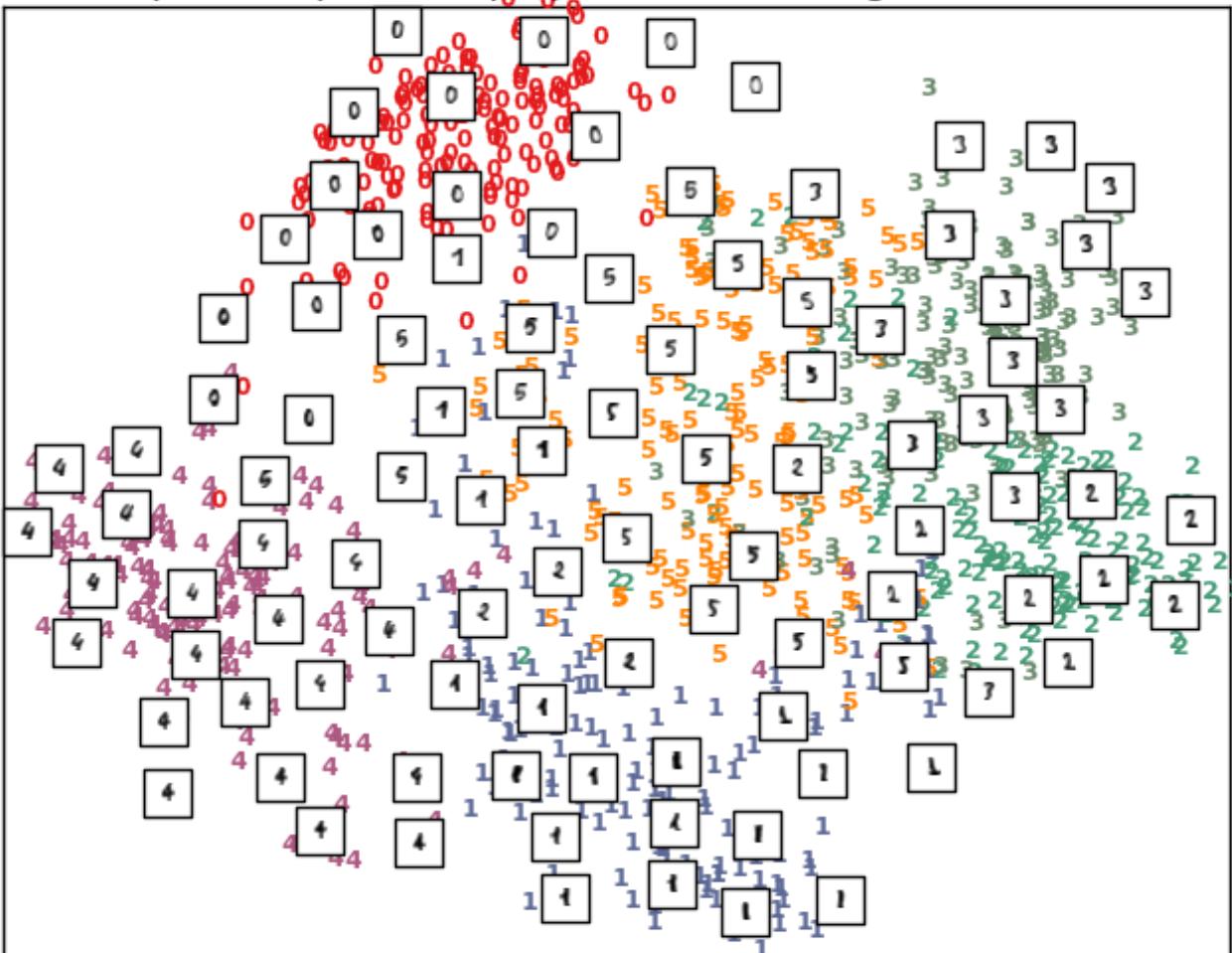
TSNE (ПРИМЕР)

- MNIST – датасет из различных написаний десятичных цифр, где каждая картинка размера 28x28.



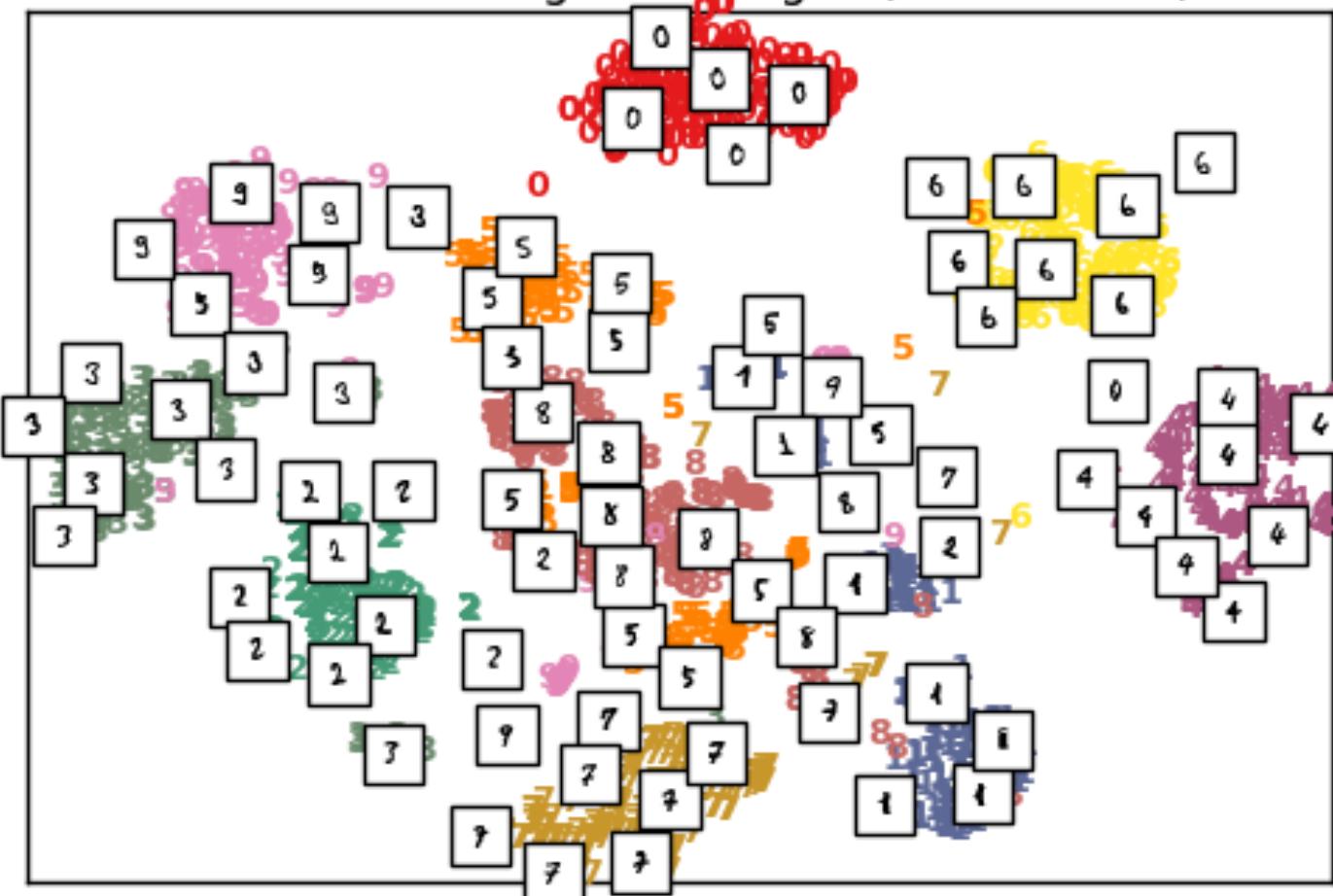
PCA (ПРИМЕР)

Principal Components projection of the digits (time 0.01s)



TSNE (ПРИМЕР)

t-SNE embedding of the digits (time 13.40s)



ВИЗУАЛИЗАЦИЯ РСА И TSNE

<http://projector.tensorflow.org/>