метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Матрицы расстояний, кластеризация и деревья решений

Г. Мороз

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Матрицы расстояний

Матрица расстояний — это матрица $n \times n$, которая содержит значения меры расстояния/сходства между объектами в метрическом пространстве. Существует уйма мер расстояния/сходства, выбор из которых зависит от типа данных. К сожалению, **не** существует универсального алгоритма выбора метода, так что это остается на откуп исследователям. Кроме того, схожие методы, зародившиеся в биологии, называют string metric: они определяют расстояния между строками (расстояние Хэмминга, расстояние Левинштейна и т. п.)

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Бинарные данные: коэффициент Жаккара

Компаративисты сравнивают языки на основе количества общих когнатов в списке Сводеша. Таким образом, для стословника составляются бинарные матрицы, которые отражают, какой когнат в каком идиоме встретился.

```
df <- data.frame(    Lithuanian =        c(1, 1, 1, 1, 0),
                     Latvian =           c(1, 1, 1, 0, 0),
                     Prussian =          c(1, 1, 0, 0, 0),
                     ChurchSlavonic =    c(0, 0, 0, 0, 1))
```

Для каждой пары идиомов строим таблицу сопряженности:

		идиом i	
		1	0
идиом j	1	a	b
	0	c	d

Коэффициент Жаккара расчитывается по формуле:

$$s(i,j) = \frac{a}{a+b+c} \qquad d(i,j) = \frac{b+c}{a+b+c}$$

В работе [Gower and Legendre 1986] есть и другие методы (14 шт.).

Большинство из них есть в функции dist.binary() пакета ade4.

Бинарные данные: коэффициент Жаккара

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

```
df <- data.frame(    Lithuanian =          c(1, 1, 1, 1, 0),
                     Latvian =             c(1, 1, 1, 0, 0),
                     Prussian =            c(1, 1, 0, 0, 0),
                     ChurchSlavonic =      c(0, 0, 0, 0, 1))
df <- t(df)          # кластеризации любят держать признаки в строках
dm <- dist(df, method = "binary")

dm                                                  # матрица расстояний
             Lithuanian     Latvian    Prussian
Latvian       0.2500000
Prussian      0.5000000   0.3333333
ChurchSlavonic 1.0000000  1.0000000  1.0000000
round(100*(dm))                                     # удобнее смотреть
             Lithuanian  Latvian  Prussian
Latvian              25
Prussian             50       33
ChurchSlavonic      100      100       100
```

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Небинарные категории: в бинарные

На основе WALS.

```
df <- data.frame(
    order = c("SVO "SOV "SVO "VOS"),
    gender = c("3 "0 "0 "0"),
    future = c("non.inflect "inflect "non.inflect "non.inflect"),
    row.names = c("English "Turkish "Estonian "Malagasy"))
df
```

	order	gender	future
English	SVO	3	non.infl
Turkish	SOV	0	infl
Estonian	SVO	0	non.infl
Malagasy	VOS	0	non.infl

```
model.matrix( ~. -1, data=df)
```

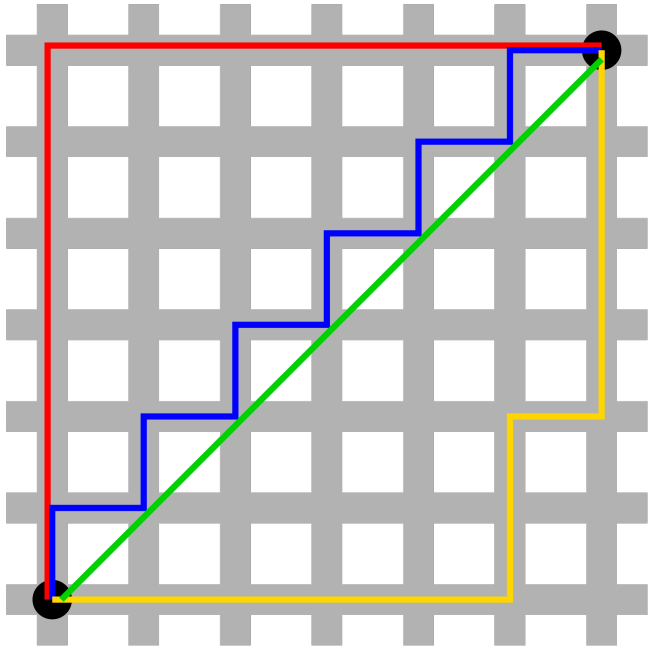
	orderSOV	orderSVO	orderVOS	gender3	futurenon.infl
English	0	1	0	1	1
Turkish	1	0	0	0	0
Estonian	0	1	0	0	1
Malagasy	0	0	1	0	1

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Числовые категории

Если категории числовые, то чаще всего используют:

- евклидово расстояние — method = "euclidean"
- расстояние городских кварталов — method = "manhattan"



Картинка из Википедии: зеленое — евклидово, остальные — манхэттенское.

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Смешанные категории

Для данных содержащих как числовые, так и категориальные данные используется алгоритм преложенный в работе [Gower 1971]. В целом, если в данных нет пропущенных значений, эта мера достаточно близка к евклидову расстоянию. В R она реализована функцией daisy пакета cluster. Вот пример на основе данных по количеству согласных и наличию абруптивных (график):

```
df <- read.csv("http://goo.gl/919qoS row.names = 1)
df <- df[sample(1:27, 5),]                          # выборка из данных

library(cluster)
dm <- daisy(df); dm                          # строит матрицу и вызывает ее

Dissimilarities :
            Japanese   Hawaiian    Lakota      Pomo
Hawaiian   0.15909091
Lakota     0.84090909 1.00000000
Pomo       0.75000000 0.90909091 0.09090909
Turkish    0.20454545 0.36363636 0.63636364 0.54545455
Metric : mixed ; Types = I, N
Number of objects : 5
```

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Метрики расстояний для строк

Для решения ряда проблем NLP было создано несколько метрик для измерения расстояний между строками. Для подсчета этих метрик в R есть несколько пакетов, я приведу примеры использования пакета stringdist. Наиболее популярные в лингвистике расстояния:

- Хэмминга # methood = "h"
- Левенштейна (см. визуализацию) # methood = "lv"
- косинусное # methood = "c"

```
library(stringdist)
str1 <- "мама"
str2 <- "папа"
stringdist(str1, str2, method = "h")
[1] 2

str3 <- "мама"
str4 <- c("папа", "рампа", "лада", "рама")
stringdist(str3, str4, method = "lv")
[1] 2 2 2 1
```

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Способы уменьшения размерностей?

- регрессионный анализ
- кластеризация
- многомерное шкалирование (multidimensional scaling)
- компонентный анализ (principal component analysis)

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

heatmap

Как обычно, есть несколько способов визуализации:

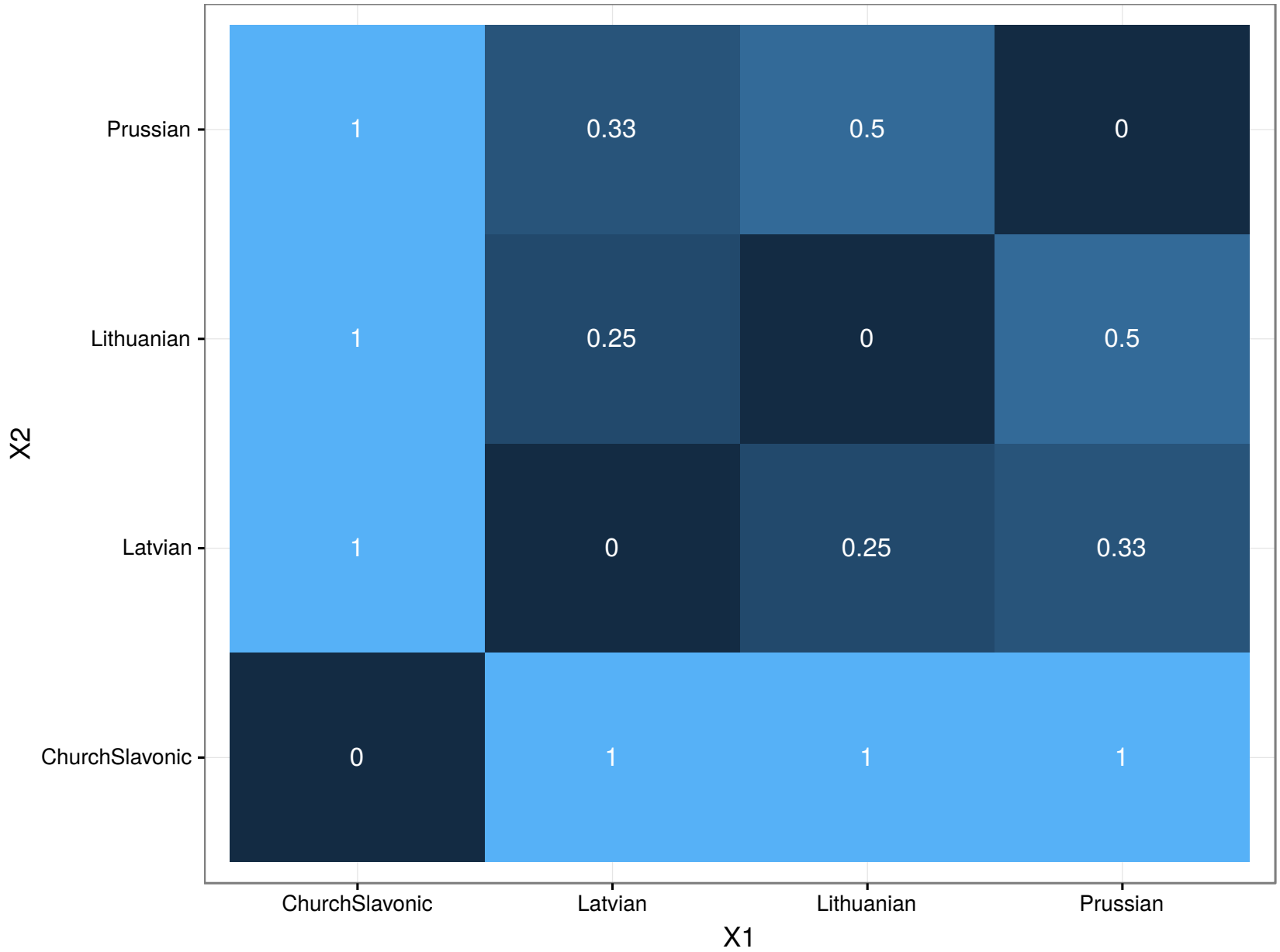
- в Rbase есть функция heatmap(), но ее настройка — сплошное мучение
- в ggplot2 есть geom_tile()

Обе функции принимают на вход матрицы, так что результат работы функции dist()надо трансформировать:

```
df <- data.frame(    Lithuanian =          c(1, 1, 1, 1, 0),
                     Latvian =             c(1, 1, 1, 0, 0),
                     Prussian =            c(1, 1, 0, 0, 0),
                     ChurchSlavonic =      c(0, 0, 0, 0, 1))
df <- t(df)             # кластеризации любят держать признаки в строках
dm <- as.matrix(dist(df, method = "binary"))
```

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

heatmap: ggplot



метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

heatmap: ggplot

```
df <- data.frame(    Lithuanian =          c(1, 1, 1, 1, 0),
                     Latvian =             c(1, 1, 1, 0, 0),
                     Prussian =            c(1, 1, 0, 0, 0),
                     ChurchSlavonic =      c(0, 0, 0, 0, 1))
df <- t(df)          # кластеризации любят держать признаки в строках
dm <- as.matrix(dist(df, method = "binary"))        # считает расстояния

library(reshape)
dm.m <- melt(dm)                    # преобразования матрицы для ggplot


library(ggplot2)
ggplot(dm.m, aes(X1, X2, fill=value)) +
        geom_tile()+                                          # делает heatmap
        geom_text(aes(X1, X2, label = round(value, 2)), # пишет значения
                  color = "white", size = 4)
```

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Кластеризация

Кластеризация — это не метод, а задача, для решение которой придумано множество алгоритмов. Не существует "правильных"методов кластеризации, так как "clustering is in the eye of the beholder"[Estivill-Castro 2002]. В презентации рассказывается о представителях двух семейств алгоритмов:

- метод k-средних (k-means)
- иерархическая кластеризация (hierarchical clustering)

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Алгоритм k-means

Алгоритм k-means был разработан в статье [Lloyd 1982]:

- на вход алгоритму подаются данные и k — количество кластеров, на которые эти данные надо поделить;
- произвольно выбираются k точек (центроидов) и рассчитываются ближайшие расстояния (евклидово) от данных точек до центроидов, точки которые ближе всего к некоторому центроиду образуют кластер;
- на основе точек вошедших в кластер строится новый центроид, так чтобы расстояние от всех точек до нового центроида было минимально;
- часть точек становится ближе к новому центроиду и входят в его кластер, а часть от центроида отдаляется и начинают входить в другой/другие кластер/кластеры;
- ... все это повторяется, пока на некоторой итерации не происходит изменение положения центроидов.

Naftali Harris сделал визуализация k-means.

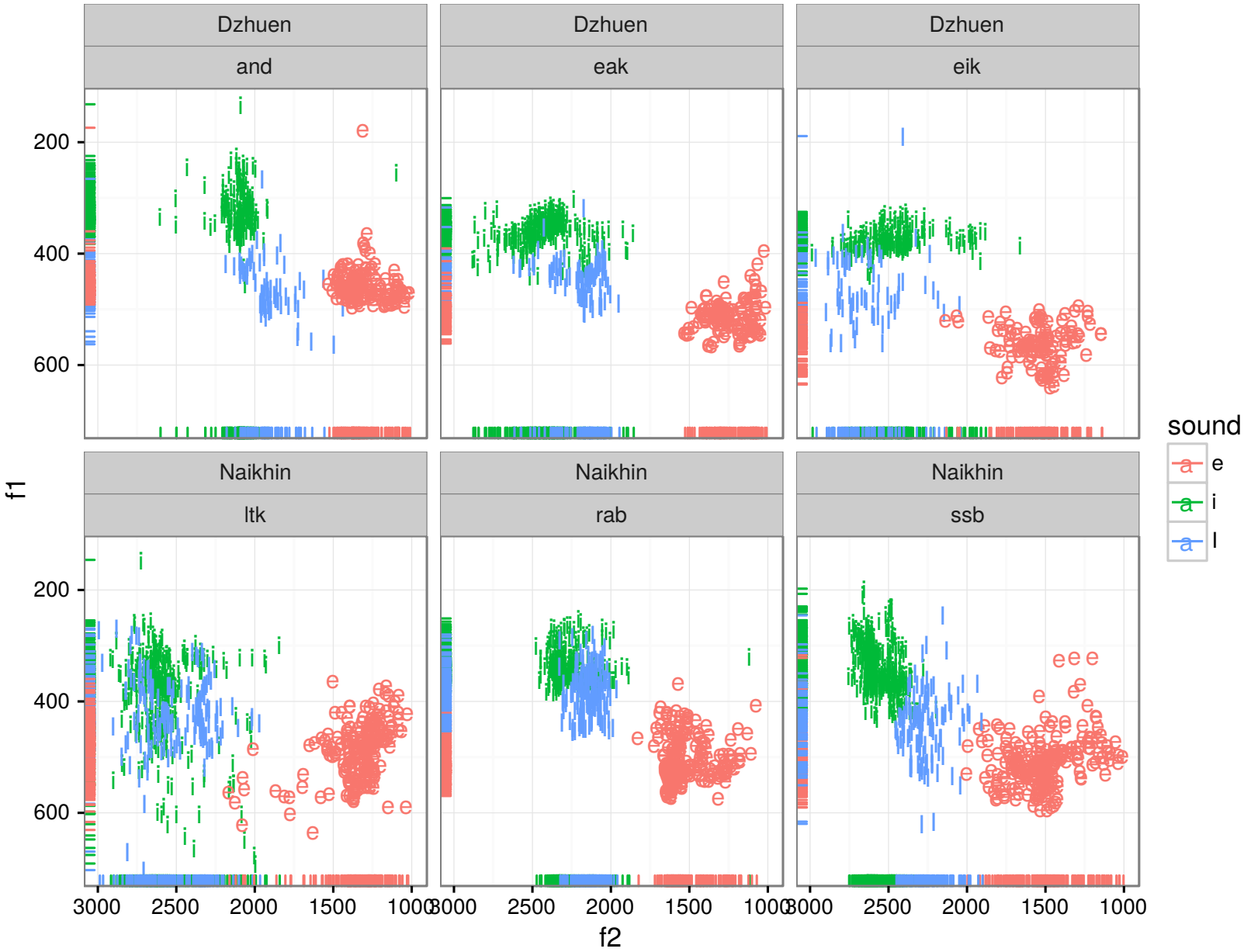
метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Задача

В описании нанайского языка есть гласные i, ɪ и ə (в данных закодированы i, I, e соответственно), однако совсем не понятно, одинаково ли произносят гласные i и ɪ современные носители. В датасет записаны F1 и F2 этих трех гласных, произнесенных в нанайских словах шестью нанайцами из двух селений Найхин и Джуен. Если F1 и F2 достаточно для описания разницы между этими гласными, то тогда они должны кластеризоваться.

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Задача



метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

k-means

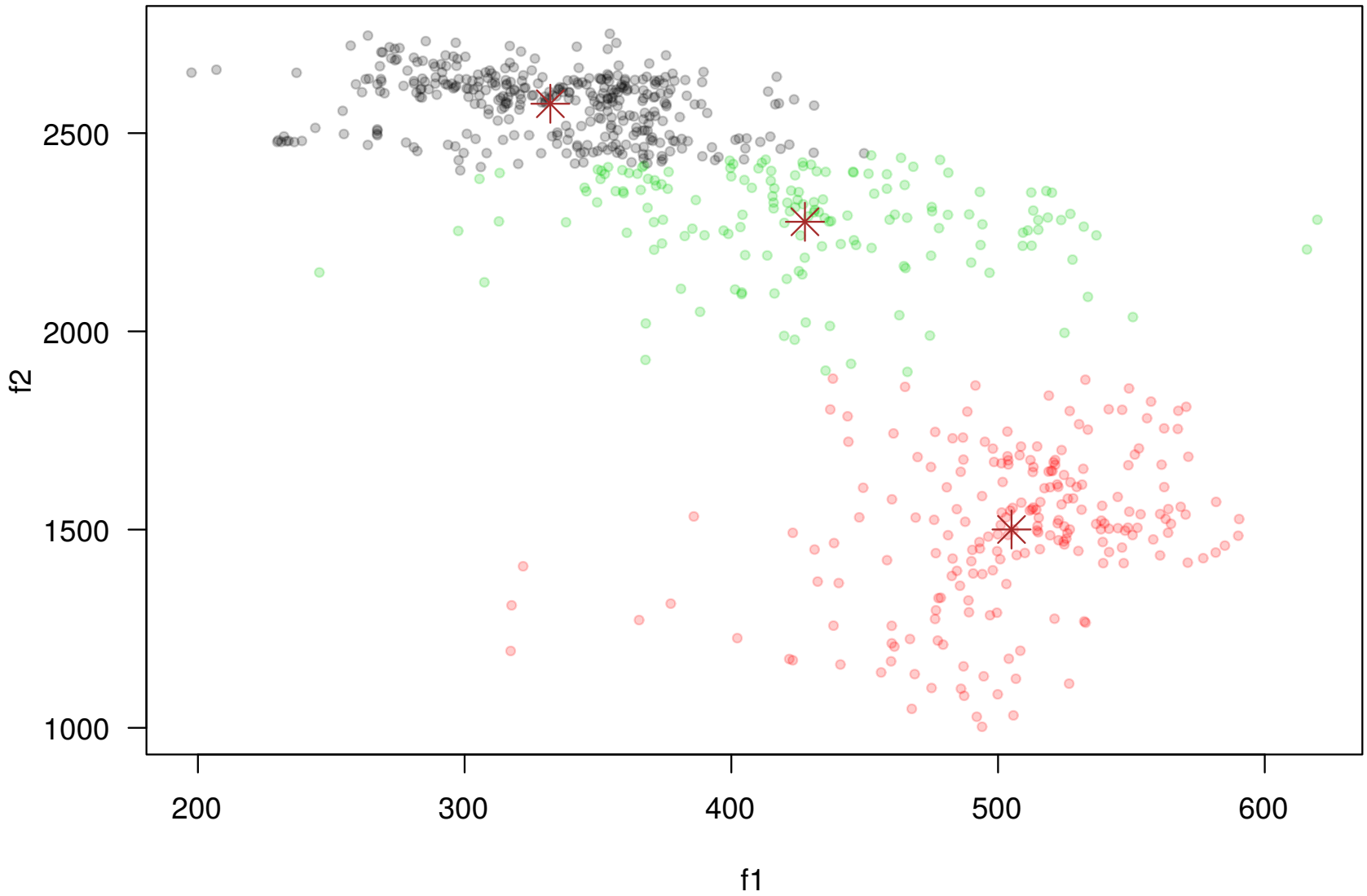
Нашим примером будет носитель ssb:

```
n <- read.csv("http://goo.gl/YPMyl2", sep = ";")
n <- n[n$dictor == "ssb",]

dm <- dist(n[, c(5,6)])
set.seed(5)     # устанавливаем определенное значение рандомизатора
n.cl <- kmeans(dm, centers = 3)                                  # датафрейм, k
n.cl$cluster                                                  # кластер каждой точки
n.cl$centers                                                 # координаты центроидов
```

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

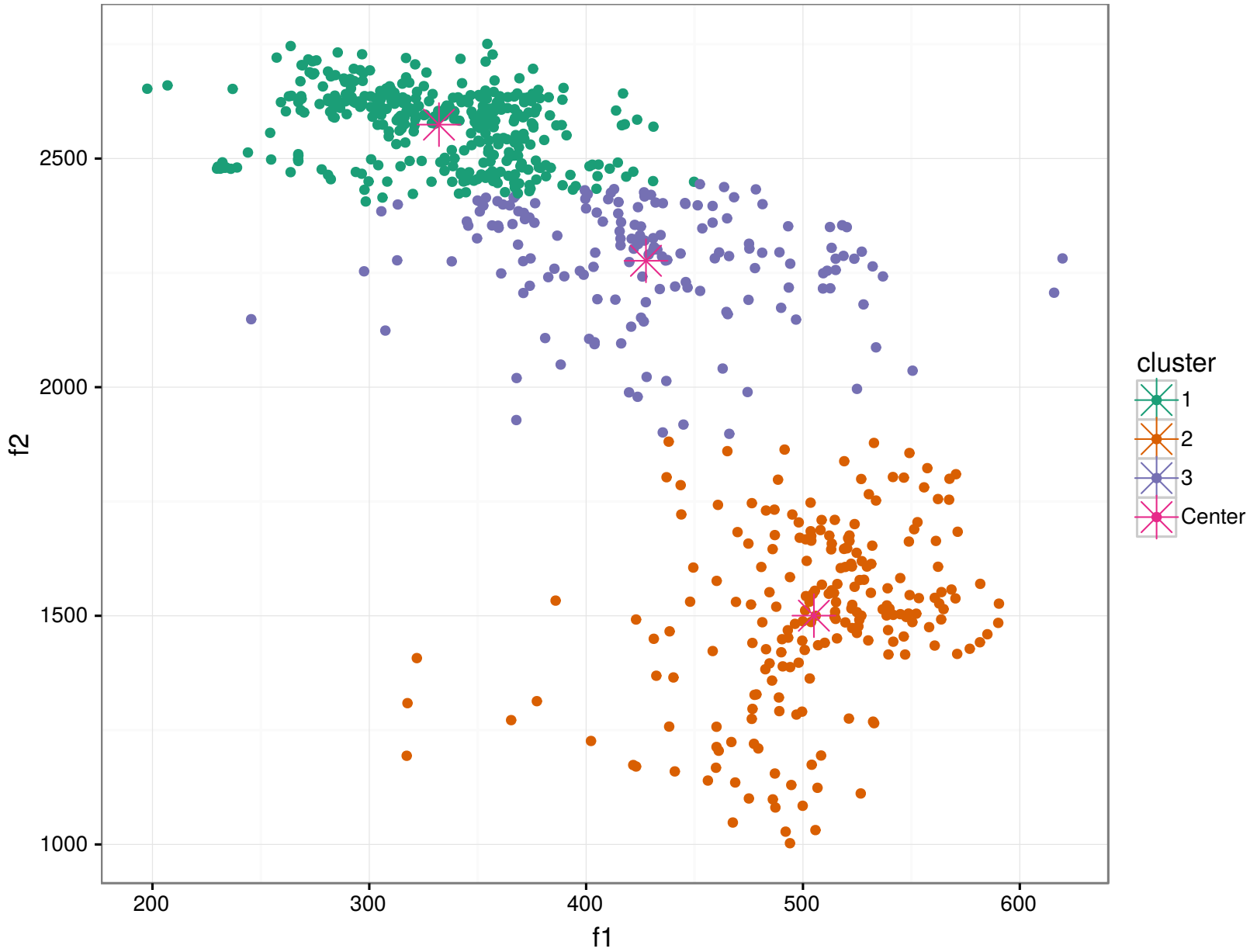
Визуализация *k*-means: R-base




```
plot(n[, c(5,6)],                                   # данные
     col = n.cl$cluster)                            # раскрашиваем по кластеру
points(n.cl$centers, col = "brown", pch = 8, cex = 2)   # центроиды
```

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Визуализация *k*-means: ggplot2



Визуализация *k*-means: ggplot2

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

```
n$cluster <- factor(n.cl$cluster)          # добавляет кластеризацию в дф
centers <- as.data.frame(n.cl$centers)       # создает дф с центроидами

library(ggplot2)
ggplot(data=n, aes(x=f1, y=f2, color=cluster)) +
    geom_point() +
    geom_point(data=centers, aes(x=f1,y=f2, color='Center'),
               shape = 8, size = 5)
```

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

k-means: продолжение

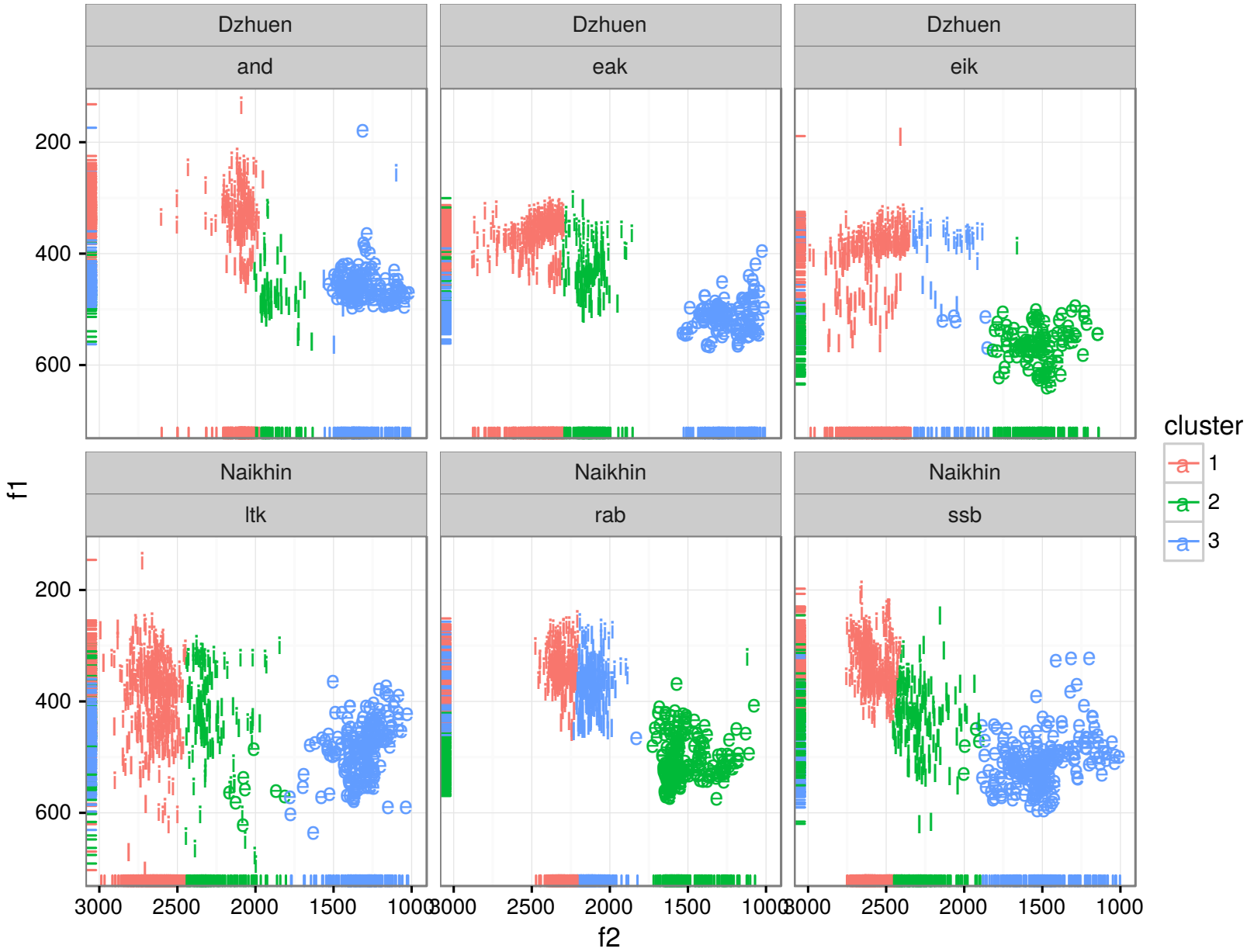
И что дальше? В наших данных есть информация о произнесениях, так что можно сравнить (следующий слайд) результат работы k-means (обозначено цветом) с тем, что ожидалось в данных словах (обозначено буквой) и посмотреть сколько раз *k*-means ошибся (слайд через один):

	and	eak	eik	ltk	rab	ssb
correct	393	426	278	515	549	682
mistaken	27	61	99	148	102	43

	and	eak	eik	ltk	rab	ssb
correct	0.94	0.87	0.74	0.78	0.84	0.94
mistaken	0.06	0.13	0.26	0.22	0.16	0.06

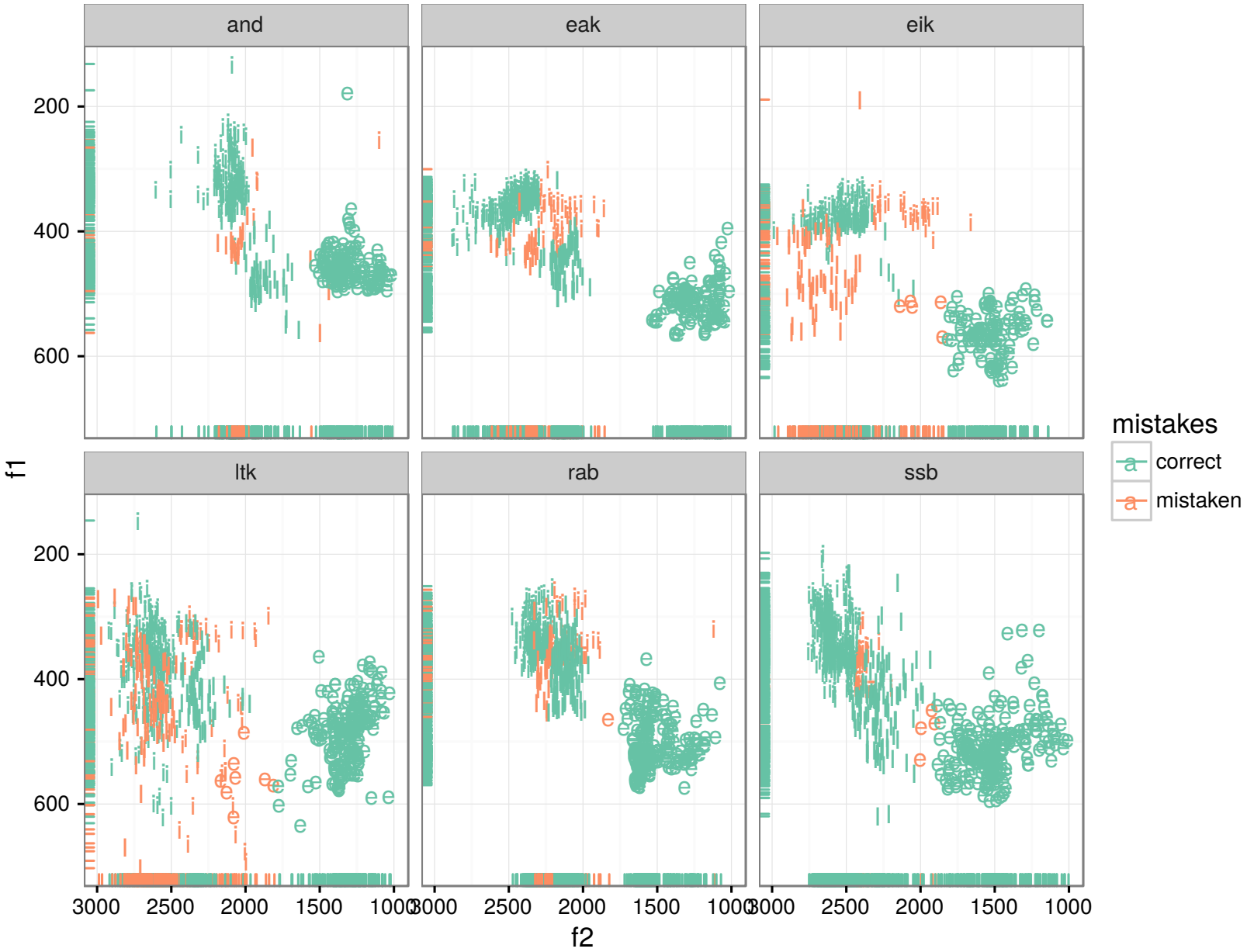
метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Кластеры *k*-means



метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Ошибки алгоритма *k*-means



метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Иерархическая кластеризация

Иерархические кластеризации имеют два типа:

- **снизу вверх (agglomerative)**: каждое наблюдение в начальной позиции является кластером, дальше два ближних кластера соединяются в один, а дендограмма отображает порядки таких соединений.
- **сверху вниз (divisive)**: все наблюдения в начальной позиции являются кластером, который дальше делится на более мелкие, а дендограмма отображает порядки таких разъединений.

Алгоритмы иерархической кластеризации требуют на вход матрицы расстояний. Алгоритмов кластерного анализа очень много, так что имеет смысл заглянуть в работу [Gordon 1987] и на страницу CRAN.

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Иерархическая кластеризация

Нашим примером снова будет носитель ssb:

```
n <- read.csv("http://goo.gl/YPMyl2", sep = ";")
n <- n[n$dictor == "ssb",]
```

Функция hclust принимает на вход матрицу расстояний:

```
hc <- hclust(dist(n[,c(5,6)]))                # agglomerative clustering
plot(hc)                                      # график получившихся кластеров
plot(hc, labels = F)                          # график без подписей
rect.hclust(hc, k=3)                          # выделить k кластеров
```

Функция cutree возвращает вектор номеров кластеров в соответсвтии с данными, так что можно строить все предыдущие графики:

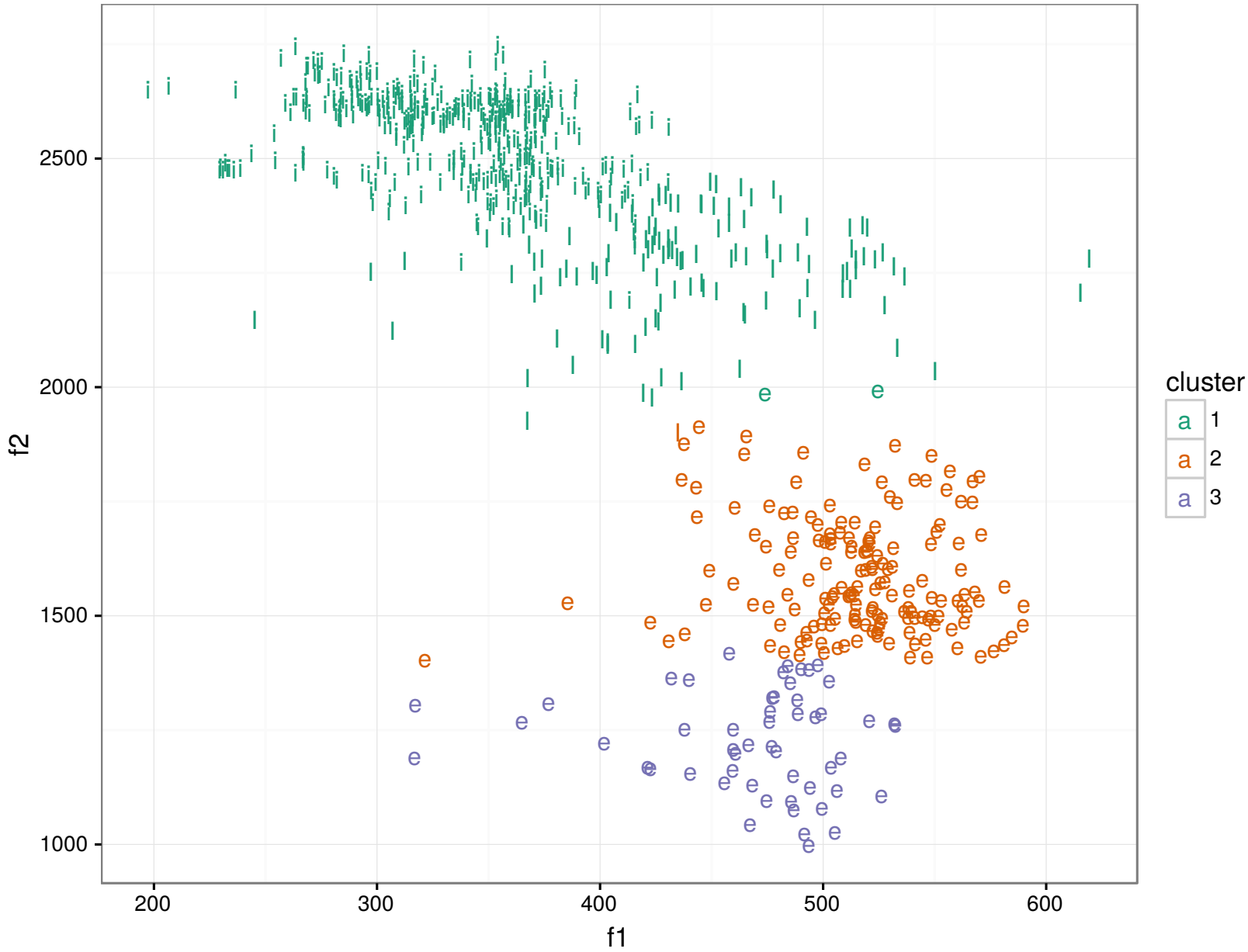
```
cluster <- cutree(hc, k=3)
```

	and	eak	eik	ltk	rab	ssb
correct	393	345	234	478	494	439
mistaken	27	142	143	185	157	286

	and	eak	eik	ltk	rab	ssb
correct	0.94	0.71	0.62	0.72	0.76	0.61
mistaken	0.06	0.29	0.38	0.28	0.24	0.39

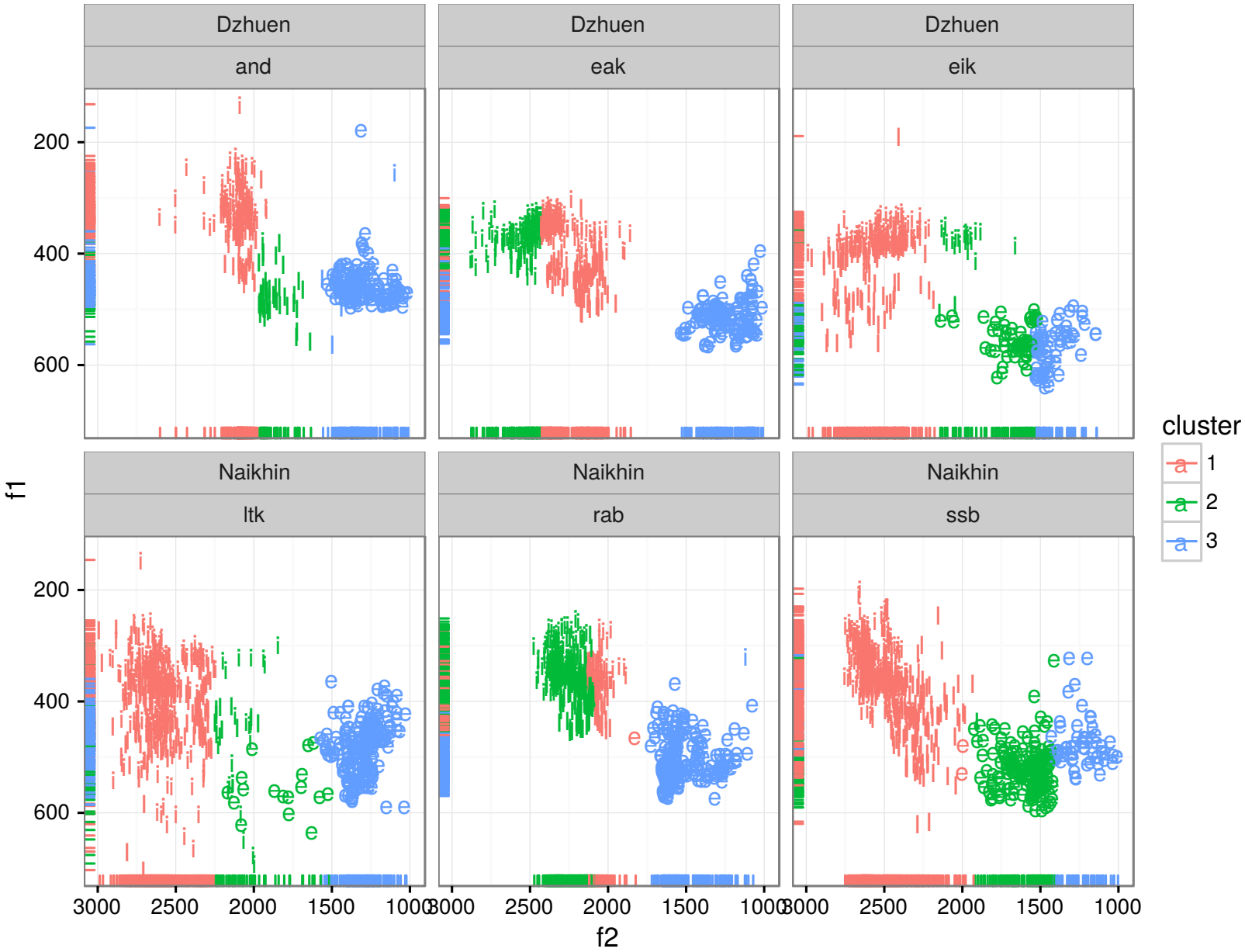
метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Иерархическая кластеризация



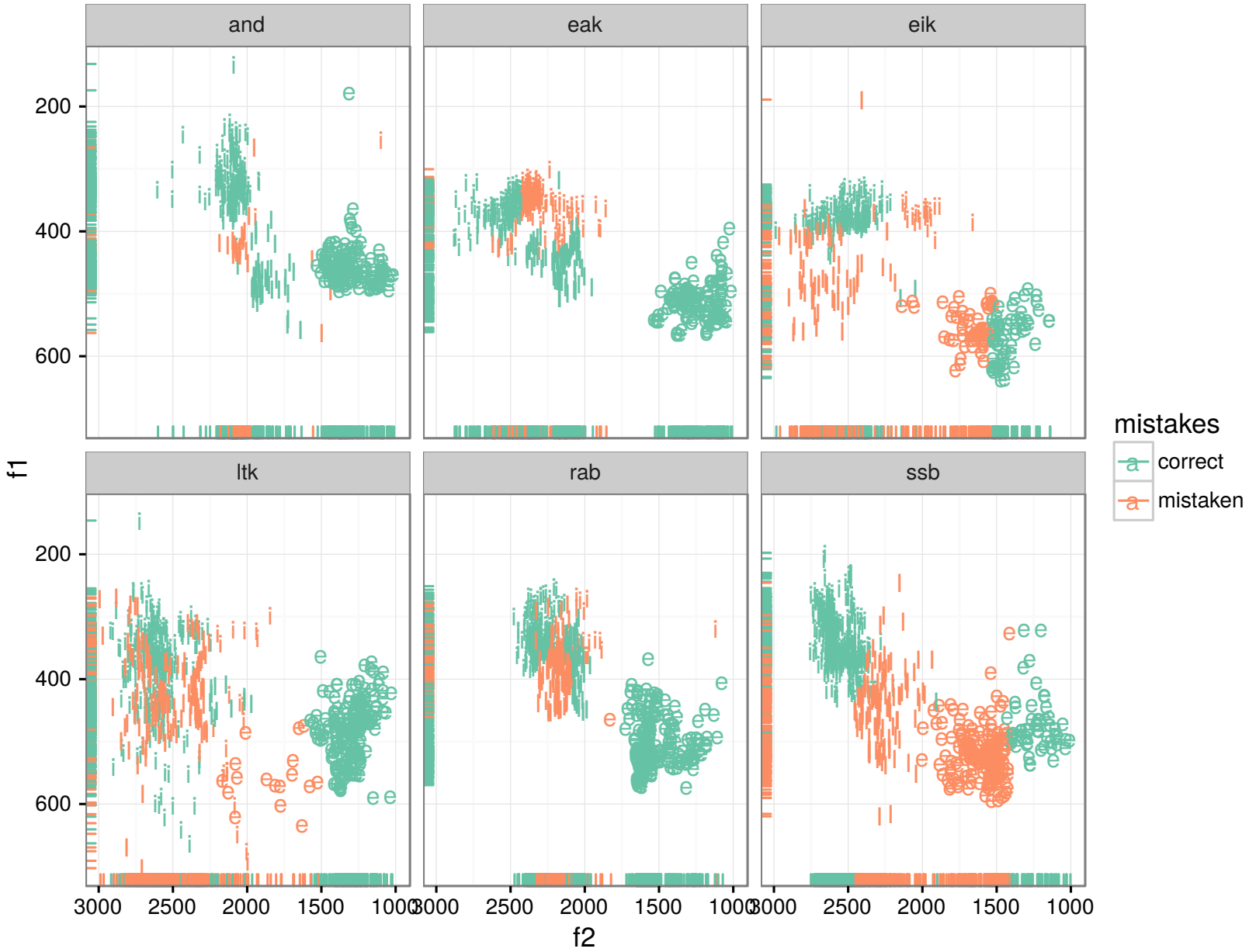
метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Кластеры иерархическая кластеризации



метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Ошибки алгоритма иерархической кластеризации



презентация доступна: http://goo.gl/dqocQt

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Проблемы приведенных методов

- *k*-means может давать разные результаты на одних и тех же данных
- при использовании *k*-means нужно знать k
- иерархическая кластеризация не может исправить ошибки, сделанные на предыдущих шагах: в работе [Hawkins 1982] приводится пример вектора c(-2.2, -2, -1.8, -0.1, 0.1, 1.8, 2, 2.2), в котором очевидны три кластера, однако если на первом этапе алгоритм разобьет все на c(-2.2, -2, -1.8, -0.1) и c(0.1, 1.8, 2, 2.2), то дальше это исправлено не будет.

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

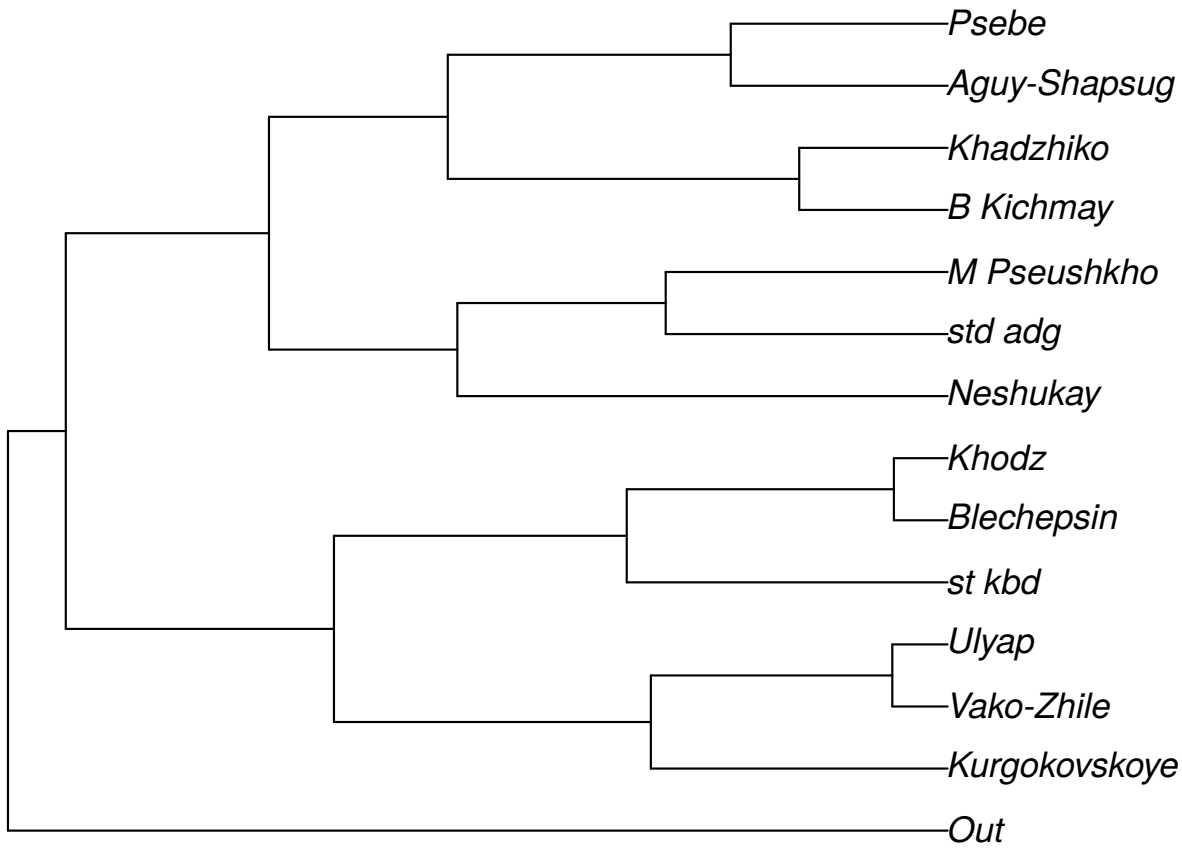
Дендрограммы

Дендрограммой обычно называют граф, отображающий некоторые расстояния между единицами. Существует достаточно много методов построения графов на основе матрицы расстояний, напрямую связанный с используемым методом кластеризации. Надо отметить, что дендрограмма это всего лишь **семейство визуализаций матрицы расстояний.** Примером для построения дендрограмм послужат данные фонетических особенностей адыгских идиомов:

```
ad <- read.csv("http://goo.gl/Rj92fh")
rownames(ad) <- ad[,1]
ad.d <- dist(ad, method = "binary")
ad.c <- hclust(ad.d)
library(ape)
ad.c <- as.phylo(ad.c)                    # этот формат лучше воспринимается
plot(ad.c, type = "phylogram")
```

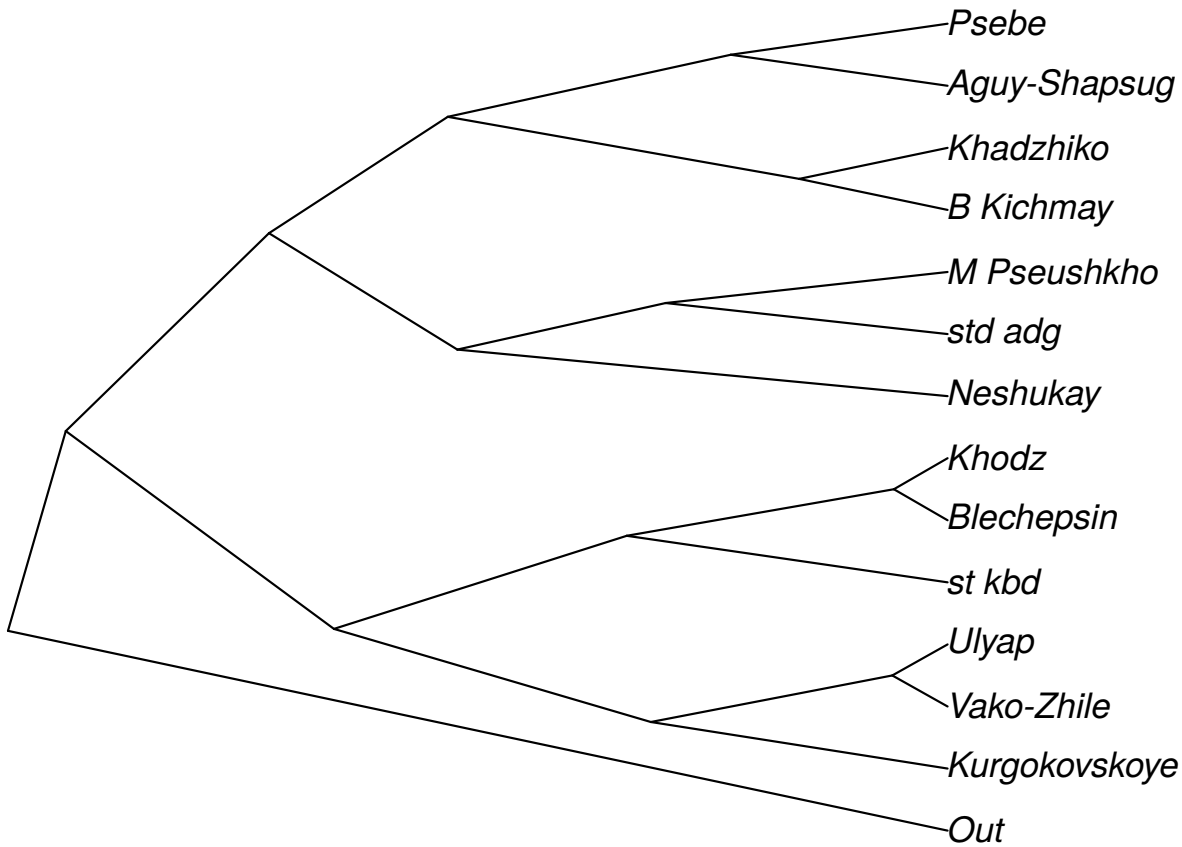
метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Дендрограммы: type = "phylogram"



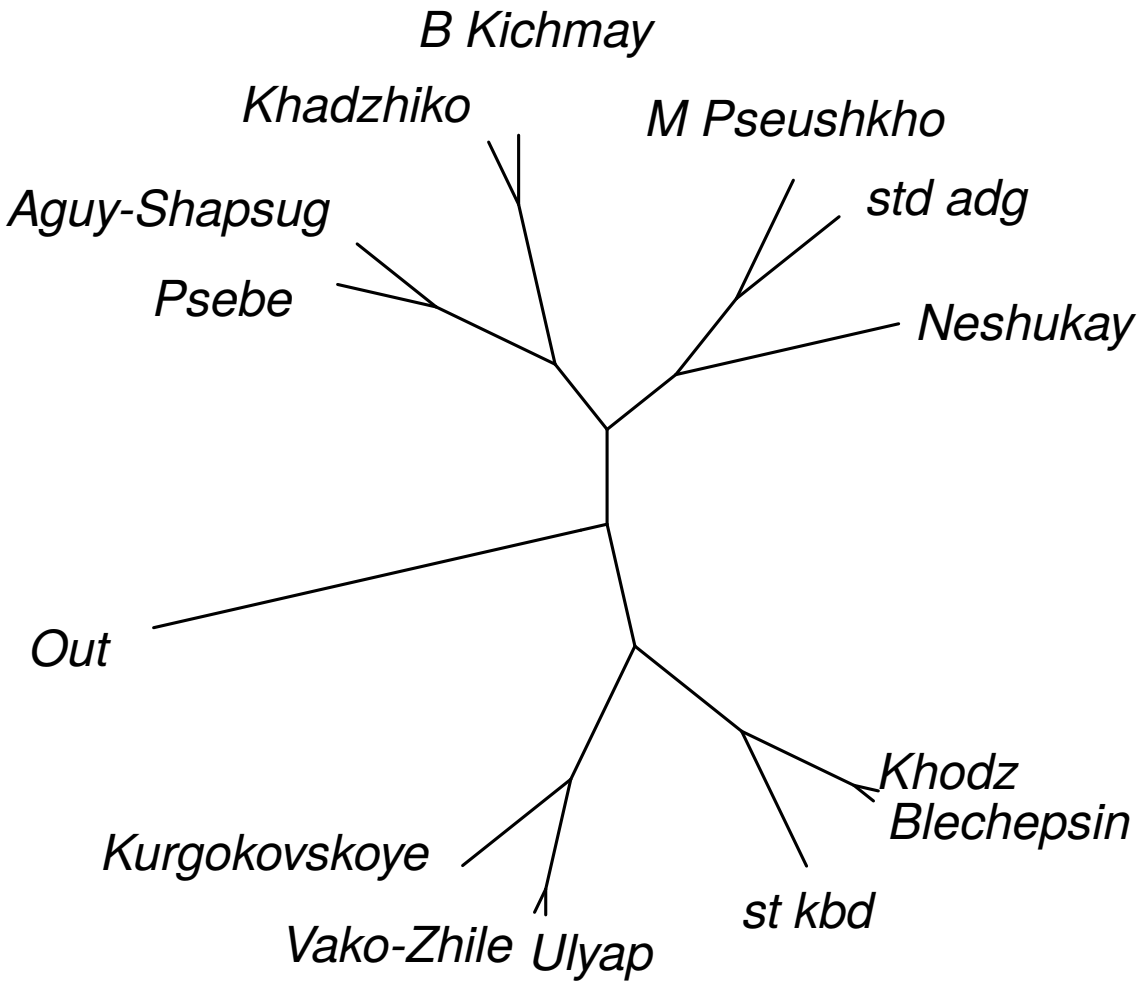
Дендрограммы: type = "cladogram"

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений



Дендрограммы: type = "unrooted"

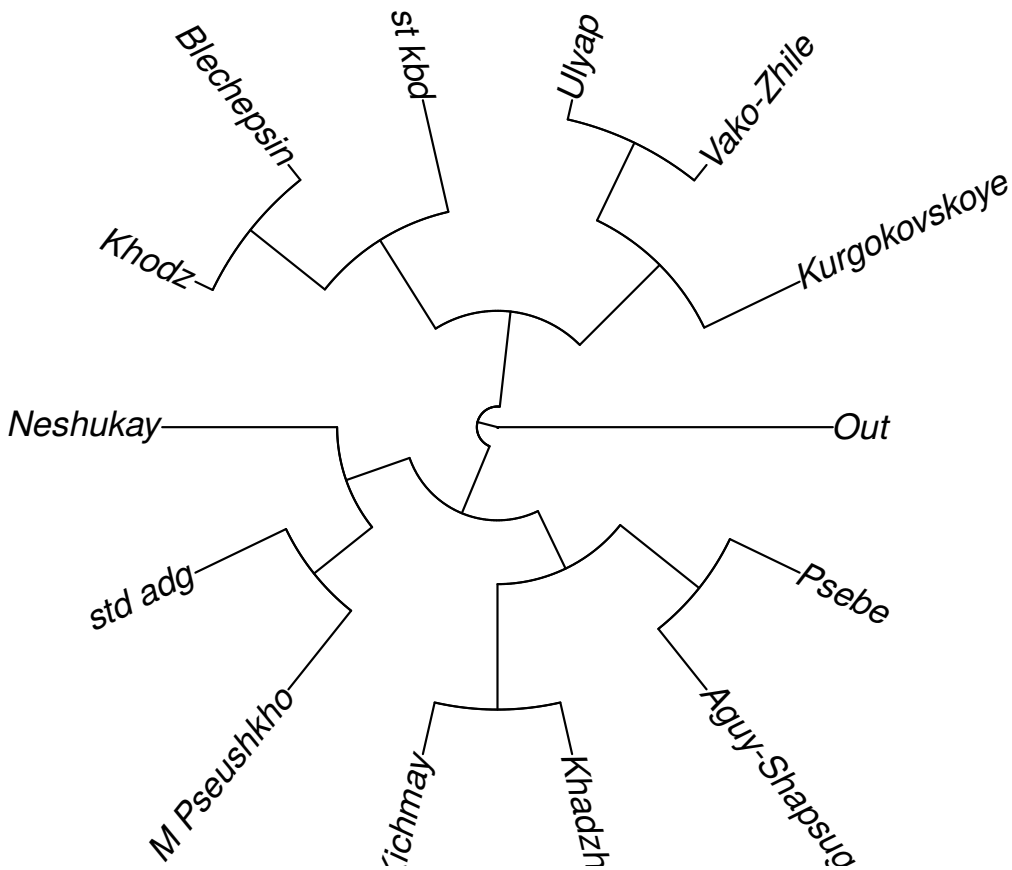
метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений



Плохо работает, нужно доводить руками.

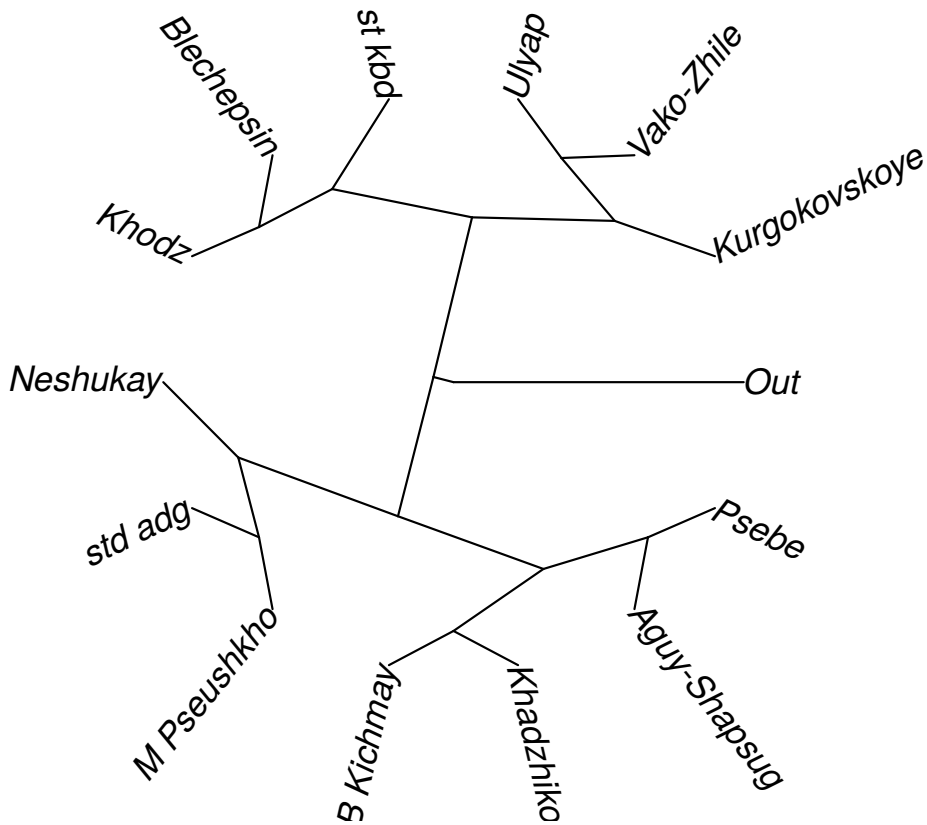
метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Дендрограммы: type = "fan"



метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Дендрограммы: type = "radial"



метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Деревья решений

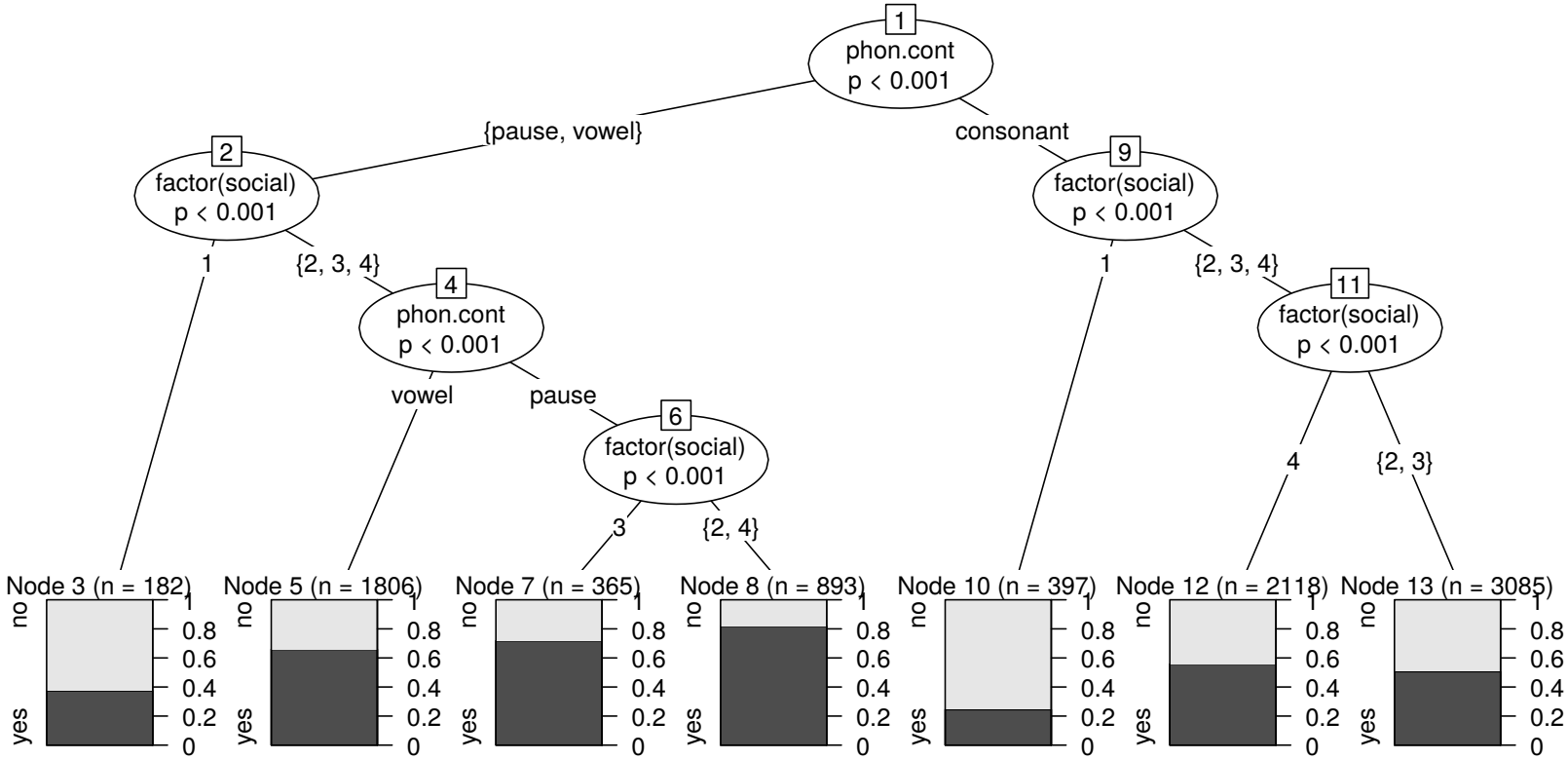
Достаточно популярным средством построения моделей является дерево решений. В узлах дерева пишутся условия, ограничивающие предикторы, на ребрах записываются значения предикторов, а на листьях дерева записаны значения предсказываемой переменной. Деревья решений позволяют решать как задачи регрессии, так и классификации.

pro	ДР легко интерпретировать	contra	Даже незначительные изменения в обучающих данных могут привести к значительной перестройке модели
pro	ДР могут работать с переменными любого типа		
pro	ДР автоматически подбирают модель, учетывая взаимодействия	contra	Невысокая предсказательная точность

Для преодоления недостатков можно использовать **случайные леса (random forest)** и другие ансамбли деревьев.

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Деревья решений




```
df <- read.csv("http://goo.gl/NwbKsN")
df$social <- factor(df$social)     # внимание! числовой vs. номинативный

library(party)
fit <- ctree(s.deletion~phon.cont+social, data=df)
plot(fit)
```

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Спасибо за внимание

Пишите письма

agricolamz@gmail.com

презентация доступна: http://goo.gl/dqocQt

метрики расстояний
метрики расстояний
heatmap
методы кластеризации
k-means
hierarchical
проблемы
дендрограммы
валидация кластеров
деревья решений

Список литературы

Estivill-Castro, V. (2002). Why so many clustering algorithms: a position paper. ACM SIGKDD explorations newsletter 4(1), 65--75.

Gower, J. C. (1971). A general coefficient of similarity and some of its properties. Biometrics, 857--871.

Gower, J. C. and P. Legendre (1986). Metric and euclidean properties of dissimilarity coefficients. Journal of classification 3(1), 5--48.

Hawkins, D. M. (1982). Topics in applied multivariate analysis, Volume 1. Cambridge University Press.

Lloyd, S. P. (1982). Least squares quantization in pcm. Information Theory, IEEE Transactions on 28(2), 129--137.