



ТЕХНОСФЕРА

Лекция 3 Алгоритмы кластеризации

Николай Анохин

7 октября 2014 г.

Задача кластеризации

Дано. N обучающих D -мерных объектов $\mathbf{x}_i \in \mathcal{X}$, образующих тренировочный набор данных (training data set) X .

Найти. Модель $h^*(\mathbf{x})$ из семейства параметрических функций $H = \{h(\mathbf{x}, \theta) : \mathcal{X} \times \Theta \rightarrow \mathbb{N}\}$, ставящую в соответствие произвольному $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ один из K кластеров так, чтобы объекты внутри одного кластера были похожи, а объекты из разных кластеров различались.

Что мы уже изучили

- ▶ Maximum Likelihood principle
- ▶ Expectation Maximization & Gaussian Mixture
- ▶ K-Means и модификации
- ▶ Различные виды функций расстояния/схожести

План занятия

Байесовская кластеризация

Иерархическая кластеризация

DBSCAN

Выбор количества кластеров

MAP

Maximum A-Posteriori

сформулировать MAP принцип

Предположения

1. Количество кластеров K задано
2. Априорные вероятности кластеров заданы $P(c_j)$, $\forall j \in 1, \dots, K$
3. Распределение \mathbf{x} в зависимости от кластера c_j и параметров θ_j известны $p(\mathbf{x}|c_j, \theta_j)$
4. Априорное распределение параметров $p(\theta)$ задано
5. Дан обучающий набор данных \mathcal{D} , состоящий из n объектов \mathbf{x} , независимо выбранных из распределения

$$p(\mathbf{x}|\theta) = \sum_{j=1}^K P(c_j) p(\mathbf{x}|c_j, \theta_j)$$

Байесовская кластеризация

Дано. $P(c_j)$, $p(\mathbf{x}|c_j, \theta_j)$, $p(\theta)$, $p(\mathbf{x}|\theta)$

Найти. $p(c_j|\mathbf{x})$

$$\begin{aligned} p(c_j|\mathbf{x}, \mathcal{D}) &= \frac{p(c_j|\mathcal{D})p(\mathbf{x}|c_j, \mathcal{D})}{\sum_{i=1}^K p(c_i|\mathcal{D})p(\mathbf{x}|c_i, \mathcal{D})} = \\ &= \frac{P(c_j) \int p(\mathbf{x}|c_j, \theta_j)p(\theta|\mathcal{D})d\theta}{\sum_{i=1}^K P(c_i) \int p(\mathbf{x}|c_i, \theta_i)p(\theta|\mathcal{D})d\theta} = \end{aligned}$$

Неизвестно. $p(\theta|\mathcal{D})$

Апостериорное распределение параметров

Дано. $P(c_j)$, $p(\mathbf{x}|c_j, \theta_j)$, $p(\theta)$, $p(\mathbf{x}|\theta)$

Найти. $p(\theta|\mathcal{D})$

$$\begin{aligned} p(\theta|\mathcal{D}) &= \frac{p(\theta)p(\mathcal{D}|\theta)}{\int p(\theta)p(\mathcal{D}|\theta)d\theta} = \\ &= \frac{p(\theta) \prod_{k=1}^n p(\mathbf{x}_k|\theta)}{\int p(\theta) \prod_{k=1}^n p(\mathbf{x}_k|\theta)d\theta} \end{aligned}$$

Итеративное обновление θ

$$p(\theta|\mathcal{D}^n) = \frac{p(\mathbf{x}_n|\theta)p(\theta|\mathcal{D}^{n-1})}{\int p(\mathbf{x}_n|\theta)p(\theta|\mathcal{D}^{n-1})d\theta}$$

Байесовская кластеризация

плюсы-минусы

Иерархическая кластеризация: идея метода

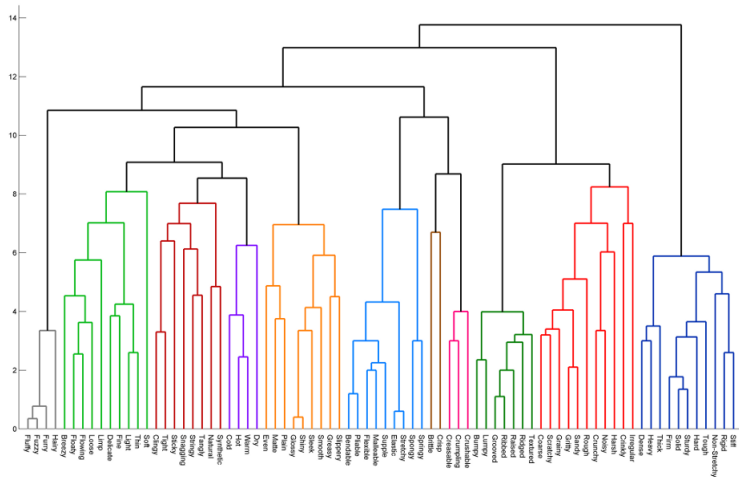
Agglomerative

1. начинаем с ситуации, когда каждый объект – отдельный кластер
2. на каждом шаге совмещаем два наиболее близких кластера
3. останавливаемся, когда получаем требуемое количество или единственный кластер

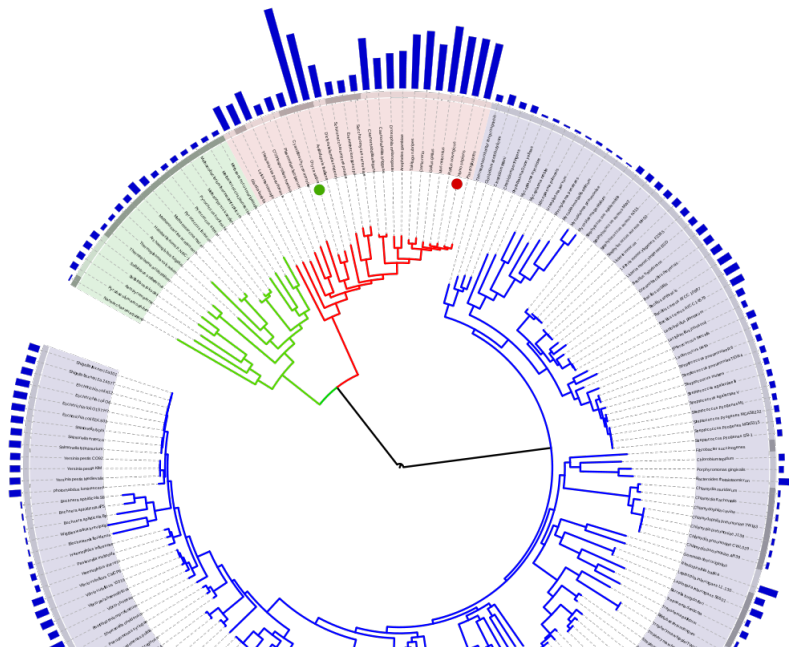
Divisive

1. начинаем с ситуации, когда все объекты составляют один кластер
2. на каждом шаге разделяем два один из кластеров пополам
3. останавливаемся, когда получаем требуемое количество или N кластеров

Дендрограмма



Радialная дендрограмма



Агломеративный алгоритм

```
1 function agglomerative(X, K):
2     initialize N # number of objects
3     initialize C = N # number of clusters
4     initialize C_i = x_i # initial clusters
5     while C > K:
6         C_a = C_b = None # closest clusters
7         min_dist = +inf # distance between closest
8         for i in 1 .. C:
9             for j in i + 1 .. C:
10                 dist = d(C_i, C_j) # dist. betw. clusters
11                 if dist < min_dist:
12                     min_dist = dist
13                     C_a = C_i
14                     C_b = C_j
15             merge(C_a, C_b)
16         C = C - 1
17     return C_1, ..., C_K
```

память $O(N^2)$, сложность $O(N^2 \log N)$

Расстояние между кластерами

- ▶ single-linkage

$$d_{min}(C_i, C_j) = \min_{\mathbf{x} \in C_i, \mathbf{x}' \in C_j} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$$

- ▶ complete-linkage

$$d_{max}(C_i, C_j) = \max_{\mathbf{x} \in C_i, \mathbf{x}' \in C_j} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$$

- ▶ average

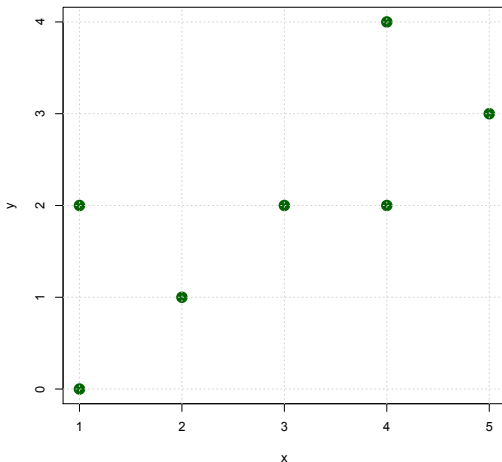
$$d_{avg}(C_i, C_j) = \frac{1}{n_i n_j} \sum_{\mathbf{x} \in C_i} \sum_{\mathbf{x}' \in C_j} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$$

- ▶ mean

$$d_{mean}(C_i, C_j) = \|\mathbf{m}_i - \mathbf{m}_j\|$$

Задача

Кластеризовать данные иерархическим методом с использованием расстояний между кластерами d_{min} и d_{max}



Stepwise-optimal HC

Какой критерий мы оптимизируем?

```
1 function swo(X, K):  
2     initialize N # number of objects  
3     initialize C = N # number of clusters  
4     initialize C_i = x_i # initial clusters  
5     while C > K:  
6         # choose the pair that optimizes  
7         # the given criterion J when merged  
8         C_a, C_b = find_best_merge(J, C_1, ..., C_C)  
9         merge(C_a, C_b)  
10        C = C - 1  
11    return C_1, ..., C_K
```

d_{max} обеспечивает наименьшее увеличение диаметра кластера

d_e обеспечивает наименьшее увеличение квадратичного критерия

$$d_e(C_i, C_j) = \sqrt{\frac{n_i n_j}{n_i + n_j}} \|\mathbf{m}_i - \mathbf{m}_j\|$$

Неэвклидовы пространства

Проблема. Как измерить расстояние между кластерами, если невозможно определить центроид?

Идея. В каждом из кластеров выбрать “типичный” пример – clustroid.

Минимизируем

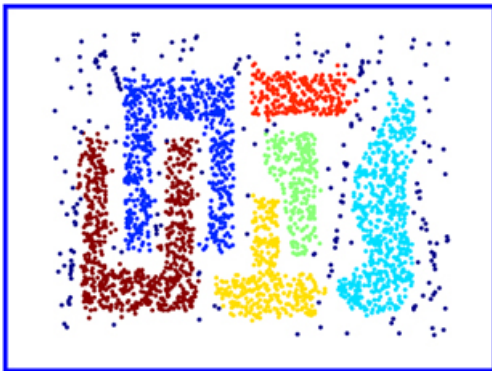
- ▶ сумму расстояний до других объектов в кластере
- ▶ сумму квадратов расстояний до других объектов в кластере
- ▶ максимальное расстояние до других объектов в кластере

Иерархическая кластеризация: итог

- + Несферические кластеры
- + Разнообразие критериев
- + Любые K из коробки
- Требуется много ресурсов

DBSCAN: идея метода

- ▶ Кластеризация, основанная на плотности объектов
- ▶ Кластеры – участки высокой плотности, разделенные участками низкой плотности



Определения

Плотность

Количество объектов внутри сферы заданного радиуса ε

Core-объект

Объект x является core-объектом, если плотность вокруг него больше min_pts

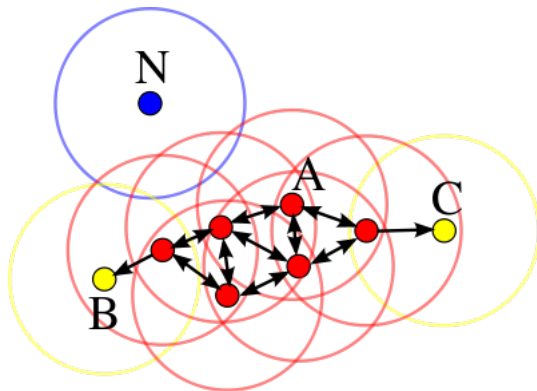
Граничный-объект

Объект x является граничным-объектом, если плотность вокруг него меньше min_pts , но он находится рядом с core-объектом

Шум

Объект x является шумом, если он не является ни core-объектом, ни граничным объектом

Виды объектов



DBSCAN 1

```
1 function dbscan(X, eps, min_pts):
2     initialize NV = X # not visited objects
3     for x in NV:
4         remove(NV, x) # mark as visited
5         nbr = neighbours(x, eps) # set of neighbours
6         if nbr.size < min_pts:
7             mark_as_noise(x)
8         else:
9             C = new_cluster()
10            expand_cluster(x, nbr, C, eps, min_pts, NV)
11            yield C
```

DBSCAN 2

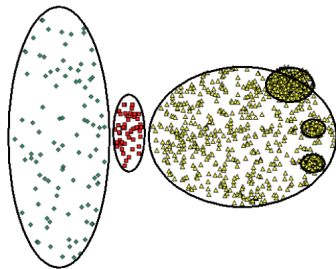
```
1 function expand_cluster(x, nbr, C, eps, min_pts, NV):  
2     add(x, C)  
3     for x1 in nbr:  
4         if x1 in NV: # object not visited  
5             remove(NV, x1) # mark as visited  
6             nbr1 = neighbours(x1, eps)  
7             if nbr1.size >= min_pts:  
8                 # join sets of neighbours  
9                 merge(nbr, nbr1)  
10            if x1 not in any cluster:  
11                add(x1, C)
```

Сложность: $O(n^2)$ или $O(n \log n)$ (R^* Tree)

Память: $O(n)$ или $O(n^2)$

DBSCAN: итог

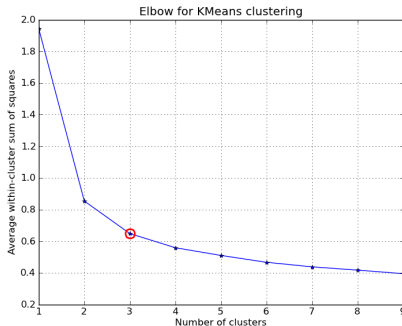
- + не требует K
- + кластеры произвольной формы
- + учитывает выбросы
- Не вполне детерминированный
- Не работает при разных плотностях кластеров



Выбор наилучшего K

Идея. Выбрать критерий качества кластеризации и построить его значение для $K = 1, 2, \dots$

- ▶ средняя сумма квадратов расстояния до центраида
- ▶ средний диаметр кластера



Критерий Silhouette

Пусть дана кластеризация в K кластеров, и объект i попал в C_k

- ▶ $a(i)$ – среднее расстояние от i объекта до объектов из C_k
- ▶ $b(i) = \min_{j \neq k} b_j(i)$, где $b_j(i)$ – среднее расстояние от i объекта до объектов из C_j

$$\text{silhouette}(i) = \frac{b(i) - a(i)}{\max(a(i), b(i))}$$

Средний silhouette для всех точек из \mathbf{X} является критерием качества кластеризации.

Кластеризация. Что дальше

Вопросы

