Кластеризация данных

Использованы материалы:

Методы кластеризации. Воронцов К.В.

Кластерный анализ. Родионова Л.А.

 "Всякий раз, когда необходимо классифицировать "горы" информации на пригодные для дальнейшей обработки группы, кластерный анализ оказывается весьма полезным и эффективным"

Кластерный анализ

ЗАДАЧА - разбить изучаемую совокупность объектов на группы схожих, близких в некотором смысле объектов, называемых кластерами (классами, таксонами).

Заранее не известно, к какому классу принадлежит каждое из наблюдений.

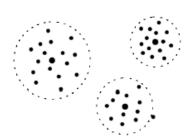
Типы кластерных структур



внутрикластерные расстояния, как правило, меньше межкластерных



ленточные кластеры



кластеры с центром

Типы кластерных структур



кластеры могут образовываться не по сходству, а по иным типам регулярностей



кластеры могут вообще отсутствовать

- Каждый метод кластеризации имеет свои ограничения и выделяет кластеры лишь некоторых типов.
- Понятие «тип кластерной структуры» зависит от метода и также не имеет формального определения.

Типы кластерных структур



кластеры могут соединяться перемычками

кластеры могут накладываться на разреженный фон из редко расположенных объектов

кластеры могут перекрываться

Цели кластеризации

- Упростить дальнейшую обработку данных, разбить множество X^{ℓ} на группы схожих объектов чтобы работать с каждой группой в отдельности (задачи классификации, регрессии, прогнозирования).
- Сократить объём хранимых данных, оставив по одному представителю от каждого кластера (задачи сжатия данных).
- Выделить нетипичные объекты, которые не подходят ни к одному из кластеров (задачи одноклассовой классификации).
 - Построить иерархию множества объектов (задачи таксономии).

ПРИМЕНЕНИЕ

- В маркетинговых исследованиях
 - Сегментации рынка
 - Анализ поведения покупателей. Идентификация однородных групп покупателей.
 - Кластеризация торговых марок и товаров.
 - Выбор тестовых рынков.
- В управлении персоналом
 - Методика оценки качества работы интервьюеров (кластерный анализ).
- В финансовом анализе

Постановка задачи кластеризации

Дано:

X — пространство объектов;

$$X^{\ell} = \{x_i\}_{i=1}^{\ell}$$
 — обучающая выборка;

 $ho\colon X imes X o [0,\infty)$ — функция расстояния между объектами.

Найти:

Y — множество кластеров и

 $a: X \to Y$ — алгоритм кластеризации, такие, что:

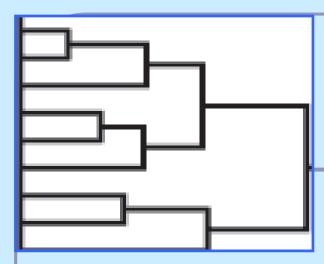
- каждый кластер состоит из близких объектов;
- объекты разных кластеров существенно различны.

Кластеризация — это обучение без учителя.

Исследуются n объектов, каждый объект имеет $\, \, m \,$ признаков. Каждый объект можно представить в виде точки в *т* -мерном пространстве

$$X_i = (X_{i1}, X_{i2}, ..., X_{im})$$
 $i = 1, ..., n$

Совокупность этих точек можно трактовать как выборку объема из многомерной генеральной совокупности.



КЛАСТЕРНЫЙ Анализ

- 1. Какую метрику выбрать для расчета расстояний?
 - > Расстояние между объектами
 - > Расстояние между кластерами
- 2. Какой метод кластеризации следует использовать?
- 3. Сколько кластеров необходимо сформировать?

Некорректность задачи кластеризации

Решение задачи кластеризации принципиально неоднозначно:

- точной постановки задачи кластеризации нет;
- существует много критериев качества кластеризации;
- существует много эвристических методов кластеризации;
- число кластеров |Y|, как правило, неизвестно заранее;
- результат кластеризации существенно зависит от метрики ρ , которую эксперт задаёт субъективно.

ЭТАПЫ КЛАСТЕР-АНАЛИЗА

- 1 этап. Проводятся кластеризация множества исследуемых объектов по показателям. На этом этапе предполагается использование методов иерархического кластерного анализа.
- 2 этап. Проверка качества полученных кластеров.
- 3 этап. Анализ полученных кластеров. Выявление наличия общих закономерностей распределения отдельных объектов в рамках полученных классификаций.

Интерпретация результатов

- Насколько полученное разбиение отличается от случайного?
- Является ли оно надежным и стабильным на подвыборках?
- Какова взаимосвязь между результатами кластеризации и переменными, не участвовавшими в процессе кластеризации?
- Можно ли проинтерпретировать полученные результаты?

постановка задачи

ТРЕБУЕТСЯ

Провести объединение объектов в кластеры на основе вычисляемой меры сходства.

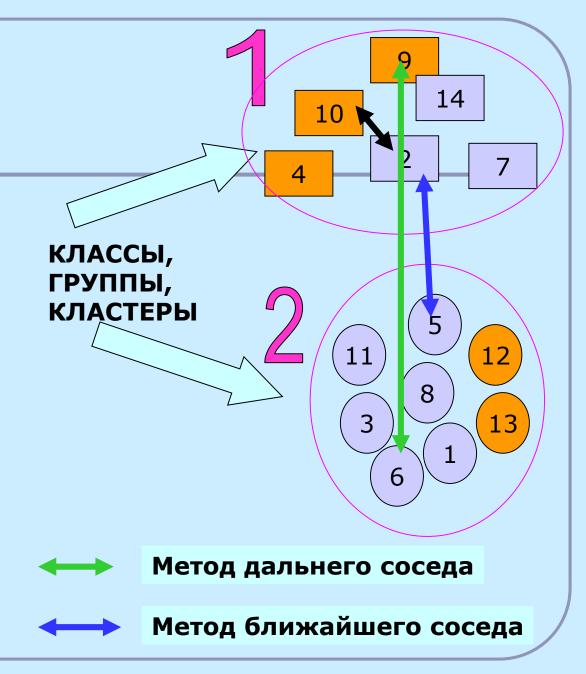
В качестве меры сходства используется расстояние.

Расстояние между объектами – выбор формулы расчета расстояния.

Расстояние между кластерами - правило объединения в кластеры.

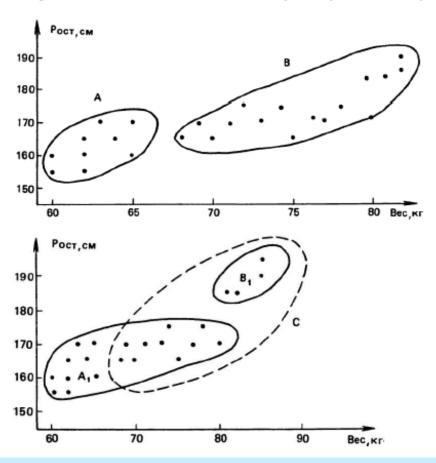
Расстояния

- Расстояние между → объектами в кластере
- Расстояние между
 кластерами.



Проблема чувствительности к выбору метрики

Результат зависит от нормировки признаков:



A — студентки,

В — студенты

после перенормировки (сжали ось «вес» вдвое)

ПРИМЕР

ПРИЗНАКИ ПЕРЕМЕННЫЕ (факторы) Variables

18 Richard M

Data: klaster1 (11/ by 18c)

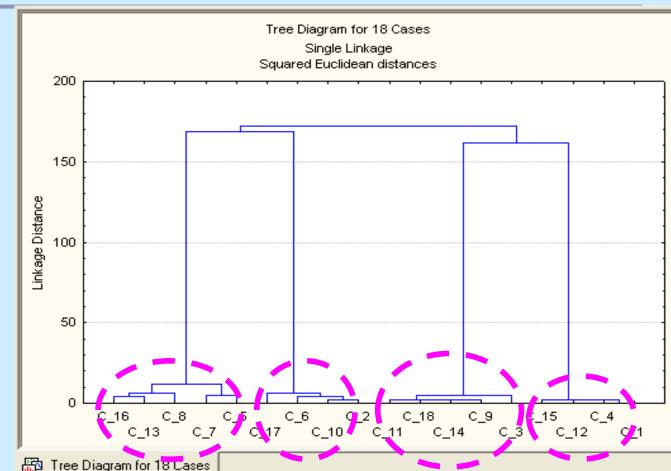
10 11

NewVar Test1 Test2 Test3 Test4 Test5 Test6 Fest7 Test8 Test9 Test10 1 Volker R 2 Sigrid K 3 Elmar M 4 Peter B 5 Otto R 6 Elke M 7 Sarah K 8 Peter T 9 Gudrun M 10 Siglinde P 11 Werner W 12 Achim Z 13 Dieter K 14 Boris P 15 Silke W 16 Clara T 17 Manfred K

ОБЪЕКТЫ

НАБЛЮДЕНИЯ Cases

Иерархический КА ДЕНДРОГРАММА





Этапы кластерного анализа

Формулировка проблемы

Выбор метода кластеризации

Интерпретация и профилирование кластеров

Оценка достоверности кластеризации

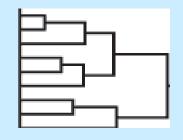
Методы кластеризации

- Отатистические методы кластеризации
 - ЕМ-алгоритм
 - \bigcirc Метод k-средних
- Сети Кохонена
 - Модели конкурентного обучения
 - Карты Кохонена
- Иерархическая кластеризация (таксономия)
 - Агломеративная иерархическая кластеризация
 - Дендрограмма

Выбор метода кластеризации

- Существует два основных класса методов кластеризации иерархические и итерационные.
- Иерархический кластерный анализ (древовидная кластеризация).
 - Исходное количество кластеров равно количеству объектов.
- Метод К-средних итерационный.
 - □Исходное количество кластеров равно К.

Иерархические методы



- Главное различие между иерархическими методами заключается в том, как они определяют расстояние между кластерами, т.е. в стратегии процесса объединения объектов в кластеры.
- В зависимости от способа измерения расстояний между кластерами методы иерархического кластерного анализа можно разбить 7 групп.
- Типичным результатом иерархической кластеризации является иерархическое дерево, или дендрограмма.

Методы иерархического кластерного анализа Расстояния между кластерами

Известно 12 методов присоединения к кластеру нового объекта. НАИБОЛЕЕ РАСПРОСТРАНЕННЫЕ:

- Метод одиночной связи (Single Linkage, Nearest Neighbor), или Расстояние ближнего соседа.
- Метод полной связи (Complete Linkage, Furthest Neighbor), или Расстояние дальнего соседа.
- Метод невзвешенного (или взвешенного) попарного среднего (Unweighted (или Weighted) pair-group average, Between-groups linkage) или Групповое среднее расстояние.
- Метод Уорда (Варда) (Ward's method).

Невзвешенный центроидный метод (Unweighted), измеряется расстояние между *центрами тяжести*.

Медианный метод – взвешенный центроидный метод (с учетом числа объектов в кластере в качестве весов).

- Метод одиночной связи (Single Linkage, Nearest Neighbor), или Расстояние ближнего соседа.
- Объект должен иметь наибольшее сходство (по сравнению с прочими «кандидатами на присоединение») с одним из членов кластера.
 Результатом такого метода являются большие продолговатые кластеры («гребенка»), длинные "цепочки".
- Нечувствителен к наличию в данных выбросов, к наличию совпадений в данных, не зависит от преобразования данных.

- Метод полной связи (Complete Linkage, Furthest Neighbor), или Расстояние дальнего соседа.
- Сходство между новым объектом и всеми членами кластера должно превышать некоторое пороговое значение (вычисляемое программой).
- Этот метод дает компактные кластеры и хорошо работает с группами разного размера.

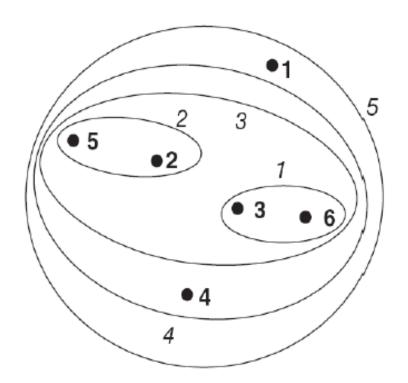
- Метод невзвешенного (или взвешенного) попарного среднего или Групповое среднее расстояние.
- Своеобразный компромисс между двумя предыдущими методами, расстояние между новым объектом и кластером определяется как среднее арифметическое расстояний между этим объектом и всеми членами кластера.
- Кластеры обычно получаются довольно продолговатыми.
- Хорошо работает с группами разного размера,
 эффективно выделяет структуру, «скрытую» случайной изменчивостью признаков.

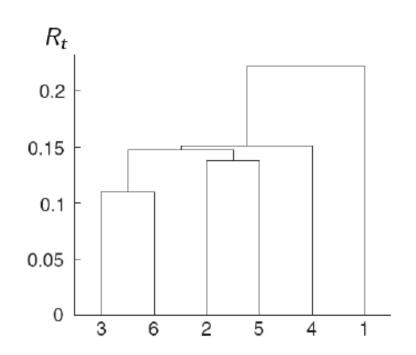
- Метод Уорда (Варда) (Ward's method)
- Минимизирует внутрикластерный разброс объектов.
 Минимизирует минимальную дисперсию внутри кластеров.
- Позволяет получить компактные хорошо выраженные кластеры. Имеет тенденцию к нахождению кластеров приблизительного равного размера и имеющих гиперсферическую форму.
- Хорошо работает с группами сходных размеров, эффективно выделяет структуру, «скрытую» случайной изменчивостью признаков.

Визуализация кластерной структуры

1. Расстояние ближнего соседа:

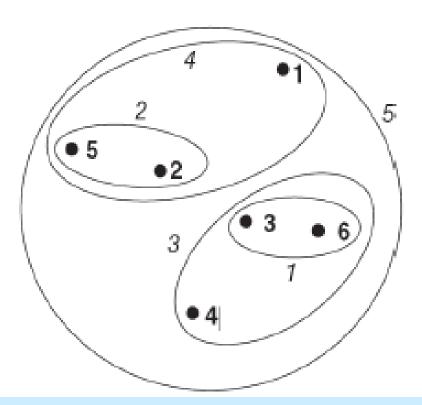
Диаграмма вложения

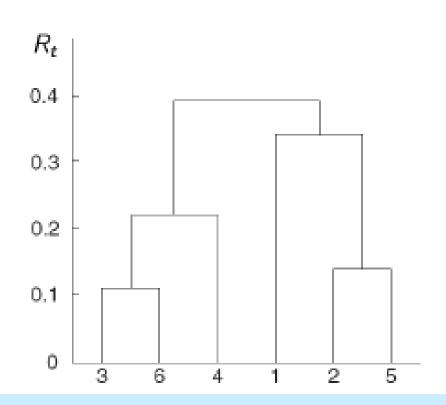




2. Расстояние дальнего соседа:

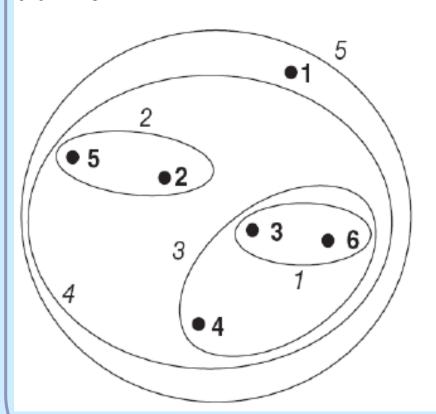
Диаграмма вложения

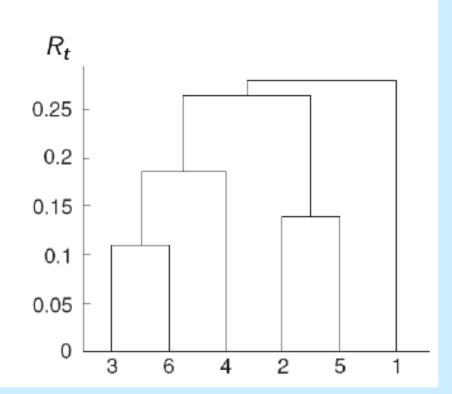




3. Групповое среднее расстояние:

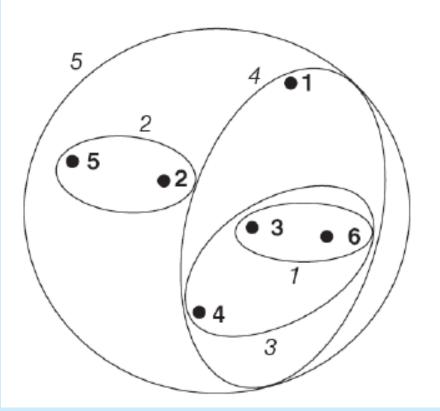
Диаграмма вложения

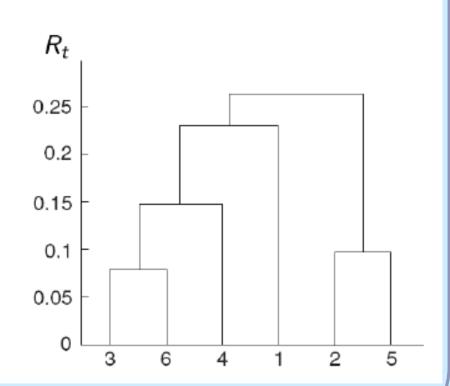




Расстояние Уорда:

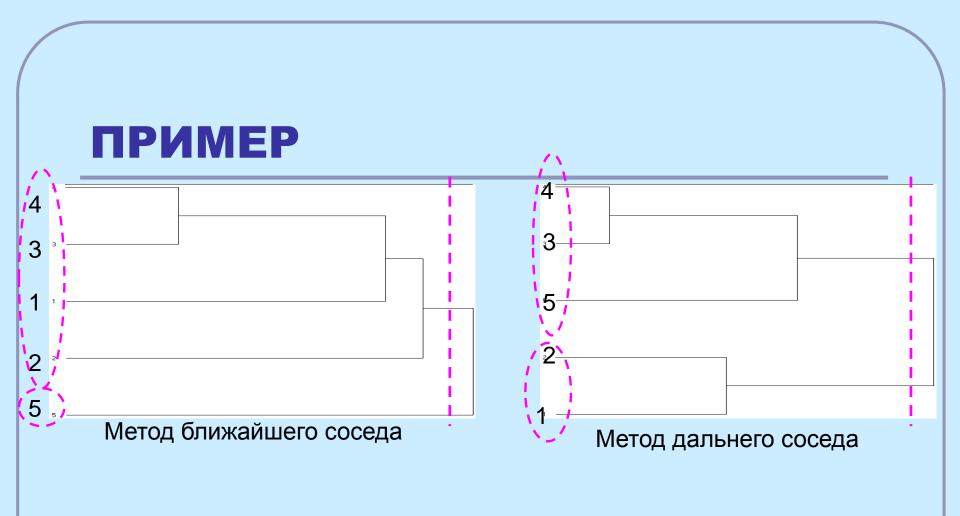
Диаграмма вложения





Советы специалистов

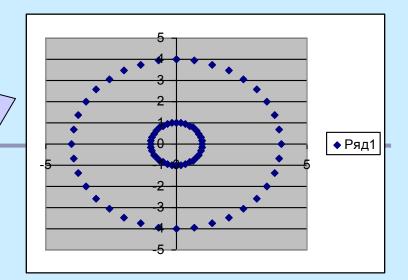
• Использовать метод Уорда (Варда)

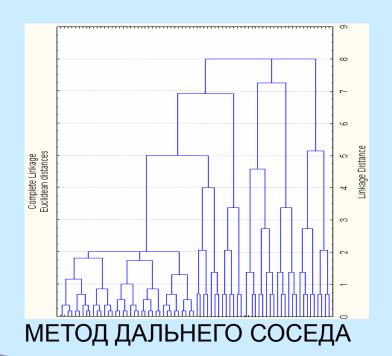


ДЕНДРОГРАММЫ

ПРИМЕР

ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ

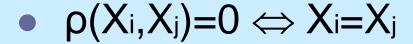


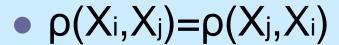




Выбор меры расстояния

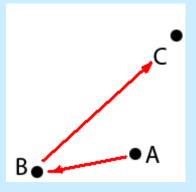
РАССТОЯНИЕ - МЕТРИКА Свойства расстояния

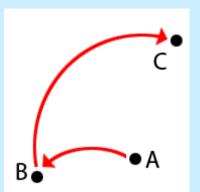




•
$$\rho(X_i,X_j) <= \rho(X_i,X_k) + \rho(X_k,X_j)$$

$$X_{i} = (X_{i1}, X_{i2}, ..., X_{im})$$

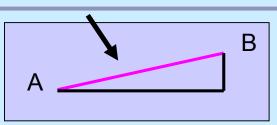




Расстояние между объектами

• Евклидова метрика

$$ho(X_i, X_j) = \sqrt{\sum_{k=1}^m (X_{ik} - X_{jk})^2} \qquad \qquad X_{ik}$$
 — значение k-того признака i-того объекта



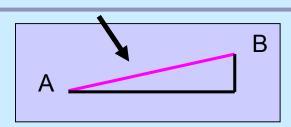
- Евклидова дистанция между двумя точками х и у это наименьшее расстояние между ними. В двух- или трёхмерном случае — это прямая, соединяющая данные точки.
- Взвешенная евклидова метрика

$$ho(X_i, X_j) = \sqrt{\sum_{k=1}^m W_k (X_{ik} - X_{jk})^2} \qquad W_k$$
 - вес k-того фактора

Расстояние между объектами

• Квадрат Евклидовой метрики

$$\rho(X_i, X_j) = \sum_{k=1}^{m} (X_{ik} - X_{jk})^2$$



 X_{ik} – значение k-того признака i-того объекта

Используется, когда требуется придать большие веса более отдаленным друг от друга объектам.

Эта мера должна всегда использоваться при построении кластеров при помощи центроидного и медианного методов, а также метода Варда.

Расстояние между объектами

• Расстояние Чебышева

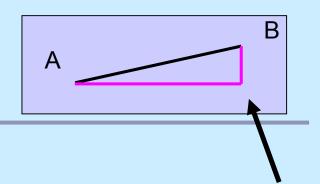
$$\rho(X_i, X_j) = \max_{k=1,\dots,m} |X_{ik} - X_{jk}|$$



Это расстояние используют, когда хотят определить два объекта как «различные», если они различаются по какой-либо одной координате (какимлибо одним измерением).

• Степенное расстояние

$$\rho(X_i, X_j) = \left[\sum_{k=1}^m |X_{ik} - X_{jk}|^p \right]^{1/r}$$



 Хемингово расстояние, (городских кварталов, манхэттенское расстояние).

$$\rho(X_i, X_j) = \sum_{k=1}^m |X_{ik} - X_{jk}|$$

В шутку называется "дистанцией таксиста".

Для этой меры влияние отдельных больших разностей (выбросов) уменьшается (так как они не возводятся в квадрат).

Расстояние Махаланобиса — обобщение предыдущих расстояний

$$d_0 = (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_1)' \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_1)$$

Здесь k и 1 — номера объектов, x_k , x_l — их векторы признаков, Σ — ковариационная матрица признаков

Основные характеристики

- Учитывает возможную корреляцию между переменными
- Если корреляция между переменными отсутствует, то расстояние Махаланобиса равно расстоянию Евклида

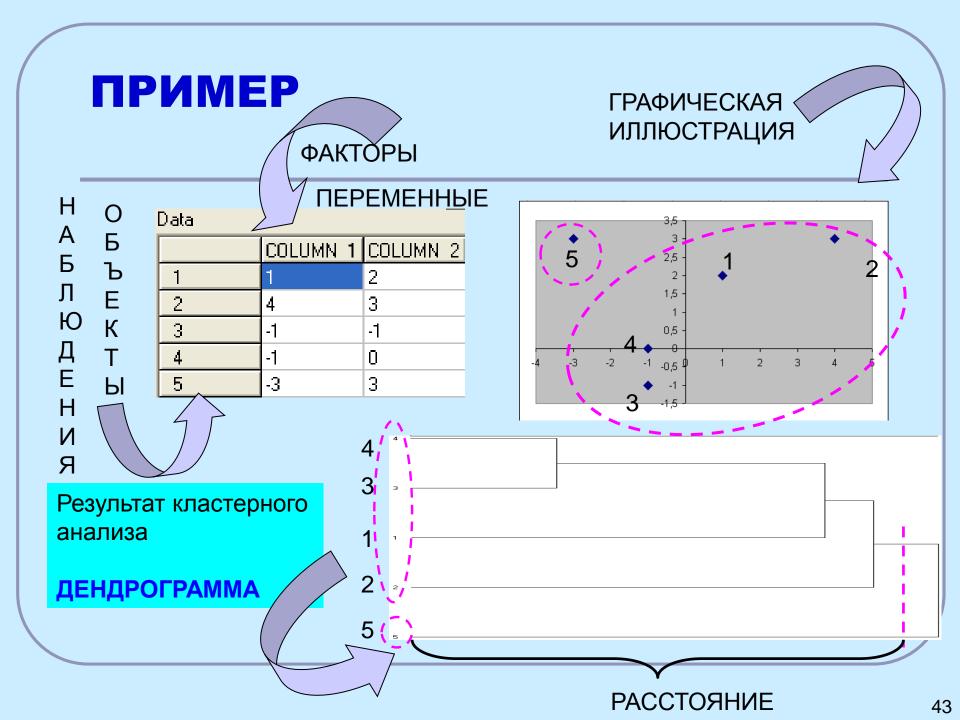


Prasanta Chandra Mahalanobis 1893 - 1972

Принятие решения о количестве кластеров

- Таким образом, в результате иерархического анализа получаем систему вложенных кластеров.
- Когда закончить разбиение на кластеры?
- Если число кластеров заранее известно, то классификацию заканчивают как только будет сформировано разбиение с этим числом кластеров. При неизвестном числе кластеров правило остановки связывают с понятием порога— это некоторое расстояние, определяемое условиями конкретной задачи.

42



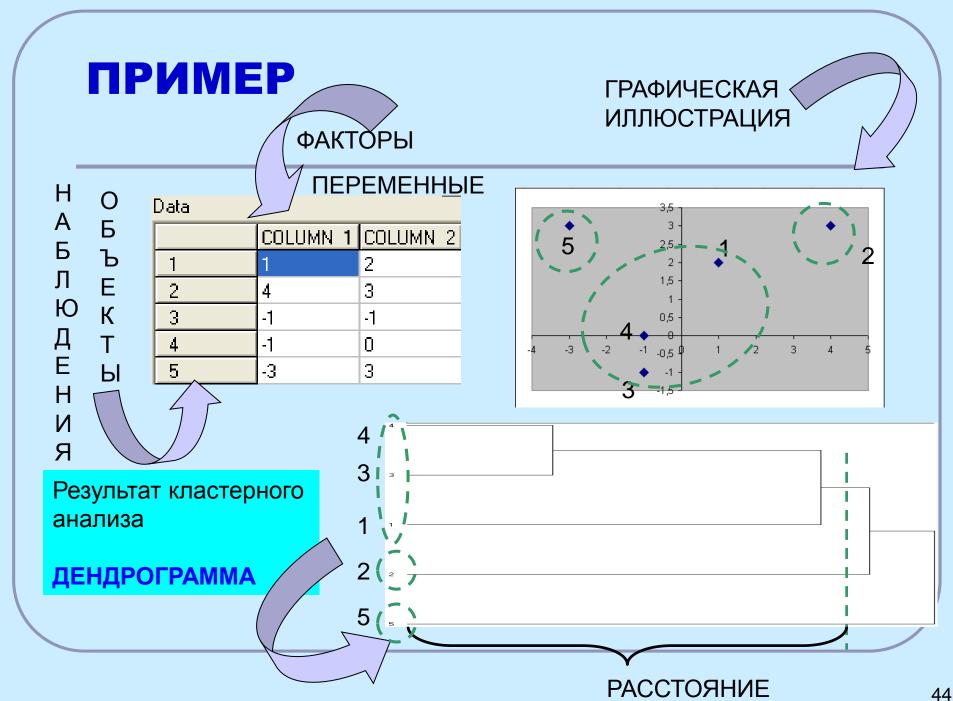
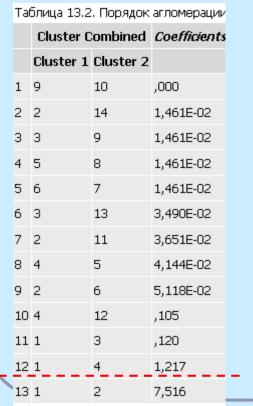


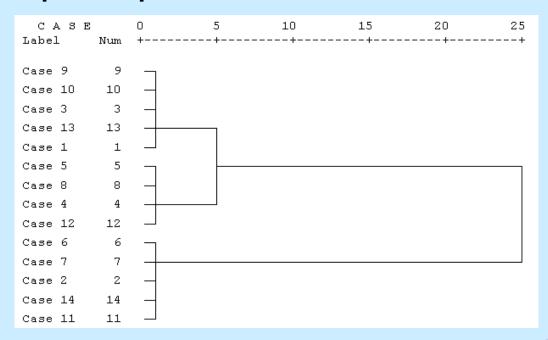
Таблица агломерации

• Оптимальное число кластеров =





Пример: 14-12=2



Иерархический кластерный анализ: Стат...

Отмена

Справка

Порядок агломерации

Матрица близостейПринадлежность к кластерам

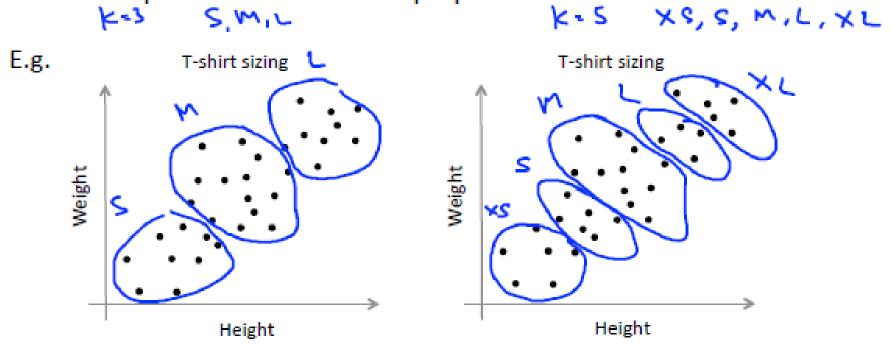
Одно решение
 Число кластеров:
 Диалазон решений
 Минимальное число кластеров:
 Максимальное число кластеров:

Продолжить

О Нет

Choosing the value of K

Sometimes, you're running K-means to get clusters to use for some later/downstream purpose. Evaluate K-means based on a metric for how well it performs for that later purpose.



Andrew Ng

- Иерархические методы используются обычно в таких задачах классификации небольшого числа объектов (порядка нескольких десятков), где больший интерес представляет не число кластеров, а анализ структуры множества этих объектов и наглядная интерпретация проведенного анализа в виде дендрограммы.
- Если же число кластеров заранее задано или подлежит определению, то для классификации чаще всего используют *параллельные* кластер-процедуры
 - итерационные алгоритмы, на каждом шаге которых используется одновременно (параллельно) все наблюдения
 - *Memod K-cpedних* («*K*-Means Clustering») с заранее заданным числом классов.

МЕТОД К-средних

Дана случайная выборка из *N* точек (наблюдений, Cases), каждая из которых имеет m признаков (переменных, Variables).

Требуется найти *К* центров, представляющих кластеры в *N* точках (*K*<*N*) так, чтобы каждая из *N* точек относилась ровно к одному из *K* кластеров и центр каждого кластера совпадал с центром тяжести относящихся к нему точек.

К – задано!

Метод К-средних – итерационный метод

- Шаг1. За центры искомых кластеров Z1(1), Z2(1),.. Zk(1), принимают случайно выбранные наблюдения, обычно это К первых точек.
- Шаг2. Для каждой из оставшихся точек находят ее расстояние до центров кластеров и точку относят к тому кластеру, расстояние до которого минимально.
- Шаг3. Рассчитывают новые центры тяжести кластеров, так чтобы сумма квадратов расстояний между всеми элементами, принадлежащими кластеру и новым центром кластера должна быть минимальна.
- Шаг4. Если пересчет центров тяжести практически не приводит к изменению кластеров, процедуру заканчивают, иначе повторяют процедуру, начиная с Шага 2.

Mетод k-средних (k-means)

$$X = \mathbb{R}^n$$
.

- 1: начальное приближение центров μ_{V} , $y \in Y$;
- повторять
- 3: отнести каждый x_i к ближайшему центру:

$$y_i := \underset{y \in Y}{\operatorname{arg \, min}} \, \rho(x_i, \mu_y), \quad i = 1, \dots, \ell;$$

4: вычислить новые положения центров:

$$\mu_{yj} := \frac{\sum_{i=1}^{\ell} [y_i = y] f_j(x_i)}{\sum_{i=1}^{\ell} [y_i = y]}, \quad y \in Y, \quad j = 1, \dots, n;$$

5: **пока** y_i не перестанут изменяться;

Критерии качества классификации.

1. Сумма квадратов расстояний до центров классов:

$$F_1 = \sum_{l} \sum_{i} d^2(X_i, \overline{X}_l),$$

где l - номер кластера;

X - центр l-го кластера;

 X_i - вектор значений переменных для i-го объекта в l-ом кластере; $d(X_i, \overline{X}_l)$ - расстояние между i-ом объектом и центром l-го кластера.

2. Сумма внутриклассовых расстояний между объектами:

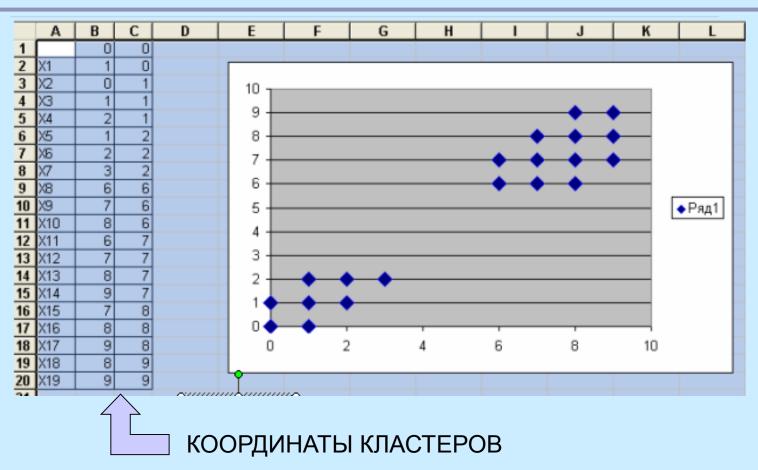
$$F_2 = \sum_{l} \sum_{ij} d^2_{ij}$$

Суммарная внутриклассовая дисперсия:

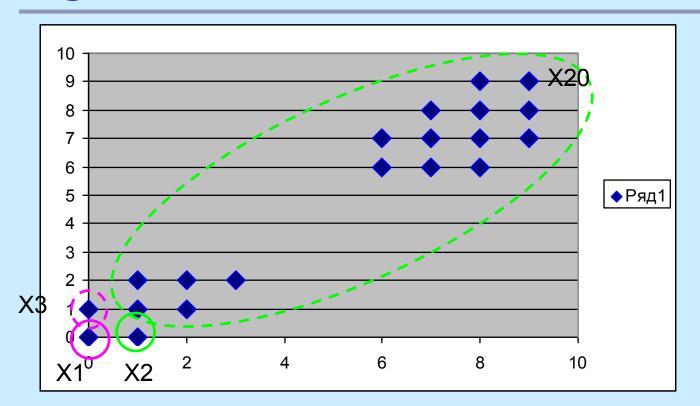
$$F_3 = \sum \sum \sigma_{ij}^2,$$

где $\sigma_{lj}^{\ \ 2}$ - дисперсия j-ой переменной в кластере S_l

ПРИМЕР (20 объектов, 2 переменные)



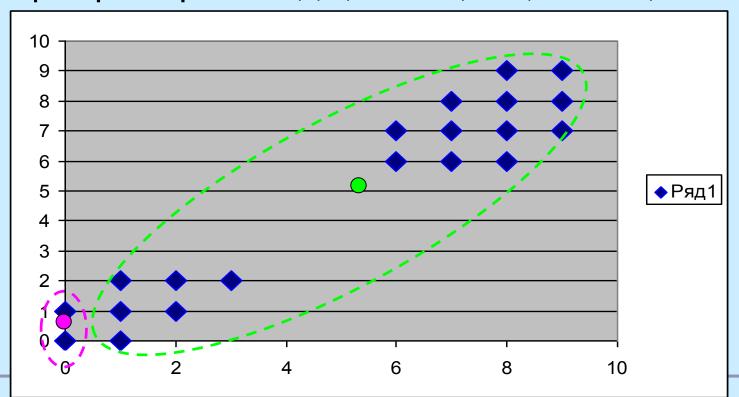
Пусть К=2

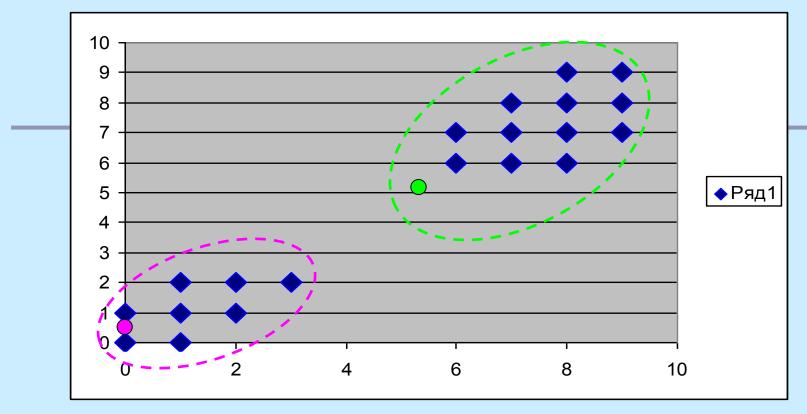


На Шаге1 в качестве кластеров берутся два первых элемента. На Шаге 2 ищутся ближайшие к ним. {X1,X3} и {X2,X4,X5,...,X20}

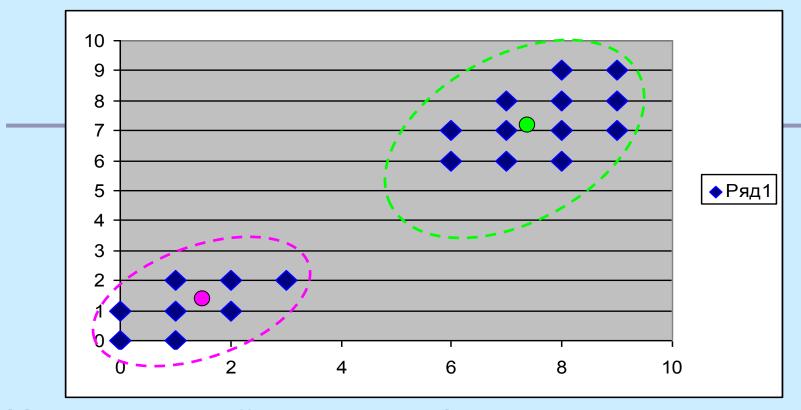
Шаг 3. Коррекция центров кластеров.

- Центр первого Z1(2)=(0, 0.5),
- Центр второго Z2(2)=(X2+X4+..)/18=(5.67, 5.33)





- На следующей итерации формируем новые кластеры, группируя их по близости к новым центрам.
- Получим два кластера {x1,x2,...,x8} и {x9,x10,...,x20}
- Рассчитываем новые центры кластеров.



- На следующей итерации формируем новые кластеры, группируя их по близости к новым центрам.
- Новый пересчет расстояний дает те же результаты, процесс можно закончить.

K - means (k - средних)

- Недостатки:
 - Чувствительность к выбору начального приближения
 - Необходимость задавать k
- Как преодолеть:
 - Провести несколько случайных кластеризаций
 - Постепенно наращивать k.

Интерпретация и профилирование кластеров

- Проводиться исследование полученных кластеров
- Построение портрета прецедентов
- Исследования кластера методами дисперсионного анализа

Оценка достоверности кластеризации

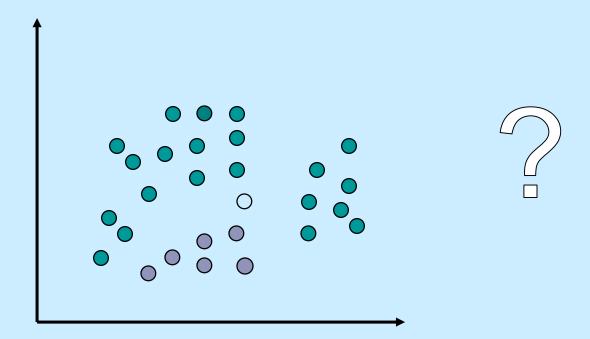
- Многие методы кластерного анализа довольно простые эвристические процедуры, как правило не имеют достаточного статистического обоснования.
- Различные методы могут порождать различные решения для одних и тех же данных.
- Формальные процедуры оценки надежности и достоверности результатов достаточно сложны.

ЧТО ДЕЛАТЬ?

- Использовать различные способы измерения расстояния.
- Использовать различные методы кластеризации.
- Выполнить кластерный анализ по сокращенному набору переменных.
- Разбить данные на две части случайным образом.

СРАВНИТЬ РЕЗУЛЬТАТЫ

Проблемы

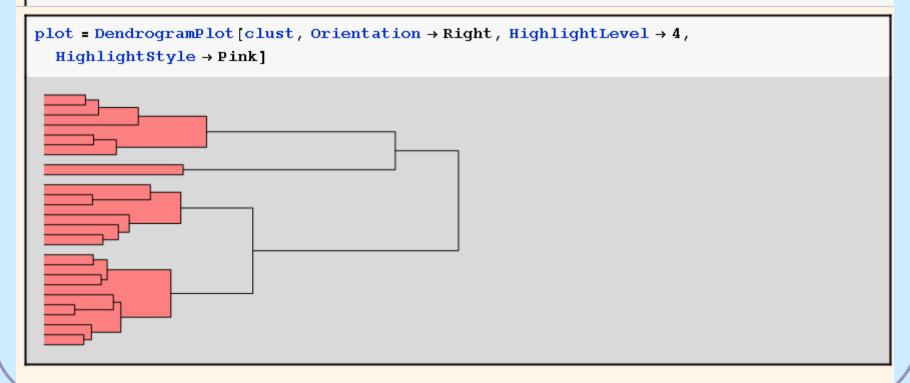


ПРИМЕР WM

КЛАСТЕРНЫЙ АНАЛИЗ

Иерархический кластерный анализ

```
Clear[distanceMatrix]
Needs["HierarchicalClustering`"]
(distanceMatrix = DistanceMatrix[stdata, DistanceFunction → EuclideanDistance]) //
    MatrixForm;
Clear[clust]
clust = DirectAgglomerate[distanceMatrix, countries, Linkage → "Ward"];
```



Получили 4 кластера, но сразу можно увидеть, что они не очень однородные по количеству стран - есть один кластер, который довольно маленький (2 страны).

Метод к - средних 4 или 3 кластера (хочется убрать кластер, который состоит из 2 стран).

```
clustKmeans = FindClusters[stdata, 4, Method -> "KMeans"];
clustK1 = clustKmeans[1];
clustK2 = clustKmeans[2];
clustK3 = clustKmeans[3];
clustK4 = clustKmeans[4];
Map[Length, {clustK1, clustK2, clustK3, clustK4}]
{14, 5, 1, 6}
```

Если разбивать на 4 кластера, то группы получаются достаточно неоднородные по количеству, попробуем 3.

```
clustKmeans2 = FindClusters[stdata, 3, Method -> "KMeans"];
clustK12 = clustKmeans2[1];
clustK22 = clustKmeans2[2];
clustK32 = clustKmeans2[3];
Map[Length, {clustK12, clustK22, clustK32}]
{17, 2, 7}
```

Сначала 3 кластера:

```
pos1 = Flatten@Table[Position[stdata, i], {i, clustK12}];
pos2 = Flatten@Table[Position[stdata, i], {i, clustK22}];
pos3 = Flatten@Table[Position[stdata, i], {i, clustK32}];
country1 = Table[countries[i], {i, pos1}]
country2 = Table[countries[i], {i, pos2}]
country3 = Table[countries[i], {i, pos3}]
{Belgium, Denmark, France, W_Germany, Ireland,
 Italy, Luxembourg, Netherlands, United_Kingdom, Austria,
 Finland, Greece, Norway, Portugal, Spain, Sweden, Switzerland}
{Turkey, Yugoslavia}
```

{Bulgaria, Czechoslovakia, E_Germany, Hungary, Poland, Rumania, USSR}

- 1 кластер : средние уровни занятости по большинству отраслей. Низкая занятость в сельском хозяйстве и в горнодобывающей промышленности, самая высокая занятость в сфере услуг и соц. служб.
- 2 кластер: самый высокий уровень занятости в сельском хозяйстве и финансовом секторе (такое бывает?). Самая низкая занятость в таких отраслях, как производство, энергетика, строительство, услуги, соц. службы и транспорт и связь.
- 3 кластер: страны, у который наблюдается наибольший уровень занятости в таких отраслях, как: горнодобывающая, производство, энергетика, строительство, транспорт и связь. По остальным отраслям страны занимают срединное значение.

