Иерархический кластерный анализ

Аббакумов
Вадим Леонардович

Версия 05.2022

Идея иерархического кластерного анализа:

сведем задачу к геометрической

Идея метода: сведем задачу к геометрической

- Каждый объект – точка в R^k.
- Похожие объекты расположены «близко» друг к другу
- Различающиеся объекты расположены «далеко»
- Скопления точек – кластер.

Синонимы

- строки таблицы данных
- анализируемые объекты
- наблюдения
- точки

- столбцы таблицы данных
- характеристики объектов
- переменные
- координаты точки

Расстояние между объектами

- Евклидово расстояние
- Квадрат Евклидова расстояния
- Блок (Манхеттен, сити-блок)
- и так далее…

Не для начинающих

- Deza, Deza
- Encyclopedia of Distances
- 3rd ed. 2014

- Мишель Мари Деза переводится как
  Михаил Ефимович Тылкин

Расстояние Евклида

- *Две точки*

  (x1, x2, x3)

  (y1, y2, y3)

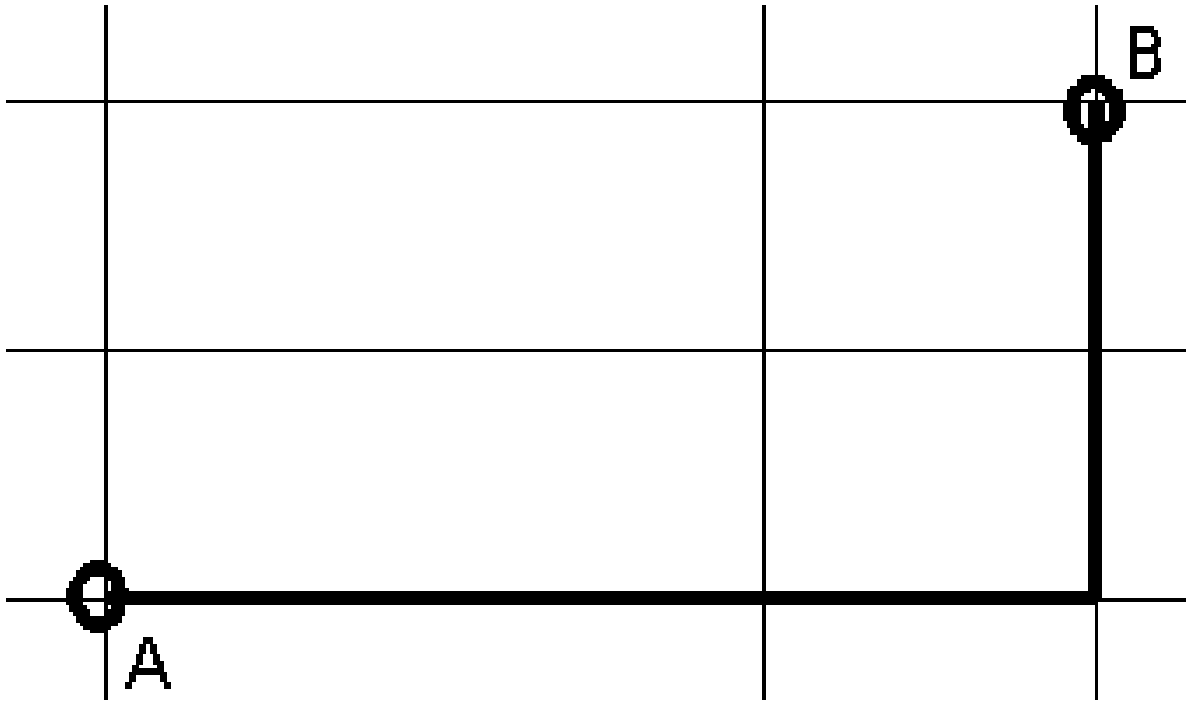
$$d_{xy} = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2 + (x_3 - y_3)^2}$$

Квадрат евклидова расстояния

не является расстоянием...

Расстояние Block

(Manhatten, таксиста).



Расстояние Block (Manhattan, таксиста, Минковского при p=1).

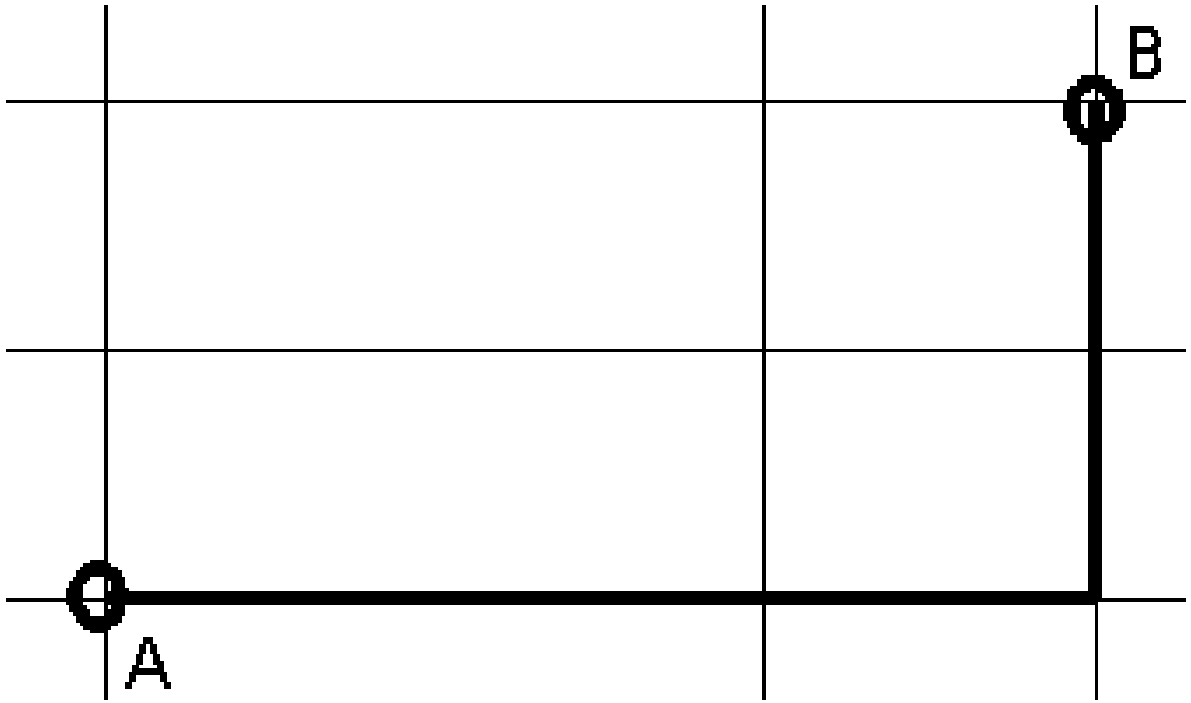
$$X = (x_1, x_2, \ldots, x_k)$$

$$Y = (y_1, y_2, \ldots, y_k)$$

$$d_{XY} = |x_1 - y_1| + |x_2 - y_2| + \ldots + |x_k - y_k|$$

Расстояние Block

(Manhatten, таксиста).



Расстояние Хэмминга

- Два слова одинаковой длины
- Расстояние - число позиций, в которых соответствующие символы различны

Word2vec

- D(1011101, 1001001) =
- D(2173896, 2233796) =
- D(toned, roses)

Растояние Sørensen–Dice

$$Q = \frac{2 \cdot |A \cap B|}{|A| + |B|}$$

Мера Жаккарда (Жаккара, Джаккарда)

В 1901 году коэффициент флористической общности

$$Q = \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} = \frac{|A \cap B|}{|A| + |B| - |A \cap B|}$$

Расстояние между кластерами

- Среднее невзвешенное расстояние (Average linkage clustering).
- Центроидный метод (Centroid Method).
- Метод дальнего соседа, максимального расстояния (Complete linkage clustering).
- Метод ближайшего соседа (Single linkage clustering).
- Метод Варда (Ward's method).

Центроидный метод

- Вычислительно прост
- Объемы кластеров не влияют
- Дендрограмма может иметь самопересечения
- Выходит из употребления

Метод Варда (WARD)

- Предполагается использование квадрата евклидова расстояния, но это требование нарушается (*в Python не реализовано*)
- Выявляет шаровые скопления

- Объяснение в следующей теме «метод k-средних»

Начинающим рекомендую

- – метод Варда - шаровые скопления;
- – метод ближнего соседа (Complete linkage clustering) — ленточные кластеры;
- – среднее невзвешенное расстояние (Average linkage clustering) - шаровые скопления.

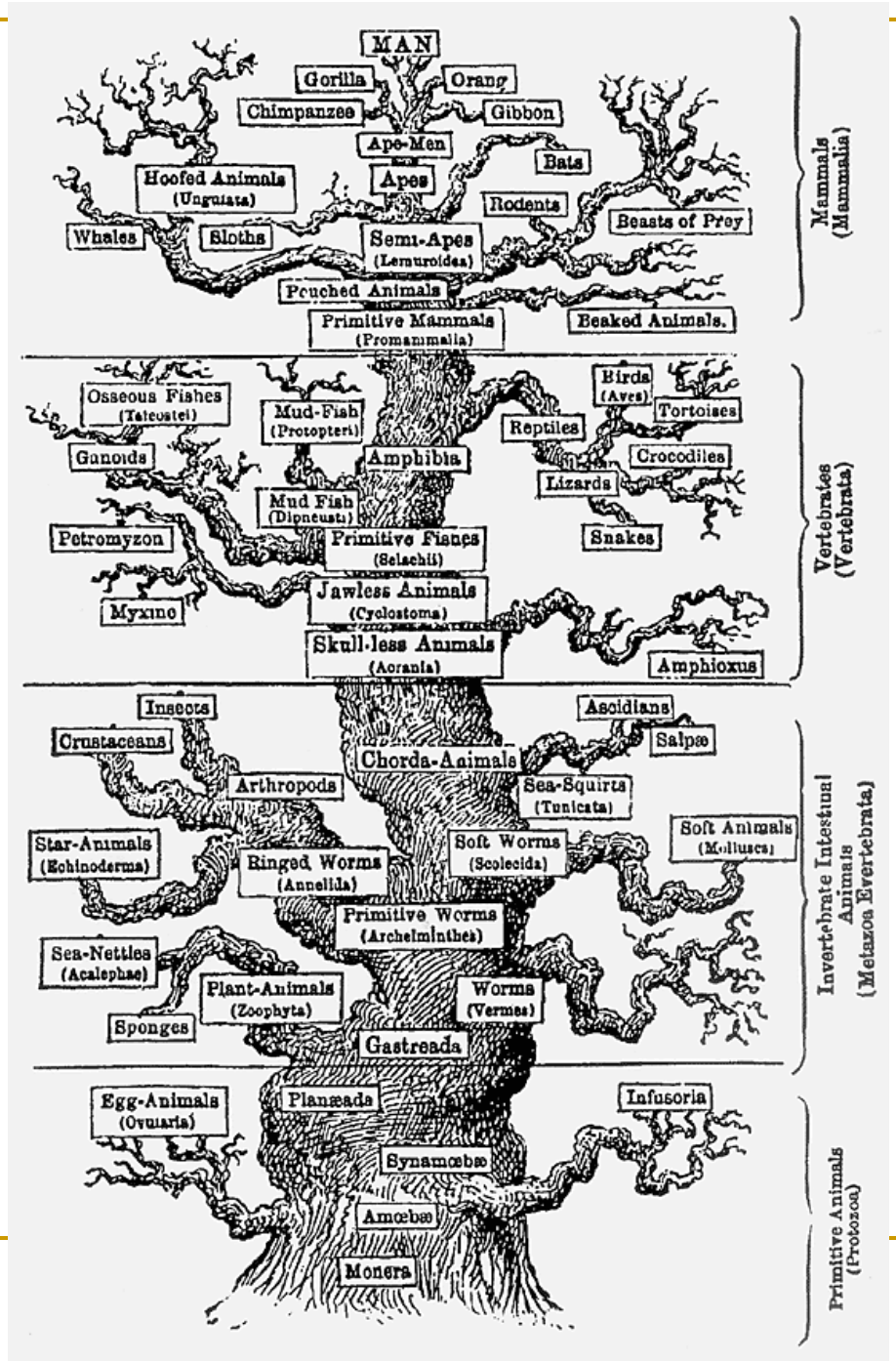
Алгоритм кластерного анализа

- Разберемся с процедурой иерархического кластерного анализа на примере

Алгоритм построения дендрограммы

Деревья — древний инструмент

- Ernst Haeckel
- Tree of Life
- The Evolution of Man (1879)
-
- Но он не был первым…
- Древо Порфирия (300+ год)


MAN
Gorilla
Orang
Chimpanzee
Gibbon
Ape-Men
Bats
Hoofed Animals
(Ungulata)
Apes
Rodents
Whales
Sloths
Semi-Apes
(Lemuroidea)
Beasts of Prey
Pouched Animals
Primitive Mammals
(Promammalia)
Beaked Animals.
Mammals
(Mammalia)
Osseous Fishes
(Teleostei)
Mud-Fish
(Protopteri)
Birds
(Aves)
Tortoises
Reptiles
Ganoids
Amphibia
Crocodiles
Lizards
Mud Fish
(Dipneusti)
Petromyzon
Primitive Fishes
(Selachii)
Snakes
Jawless Animals
(Cyclostoma)
Myxine
Skull-less Animals
(Acrania)
Amphioxus
Vertebrates
(Vertebrata)
Insects
Ascidians
Crustaceans
Salpæ
Chorda-Animals
Arthropods
Sea-Squirts
(Tunicata)
Soft Animals
(Molluscs)
Star-Animals
(Echinoderms)
Soft Worms
(Scolecida)
Ringed Worms
(Annelida)
Primitive Worms
(Archelminthes)
Sea-Nettles
(Acalephæ)
Plant-Animals
(Zoophyta)
Worms
(Vermes)
Sponges
Gastreada
Invertebrate Intestinal
Animals
(Metazoa Evertebrata)
Egg-Animals
(Ovularia)
Planæada
Infusoria
Synamœbæ
Amœbæ
Monera
Primitive Animals
(Protozoa)

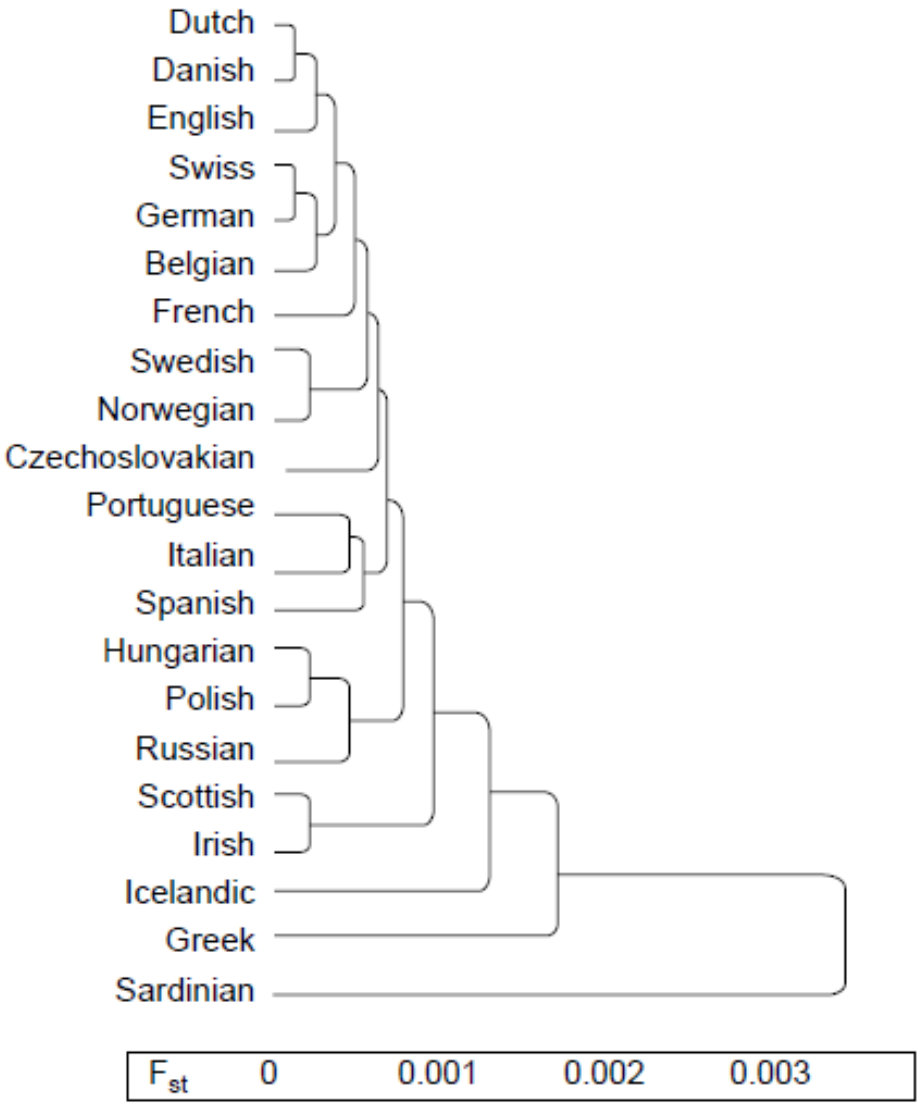
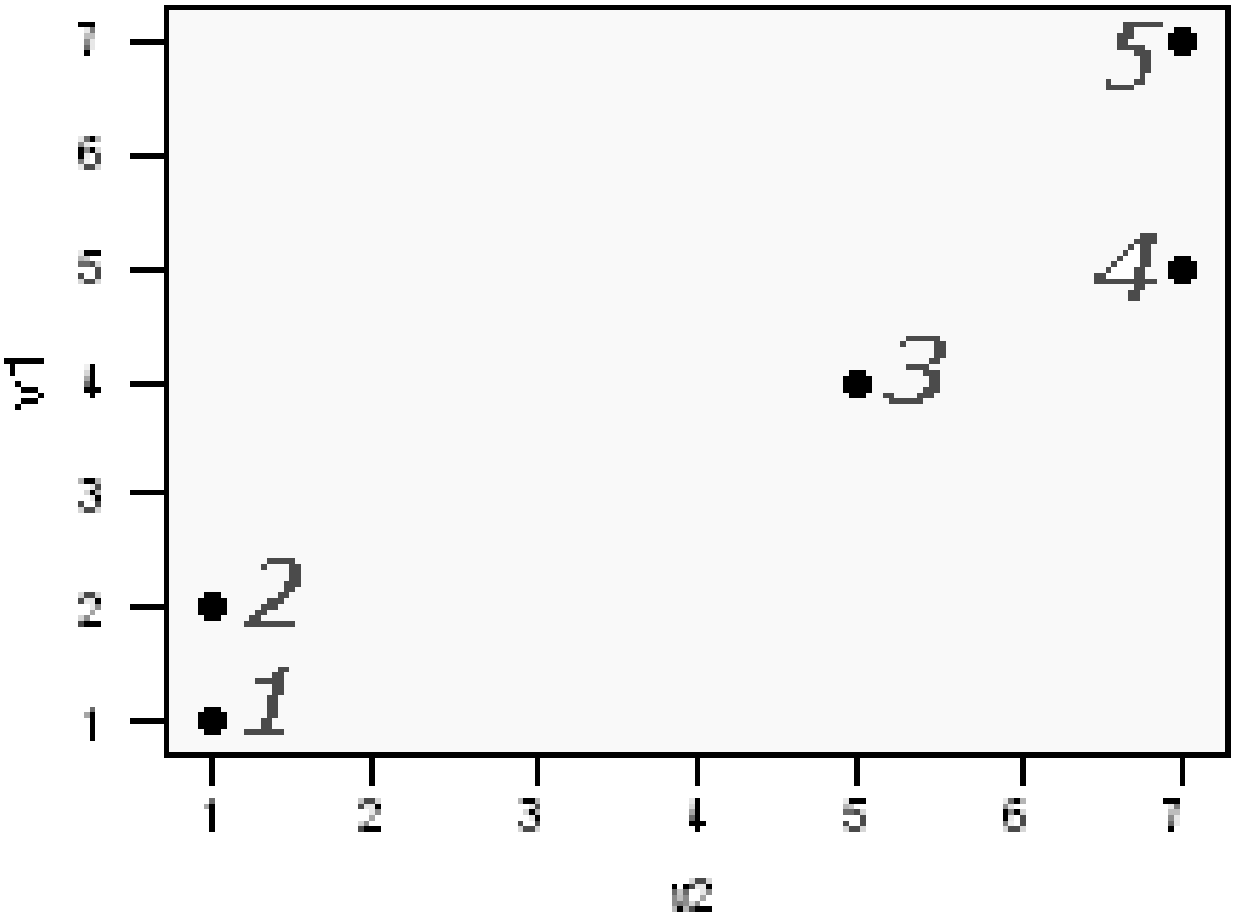
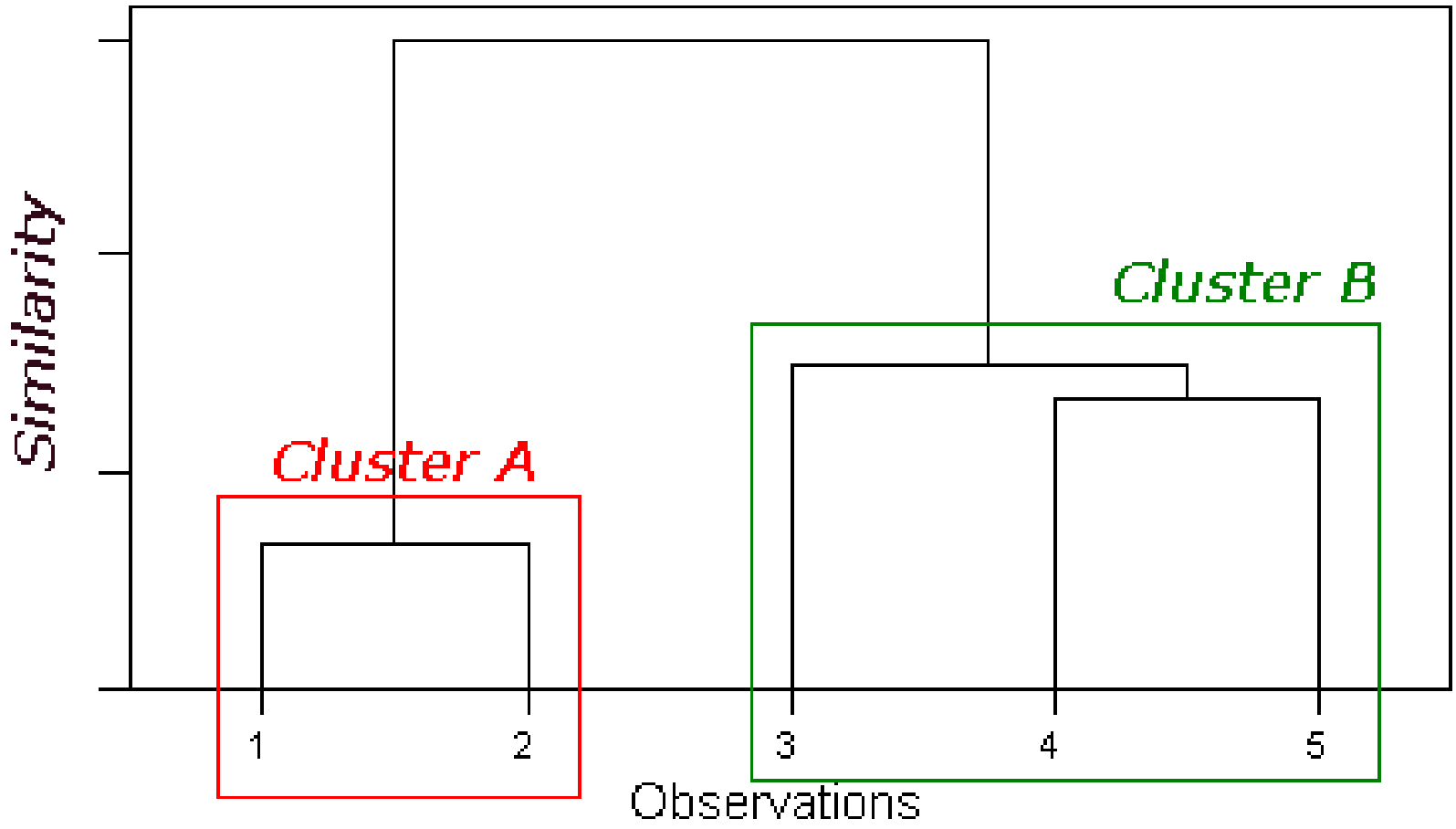
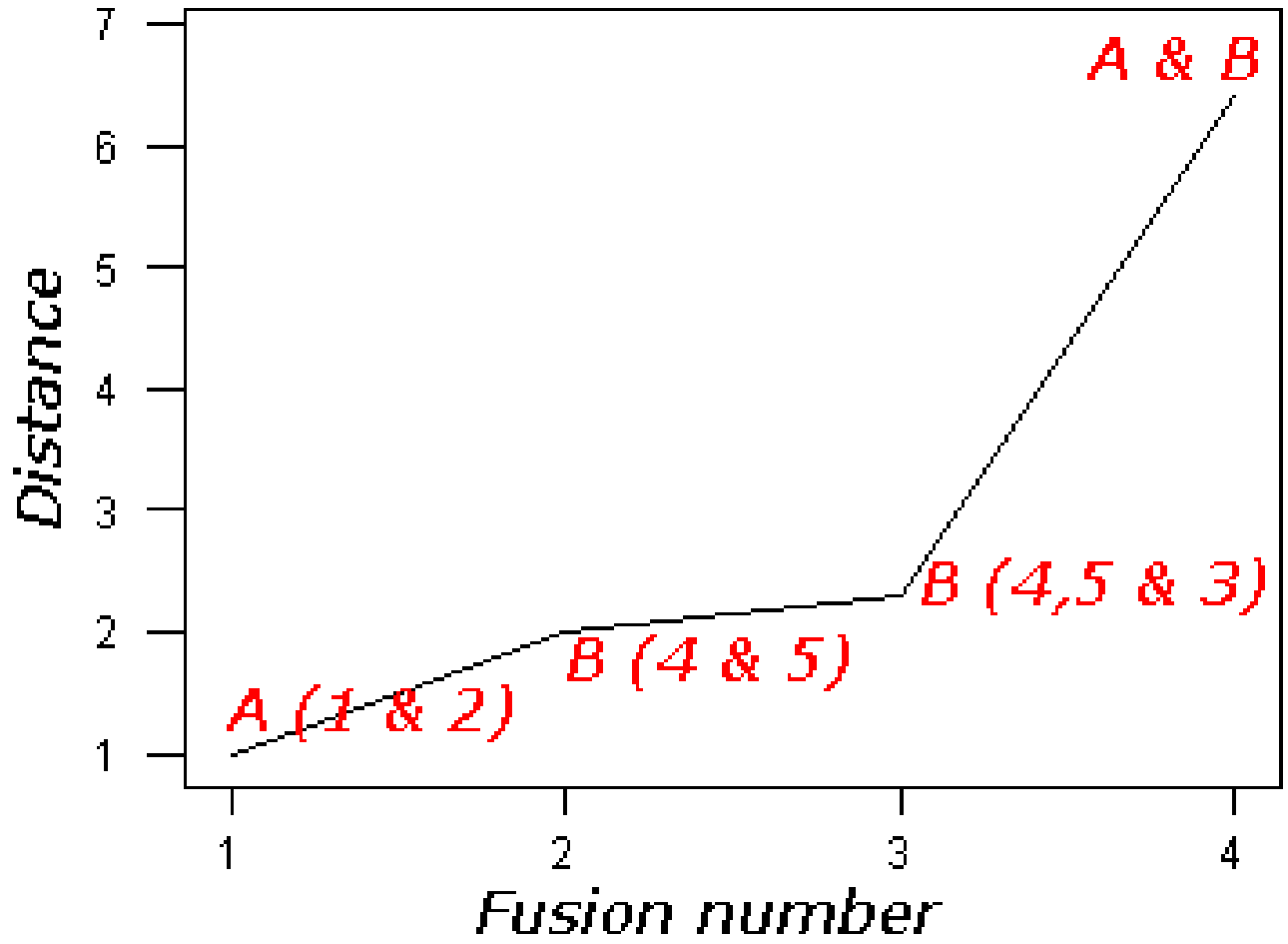


Fig. 5.2 Genetic tree of European populations from genetic distances (= F_{st}) between populations, based on 88 genetic polymorphisms from data in Cavalli-Sforza et al. (1994)


7
6
5
4
3
2
1
v1
1
2
3
4
5
6
7
v2
5
4
3
2
1

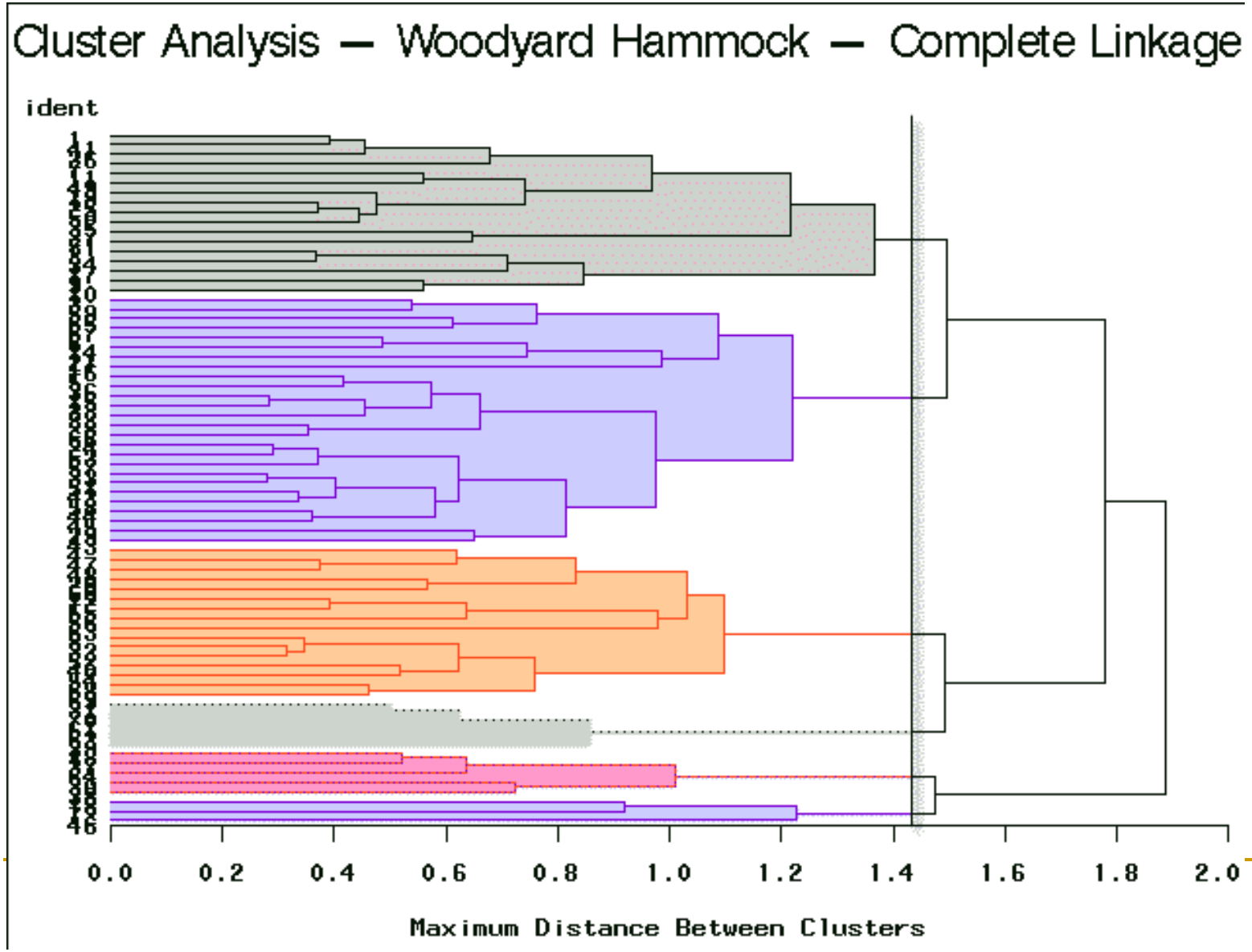

Similarity
Cluster A
Cluster B
1
2
3
4
5
Observations

каменистая осыпь / локоть



- Кеттел (Cattell) предложил график каменистая осыпь (scree plot) в 1966 году в факторном анализе
- Потомки переименовали график в локоть (elbow plot)

Где на дендрограмме кластеры?

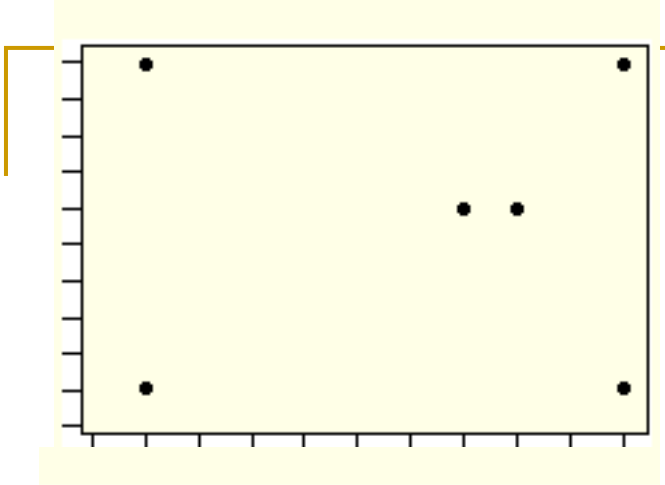


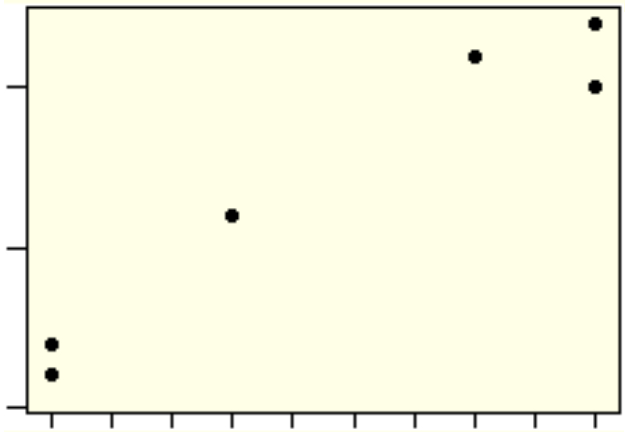
- В многомерном случае диаграмму рассеивания не построить.
- Вместо нее используем дендрограмму и каменистую осыпь

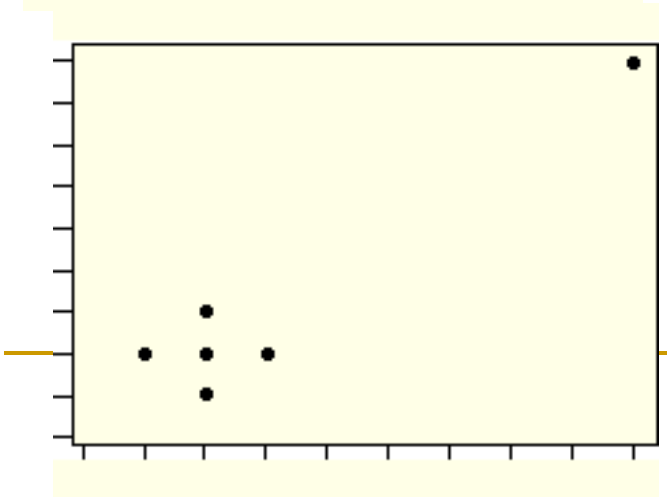
- зачем нам каменистая осыпь, если у нас есть дендрограмма?

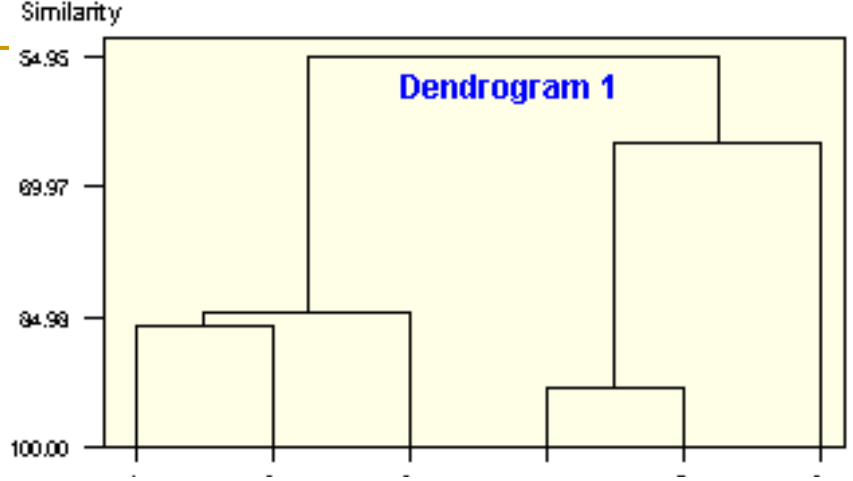
Упражнение

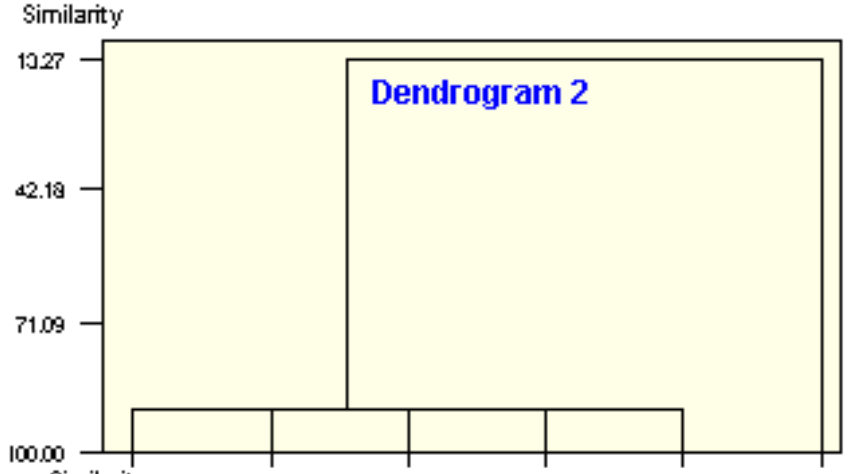
- Разбить на пары:
- Каждой диаграмме рассеивания поставить в соответствие дендрограмму

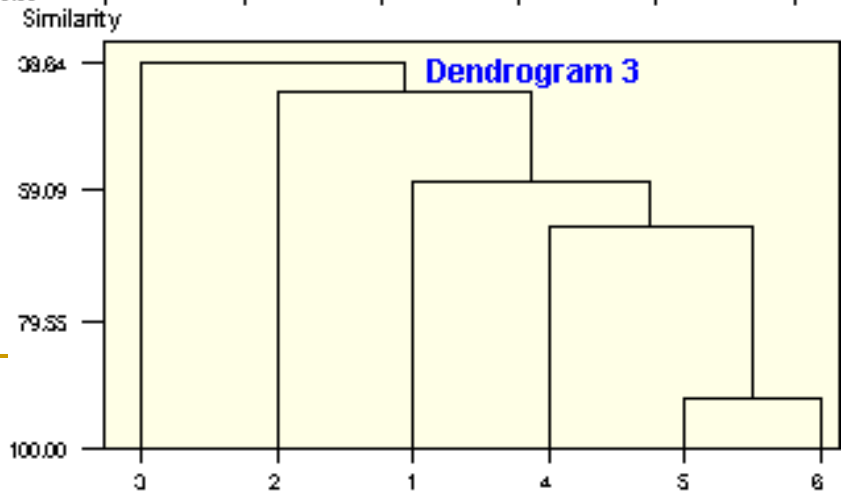







Similarity
54.95
69.97
84.98
100.00
Dendrogram 1


Similarity
13.27
42.18
71.09
100.00
Dendrogram 2


Similarity
39.64
59.09
79.55
100.00
Dendrogram 3
3
2
1
4
5
6

- Кластеризовали 100000 объектов, получили 21 кластер

- Получим 20 кластеров, состоящих из одного наблюдения каждый. И один кластер, содержащий все остальные (100000-20)=99980 наблюдений.

- Расстояние между кластерами по методу «центроид»
- Почему на дендрограмме возможны самопересечения?

Участие аналитика

1. Отбор переменных
2. Метод стандартизации
3. Расстояние между кластерами
4. Расстояние между объектами
5. Число кластеров

Отбор переменных

- 1. Какие переменные будут использоваться при анализе?

- Все?
- Три радиостанции одновременно...
- Как влияет цвет глаз покупателя на средний объем выпиваемого пива?
- Распознавание танков

С другой стороны

- если неизвестны доходы покупателей, но известны их профессия, образование и стаж работы, эти три переменные (surrogate variables) позволят распознать доходы.
- Перепись населения — разгадать доход
- Если классифицируются школы, и отсутствуют переменные «число школьников» и «число учителей», то размеры школ не будут учитываться при кластеризации .

Вывод

- Правильный выбор переменных очень важен.
- Критерием при отборе переменных для анализа является

1) ясность интерпретации результата,
2) интуиция исследователя.

Надо ли стандартизировать переменные?

- Правило для новичка:

- если Вы не знаете, стандартизировать или нет, стандартизируйте.

Надо стандартизировать

5296782.7	0.5	1
7400381.4	0.7	0
9362870.2	0.1	0
7594038.5	0.4	0
6455034.1	0.4	1

Стандартизация

- Для каждого столбца.
- Линейное преобразование

- 1. Максимальное значение =1, минимальное = 0 (-1)
- 2. z-метки. Среднее равно 0, выборочная дисперсия равна 1.

- Иногда решением будет преобразование данных

Очень трудно искать черную кошку в темной комнате, особенно, если там ее нет (Может это сказал Конфуций, может нет)

Если кластеров нет, они все равно будут найдены

- Договор

  провести удачно кластерный и факторный анализ, проинтерпретировать результаты

Результаты кластерного анализа нуждаются в интерпретации

- какой вариант кластеризации даст лучшие результаты?
- тот, который вы смогли понять и проинтерпретировать

- кластерный анализ завершён, когда мы смогли объяснить себе и заказчику, что общего у объектов в кластере и чем различаются объекты из разных кластеров между собой

Еще раз об участии аналитика

Иерархический кластерный анализ требует вдохновенного выбора формул для расстояния между объектами и расстояния между кластерами. Еще надо угадать число кластеров. Потом останется неясной геометрия кластеров. Таким образом, многое надо угадать и осмыслить. Не всегда это удается.

Число кластеров: Silhouette

- $Dist(x_i, c_k)$ = среднее расстояние от $x_i \in c_k$ до других объектов из кластера c_k (компактность),
- Dist(x_i, c_l) =среднее расстояние от $x_i \in c_k$ до объектов из ближайшего другого кластера c_l: $k \neq l$ (отделимость).
- $$Silhouette(x_i) = \frac{Dist(x_i, c_l) - Dist(x_i, c_k)}{max(Dist(x_i, c_k), Dist(x_i, c_l))}$$
- Среднее по кластеру, по всей выборке

Другие методы определения числа кластеров

- Gordon Classification 2ed
-
- https://neerc.ifmo.ru/wiki/index.php?title=%D0%9E%D1%86%D0%B5%D0%BD%D0%BA%D0%B0_%D0%BA%D0%B0%D1%87%D0%B5%D1%81%D1%82%D0%B2%D0%B0_%D0%B2_%D0%B7%D0%B0%D0%B4%D0%B0%D1%87%D0%B5_%D0%BA%D0%BB%D0%B0%D1%81%D1%82%D0%B5%D1%80%D0%B8%D0%B7%D0%B0%D1%86%D0%B8%D0%B8#.D0.A1.D0.B8.D0.BB.D1.83.D1.8D.D1.82_.28.D0.B0.D0.BD.D0.B3.D0.BB._Silhouette.29

Автоматическое определение числа кластеров

- Разные методы дают разное число кластеров (один 2 кластера, другой 19)
- Мудрость толпы
- В R пакет/процедура Nbclust

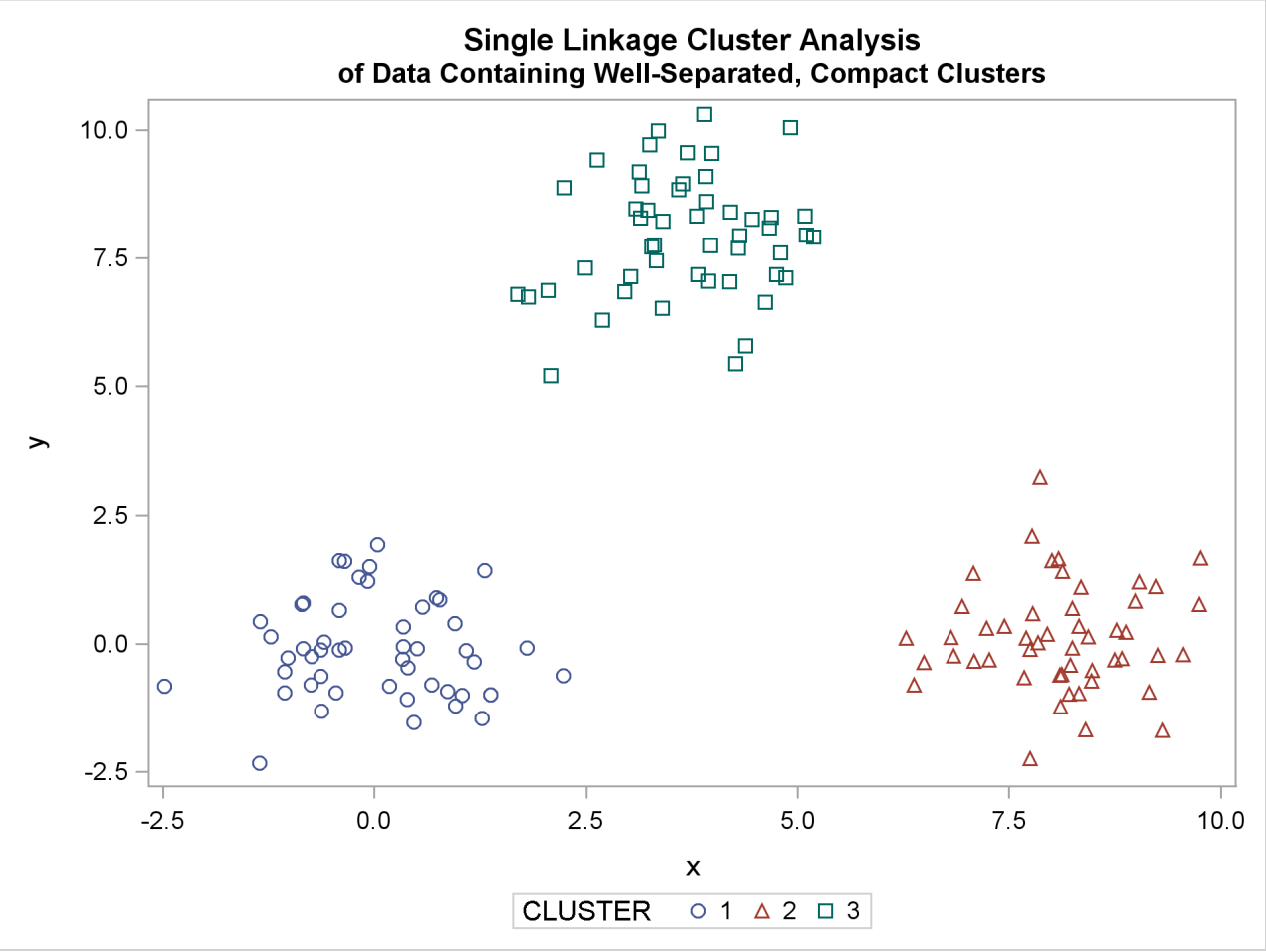
- В Питоне аналогов пока нет

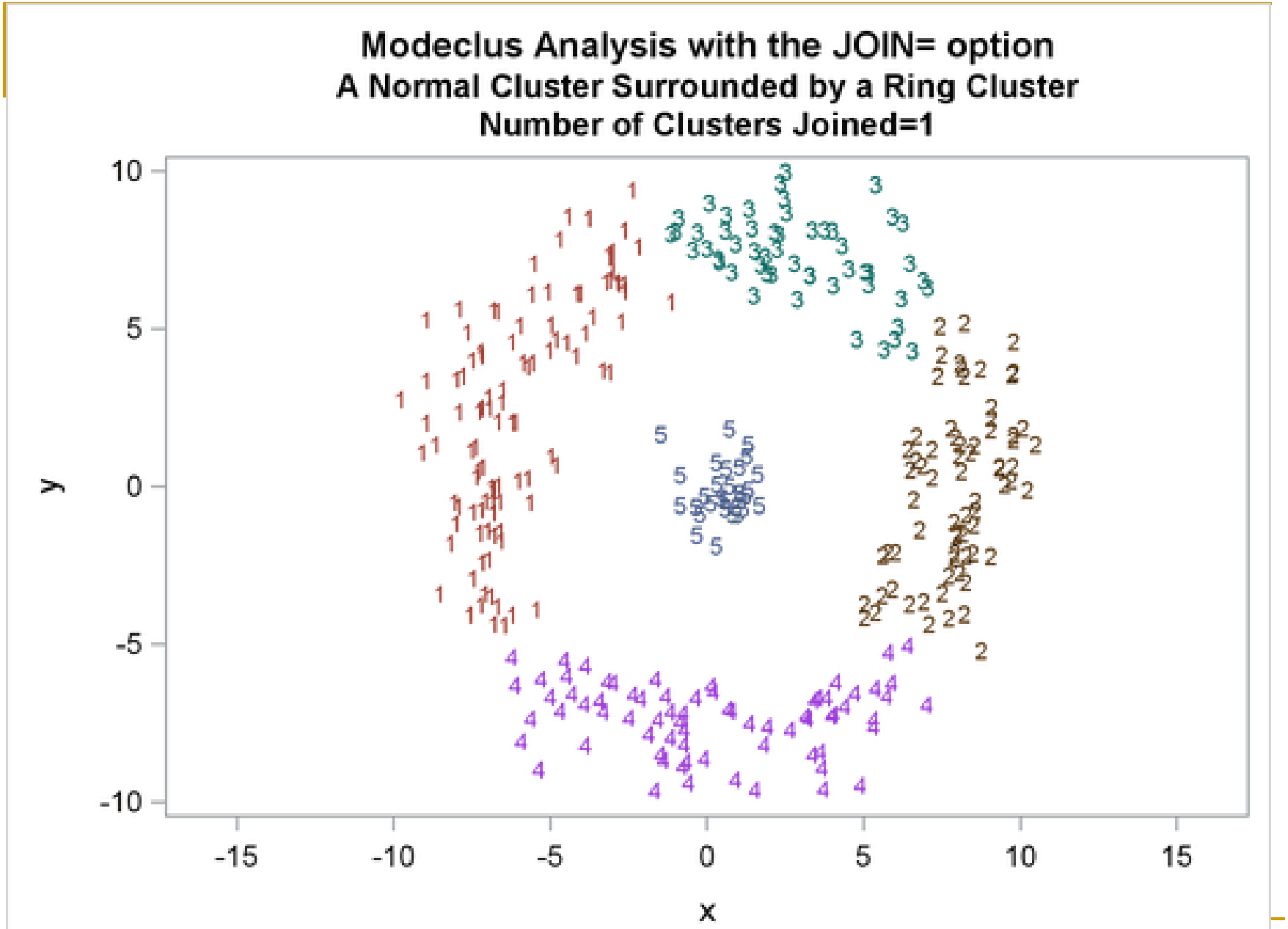
Типы кластеров

- Шаровые
- Ленточные
- …

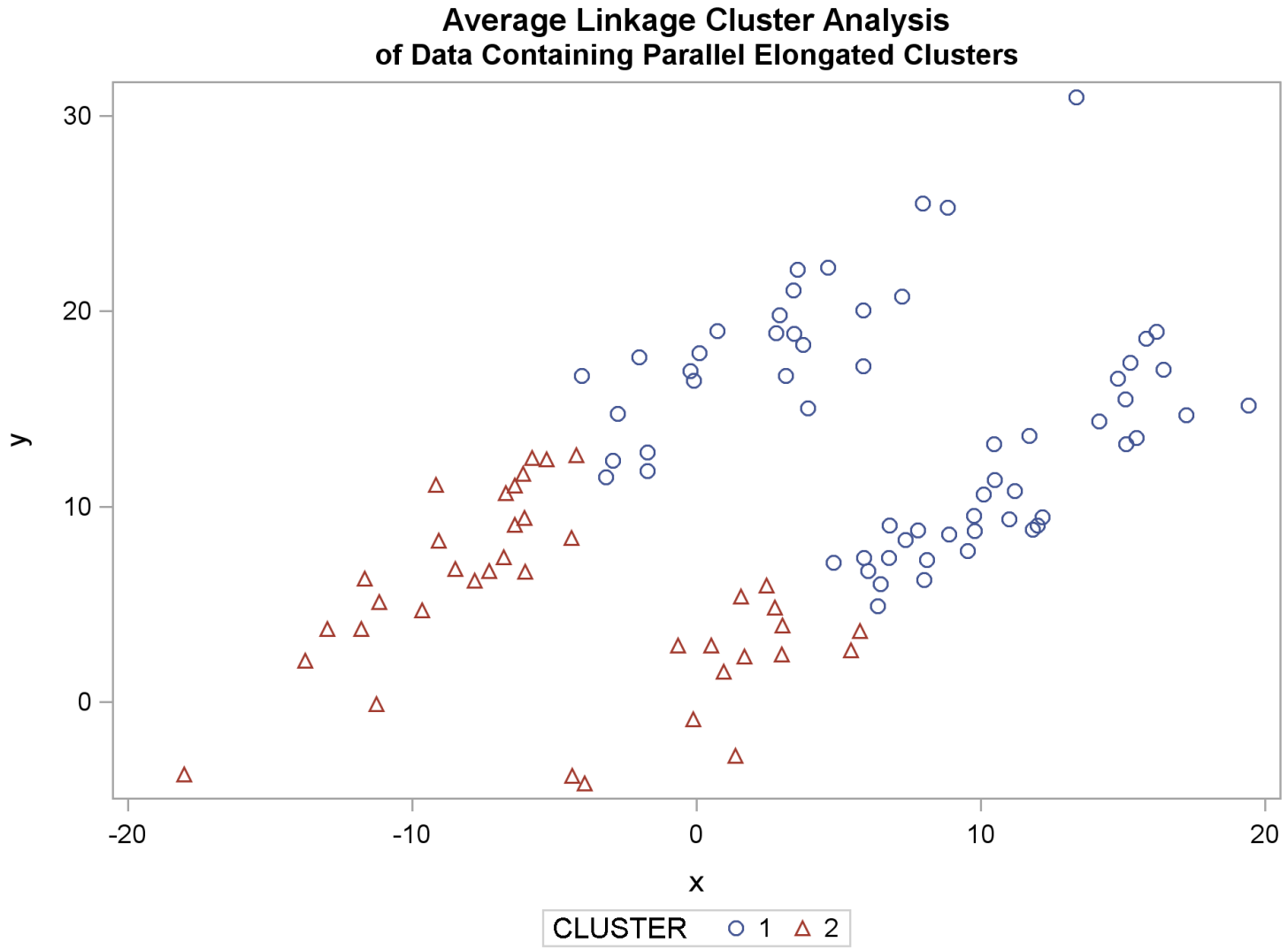
- Поможет выбор расстояния между кластерами

Выраженные кластеры – все равно какой метод

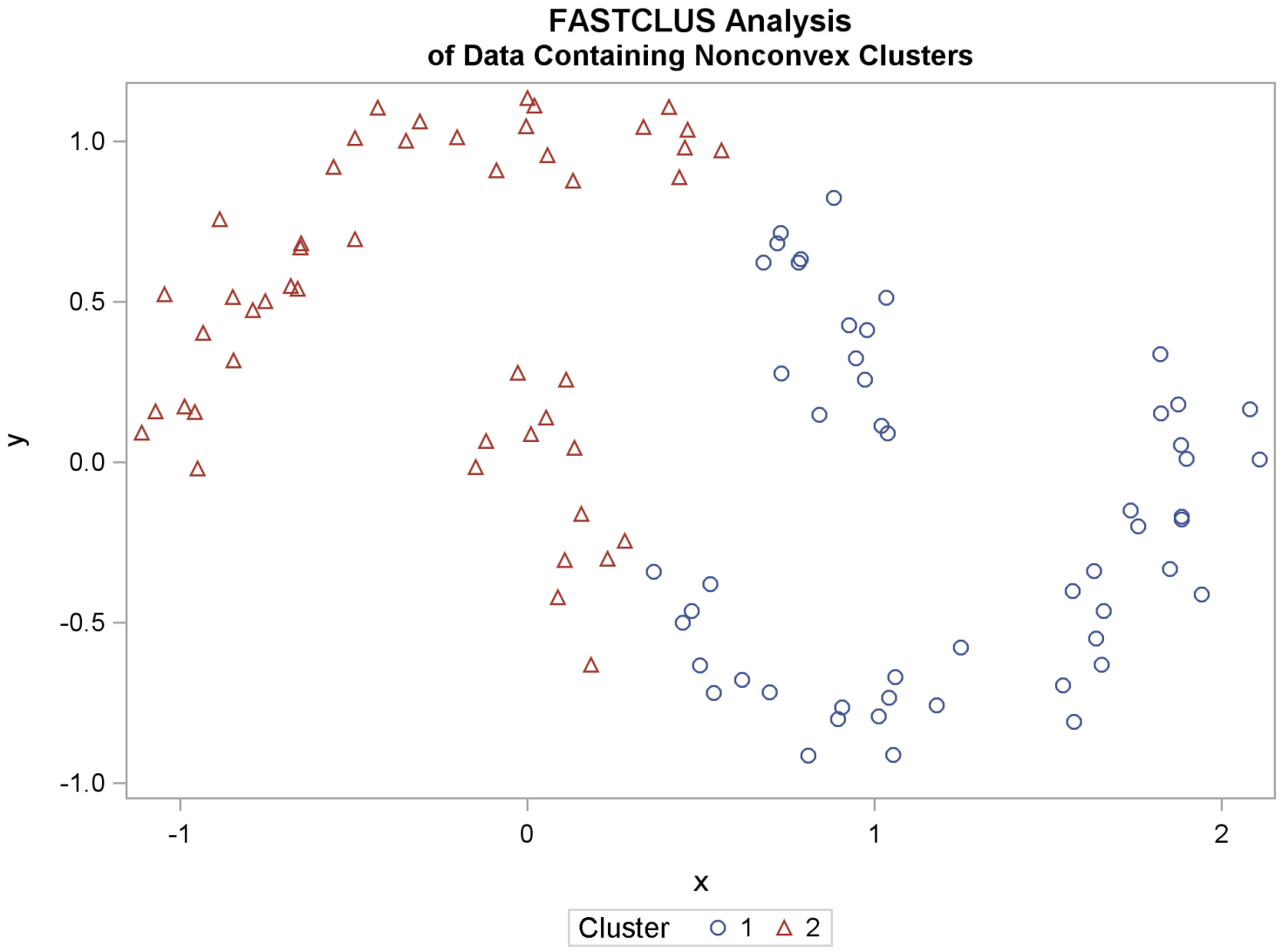



Modeclus Analysis with the JOIN= option
A Normal Cluster Surrounded by a Ring Cluster
Number of Clusters Joined=1
y
x
10
5
0
-5
-10
-15
-10
-5
0
5
10
15

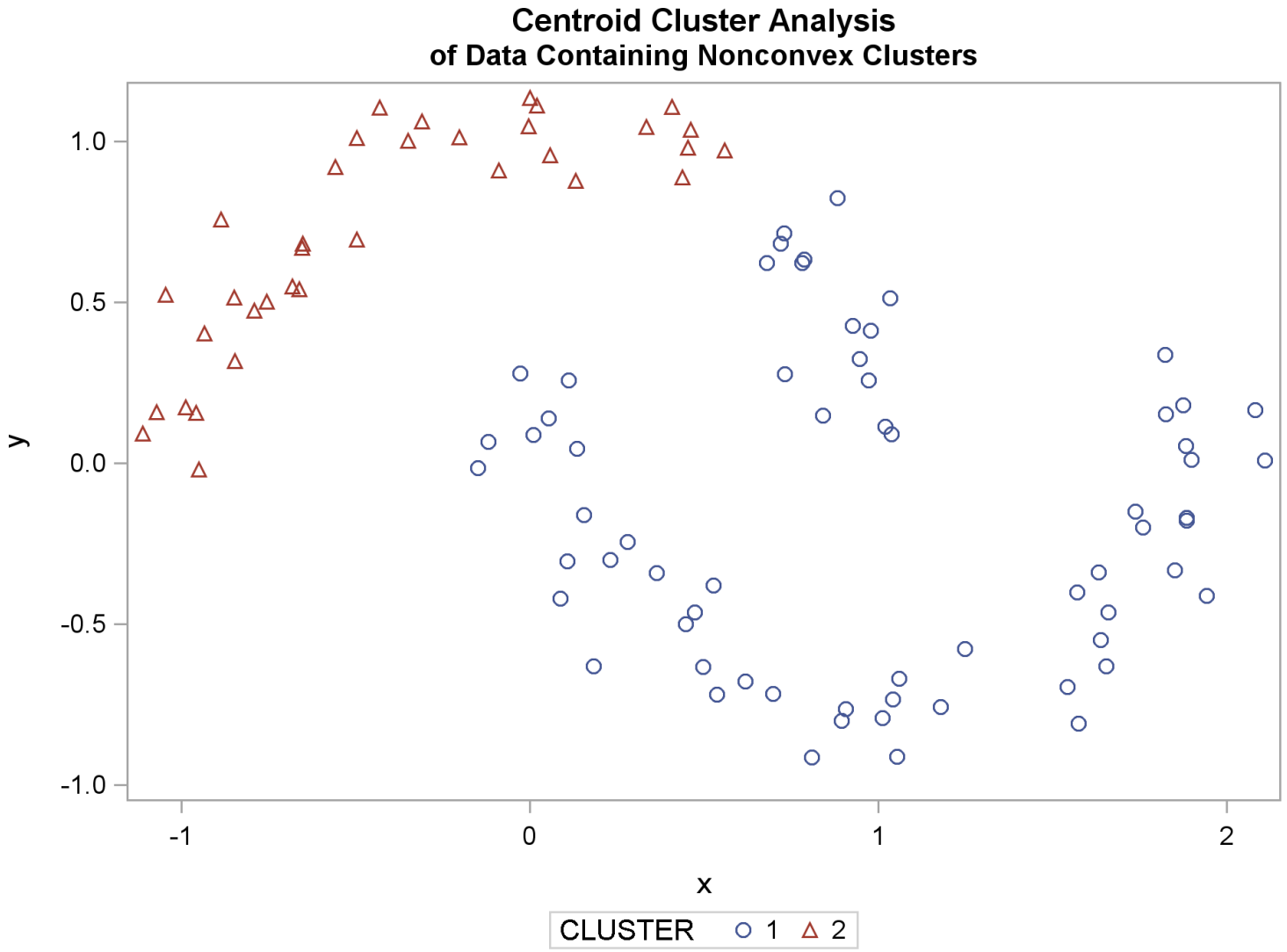
Какой метод будет лучше?



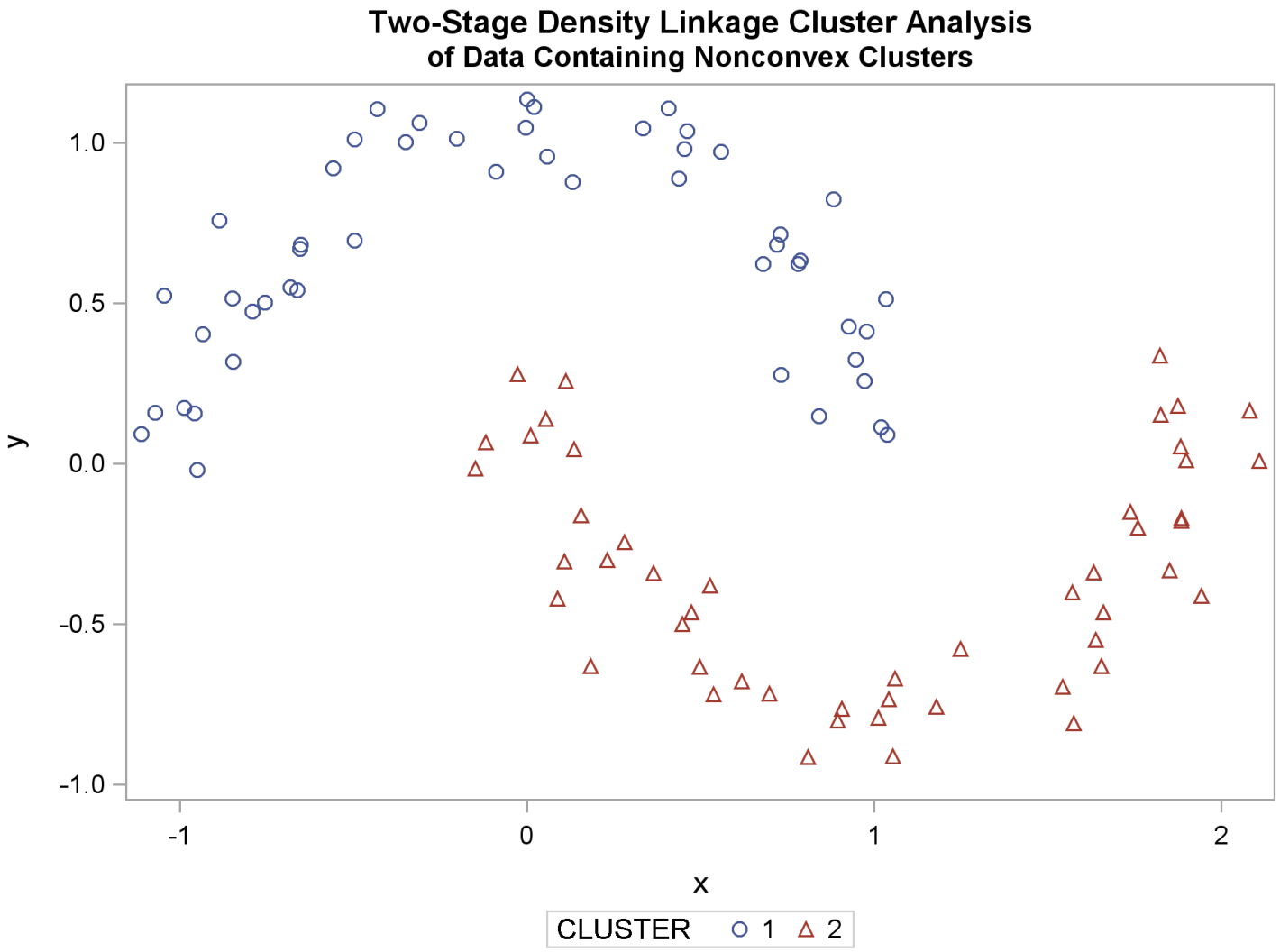
Неудача


FASTCLUS Analysis
of Data Containing Nonconvex Clusters
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
y
-1
0
1
2
x
Cluster 1 2

Неудача

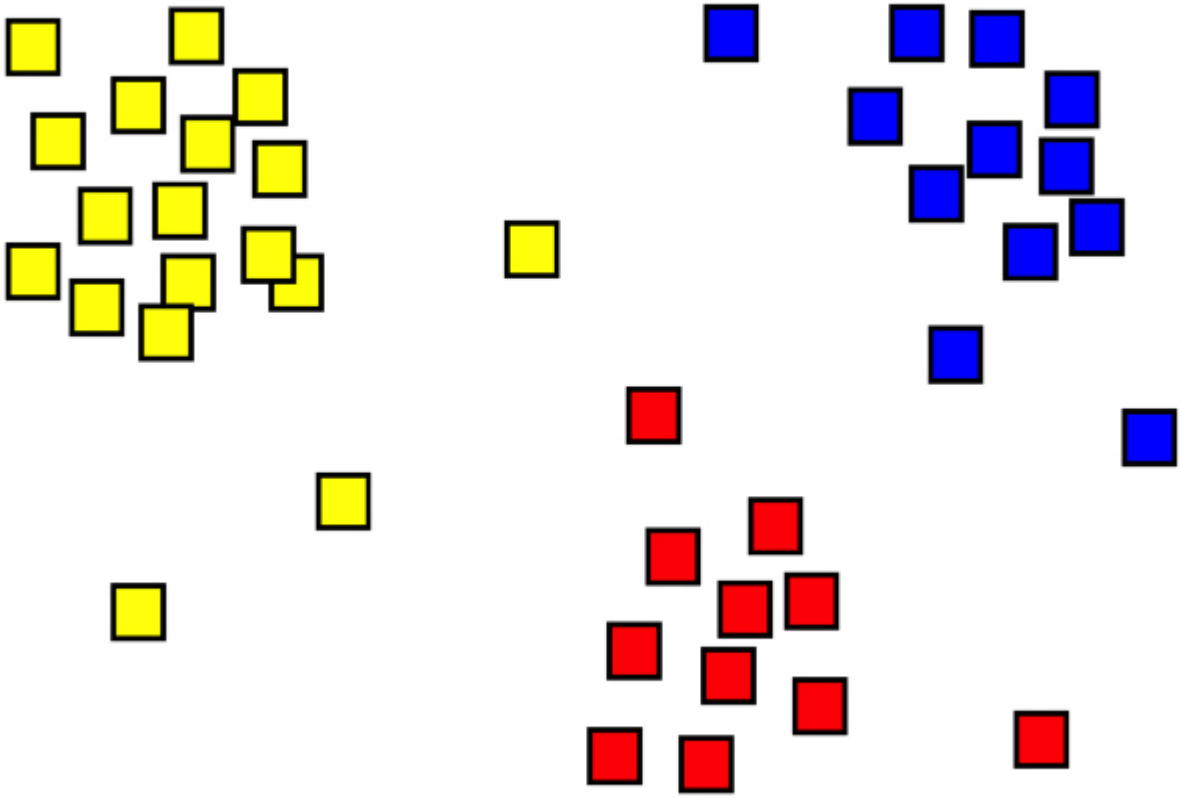

Centroid Cluster Analysis
of Data Containing Nonconvex Clusters
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
y
-1
0
1
2
x
CLUSTER
1
2

Метод ближайшего соседа



Визуализация кластеров

- Проецируем точки на плоскость
- Раскрашиваем точки из разных кластеров
- Методы: факторный анализ, многомерное шкалирование, ...



Кластеризация текстов

- При анализе текстов (NLP: Natural language Processing) объектами могут быть книги, представленные множеством слов
- Нам надо измерять схожесть книг.
-
- Сначала упрощаем каждую книгу.
- Преобразуем: все существительные в именительном падеже, единственном числе, а все глаголы в неопределенной форме.
- Затем отбрасываем малоинформативные слова, например "и", "или", "этот"

- Как упрощать тексты это отдельная непростая наука, но идея, я надеюсь понятна

- После упрощений мы можем измерить схожесть двух книг, посчитав меру Жаккарда

- Если кластер содержит единственную точку, то эта точка — выброс

- распознаем породы собак
- фотография слоненка

- Разные методы дают разные кластеризации.

- Если все методы дают одну и ту же кластеризацию?

Вопрос:

- Когда использовать евклидово расстояние, а когда растояние Манхэттен?

Большое различие по одной координате

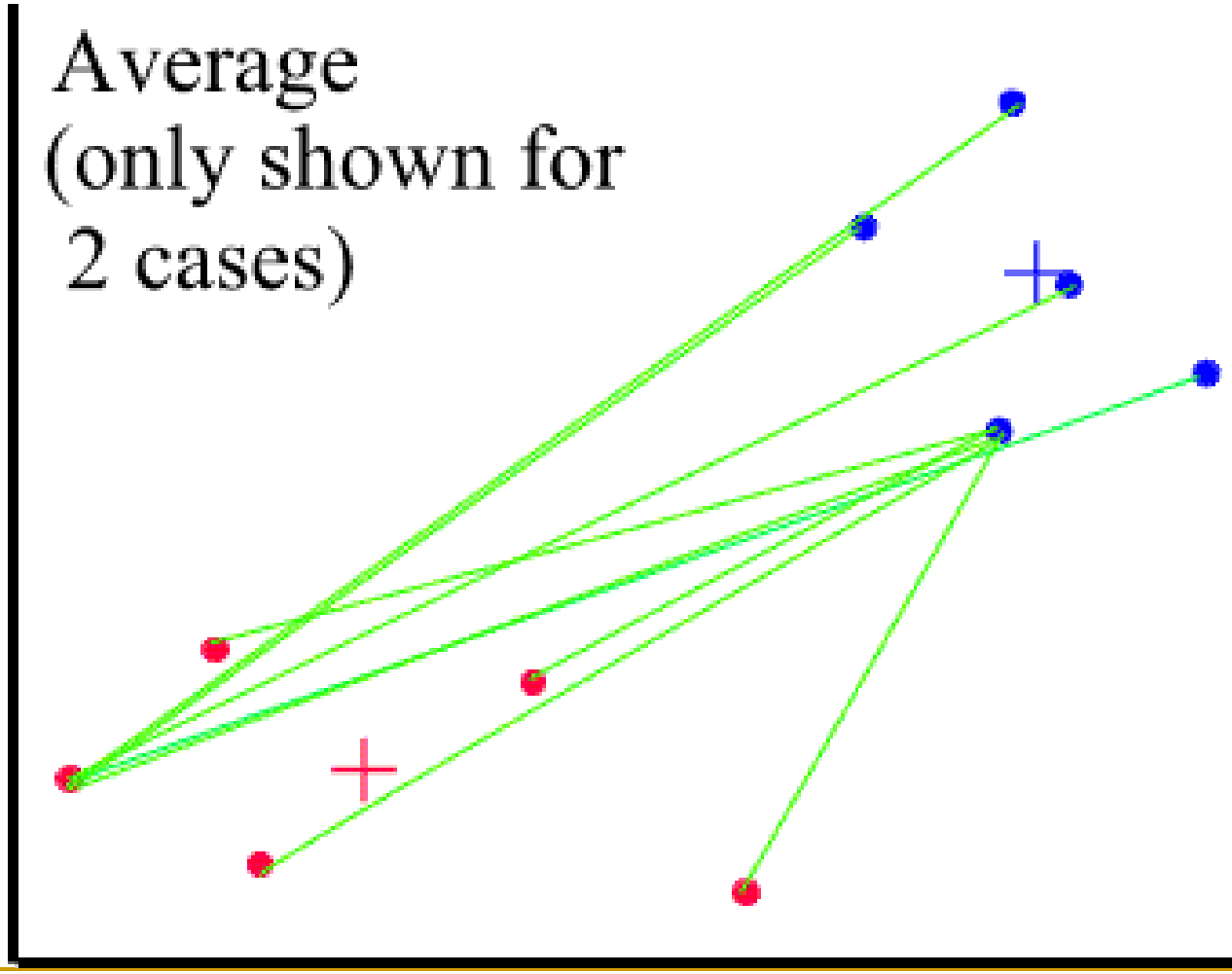
X = (1, 5, 6, 4)

Y = (11, 10, 7, 3)

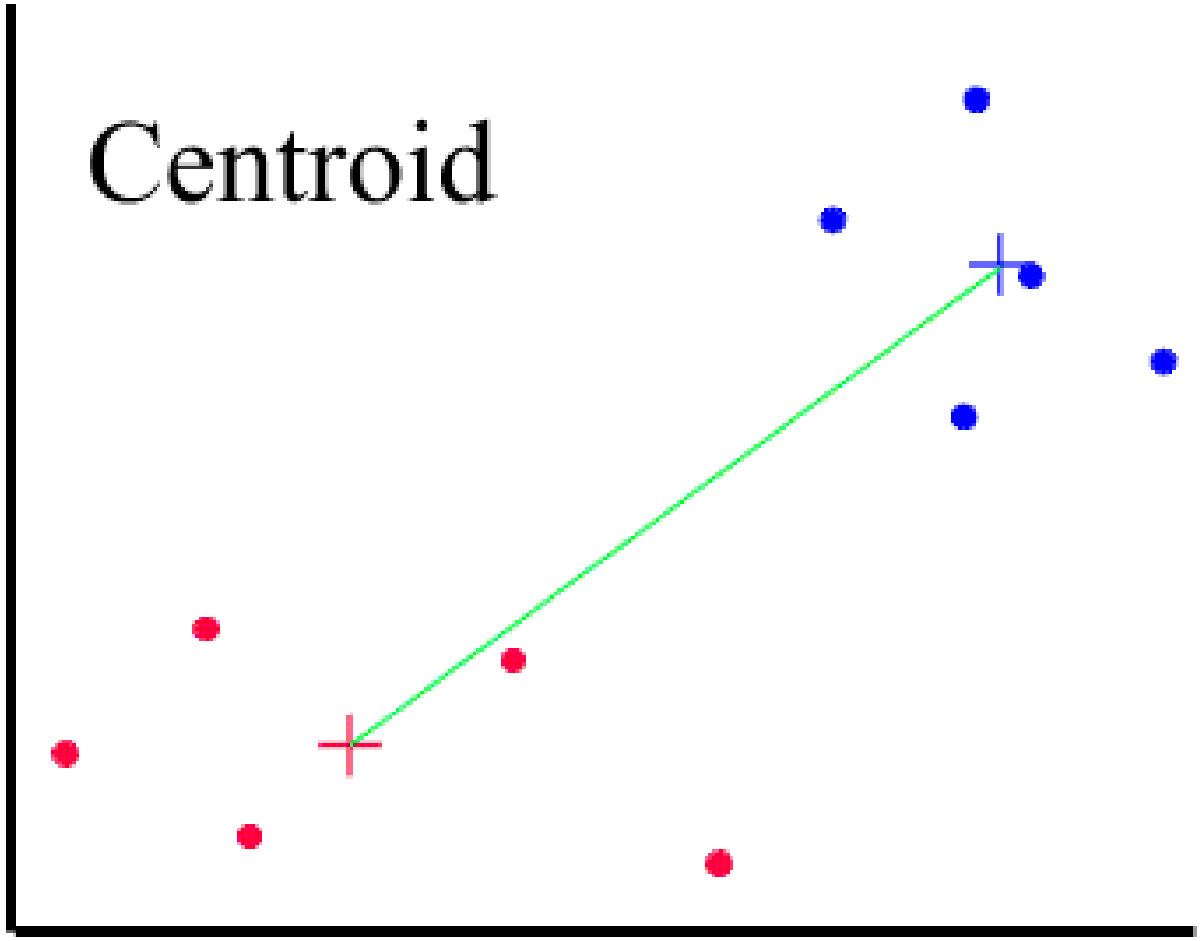
$Dist_M = 10 + 5 + 1 + 1 = 17$

$Dist_E = sqrt(100 + 25 + 1 + 1) = 11.3$

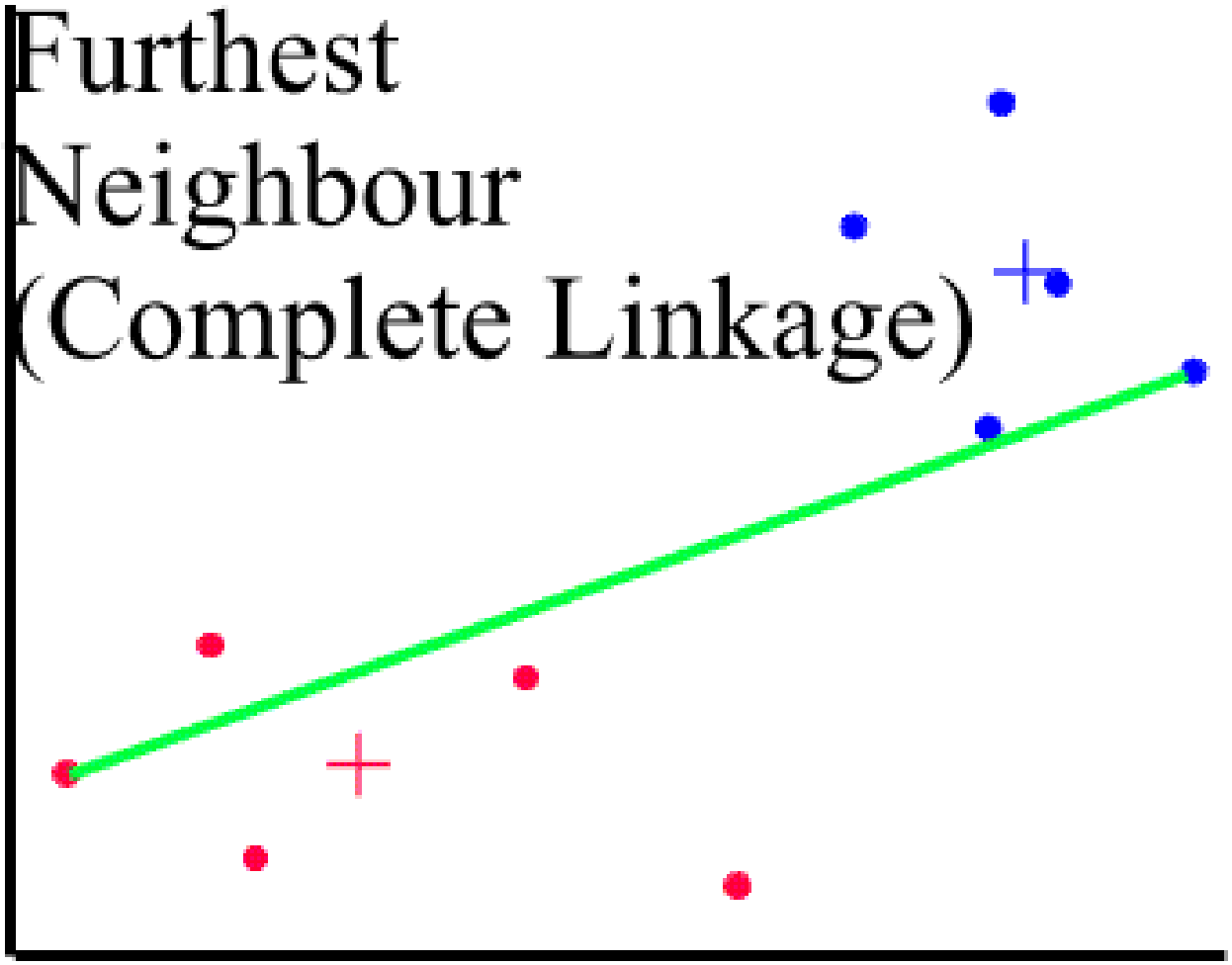
Среднее невзвешенное расстояние



Центроидный метод



Метод дальнего соседа



Метод ближнего соседа