

### План

Задача кластеризации, типы кластеризации

k-средних (Lloyd's algorithm) + обобщения

Иерархическая кластеризация (Hierarchical clustering)

**DBSCAN** = Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise

Сравнение алгоритмов кластеризации

## Кластеризация

- разбиение множества объектов на группы похожих, такие группы - кластеры

## неформально:

маленькие внутрикластерные расстояния **большие межкластерные** расстояния

### Самое важное и «скользкое»

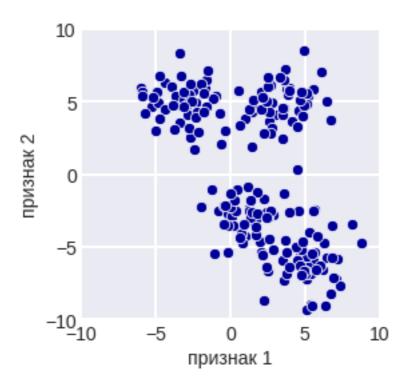
дальше предполагаем, что есть некоторая адекватная метрика!

С помощью её и будем осуществлять кластеризацию.

## Входная информация для алгоритмов

- 1. (Feature-based) Признаковые описания объектов
- 2. (Dis/similarity-based) Попарные сходства/различия

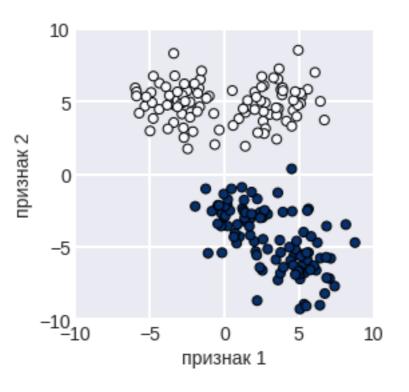
# Модельная задача кластеризации



Даны объекты (без меток)

Надо разбить на группы похожих – кластеры

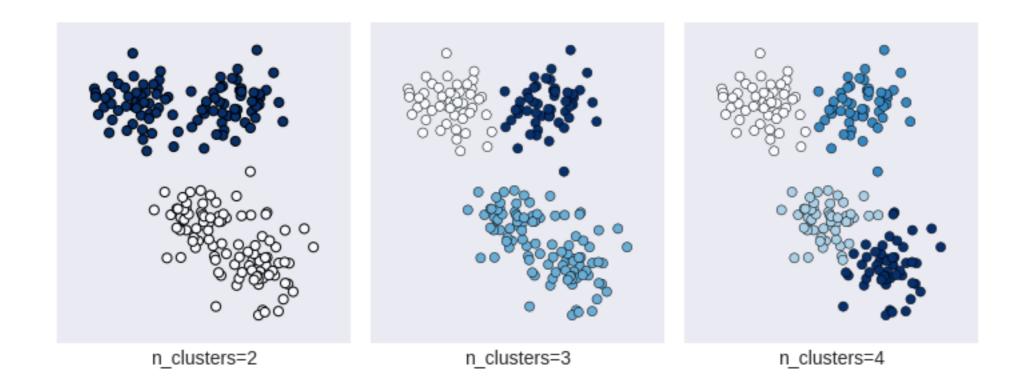
# Модельная задача кластеризации



Даны объекты (без меток)

Надо разбить на группы похожих – кластеры

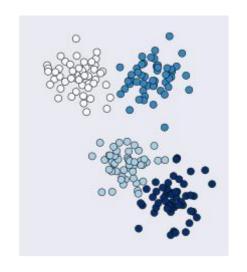
## Модельная задача кластеризации



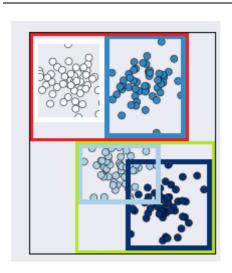
Много допустимых решений...

Нет правильного ответа!

## Методы кластеризации



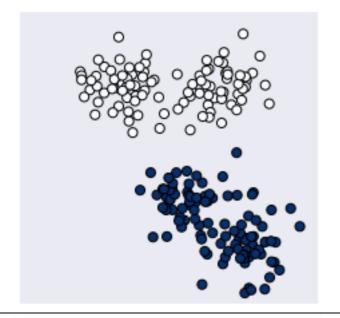
Плоские / разделяющие (Flat / Partitional) – кластеризация на k непересекающихся кластеров



**Иерархические (Hierarchical)** – данные один большой кластер, далее рекурсивно «кластер = объединение подкластеров»

~ система каталогов

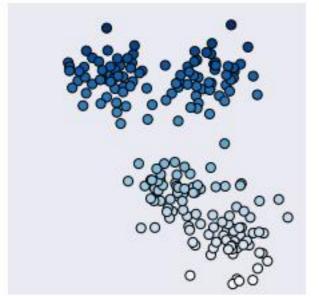
### Типы кластеризации



## чёткая (hard)

разбиение на непересекающиеся кластеры

$$\aleph = C_1 \cup \ldots \cup C_k$$
$$i \neq j \Rightarrow C_i \cap C_j = \varnothing$$



# нечёткая (мягкая, fuzzy)

определение степени принадлежности кластерам

$$x_i \to r_{it} \in [0, 1]$$

$$\forall i \in \{1, 2, ..., m\} \sum_{t=1}^k r_{it} = 1$$

#### Зачем

• кластеризация клиентов / товаров, иерархия сущностей (таксономия) (выработка таргетированной политики)

• сжатие данных

(при модерации проверять несколько представителей кластера, устранение однотипности вопросов, vector quantization – замена кластера центром)

• сообщества клиентов

(эффективное распространение новостей, предложение услуг)

• анализ данных / признаков

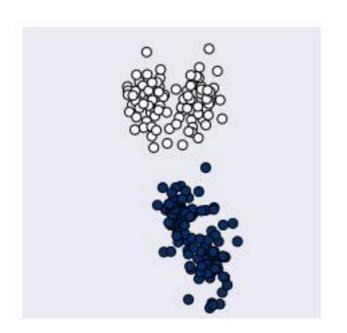
(классическая идея математики – факторизация)

• важная составляющая решения других задач

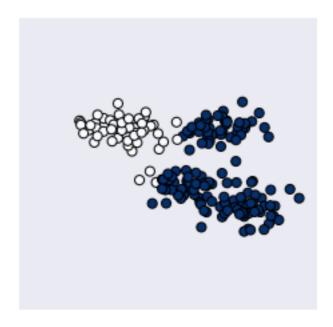
(semi-supervised, outlier detection, community detection) была в методах сэмплирования и много где ещё...

Редко бывает самостоятельной задачей! Но важный этап

## Проблемы с расстоянием







сжали по второму признаку

Часто используют стандартизацию, но она может всё портить...

В кластеризации считаем, что метрика адекватна

## k-средних (Lloyd's algorithm)

Вход:

$$\{x_1,\ldots,x_m\}\subseteq\mathbf{R}^n$$

## Инициализация:

k центров кластеров  $\{\mu_1, \ldots, \mu_k\} \subseteq \mathbf{R}^n$ 

### Итерация:

1. Каждый объект приписать к тому кластеру, к центру которого он ближе:

$$C_t = \{i \mid || x_i - \mu_t || = \min_i || x_i - \mu_j || \}$$

2. Пересчитать центры кластеров:

$$\mu_t = \frac{1}{|C_t|} \sum_{i \in C_t} x_i$$

случайные точки или случайные объекты из обучающей выборки

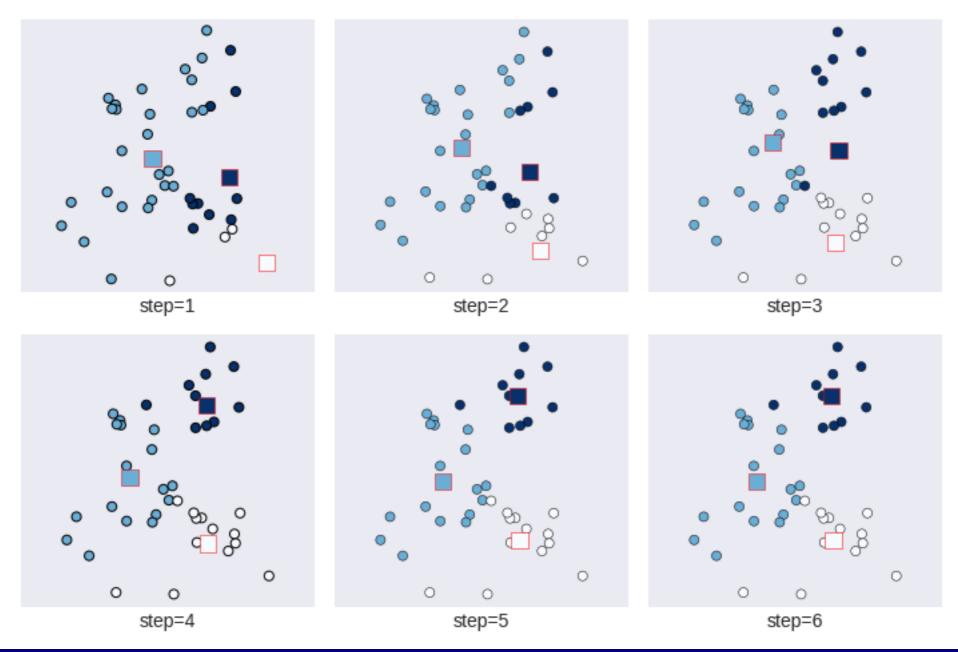
повторять итерации до сходимости (пока центры станут неподвижными) «assignment»

Ничьи разрешаются произвольно «update»

при неопределённости вида «деление на ноль» оставляем центр неизменным

метод ~ координатный спуск

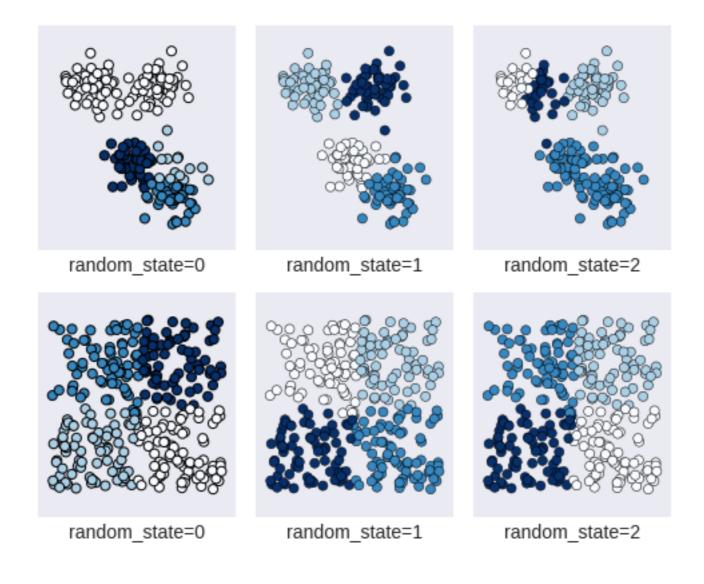
# Итерации метода k-средних



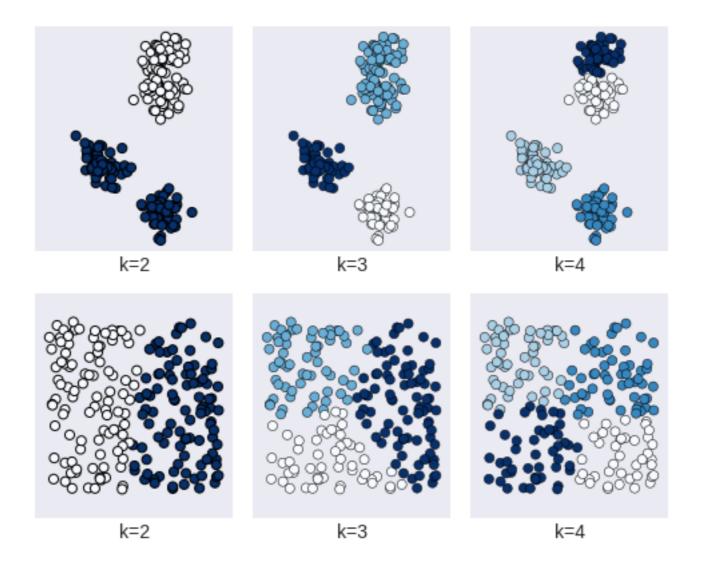
## Код

```
# запуск алгоритма
from sklearn.cluster import KMeans
model = KMeans(n clusters=8, # число кластеров
           init='k-means++', # метод инициализации: «random», ndarray
                             # сколько раз алгоритм запускается
          n init=10,
                             # (выбирается лучший ответ)
          max iter=300, # максимальное число итераций для каждого алгоритма
           tol=0.0001,
                             # порог для определения сходимости
          verbose=0,
           random state=None,
           copy x=True, # данные модифицируются и центрируются...
           algorithm='lloyd') # какой алгоритм использовать: «elkan» (использует
                             # неравенство треугольника, но не подходит для
                              # разреженных данных)
a = model.fit predict(X)
# визуализация
import matplotlib.pyplot as plt
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=a)
```

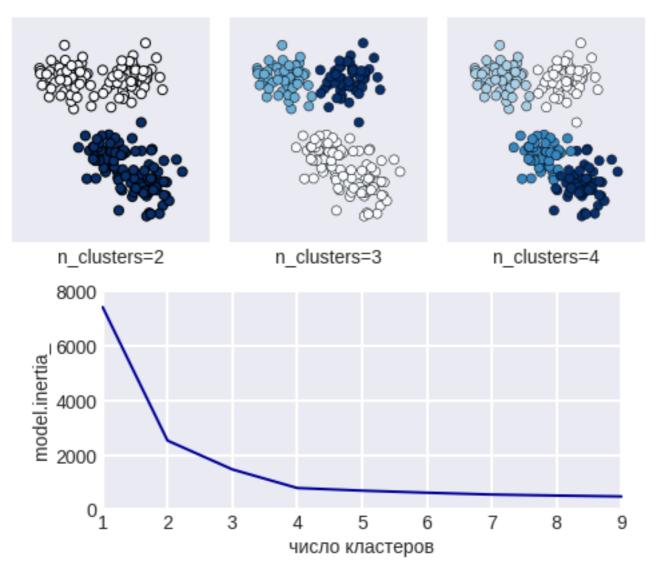
# Разная начальная инициализация



# Разное число кластеров k



# Вариант для выбора k



выбираем лучшую инициализацию из 5

## Сходимость метода

- теоретически может сходиться долго, но на практике быстро

средняя сложность 
$$O(kmn_{\text{iter}})$$
 худший случай  $O(m^{(k+2/n)})$ 

- D. Arthur, S. Vassilvitskii «How slow is the k-means method?» SoCG2006
  - сходимость к локальному минимуму
- чувствителен к начальной инициализации (могут получаться разные ответы):
  - качество кластеризации
    - скорость сходимости
      - нужен выбор k

## Реализация на практике и обобщения

## несколько разных инициализаций и перезапусков

эвристика: 1й центр – один из объектов, 2й – максимально удалённый от первого, 3й – максимально удалённый от предыдущих центров и т.д.

на самом деле тут вероятностный выбор, поэтому разные перезапуски – k-means++

Fuzzy / soft k-means – вместо чёткой принадлежности – нечёткая дальше

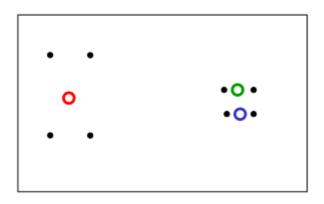
k-medians (medoids) – другие усреднения (для борьбы с выбросами)

k-means + kernel tricks

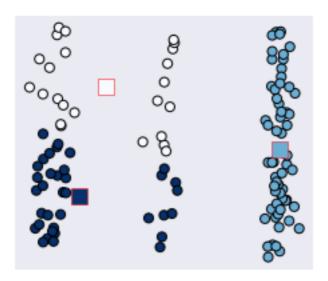
## k-means: ограничения

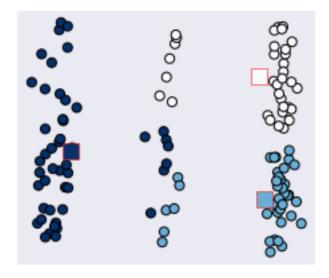
- хорошо работает для примерно равномощных кластеров с «шаровой формой» будут рисунки, потом поймём почему (GMM)

– оптимизируемый функционал не выпуклый



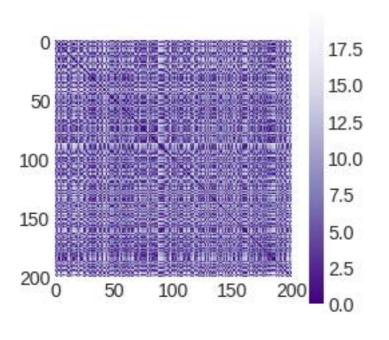
много локальных минимумов

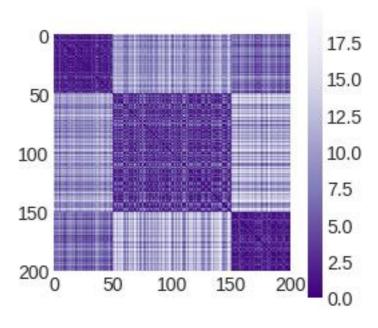




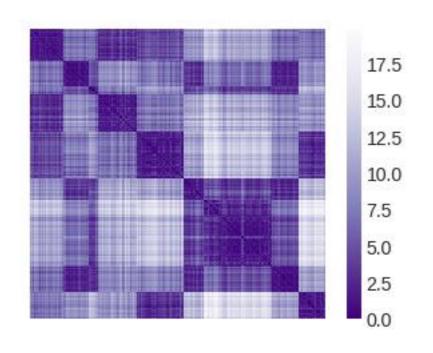
# **Иллюстрация**

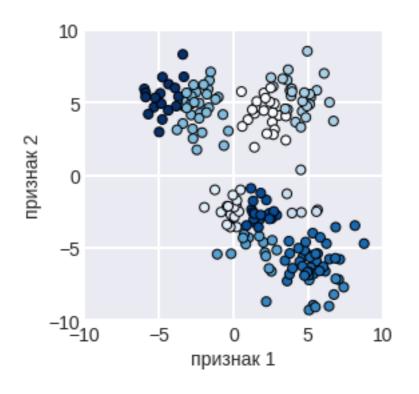
# Матрица попарных расстояний до и после кластеризации (объекты упорядочены по кластерам)



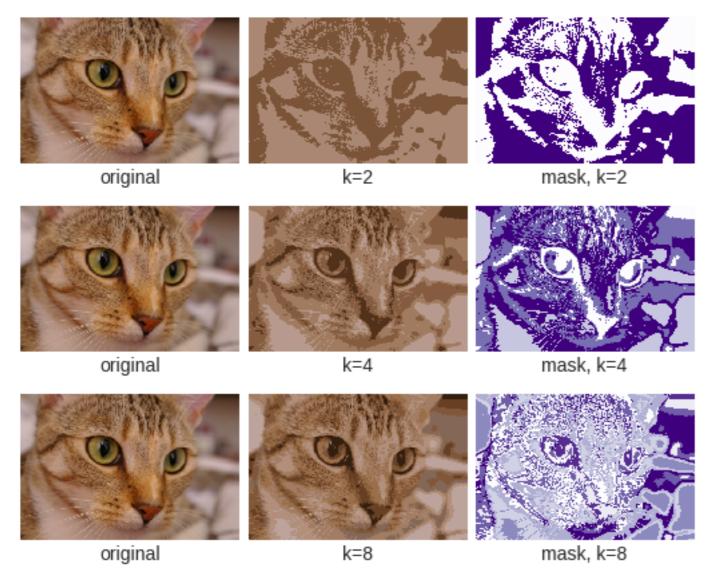


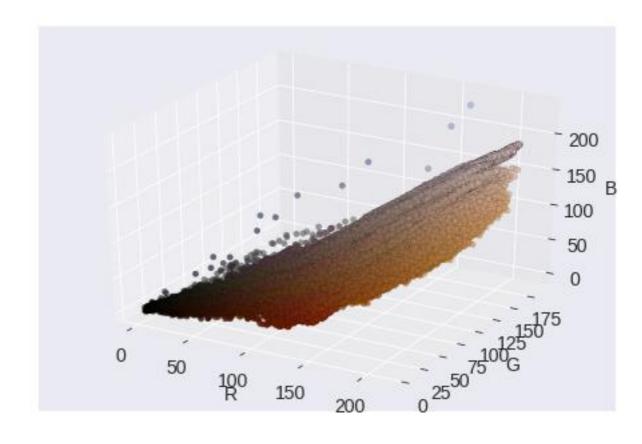
# Иллюстрация





## Пример k-means: сегментации в изображениях





**Не надо хранить все цвета, а только k – хорошее сжатие** 

## Пример k-means: сегментации в изображениях

```
def simplify_image(image, k=10):
    image2 = image.copy()
    image2.resize([image.shape[0]*image.shape[1], 3])
    model = KMeans(n_clusters=k, random_state=11)
    model.fit(image2)
    result = model.cluster_centers_.round().astype(int)[model.labels_,:]
    result.resize([image.shape[0], image.shape[1], 3])
    mask = model.labels_
    mask.resize([image.shape[0], image.shape[1]])
    return result, mask
```











# Пример k-means: сегментации в изображениях



# k-Means – немного перепишем алгоритм

Вход:

$$\{x_1,\ldots,x_m\}\subseteq\mathbf{R}^n$$

Инициализация:

$$k$$
 центров кластеров  $\{\mu_1, \ldots, \mu_k\} \subseteq \mathbf{R}^n$ 

## Итерация:

1. Каждый объект приписать к тому кластеру, к центру которого он ближе:

$$C_t = \{i \mid || x_i - \mu_t || = \min_i || x_i - \mu_j || \}$$

2. Пересчитать центры кластеров:

$$\mu_t = \frac{1}{|C_t|} \sum_{i \in C_t} x_i$$

$$r_{it} = I[||x_i - \mu_t|| = \min_s ||x_i - \mu_s||]$$
 считаем, что минимум единственный

$$\mu_{t} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{m} r_{it}} \sum_{i=1}^{m} r_{it} x_{i}$$

#### soft k-Means

Вход:

$$\{x_1,\ldots,x_m\}\subseteq\mathbf{R}^n$$

Инициализация:

$$k$$
 центров кластеров  $\{\mu_1, \ldots, \mu_k\} \subseteq \mathbf{R}^n$ 

## Итерация:

- 1. Для каждого объекта оценку принадлежности к каждому кластеру
  - 2. Пересчитать центры кластеров:

Изменения:

$$r_{it} = \frac{\exp(-\beta || x_i - \mu_t ||)}{\sum_{j} \exp(-\beta || x_i - \mu_j ||)}$$

$$\mu_t = \frac{1}{\sum_{i=1}^{m} r_{it}} \sum_{i=1}^{m} r_{it} x_i$$

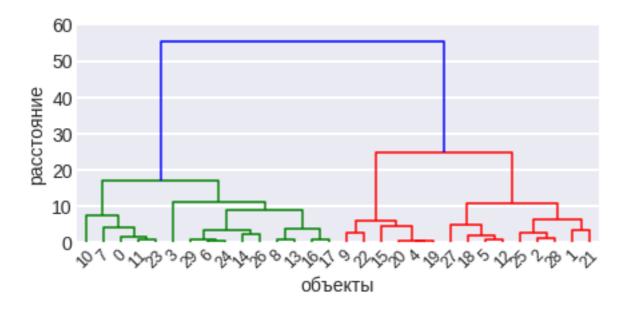
#### soft k-Means

- + мягкая кластеризация
- + иногда работает лучше
- выбор параметра «бета»
- остались проблемы «продолговатые кластеры» кластеры разной мощности

http://qaru.site/questions/611120/minibatchkmeans-parameters

# Иерархическая кластеризация (Hierarchical clustering)

# ИК в отличии от плоской (Flat Clustering) получает серию вложенных друг в друга кластеризаций (⇒ не требует заранее заданного числа кластеров)



ИК может быть долгой...

https://en.wikipedia.org/wiki/Hierarchical\_clustering

# Два подхода к иерархической кластеризации

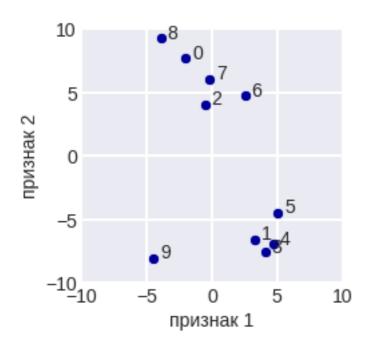
# Агломеративный (Agglomerative / bottom-up)

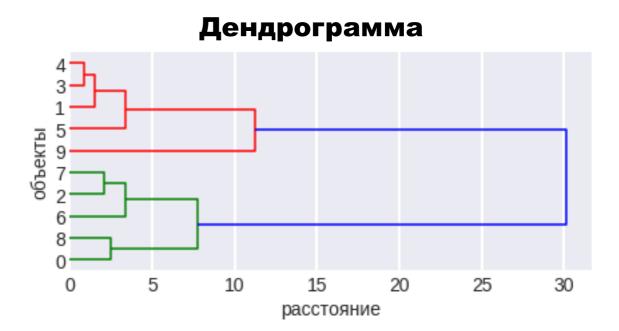
- изначально число кластеров совпадает с числом объектов, каждый кластер содержит один объект обучения
- на каждом шаге объединяем два наиболее похожих кластера
- останавливаемся, если остаётся один кластер
- чаще используют (проще реализовать)

# Дивизионный (Divisive / top-down)

- изначально есть один кластер,
   содержащий все объекты обучения
- расщепить кластер с максимальными внутрикластерными расстояниями да два
- останавливаемся, когда число кластеров совпадает с числом объектов

# Визуализация иерархической кластеризации





Корень дерева – кластер, который содержит все объекты

## Визуализация иерархической кластеризации

```
from scipy.cluster.hierarchy import dendrogram
from sklearn.cluster import AgglomerativeClustering
def plot dendrogram(model, **kwargs):
    # Create linkage matrix and then plot the dendrogram
    # create the counts of samples under each node
    counts = np.zeros(model.children .shape[0])
    n samples = len(model.labels )
    for i, merge in enumerate(model.children):
        current count = 0
        for child idx in merge:
            if child idx < n samples:</pre>
                current count += 1 # leaf node
            else:
                current count += counts[child idx - n samples]
        counts[i] = current count
    linkage matrix = np.column stack([model.children ,
                                      model.distances ,
                                      counts]).astype(float)
    # Plot the corresponding dendrogram
    dendrogram(linkage matrix, **kwargs, orientation = 'right')
    return linkage matrix
```

# Как измерить расстояния между кластерами – типы Linkage

Linkage		Описание
Complete		Maximal inter-cluster dissimilarity
Jonipiete		$\max_{x \in A, x' \in B} \operatorname{dis}(x, x')$
Single		Minimal inter-cluster dissimilarity
		$\min_{x \in A, x' \in B} \operatorname{dis}(x, x')$
Average		Mean inter-cluster dissimilarity $\frac{1}{ A  \cdot  B } \sum_{x \in A, x' \in B} \operatorname{dis}(x, x')$
Centroid	Dissimilarity between the centroid for cluster A and B	
		$\operatorname{dis}(\overline{x}_A, \overline{x}_B)$

## Как измерить расстояния между кластерами – типы Linkage

## Расстояние Варда (Ward's measure)

изменение суммы квадратов

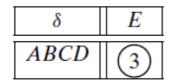
$$\lambda(X) = \sum_{x \in X} ||x - \overline{X}||^2$$

после объединения кластеров:

$$\lambda(A \cup B) - \lambda(A) - \lambda(B) = \frac{1}{\frac{1}{|A|} + \frac{1}{|B|}} ||\overline{A} - \overline{B}||^2$$

Можно доказать...

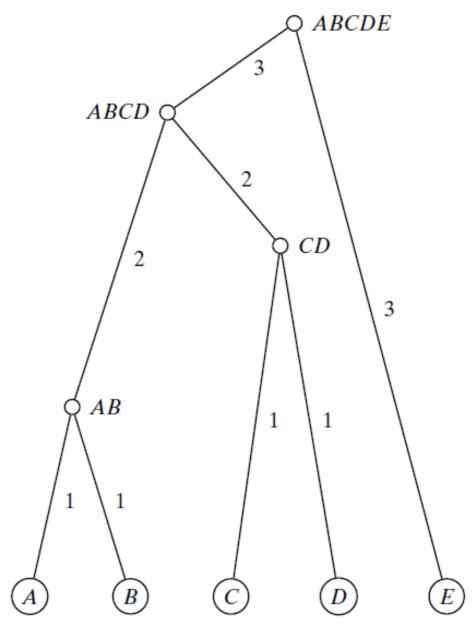
# **Single Link**



δ	CD	E
AB	(2)	3
CD		3

δ	C	D	$\boldsymbol{E}$
AB	3	2	3
C		1	3
D			5

δ	В	C	D	$\boldsymbol{E}$
A	1	3	2	4
В		3	2	3
C			1	3
D				5



#### **Lance-Williams formula**

## «Lance-Williams formula» при объединении кластеров

## не будем рассматривать

$$\delta(C_{ij}, C_r) = \alpha_i \cdot \delta(C_i, C_r) + \alpha_j \cdot \delta(C_j, C_r) + \beta \cdot \delta(C_i, C_j) + \gamma \cdot \left| \delta(C_i, C_r) - \delta(C_j, C_r) \right|$$

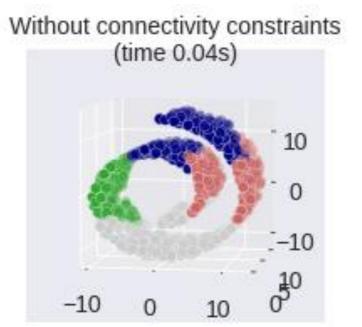
Measure	$\alpha_i$	$\alpha_j$	β	γ
Single link	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$
Complete link	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$
Group average	$\frac{n_l}{n_l + n_j}$	$\frac{n_j}{n_l+n_j}$	0	0
Mean distance	$\frac{n_l}{n_l + n_j}$	$\frac{n_j}{n_l+n_j}$	$\frac{-n_l \cdot n_j}{(n_l + n_j)^2}$	0
Ward's measure	$\frac{n_l + n_r}{n_l + n_j + n_r}$	$\frac{n_j + n_r}{n_l + n_j + n_r}$	$\frac{-n_{I}}{n_{I}+n_{J}+n_{I}}$	0

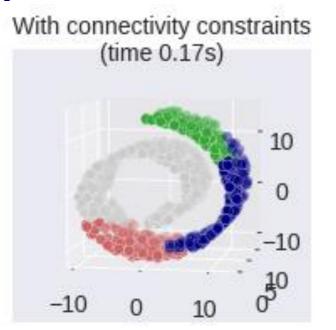
https://en.wikipedia.org/wiki/Ward's\_method

## Агломеративная кластеризация

```
clustering = AgglomerativeClustering(n clusters=2, # число кластеров
    affinity='deprecated',
   metric=None,
                              # «euclidean», «11», «12», «manhattan», «cosine»,
                              # «precomputed»
                             # кэшировать ли память
   memory=None,
    connectivity=None,
                             # матрица связности (матрица или функция), чтобы только
                              # соседние кластеры объединялись, по умолчанию нет
    compute_full_tree='auto', # остановить построение дерева
                              # при достижении числа кластеров
                             # критерий слияния: «ward», «complete», «average»,
    linkage='ward',
                              # «single»
    distance threshold=None, # порог между кластерами - до которого они сливаются
    compute distances=False).fit(X) # вычислять расстояния между кластерами
                                    # (даже после достижения порога)
clustering.labels
array([1, 1, 1, 0, 0, 0])
```

#### Использование матрицы связности

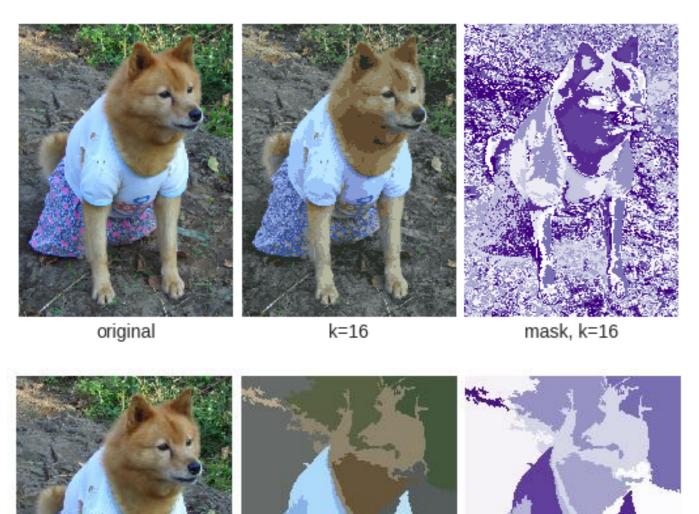




матрица k-соседства

## Агломеративная кластеризация для сокращения признакового пространства

```
from sklearn import cluster
agglo = cluster.FeatureAgglomeration(n_clusters=32)
agglo.fit(X)
X_reduced = agglo.transform(X)
X.shape, X_reduced.shape
(1797, 64), (1797, 32)
```



k=16

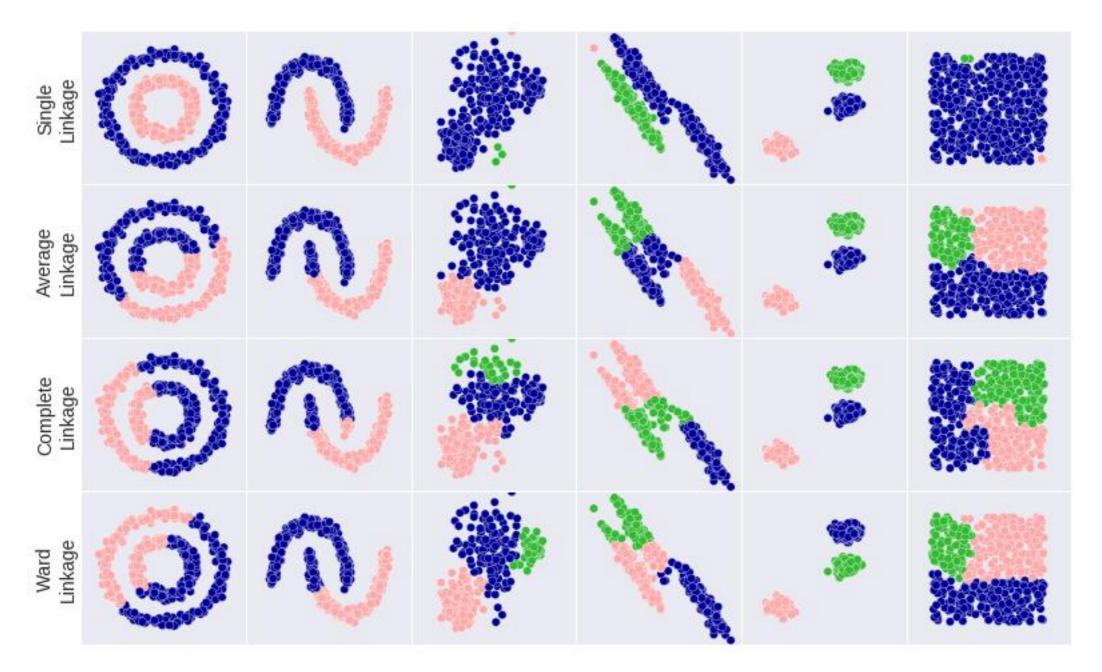
mask, k=16

Кластеризация пикселей по признакам (R, G, B)

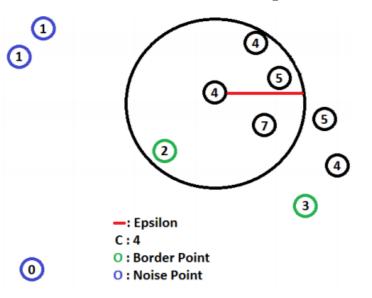
Сегментации в изображениях по признакам (R, G, B) по графу 4-соседства

original

# Разные виды связности



# DBSCAN = Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise Алгоритм с маркировкой точек как шум и т.п.



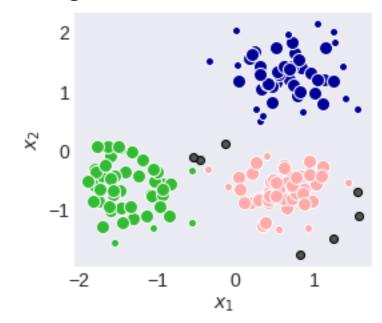
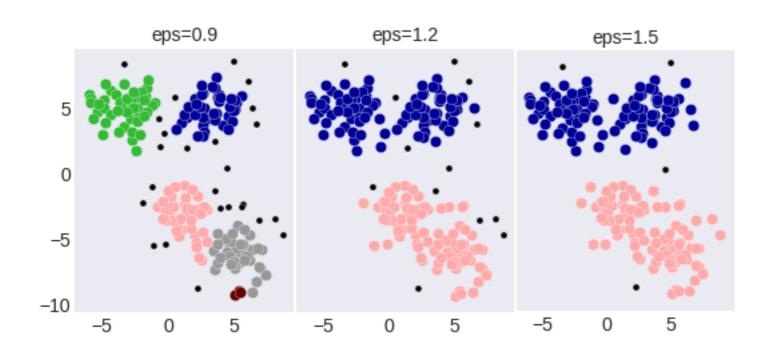
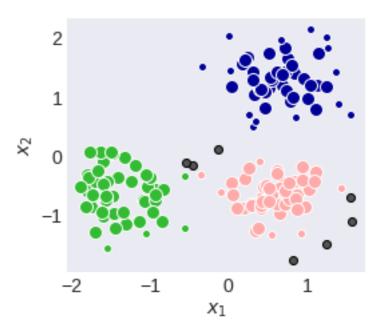


Figure 2: Noise Points in DBSCAN

- для каждой точки строим круг радиуса  ${\mathcal E}$
- если в круге есть как минимум k точек она плотная / основная (core point)
- если нет, но есть плотные точки она граничная / достижимая (border point) иногда если есть путь точек на расстоянии <  ${\cal E}$  до основной точки
- иначе шум (noise point)
- множество основных точек кластеризовать SingleLink с пороговым расстоянием  $\geq \ \mathcal{E}$
- множество граничных точек к соответствующим кластерам

# **DBSCAN = Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise**





#### **DBSCAN** = Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise

- + кластеры произвольной формы
- + можно работать с большими данными
- + детерминированный (нет случайности, ответ однозначный)

но может зависеть от порядка данных

(как приписываемые метки, так и приписывание неосновные точек)

- неудобные гиперпараметры
- когда плотности сильно неоднородны
- не применяют для высокоразмерных данных

y scikit-learn-реализации могут быть проблемы с памятью

Ester, M., H. P. Kriegel, J. Sander, X. Xu «A Density-Based Algorithm for Discovering Clusters in Large Spatial Databases with Noise» // In: Proceedings of the 2nd International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, Portland, OR, AAAI Press, pp. 226-231. 1996

### **DBSCAN = Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise**

```
from sklearn.cluster import DBSCAN

clustering = DBSCAN(eps=0.5, # порог близости

min_samples=5, # число объектов в окрестности, чтобы считать точку основной metric='euclidean', # метрика

metric_params=None, # параметры метрики

algorithm='auto', # алгоритм для нахождения ближайших соседей: «auto»,

# «ball_tree», «kd_tree», «brute»

leaf_size=30, # размер листьев в BallTree / KDTree

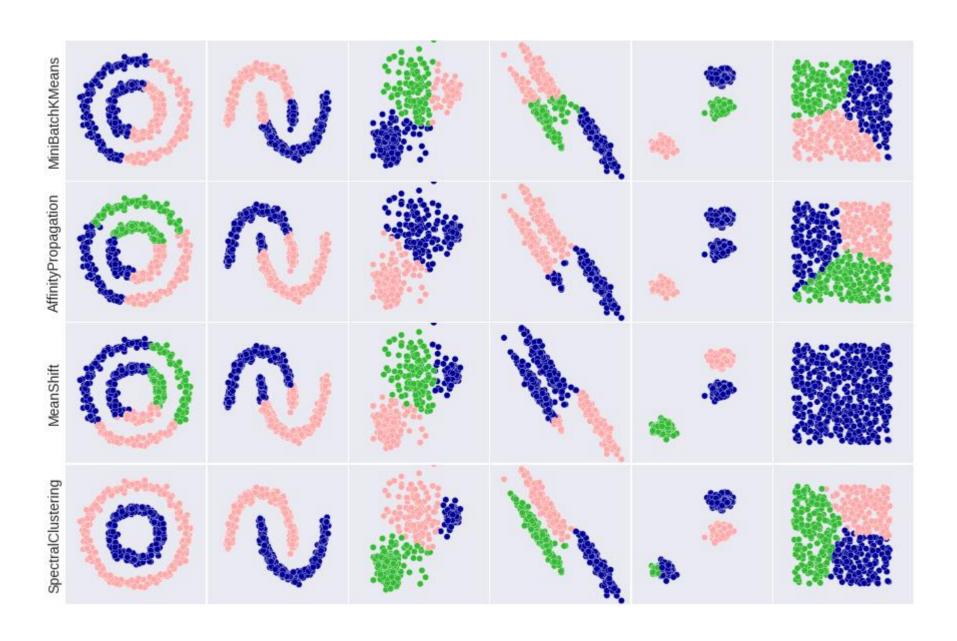
p=None, # степень в метрике Минковского

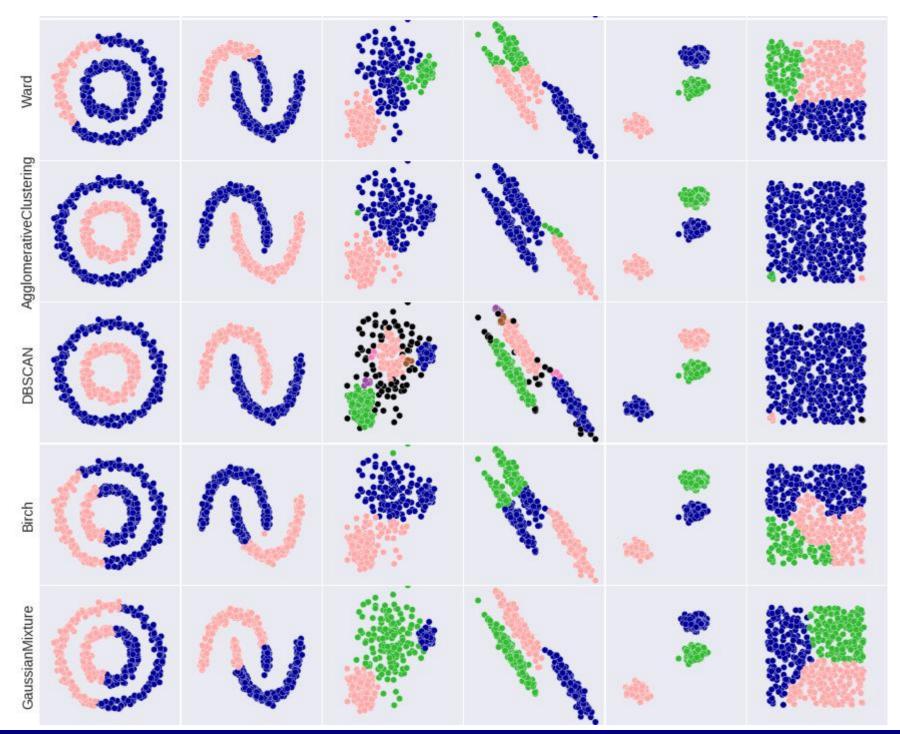
n_jobs=None)

clustering.fit(X)

labels = clustering.labels
```

# Сравнение алгоритмов кластеризации





#### Оценка результатов кластеризации

Если знаем верную кластеризацию... внешняя оценка (External evaluation)

Вопрос: когда?

ничего не знаем ⇒ согласованность с данными внутренняя оценка (Internal evaluation)

#### Оценка результатов кластеризации: «Internal evaluation»

# Пусть чёткая (нет пересечений) кластеризация $U=u_1\cup\ldots\cup u_{|U|}$ множества $X=\{x_1,\ldots,x_m\}$

#### **Davies-Bouldin index**

Использует центроиды и дисперсии

#### **Dunn index =**

min между кластерами / max внутри кластерами

#### **Silhouette**

$$x_i \in u_1, d(x_i, u_2) \le d(x_i, u_3) \le \dots$$

Расстояние считается как среднее до всех точек кластера

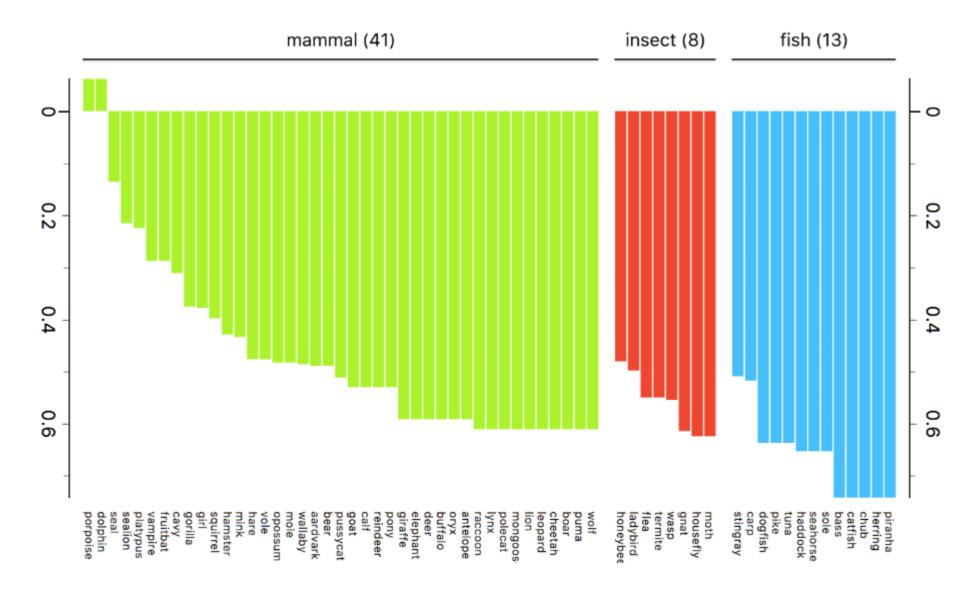
$$DB = \frac{1}{|U|} \sum_{i=1}^{|U|} \max_{j \neq i} \left( \frac{\sigma_i + \sigma_j}{d(c_i, c_j)} \right)$$

$$D = \frac{\min_{1 \le i < j \le |U|} d(u_i, u_j)}{\max d_{in}(u_i)}$$

silhouette(
$$x_i$$
) = 
$$\frac{d(x_i, u_2) - d(x_i, u_1)}{\max(d(x_i, u_2), d(x_i, u_1))}$$

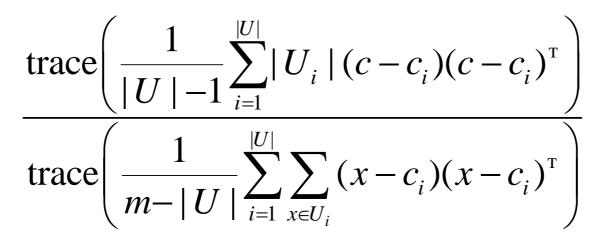
Можно усреднять по точкам

### Оценка результатов кластеризации: «Internal evaluation»



https://en.wikipedia.org/wiki/Silhouette\_(clustering)

## Calinski-Harabasz Index (Variance Ratio Criterion)



след матрицы межклассовой ковариации / след матрицы внутриклассовой ковариации  $\mathcal{C}$  – центроид всей выборки

лучше подходит для выпуклых кластеров и евклидовой метрики

## External evaluation: взаимная информация

### Пусть чёткие (нет пересечений) кластеризации

$$U = u_1 \cup \ldots \cup u_{|U|}$$
$$V = v_1 \cup \ldots \cup v_{|V|}$$

множества  $X = \{x_1, ..., x_m\}$ 

$$p_i = \frac{|u_i|}{m}$$

$$H(U) = -\sum_{i=1}^{|U|} p_i \log p_i$$

Аналогично H(V)

$$p_{ij} = \frac{|u_i \cap v_j|}{m}$$

$$MI = \sum_{i=1}^{|U|} \sum_{j=1}^{|V|} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{p_i p_j}$$

потом MI ~ насколько более чётко определена U при знании V

# External evaluation: нормализованная взаимная информация Normalized Mutual Information

$$NMI(U,V) = \frac{MI(U,V)}{\text{mean}(H(U),H(V))}$$

# External evaluation: скорректированная взаимная информация Adjusted mutual information

$$AMI(U,V) = \frac{MI(U,V) - \mathbf{E}(MI(U,V))}{\max(H(U),H(V)) - \mathbf{E}(MI(U,V))}$$

1 – если кластеризации равны~0 – если кластеризации случайны

#### матожидание можно вычислить аналитически

нужно калибровать, т.к. чем больше кластеров в кластеризациях, тем больше значение MI

```
from sklearn.metrics import mutual_info_score # MI
from sklearn.metrics import normalized_mutual_info_score # [0, 1]
from sklearn.metrics.cluster import adjusted_mutual_info_score
adjusted_mutual_info_score([0, 0, 1, 1], [0, 0, 1, 1])
    https://en.wikipedia.org/wiki/Adjusted_mutual_information
```

## External evaluation: V-мера

V – среднее гармоническое homogeneity и completeness

homogeneity ~ каждый кластер содержит только объекты отдельного класса completeness ~ все объекты конкретного класса отнесены в один кластер

```
from sklearn.metrics.cluster import homogeneity_score
from sklearn.metrics.cluster import completeness_score
from sklearn.metrics.cluster import v_measure_score
v_measure_score([0, 0, 1, 1], [0, 0, 1, 1])
```

#### **External evaluation: Adjusted Rand index**

# Аналогичная «Adjusted» идея, но проще... поскольку кластеризация задаёт отношение эквивалентности Rand index

$$R = \frac{|\{i, j : (i \sim_U j) \& (i \sim_V j)\}| + |\{i, j : (i \nsim_U j) \& (i \nleftrightarrow_V j)\}|}{C_m^2}$$

#### теперь калибровка под случайную кластеризацию:

$$\widehat{ARI} = \underbrace{\frac{\sum_{ij} \binom{n_{ij}}{2} - \underbrace{\left[\sum_{i} \binom{a_{i}}{2} \sum_{j} \binom{b_{j}}{2}\right] / \binom{n}{2}}}{\underbrace{\frac{1}{2} \left[\sum_{i} \binom{a_{i}}{2} + \sum_{j} \binom{b_{j}}{2}\right] - \underbrace{\left[\sum_{i} \binom{a_{i}}{2} \sum_{j} \binom{b_{j}}{2}\right] / \binom{n}{2}}_{\text{Expected Index}}}_{\text{Max Index}}$$

from sklearn.metrics.cluster import adjusted\_rand\_score
adjusted\_rand\_score([0, 0, 1, 1], [0, 0, 1, 1])

https://en.wikipedia.org/wiki/Rand\_index#Adjusted\_Rand\_index

#### External evaluation: общий подход

#### Кластеризация ~ классификация пар

$$\{x_1, \dots, x_m\} \rightarrow \{(1,1), \dots, (i,j), \dots, (m,m)\}$$
$$a_U(i,j) = 1 \Leftrightarrow i \sim_U j$$

Можно сравнивать классификации  $\mathit{a}_{\scriptscriptstyle U}$  и  $\mathit{a}_{\scriptscriptstyle V}$ 

Пример, Rand index: 
$$RI = \frac{TP + TN}{TP + FP + FN + TN}$$

#### **Fowlkes-Mallows index (FMI)**

- среднее геометрическое точности и полноты

$$FMI = \frac{TP}{\sqrt{(TP+FP)(TP+FN)}}$$

#### Итоги

Общие подходы при кластеризации: вычисление центров кластеров – итерационное оценка распределений (пока не было) оценка плотности (пока не было) Иерархические – разбиение / слияние кластеров Графовые методы

Есть ещё нейростевые... будет потом

#### Ссылки

Дьяконов, А. Г. «Анализ данных, обучение по прецедентам, логические игры, системы WEKA, RapidMiner и MatLab (практикум на ЭВМ кафедры математических методов прогнозирования)» МАКСПресс 2010 //

http://www.machinelearning.ru/wiki/images/7/7e/Dj2010up.pdf

Интересные алгоритмы кластеризации

https://habr.com/ru/post/322034/