ЦИФРОВАЯ КУЛЬТУРА
УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Машинное обучение

Лекция 10. Кластеризация

Автор: Рустам Азимов

Санкт-Петербург, 2023г.

Обучение без учителя

- Отсутствует целевая переменная
- Требуется восстановить некую скрытую структуру в данных
- Примеры:
  - **Задача кластеризации**
  - Задача уменьшения размерности
  - Задача визуализации

Задача кластеризации

- X — признаки, например вещественные числа
- Требуется разбить выборку на непересекающиеся подмножества, называемые кластерами,
- Хотим, чтобы каждый кластер состоял из схожих объектов, а объекты разных кластеров существенно отличались
- То есть построить функцию:

$$\alpha : \mathbb{X} \to \{1, \ldots, K\}$$

- Число кластеров K может либо быть известно, либо являться параметром

Примеры

- Кластеризовать новости по сюжетам
- Пиксели на изображении по принадлежности объекту
- Музыку по жанрам
- Сообщения на форуме по темам
- Клиентов по типу поведения
- Класстеризация бывает иерархическая (нисходящая, восходящая) или нет
- Как измерять сходство объектов?

Метрики качества кластеризации

- Существует два подхода к измерению качества кластеризации:
  - Внутренний — основан на некоторых свойствах выборки и кластеров
  - Внешний — использует дополнительные данные, например, информацию об истинных кластерах
- Для внутренних метрик качества каждый кластер зачастую характеризуется своим центром (центроидом) c_k
- Внешние метрики возможно использовать, если известно истинное распределение объектов по кластерам и задачу кластеризации можно рассматривать как задачу многоклассовой классификации с любой метрикой оттуда

Примеры внутренних метрик качества

1. Внутрикластерное расстояние:
   - $\sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{n} [\alpha(x_i) = k] \rho(x_i, c_k)$
   - $\rho(x, z)$ — некоторая функция расстояния
   - Данный функционал требуется минимизировать, поскольку все объекты кластера должны быть схожи (близки)
2. Межкластерное расстояние:
   - $\sum_{i,j=1}^{n} [\alpha(x_i) \neq \alpha(x_j)] \rho(x_i, x_j)$
   - Данный функционал нужно максимизировать, поскольку объекты из разных кластеров должны существенно отличаться
3. Индекс Данна (Dunn Index):
   - $\frac{\min_{\mathbf{1} \leq k < k' \leq K} d(k, k')}{\max_{\mathbf{1} \leq k \leq K} d(k)}$
   - $d(k, k')$ — расстояние между кластерами k и k' (например, евклидово расстояние между их центрами)
   - $d(k)$ — внутрикластерное расстояние для k -го кластера (например, сумма расстояний от всех объектов этого кластера до его центра)
   - Данный индекс необходимо максимизировать

K-Means

- Одним из наиболее популярных методов кластеризации является **K-Means**
- Оптимизирует внутрикластерное расстояние с квадратом евклидовой метрики в качестве расстояния
- Нужно подбирать центры кластеров c_k и распределение объектов по кластерам $\alpha(x_i)$
- Выберем для этих величин произвольные начальные приближения, а затем будем оптимизировать их по очереди

K-Means

1. Зафиксируем центры кластеров. В этом случае внутрикластерное расстояние будет минимальным, если каждый объект будет относиться к тому кластеру, чей центр является ближайшим:

$$\alpha(x_i) = \arg \min_{1 \le k \le K} \rho(x_i, c_k)$$

2. Зафиксируем распределение объектов по кластерам. В этом случае внутрикластерное расстояние с квадратом евклидовой метрики можно продифференцировать по центрам кластеров и вывести аналитические формулы для них:

$$c_k = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n} [\alpha(x_i) = k]} \sum_{i=1}^{n} [\alpha(x_i) = k] x_i$$

K-Means

- Повторяя эти шаги до сходимости, мы получим некоторое распределение объектов по кластерам
- Новый объект относится к тому кластеру, чей центр является ближайшим
- Не гарантируется достижение глобального минимума суммарного квадратичного отклонения, а только одного из локальных минимумов
- Число кластеров надо знать заранее
- Результат работы метода K-Means существенно зависит от начального приближения
- Существует большое количество подходов к инициализации, а одним из наиболее успешных считается **k-means++**

Графовые методы кластеризации

- Графовые методы кластеризации — это простейшие методы, которые основаны на построении графа близости
- Убираются рёбра между объектами, расстояния между которыми больше определённого порога
- Кластерами же объявляются группы объектов, попадающих в одну компоненту связности

AFFINITY PROPAGATION

INPUT: $\{s(i,j)\}_{i,j\in\{1,\ldots,N\}}$ (data similarities and preferences)

INITIALIZE: set 'availabilities' to zero *i.e.* $\forall i,k\colon a(i,k)=0$

REPEAT: responsibility and availability updates until convergence

$$\forall i,k\colon\ r(i,k)=s(i,k)-\max_{k':k'\neq k}\left[s(i,k')+a(i,k')\right]$$

$$\forall i,k\colon\ a(i,k)=\begin{cases}\sum_{i':i'\neq i}\max[0,\ r(i',k)], & \text{for } k=i\\ \min\left[0,\ r(k,k)+\sum_{i':i'\notin\{i,k\}}\max[0,\ r(i',k)]\right], & \text{for } k\neq i\end{cases}$$

OUTPUT: cluster assignments $\hat{\mathbf{c}}=(\hat{c}_1,\ldots,\hat{c}_N)$, $\hat{c}_i=\operatorname{argmax}_k\left[a(i,k)+r(i,k)\right]$

Note: $\hat{c}$ may violate $\{f_k\}$ constraints, so initialize k-medoids with $\hat{c}$ and run to convergence for a coherent solution.

Affinity propagation

- **Affinity propagation** (AP, он же метод распространения близости) получает на вход матрицу схожести между элементами датасета $S : n \times n$
- Возвращает набор меток, присвоенных этим элементам
- $s(i, k)$ — насколько похожа точка i на соседа k, почти никогда не меняется
- Точки хотят объединятся в группы вокруг одного лидера
- Каждая точка хотела бы видеть лидером кого-то, кто максимально на неё похож, но готова мириться с другими кандидатами, если те нравятся многим другим
- Точки сами не сильно хотят быть лидерами $s(k, k) < 0$

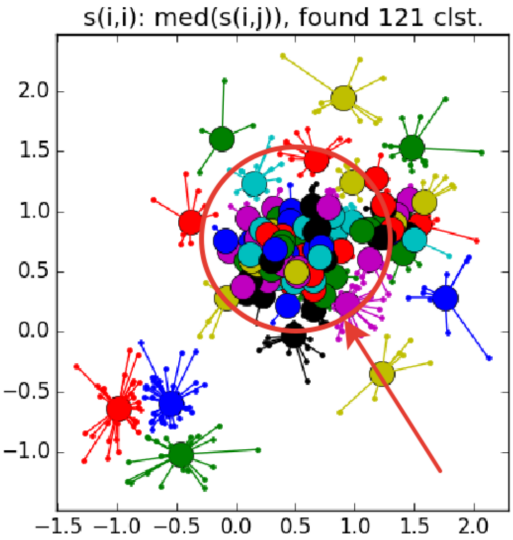
Responsibility and availability

- **Ответственность** (responsibility, таблица R с элементами $r(i,k)$) отвечает за то, насколько i хочет видеть k своим предводителем
- Ответственность возлагается каждой точкой на кандидата в лидеры группы
- **Доступность** (availability, таблица A, с элементами $a(i,k)$) — есть ответ от потенциального предводителя k, насколько хорошо k готова представлять интересы i
- Ответственность и доступность точки вычисляют в том числе и сами для себя
- Только когда велика самоответственность (да, я хочу представлять свои интересы) и самодоступность (да, я могу представлять свои интересы), т.е. $a(k,k) + r(k,k) > 0$, точка может перебороть врождённую неуверенность в себе
- Точки в конечном итоге присоединяются к лидеру, для которого у них наибольшая сумма $a(i,k) + r(i,k)$

Оптимизации и параметры

- Affinity propagation, как и многие другие алгоритмы, можно прервать досрочно, если R и A перестают обновляться
- Affinity propagation подвержен вычислительным осцилляциям в случаях, когда есть несколько хороших разбиений на кластеры
  - В самом начале к матрице сходства добавляется немного шума порядка 10^{-16}
  - При обновлении и используется не простое присваивание, а присваивание с экпоненциальным сглаживанием
  - Параметр $\gamma = 0.5$, но если есть проблемы со сходимостью, то увеличиваем до 0.9 или 0.95 и увеличиваем количество итераций
- Параметр самоподобия $s(k, k)$ чем меньше, тем крупнее кластеры
  - Используйте медиану по всем $s(i, k)$ для большого количества кластеров
  - 25 перцентиль или даже минимум — для меньшего
- Пример $s(i, k)$ — отрицательное евклидово расстояние

Пример отказа AP



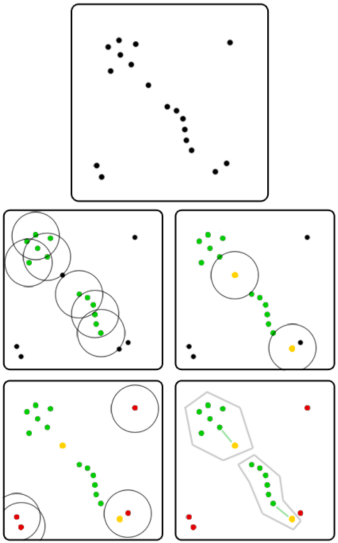
Использование AP

- Когда у вас не очень большой ($n < 10^6$) или в меру большой, но разреженный ($n < 10^7$) датасет
- Заранее известна функция близости
- Количество кластеров значения не имеет
- Свойства функции близости значения не имеют
- Вы ожидаете увидеть множество кластеров различной формы и немного варьирующимся количеством элементов

DBSCAN

- **DBSCAN** (Density-based spatial clustering of applications with noise, плотностный алгоритм пространственной кластеризации с присутствием шума), как следует из названия, оперирует плотностью данных
- На вход он просит уже знакомую матрицу близости и два параметра — радиус ε-окрестности и количество соседей m
- Обходим (например, в ширину) все точки и смотрим сколько соседей в ε-окрестности
- Если соседей $\geq m$, то помечаем точку зелёным цветом
- Если соседей $< m$, но в ε-окрестности есть зелёная точка, то помечаем жёлтым цветом, иначе красным
- Зелёные соседи в одном кластере, желтые — пограничные точки нужно как-то решить какому классу отдать, а красные — отшельники (тоже надо решить, что делать)

Пример DBSCAN



Применение DBSCAN

- DBSCAN с неслучайным правилом обработки краевых точек детерминирован
- Однако большинство реализаций для ускорения работы и уменьшения количества параметров отдают краевые точки первым кластерам, которые до них дотянулись
- DBSCAN автоматически определяет выбросы
- Соотношение $\frac{m}{\varepsilon^n}$, где n — размерность пространства, можно интуитивно рассматривать как пороговую плотность точек данных в области пространства
- При одинаковом соотношении $\frac{m}{\varepsilon^n}$ и результаты будут примерно одинаковы
- Главные недостатки DBSCAN — неспособность соединять кластеры через проёмы, и, наоборот, способность связывать явно различные кластеры через плотно населённые перемычки

Источники

- http://www.machinelearning.ru/
- https://scikit-learn.org
- https://habr.com/ru/post/321216/
- https://habr.com/ru/post/322034/