Машинное обучение

Лекция 3. Методы кластеризации

Катя Тузова

Разбор летучки

Что такое прецедент?

Разбор летучки

Задача обучения с учителем.

Множество объектов X
Множество допустимых ответов Y
Прецедент - пара объект-ответ (x_i, y_i)
$x_i \in X$ $y_i \in Y$

Разбор летучки

К какому типу задач относятся:

- Прогнозирования потребительского спроса. У компании есть 1000 продуктов, которые она производит. Требуется предсказать сколько будет продано в следующие полгода.
- Вы владелец фейсбука и пишете алгоритм, который определяет был ли взломан пользователь.
- В задачах медицинской диагностики в роли объектов выступают пациенты. Найти вид заболевания.
- Задача кредитного скоринга (Оценка кредитоспособности клиента, на основании которой принимается решение о выдаче кредита)

Разбор летучки

К какому типу задач относятся:

- Прогнозирования потребительского спроса. (регрессия)
- Взломан ли пользователь. (бинарная классификация)
- Найти вид заболевания. (классификация)
- Задача кредитного скоринга. (классификация)

Разбор летучки

Какие из следующих задач являются задачей обучения без учителя?

- Спам фильтр
- Рубрикация текстов (Группировка статей по темам)
- Оценить есть ли у нового пациента диабет
- Прогнозирование времени следующего землетрясения на определенной территории.
- Разделение людей по психотипу.

Разбор летучки

Какие из следующих задач являются задачей обучения без учителя?

- – Спам фильтр
- \+ Рубрикация текстов (Группировка статей по темам)
- – Оценить есть ли у нового пациента диабет
- – Прогнозирование времени следующего землетрясения на определенной территории.
- \+ Разделение людей по психотипу.

Разбор летучки

- Пол
- Средний школьный балл
- Номер школы
- Город школы
- Доля пропущенных лекций
- Оценка по мнению родителей
- Пиво/неделя
- Друзей в ВКонтакте
- Расстояние от дома до универа
- Ряд в аудитории
- Наличие планшета
- Периметр головы

Разбор летучки

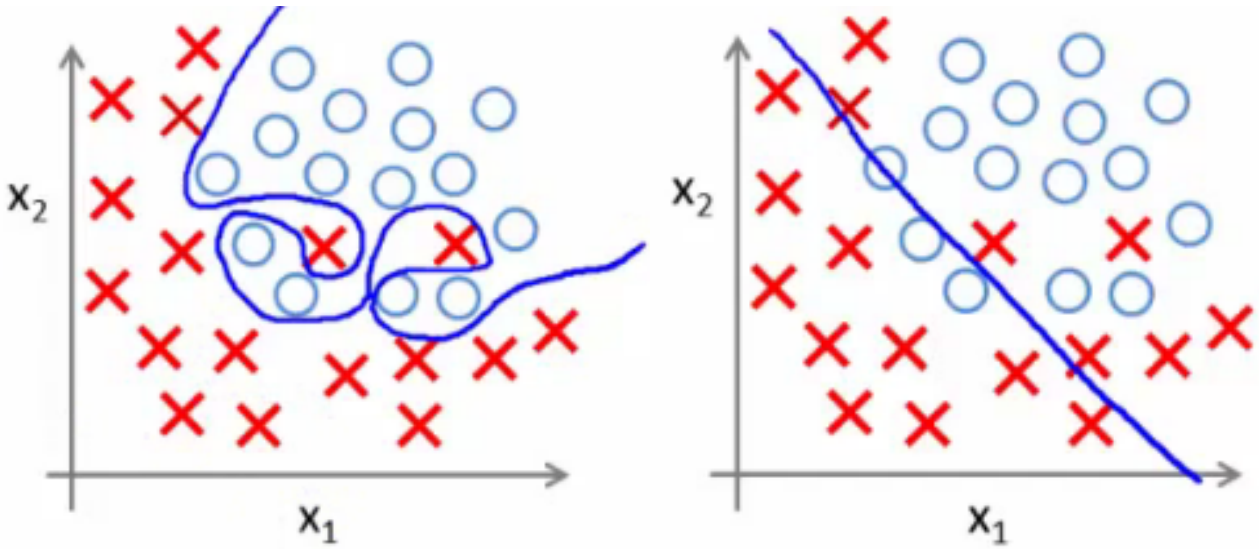
- Пол (бинарный)
- Средний школьный балл (количественный)
- Номер школы (номинальный)
- Город школы (номинальный)
- Доля пропущенных лекций (количественный)
- Оценка по мнению родителей (порядковый)
- Пиво/неделя (количественный)
- Друзей в ВКонтакте (количественный)
- Расстояние от дома до универа (количественный)
- Ряд в аудитории (порядковый)
- Наличие планшета (бинарный)
- Периметр головы (количественный)

Разбор летучки

Приведите пример переобучения и недообучения.

Разбор летучки

Приведите пример переобучения и недообучения.



Разбор летучки 2

Что такое cross-fold validation?

Разбор летучки 2

Что такое cross-fold validation?

Способ разбиения обучающей выборки на два множества L и T.

Разбор летучки 2

Гипотеза компактности:
Схожие объекты, как правило, лежат в одном классе.

Разбор летучки 2

$$a(u, X^l) = \arg\max_{y \in Y} \underbrace{\sum_{i=1}^{l} [y_u^i = y] w(i, u)}_{\Gamma_y(u)}$$

Смысл параметров w, i, u, $\Gamma_y(u)$

Разбор летучки 2

$$a(u, X^l) = \arg\max_{y \in Y} \underbrace{\sum_{i=1}^{l} [y_u^i = y] w(i, u)}_{\Gamma_y(u)}$$

$w(i, u)$ - вес i-го соседа u

i - порядковый номер соседа u в упорядоченном множестве

u – объект, для которого проводится классификация

$\Gamma_y(u)$ – оценка близости объекта u к классу y

Разбор летучки 2

Мотивация для использования Парзеновского окна. В чем минусы зависимости веса объекта только от его порядкового номера?

Разбор летучки 2

Мотивация для использования Парзеновского окна. В чем минусы зависимости веса объекта только от его порядкового номера?

Объекты, находящиеся на одинаковом расстоянии будут взяты с разными весами. Далекие объекты могут быть взяты со слишком большим весом.

Разбор летучки 2

Какими свойствами должна обладать функция K, чтобы использовать ее в качестве ядра?

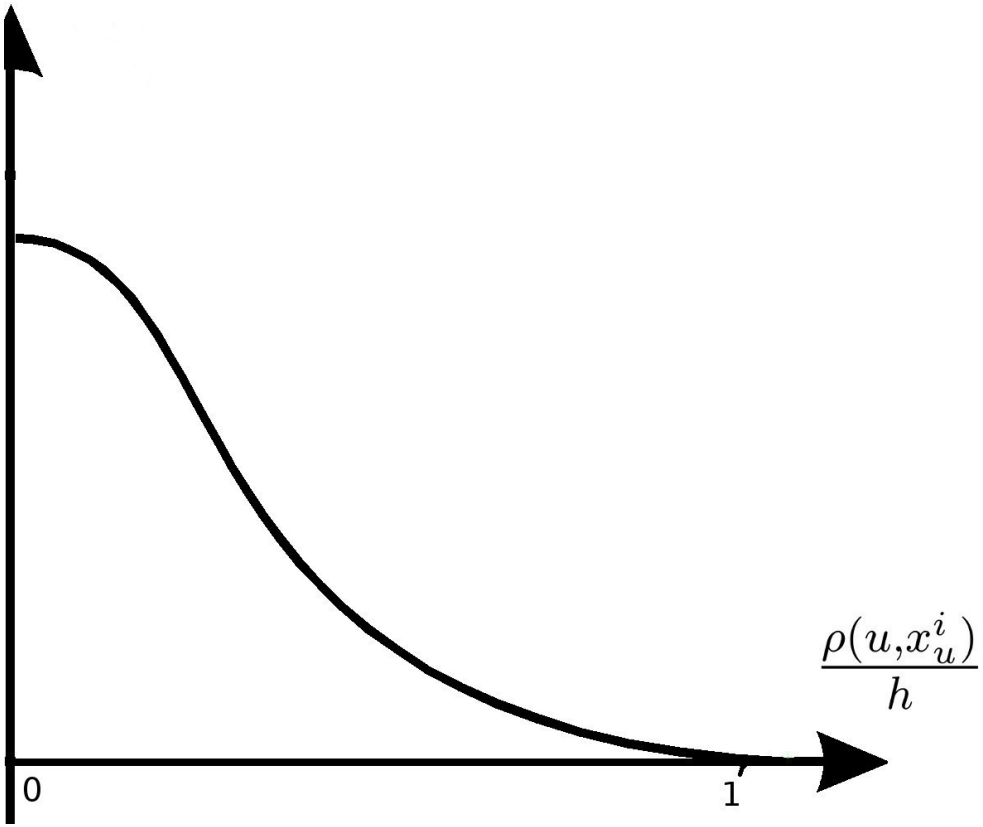
Разбор летучки 2

Какими свойствами должна обладать функция K, чтобы использовать ее в качестве ядра?

Невозрастающая функция, положительная на отрезке [0, 1]

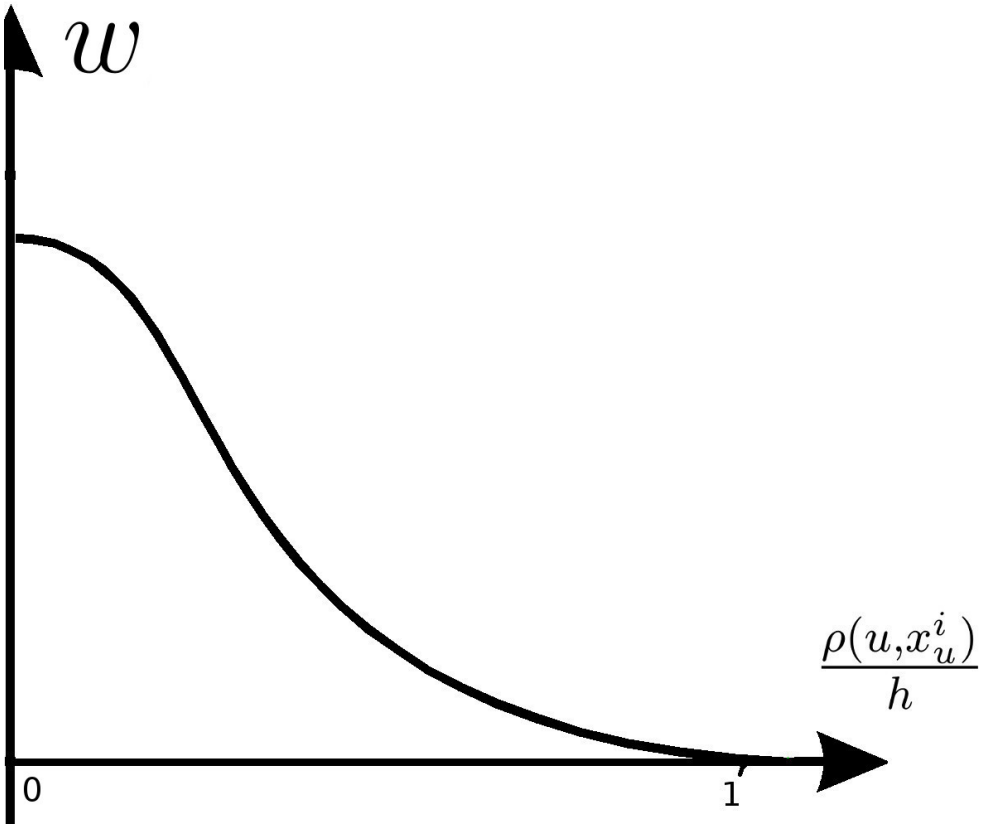
Разбор летучки 2

Что по оси ординат?



Разбор летучки 2

Что по оси ординат?



Разбор летучки 2

Как подбирать функцию расстояния?

Разбор летучки 2

Как подбирать функцию расстояния?

Максимизировать сумму расстояний между объектами разных классов при этом сохраняя сумму расстояний между объектами одного класса небольшой.

$$\max \sum_{x_i, x_j \in D} \rho(x_i, x_j)$$

$$\sum_{x_i, x_j \in S} \rho^2(x_i, x_j) \leq 1$$

Разбор летучки 2

Что такое проклятие размерности?

Разбор летучки 2

Что такое проклятие размерности?

Если используемая метрика $\rho(u, x_u^i)$ основана на суммировании различий по всем признакам, а число признаков очень велико, то все точки выборки могут оказаться практически одинаково далеки друг от друга.

Разбор летучки 2

Жадное добавление признаков – как определить, что признаков уже достаточно?

Разбор летучки 2

Жадное добавление признаков – как определить, что признаков уже достаточно?

Все время минимизируем функционал скользящего контроля (leave-one-out):

$$LOO(k, X^l) = \sum_{i=1}^{l} [a(x_i; X^l \setminus \{x_i\}, k) \neq y] \to \min_k$$

Добавляем признаки, пока LOO не увеличивается

Разбор летучки 2

Чем эталонный объект отличается от надежно классифицируемого?

Разбор летучки 2

Чем эталонный объект отличается от надежно классифицируемого?

Эталонные объекты имеют большой положительный отступ, плотно окружены объектами своего класса и являются наиболее типичными его представителями.

Надежно классифицируемые(неинформативные) объекты – изъятие этих объектов из выборки не влияет на качество классификации. Фактически, они не добавляют к эталонам никакой новой информации.

Быстрый поиск ближайшего соседа

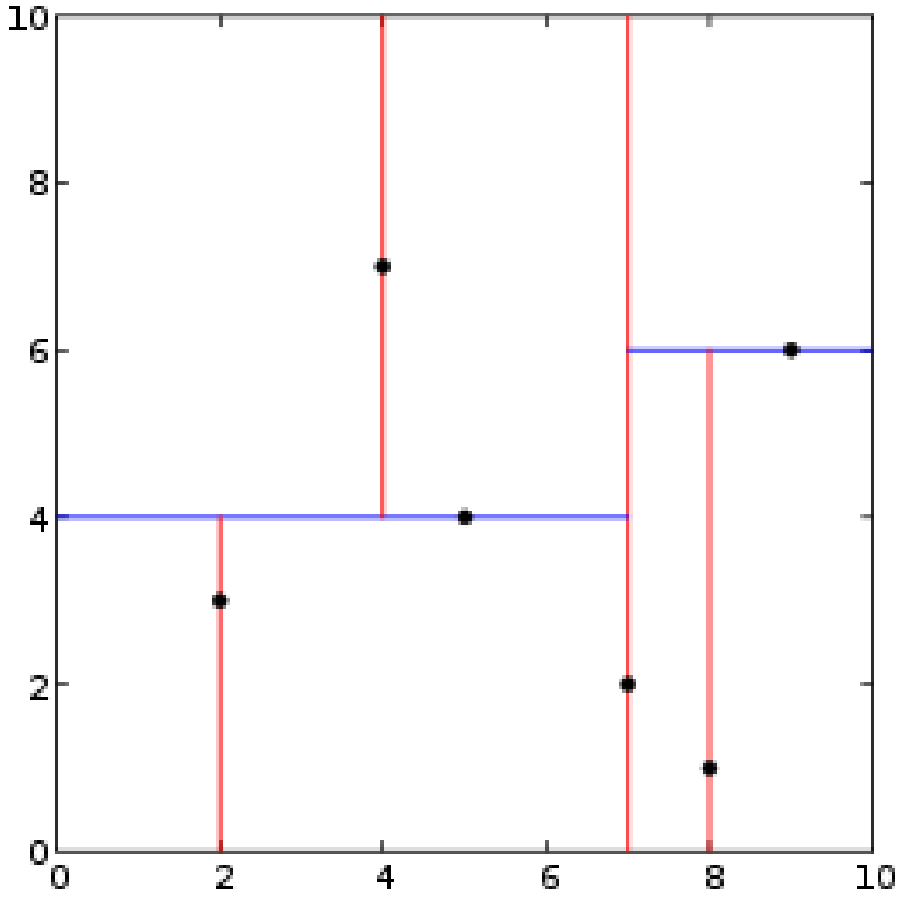
k-d дерево

Идея: разложим множество по поторому будем искать в бинарное дерево с простыми условиями и конкретными точками в узлах.

1. По циклу, или рандомно выбираем ось.
2. Ищем точку, разбивающую множество на как можно более равные части.
3. Повторяем 1-2 для каждого из получившихся подмножеств

Сложность построения: $O(n \log n)$
Сложность поиска: в лучшем случае $O(\log n)$, в худшем – $O(n)$

2-d дерево



k-d дерево. Особенности

+ Один из наиболее простых методов
– Работает только при малом количестве параметров
– Затратный алгоритм перестроения

Locality Sensitive Hash

R-соседи – соседи в радиусе R от объекта.

Хэш-функция $h(R, cR, p1, p2)$:
$\|u - v\| \leq R => p(h(u) = h(v)) \geq p_1$
$\|u - v\| \geq cR => p(h(u) = h(v)) \leq p_2$

Постановка задачи кластеризации

Кластеризация – задача разделения объектов одной природы на несколько групп так, чтобы объекты в одной группе обладали одним и тем же свойством.

Кластеризация – это обучение без учителя.

Постановка задачи кластеризации

X – пространство объектов
$X^l = \{x\}_{i=1}^l$ – обучающая выборка
$\rho : X \times X \to [0, \infty)$ – функция расстояния между объектами

Найти:
Y – множество кластеров
$a : X \to Y$ – алгоритм кластеризации

Степени свободы в постановке задачи

Степени свободы в постановке задачи

- Критерий качества кластеризации
- Число кластеров неизвестно заранее
- Результат кластеризации существенно зависит от метрики

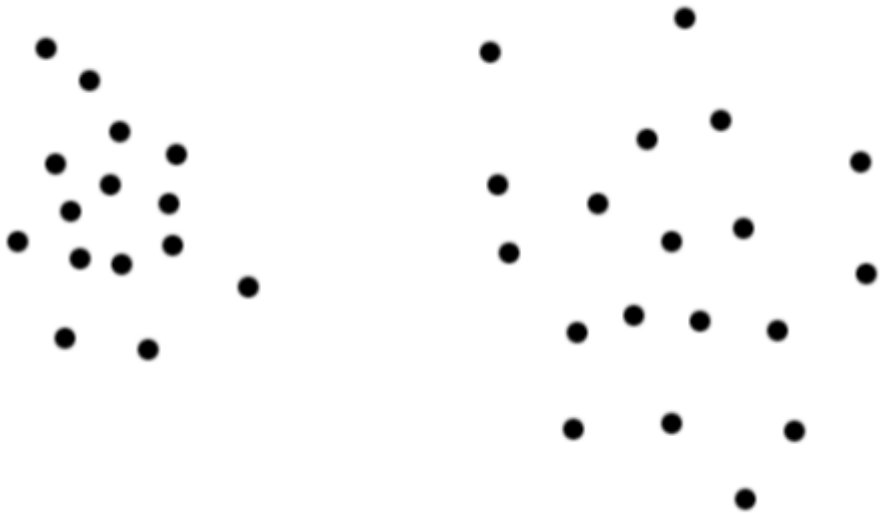
Цели кластеризации

Цели кластеризации

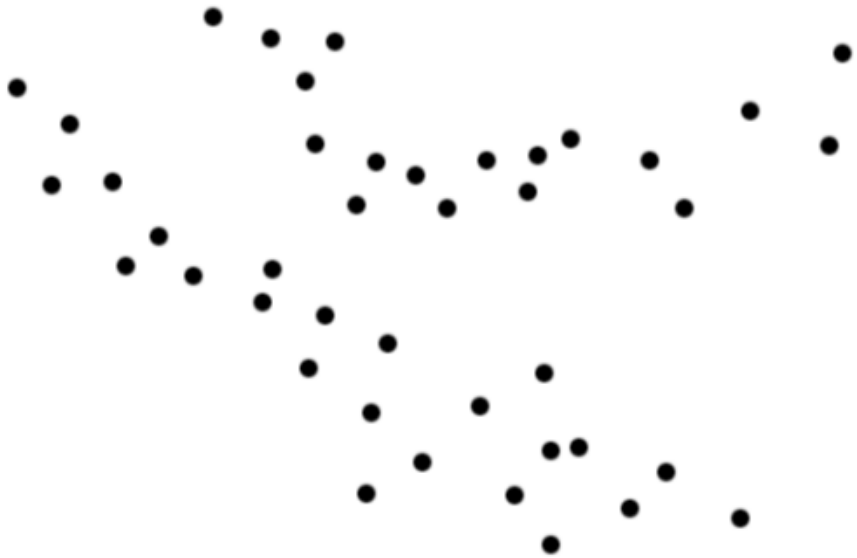
- Сократить объём хранимых данных
- Выделить нетипичные объекты
- Упростить дальнейшую обработку данных
- Построить иерархию множества объектов

Какие бывают кластеры?

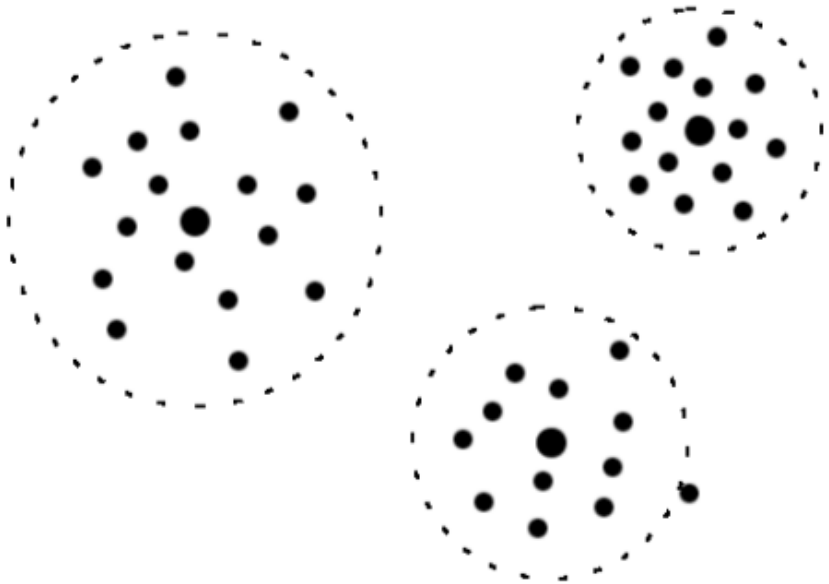
Типы кластерных структур. Сгущения



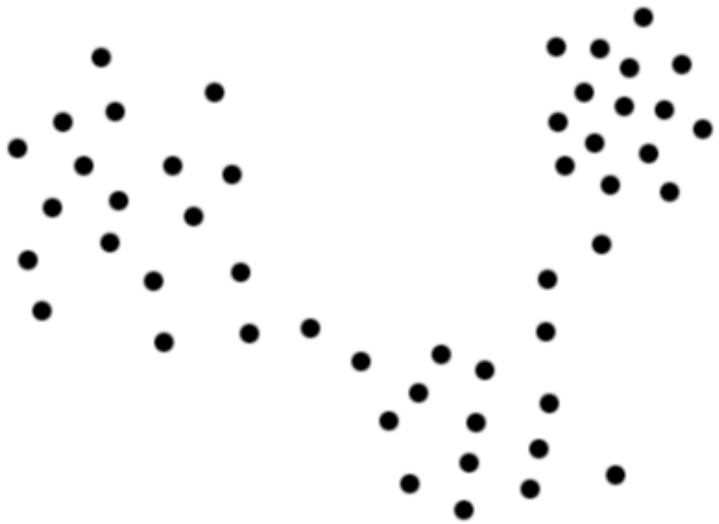
Типы кластерных структур. Ленты



Типы кластерных структур. С центром



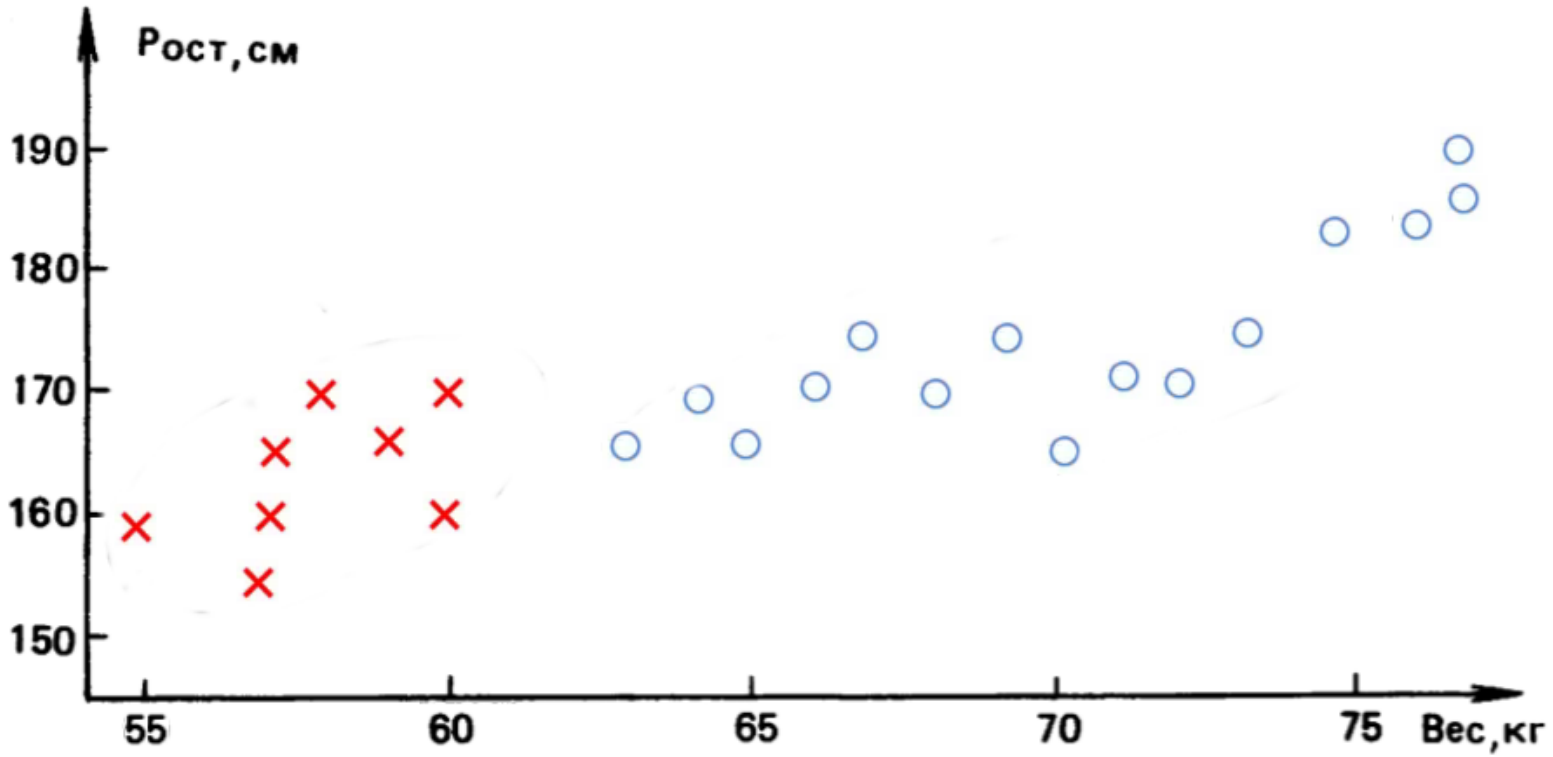
Типы кластерных структур. С перемычками



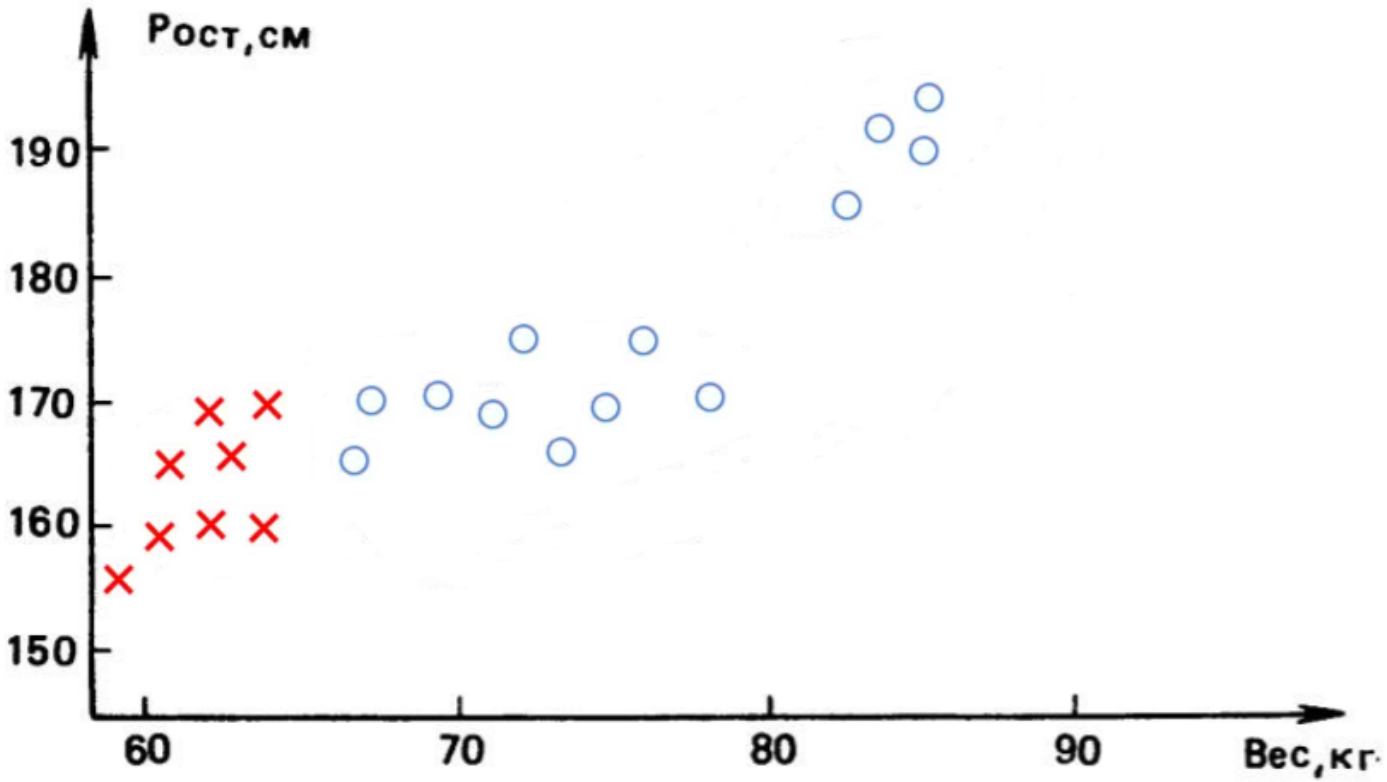
Типы кластерных структур. На фоне

Типы кластерных структур. Перекрывающиеся

Чувствительность к выбору метрики



Чувствительность к выбору метрики



Оценка качества кластеризации

Есть несколько разбиений на кластеры. Как их сравнить?

Оценка качества кластеризации

- Минимизировать среднее внутрикластерное расстояние

$$\frac{\sum_{a(x_i)=a(x_j)} \rho(x_i,x_j)}{\sum_{a(x_i)=a(x_j)} 1} \to \min$$

- Максимизировать среднее межкластерное расстояние

$$\frac{\sum_{a(x_i)\neq a(x_j)} \rho(x_i,x_j)}{\sum_{a(x_i)\neq a(x_j)} 1} \to \max$$

Методы кластеризации

- Иерархические
- Графовые
- Статистические

Иерархическая кластеризация

Графовые алгоритмы

Очевидные:

- Выделение связных компонент
- Минимальное покрывающее дерево

Расстояние между кластерами. Формула Ланса-Уильямса

Увеличение эффективности Ланса-Уильямса

Визуализация кластеров. Дендрограмма

Визуализация кластеров. Диаграмма вложения

Свойство монотонности

Визуализация кластеров. Диаграмма вложения

Метод k-средних

Модификации метода k-средних

Плюсы и минусы метода k-средних