

# Методы кластеризации

## Постановка задачи кластеризации

**Дано:**

$X$  — пространство объектов;

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

$\rho: X \times X \rightarrow [0, \infty)$  — функция расстояния между объектами.

**Найти:**

$Y$  — множество кластеров и

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

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

Кластеризация — это *обучение без учителя*.

## Некорректность задачи кластеризации

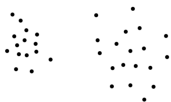
Решение задачи кластеризации принципиально неоднозначно:

- 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  $\rho$ , которую эксперт задаёт субъективно.

## Цели кластеризации

- Упростить дальнейшую обработку данных, разбить множество  $X^\ell$  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).

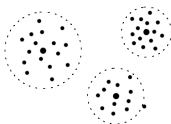
## Типы кластерных структур



внутрикластерные расстояния, как правило,  
меньше межкластерных



ленточные кластеры



кластеры с центром

## Типы кластерных структур



кластеры могут соединяться перемычками



кластеры могут накладываться на разреженный фон из редко расположенных объектов



кластеры могут перекрываться

## Типы кластерных структур



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

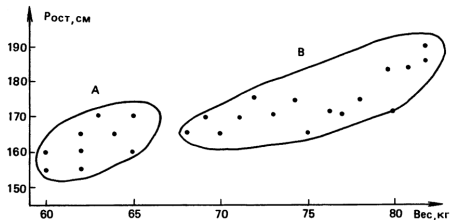


кластеры могут вообще отсутствовать

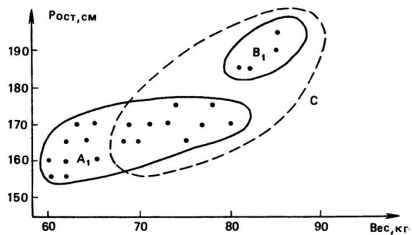
- Каждый метод кластеризации имеет свои ограничения и выделяет кластеры лишь некоторых типов.
- Понятие «тип кластерной структуры» зависит от метода и также не имеет формального определения.

## Проблема чувствительности к выбору метрики

Результат зависит от нормировки признаков:



A — студентки,  
B — студенты



после перенормировки  
(сжали ось «вес» вдвое)



## Содержание: методы кластеризации

- 1 **Графовые методы кластеризации**
  - Алгоритм выделения связных компонент
  - Алгоритм ФОРЭЛ
  - Функционалы качества кластеризации
- 2 **Иерархическая кластеризация (таксономия)**
  - Агломеративная иерархическая кластеризация
  - Дендрограмма и свойство монотонности
  - Свойства сжатия, растяжения и редуктивности
- 3 **Статистические методы кластеризации**
  - EM-алгоритм
  - Метод  $k$ -средних

## Алгоритм выделения связанных компонент

Выборка представляется в виде графа:

- вершины графа — объекты  $x_i$ ;
- рёбра — пары объектов с расстоянием  $\rho_{ij} = \rho(x_i, x_j) \leq R$ .

1: **повторять**

2:   удалить все рёбра  $(i, j)$ , для которых  $\rho_{ij} > R$ ;

3:    $K :=$  число связанных компонент  
      (алгоритм Дейкстры или поиск в глубину);

4:   **если**  $K < K_1$  **то** уменьшить  $R$ ;

5:   **если**  $K > K_2$  **то** увеличить  $R$ ;

6: **пока**  $K \notin [K_1, K_2]$

**Недостатки:**

- задаётся неудобный параметр  $R$ ;
- высокая чувствительность к шуму.

## Алгоритм КНП — «Кратчайший Незамкнутый Путь»

- 1: Найти пару вершин  $(i, j)$  с наименьшим  $\rho_{ij}$  и соединить их ребром;
- 2: **пока** в выборке остаются изолированные точки
- 3:   найти изолированную точку, ближайшую к некоторой неизолрированной;
- 4:   соединить эти две точки ребром;
- 5: удалить  $K - 1$  самых длинных рёбер;

### Достоинство:

- задаётся число кластеров  $K$ .

### Недостаток:

- высокая чувствительность к шуму.

## Алгоритм ФОРЭЛ — «ФОРмальные Элементы»

[Загоруйко, Ёлкина, 1967]

- 1:  $U := X^\ell$  — множество некластеризованных точек;
- 2: **пока** в выборке есть некластеризованные точки,  $U \neq \emptyset$ :
- 3:   взять случайную точку  $x_0 \in U$ ;
- 4:   **повторять**
- 5:     образовать кластер с центром в  $x_0$  и радиусом  $R$ :  
       $K_0 := \{x_i \in U \mid \rho(x_i, x_0) \leq R\}$ ;
- 6:     переместить центр  $x_0$  в центр масс кластера:  
       $x_0 := \frac{1}{|K_0|} \sum_{x_i \in K_0} x_i$ ;
- 7:     **пока** состав кластера  $K_0$  не стабилизируется;
- 8:     пометить все точки  $K_0$  как кластеризованные:  
       $U := U \setminus K_0$ ;
- 9:   применить алгоритм КНП к множеству центров кластеров;
- 10: каждый  $x_i \in X^\ell$  приписать кластеру с ближайшим центром;

### Замечание к шагу 6:

если  $X$  не является линейным векторным пространством, то

$$x_0 := \frac{1}{|K_0|} \sum_{x_i \in K_0} x_i \longrightarrow x_0 := \arg \min_{x \in K_0} \sum_{x' \in K_0} \rho(x, x');$$

### Преимущества ФОРЭЛ:

- получаем двухуровневую структуру кластеров;
- кластеры могут быть произвольной формы;
- варьируя  $R$ , можно управлять детальностью кластеризации.

### Недостаток ФОРЭЛ:

- чувствительность к  $R$  и начальному выбору точки  $x_0$ .

#### Способ устранения:

сгенерировать несколько кластеризаций и  
выбрать лучшую по заданному *функционалу качества*.

## Функционалы качества кластеризации

Случай 1:  $X$  — метрическое (не линейное векторное) пространство

- Среднее внутрикластерное расстояние:

$$F_0 = \frac{\sum_{i < j} [y_i = y_j] \rho(x_i, x_j)}{\sum_{i < j} [y_i = y_j]} \rightarrow \min .$$

- Среднее межкластерное расстояние:

$$F_1 = \frac{\sum_{i < j} [y_i \neq y_j] \rho(x_i, x_j)}{\sum_{i < j} [y_i \neq y_j]} \rightarrow \max .$$

- Отношение пары функционалов:

$$F_0/F_1 \rightarrow \min .$$

## Функционалы качества кластеризации

Случай 2:  $X$  — линейное векторное пространство

- Сумма средних внутрикластерных расстояний:

$$\Phi_0 = \sum_{y \in Y} \frac{1}{|K_y|} \sum_{i: y_i=y} \rho^2(x_i, \mu_y) \rightarrow \min,$$

$K_y = \{x_i \in X^\ell \mid y_i = y\}$  — кластер  $y$ ,

$\mu_y$  — центр масс кластера  $y$ .

- Сумма межкластерных расстояний:

$$\Phi_1 = \sum_{y \in Y} \rho^2(\mu_y, \mu) \rightarrow \max,$$

где  $\mu$  — центр масс всей выборки.

- Отношение пары функционалов:

$$\Phi_0 / \Phi_1 \rightarrow \min.$$

## Агломеративная иерархическая кластеризация

Алгоритм Ланса-Уильямса [1967]

1: сначала все кластеры одноэлементные:

$$t := 1; \quad C_t = \{\{x_1\}, \dots, \{x_\ell\}\};$$

$$R(\{x_i\}, \{x_j\}) := \rho(x_i, x_j);$$

2: **для всех**  $t = 2, \dots, \ell$  ( $t$  — номер итерации):

3: найти в  $C_{t-1}$  два ближайших кластера:

$$(U, V) := \arg \min_{U \neq V} R(U, V);$$

$$R_t := R(U, V);$$

4: слить их в один кластер:

$$W := U \cup V;$$

$$C_t := C_{t-1} \cup \{W\} \setminus \{U, V\};$$

5: **для всех**  $S \in C_t$

6: вычислить  $R(W, S)$  по формуле Ланса-Уильямса;



## Формула Ланса-Уильямса

Как определить расстояние  $R(W, S)$   
между кластерами  $W = U \cup V$  и  $S$ ,  
зная расстояния  $R(U, S)$ ,  $R(V, S)$ ,  $R(U, V)$ ?

Формула, обобщающая большинство разумных способов  
определить это расстояние [Ланс, Уильямс, 1967]:

$$\begin{aligned} R(U \cup V, S) = & \alpha_U \cdot R(U, S) + \\ & + \alpha_V \cdot R(V, S) + \\ & + \beta \cdot R(U, V) + \\ & + \gamma \cdot |R(U, S) - R(V, S)|, \end{aligned}$$

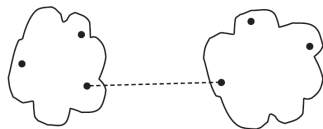
где  $\alpha_U$ ,  $\alpha_V$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  — числовые параметры.

## Частные случаи формулы Ланса-Уильямса

### 1. Расстояние ближнего соседа:

$$R^b(W, S) = \min_{w \in W, s \in S} \rho(w, s);$$

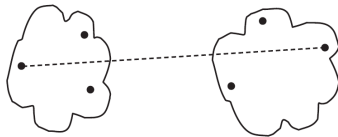
$$\alpha_U = \alpha_V = \frac{1}{2}, \quad \beta = 0, \quad \gamma = -\frac{1}{2}.$$



### 2. Расстояние дальнего соседа:

$$R^d(W, S) = \max_{w \in W, s \in S} \rho(w, s);$$

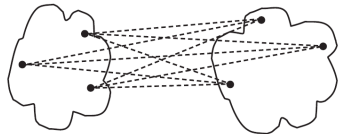
$$\alpha_U = \alpha_V = \frac{1}{2}, \quad \beta = 0, \quad \gamma = \frac{1}{2}.$$



### 3. Групповое среднее расстояние:

$$R^g(W, S) = \frac{1}{|W||S|} \sum_{w \in W} \sum_{s \in S} \rho(w, s);$$

$$\alpha_U = \frac{|U|}{|W|}, \quad \alpha_V = \frac{|V|}{|S|}, \quad \beta = \gamma = 0.$$



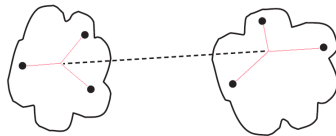
## Частные случаи формулы Ланса-Уильямса

### 4. Расстояние между центрами:

$$R^c(W, S) = \rho^2 \left( \sum_{w \in W} \frac{w}{|W|}, \sum_{s \in S} \frac{s}{|S|} \right);$$

$$\alpha_U = \frac{|U|}{|W|}, \quad \alpha_V = \frac{|V|}{|W|},$$

$$\beta = -\alpha_U \alpha_V, \quad \gamma = 0.$$



### 5. Расстояние Уорда:

$$R^y(W, S) = \frac{|S||W|}{|S|+|W|} \rho^2 \left( \sum_{w \in W} \frac{w}{|W|}, \sum_{s \in S} \frac{s}{|S|} \right);$$

$$\alpha_U = \frac{|S|+|U|}{|S|+|W|}, \quad \alpha_V = \frac{|S|+|V|}{|S|+|W|}, \quad \beta = \frac{-|S|}{|S|+|W|}, \quad \gamma = 0.$$

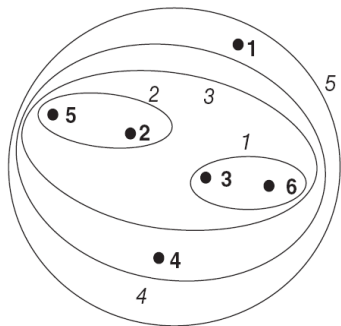
## Проблема выбора

Какой тип расстояния лучше?

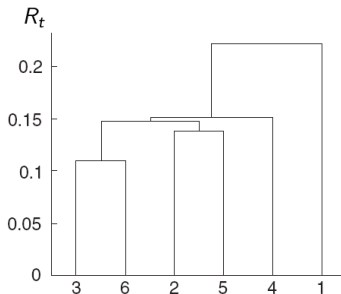
## Визуализация кластерной структуры

### 1. Расстояние ближнего соседа:

Диаграмма вложения



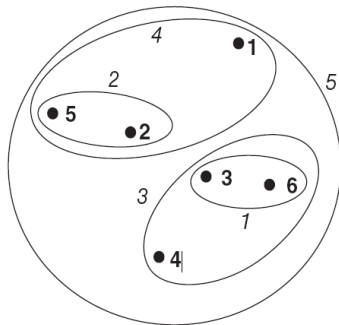
Дендрограмма



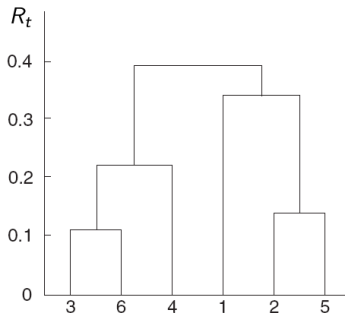
## Визуализация кластерной структуры

### 2. Расстояние дальнего соседа:

Диаграмма вложения



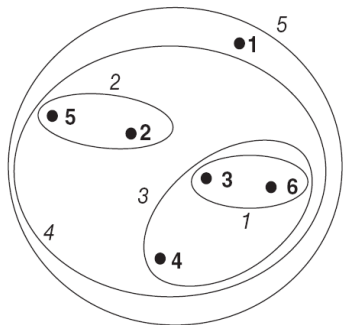
Дендрограмма



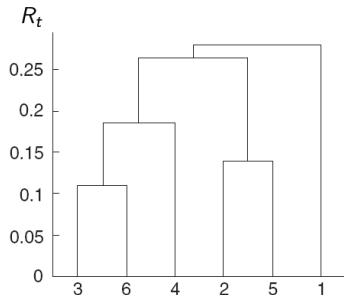
## Визуализация кластерной структуры

### 3. Групповое среднее расстояние:

Диаграмма вложения



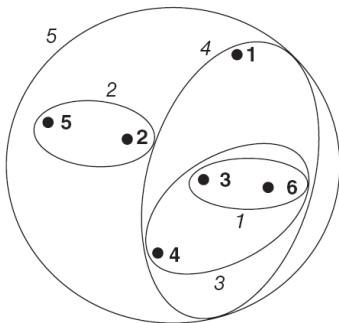
Дендрограмма



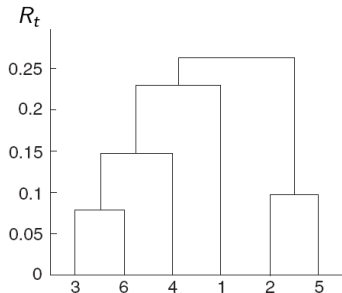
## Визуализация кластерной структуры

### 5. Расстояние Уорда:

Диаграмма вложения



Дендрограмма



## Свойство монотонности

### Определение

Кластеризация *монотонна*, если при каждом слиянии расстояние между объединяемыми кластерами только увеличивается:  $R_2 \leq R_3 \leq \dots \leq R_\ell$ .

### Теорема (Миллиган, 1979)

Кластеризация монотонна, если выполняются условия

$$\alpha_U \geq 0, \quad \alpha_V \geq 0, \quad \alpha_U + \alpha_V + \beta \geq 1, \quad \min\{\alpha_U, \alpha_V\} + \gamma \geq 0.$$

Если кластеризация монотонна, то дендрограмма не имеет самопересечений.

$R^C$  не монотонно;  $R^b, R^d, R^r, R^y$  — монотонны.



## Свойства сжатия и растяжения

### Определение

Кластеризация *сжимающая*, если  $R_t \leq \rho(\mu_U, \mu_V)$ ,  $\forall t$ .

Кластеризация *растягивающая*, если  $R_t \geq \rho(\mu_U, \mu_V)$ ,  $\forall t$ .

Иначе кластеризация *сохраняет метрику пространства*.

Свойство **растяжения** наиболее желательно, так как оно способствует более чёткому отделению кластеров.

$R^b$  — сильно сжимающее;

$R^d$ ,  $R^y$  — растягивающие;

$R^r$ ,  $R^c$  — сохраняют метрику пространства.

## Проблема повышения эффективности алгоритма

### Проблема эффективности:

- самая трудоёмкая операция в алгоритме Ланса-Уильямса — поиск ближайших кластеров —  $O(\ell^2)$  операций:

$$\text{шаг 3: } (U, V) := \arg \min_{U \neq V} R(U, V).$$

- значит, построение всего дерева —  $O(\ell^3)$  операций.

### Идея повышения эффективности:

- перебирать лишь наиболее близкие пары:

$$\text{шаг 3: } (U, V) := \arg \min_{R(U, V) \leq \delta} R(U, V).$$

- периодически увеличивать параметр  $\delta$ .

## Быстрый (редуктивный) алгоритм Ланса-Уильямса

- 1: сначала все кластеры одноэлементные:  
 $t := 1; \quad C_t = \{\{x_1\}, \dots, \{x_\ell\}\};$   
 $R(\{x_i\}, \{x_j\}) := \rho(x_i, x_j);$
- 2: выбрать начальное значение параметра  $\delta$ ;  
 $P(\delta) := \{(U, V) \mid U, V \in C_t, R(U, V) \leq \delta\};$
- 3: для всех  $t = 2, \dots, \ell$  ( $t$  — номер итерации):
- 4: если  $P(\delta) = \emptyset$  то увеличить  $\delta$  так, чтобы  $P(\delta) \neq \emptyset$ ;
- 5:  $(U, V) := \arg \min_{(U, V) \in P(\delta)} R(U, V);$   
 $R_t := R(U, V);$
- 6:  $C_t := C_{t-1} \cup \{W\} \setminus \{U, V\};$
- 7: для всех  $S \in C_t$
- 8: вычислить  $R(W, S)$  по формуле Ланса-Уильямса;
- 9: если  $R(W, S) \leq \delta$  то  $P(\delta) := P(\delta) \cup \{(W, S)\};$

## Свойство редутивности

Всегда ли быстрый алгоритм строит ту же кластеризацию?

### Определение (Брюинош, 1978)

Расстояние  $R$  называется *редуктивным*, если для любого  $\delta > 0$  и любых  $\delta$ -близких кластеров  $R(U, V) \leq \delta$  объединение  $\delta$ -окрестностей  $U$  и  $V$  содержит  $\delta$ -окрестность объединения  $W = U \cup V$ :

$$\{S: R(U \cup V, S) < \delta\} \subseteq \{S: R(S, U) < \delta\} \cup \{S: R(S, V) < \delta\}.$$

### Теорема

Если расстояние  $R$  редутивно, то быстрый алгоритм приводит к той же кластеризации, что и исходный алгоритм.

## Свойство редутивности

### Теорема (Диде и Моро, 1984)

Расстояние  $R$  является редутивным, если

$$\alpha_U \geq 0, \alpha_V \geq 0, \alpha_U + \alpha_V + \min\{\beta, 0\} \geq 1, \min\{\alpha_U, \alpha_V\} + \gamma \geq 0.$$

### Утверждение

Всякое редутивное расстояние является монотонным.

$R^{\text{ч}}$  не редутивное;  $R^{\text{б}}, R^{\text{д}}, R^{\text{г}}, R^{\text{у}}$  — редутивные.

## Рекомендации и выводы

### Стратегия выбора параметра $\delta$ на шагах 2 и 4:

- Если  $|C_t| \leq n_1$ , то  $P(\delta) := \{(U, V) : U, V \in C_t\}$ .
- Иначе выбрать  $n_2$  случайных расстояний  $R(U, V)$ ;  
 $\delta :=$  минимальное из них;
- $n_1, n_2$  влияют только на скорость, но не на результат кластеризации; сначала можно положить  $n_1 = n_2 = 20$ .

### Общие рекомендации по иерархической кластеризации:

- лучше пользоваться  $R^y$  — расстоянием Уорда;
- лучше пользоваться быстрым алгоритмом;
- определение числа кластеров — по максимуму  $|R_{t+1} - R_t|$ ,  
тогда результирующее множество кластеров  $:= C_t$ .

## Гипотеза (о вероятностной природе данных)

Выборка  $X^\ell$  случайна, независима, из смеси распределений

$$p(x) = \sum_{y \in Y} w_y p_y(x), \quad \sum_{y \in Y} w_y = 1,$$

$p_y(x)$  — плотность,  $w_y$  — априорная вероятность кластера  $y$ .

## Гипотеза (о пространстве объектов и форме кластеров)

$X = \mathbb{R}^n$ ,  $x_i \equiv (f_1(x_i), \dots, f_n(x_i))$ ; кластеры  $n$ -мерные гауссовские:

$$p_y(x) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} (\sigma_{y1} \cdots \sigma_{yn})^{-1} \exp \left( -\frac{1}{2} \rho_y^2(x, \mu_y) \right),$$

$\mu_y = (\mu_{y1}, \dots, \mu_{yn})$  — центр кластера  $y$ ;

$\Sigma_y = \text{diag}(\sigma_{y1}^2, \dots, \sigma_{yn}^2)$  — диагональная матрица ковариаций;

$$\rho_y^2(x, x') = \sum_{j=1}^n \sigma_{yj}^{-2} |f_j(x) - f_j(x')|^2.$$

## ЕМ-алгоритм (повторение)

1: начальное приближение  $w_y$ ,  $\mu_y$ ,  $\Sigma_y$  для всех  $y \in Y$ ;

2: **повторять**

3: Е-шаг (expectation):

$$g_{iy} := P(y|x_i) \equiv \frac{w_y p_y(x_i)}{\sum_{z \in Y} w_z p_z(x_i)}, \quad y \in Y, \quad i = 1, \dots, \ell;$$

4: М-шаг (maximization):

$$w_y := \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} g_{iy}, \quad y \in Y;$$

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

$$\sigma_{yj}^2 := \frac{1}{\ell w_y} \sum_{i=1}^{\ell} g_{iy} (f_j(x_i) - \mu_{yj})^2, \quad y \in Y, \quad j = 1, \dots, n;$$

5:  $y_i := \arg \max_{y \in Y} g_{iy}$ ,  $i = 1, \dots, \ell$ ;

6: **пока**  $y_i$  не перестанут изменяться;



## Метод $k$ -средних ( $k$ -means)

$X = \mathbb{R}^n$ . Упрощённый аналог ЕМ-алгоритма:

1: начальное приближение центров  $\mu_y$ ,  $y \in Y$ ;

2: **повторять**

3: аналог Е-шага:

отнести каждый  $x_i$  к ближайшему центру:

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

4: аналог М-шага:

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;

## Модификации и обобщения

### Варианты $k$ -means:

- вариант Болла-Холла (на предыдущем слайде);
- вариант МакКина: при каждом переходе объекта из кластера в кластер их центры пересчитываются;

### Основные отличия ЕМ и $k$ -means:

- ЕМ: мягкая кластеризация:  $g_{iy} = P\{y_i = y\}$ ;  
 $k$ -m: жёсткая кластеризация:  $g_{iy} = [y_i = y]$ ;
- ЕМ: форма кластеров эллиптическая, настраиваемая;  
 $k$ -m: форма кластеров жёстко определяется метрикой  $\rho$ ;

### Гибридные варианты по пути упрощения ЕМ:

- ЕМ с жёсткой кластеризацией на Е-шаге;
- ЕМ без настройки дисперсий (сферические гауссианы);

## Частичное обучение (Semi-supervised learning)

**Дано:**

$Y$  — множество кластеров;

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

$\{x_i, y_i\}_{i=\ell+1}^{\ell+m}$  — размеченная часть выборки, обычно  $m \ll \ell$ .

**Найти:**

$a: X \rightarrow Y$  — алгоритм кластеризации.

**Как приспособить ЕМ-алгоритм:**

Е-шаг:  $g_{iy} := [y = y_i]$ ,  $y \in Y$ ,  $i = \ell+1, \dots, \ell+m$ ;

**Как приспособить  $k$ -means:**

Е-шаг:  $y_i := \arg \min_{y \in Y} \rho(x_i, \mu_y)$ ,  $i = 1, \dots, \ell$ .

## Недостатки $k$ -means

- Чувствительность к выбору начального приближения.
- Необходимость задавать  $k$ ;

### Способы устранения этих недостатков:

- Несколько случайных кластеризаций;  
выбор лучшей по функционалу качества.
- Постепенное наращивание числа кластеров  $k$   
(аналогично ЕМ-алгоритму)