Лекция 7:
о задаче кластеризации

Евгений Борисов

четверг, 1 ноября 2018 г.

кластеризация

метрический подход - использование расстояний между объектами

метрика - функция расстояния

$$\rho: X \times X \to [0, \infty)$$

аксиома тождества : $\rho(x, y) = 0 \Leftrightarrow x = y$

симметрия: $\rho(x, y) = \rho(y, x)$

неравенство треугольника: $\rho(x, z) \leqslant \rho(x, y) + \rho(y, z)$

кластеризация

метрика - функция расстояния

Евклидова метрика: $\rho(x,y)=\sqrt{\sum_i (x_i-y_i)^2}$

метрика Минковского: $\rho(x,y)=\sqrt[n]{\sum_i w_i|x_i-y_i|^n}$

метрика Чебышева: $\rho(x,y)=\max_i|x_i-y_i|$

косинусная метрика: $\rho(x,y)=\frac{\sum_i x_i y_i}{\sqrt{\sum_i x_i^2}\cdot\sqrt{\sum_i y_i^2}}$

кластеризация

о задаче: обучение «без учителя» (unsupervised learning)

дано:

X - объекты

$\rho: X \times X \to [0, \infty)$ - функция расстояния (метрика)

найти:

Y - кластеры (метки)

$a: X \to Y$ - кластеризатор

- кластер состоит из близких объектов

- объекты разных кластеров существенно разные

кластеризация

о некорректности (размытости) задачи кластеризации

- недостаточно точная постановка задачи
- много разных критериев качества
- число кластеров обычно заранее не известно
- результат сильно зависит от метрики
- нормировка данных может существенно изменять результат

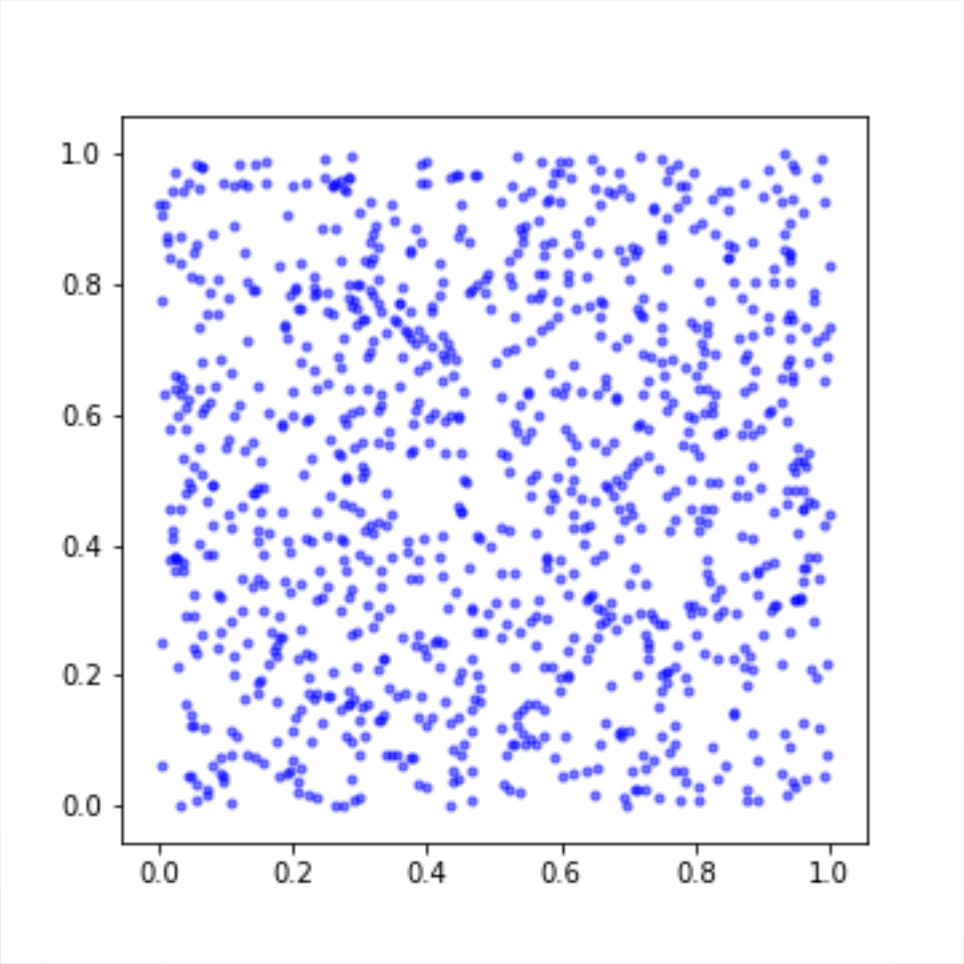
кластеризация

цели кластеризации

- предварительная обработка данных для упрощения основной задачи
- сжатие данных (оставляем один или несколько объектов от кластера)
- выделить нетипичные объекты
- построение иерархии объектов

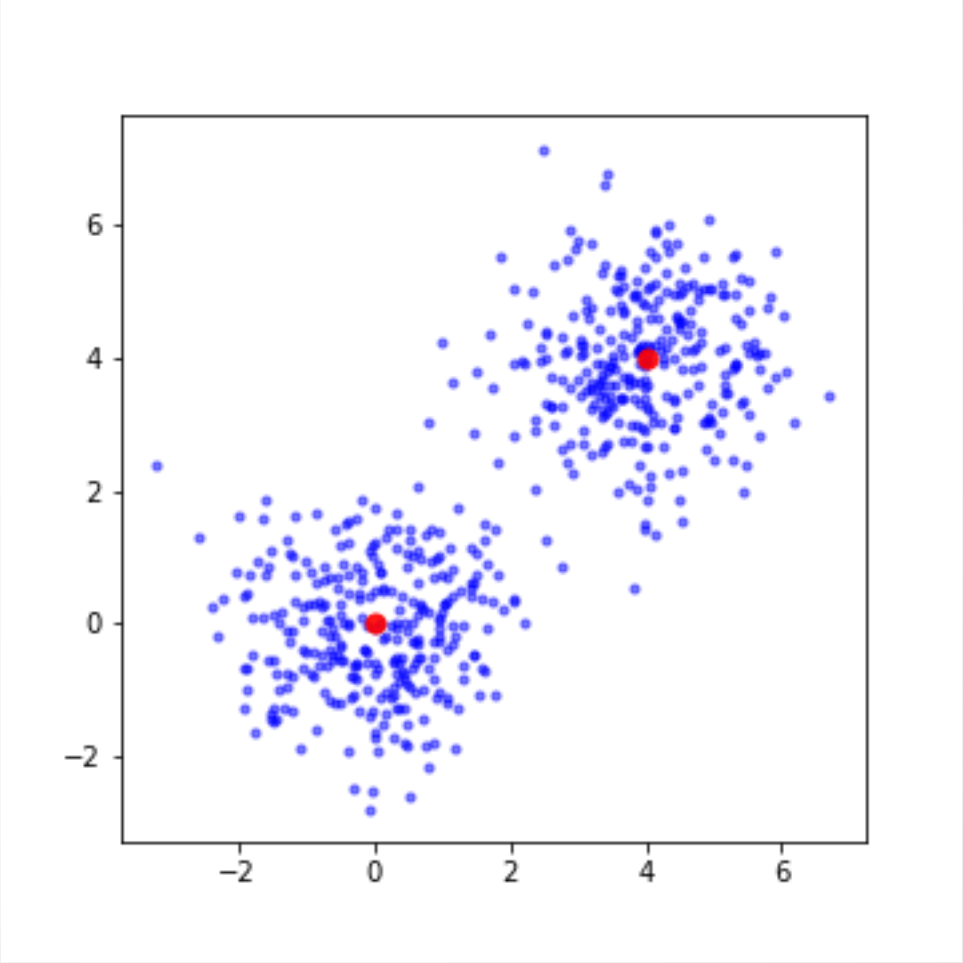
кластеризация

тип кластера: кластеры могут отсутствовать совсем



кластеризация

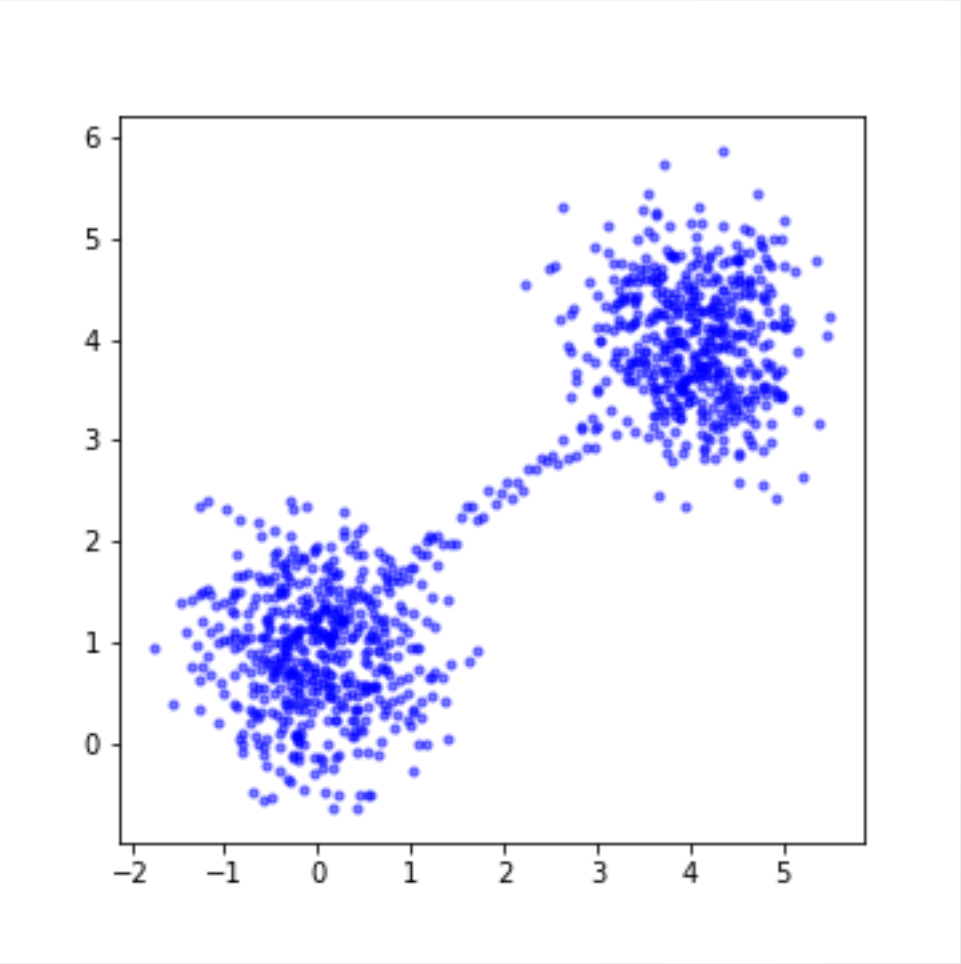
типы кластера: кластеры с центром



другие типы кластеров:
• могут отсутствовать

кластеризация

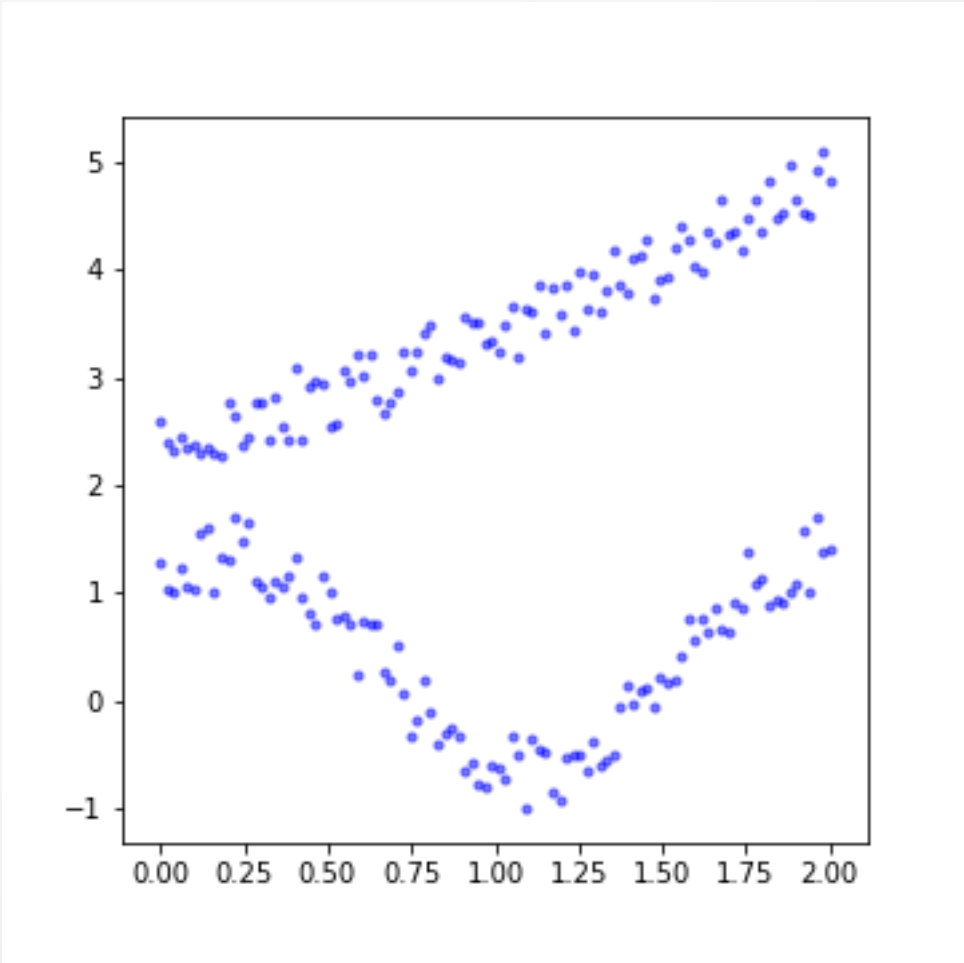
тип кластера: кластеры с перемычками



другие типы кластеров:
- могут отсутствовать
- кластеры с центром

кластеризация

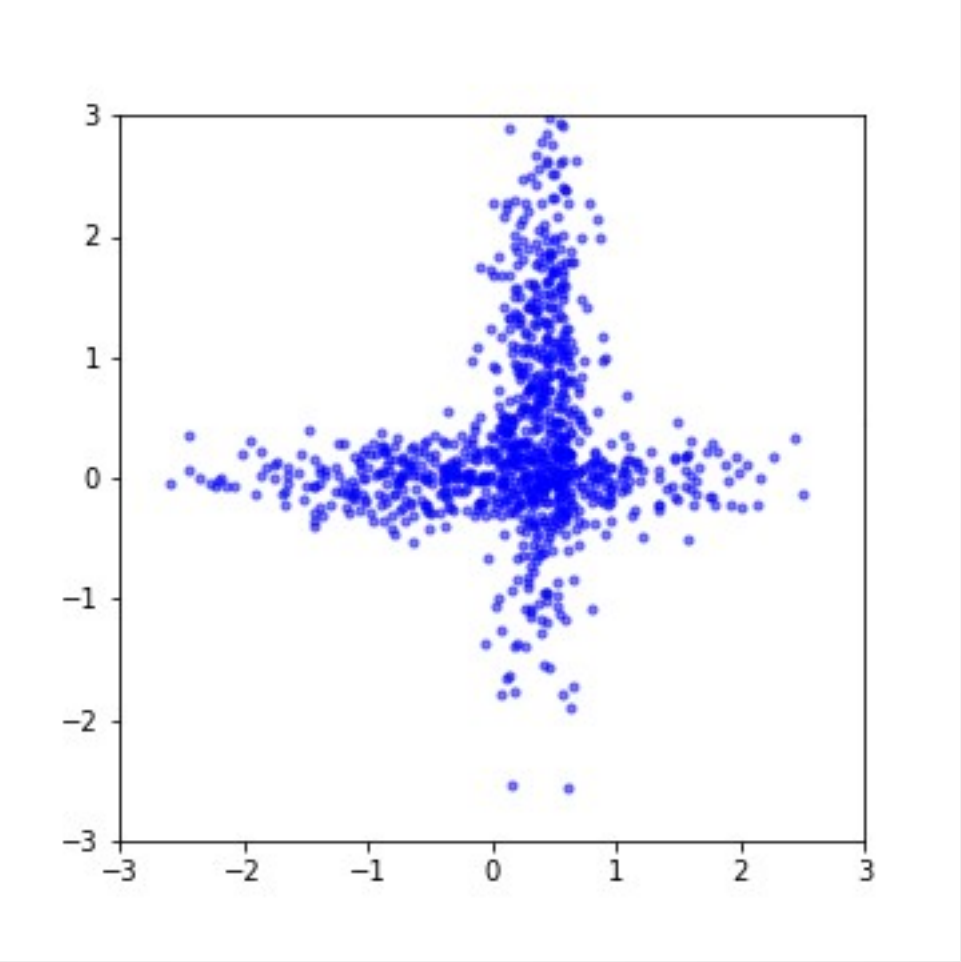
тип кластера: кластеры ленточные



другие типы кластеров:
- могут отсутствовать
- кластеры с центром
- кластеры с перемычками

кластеризация

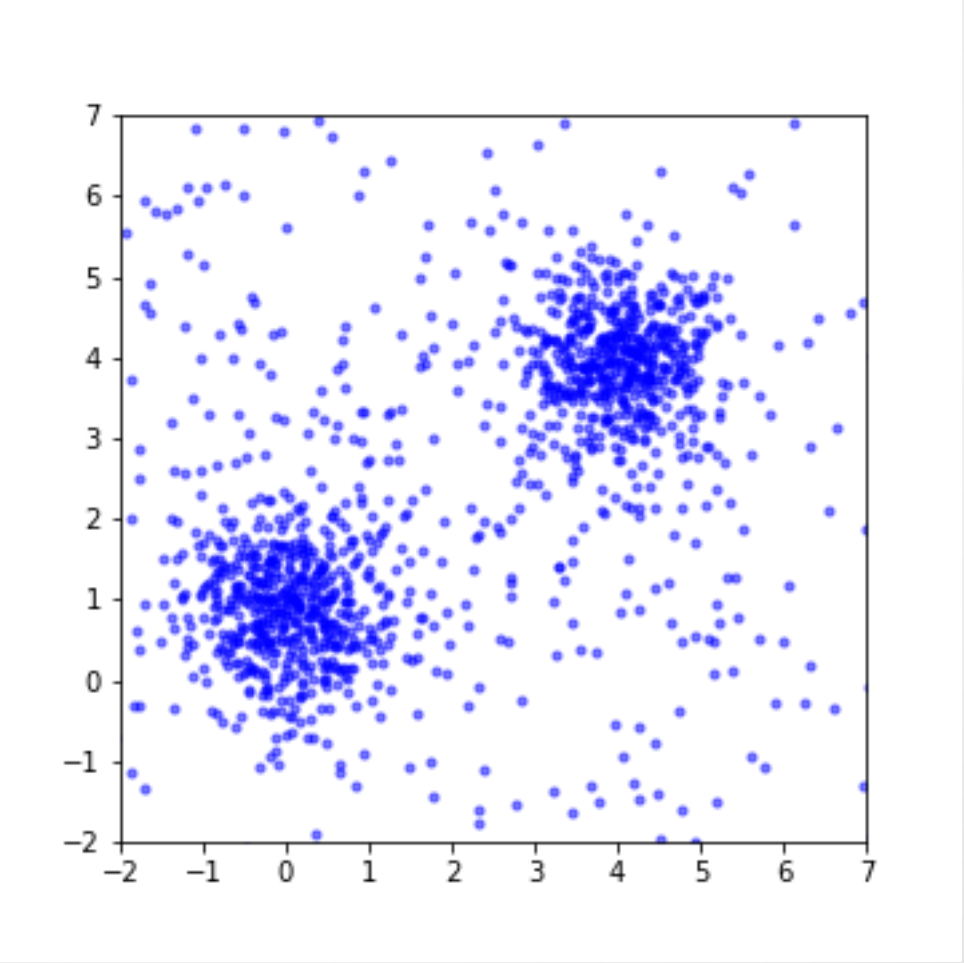
тип кластера: кластеры с наложением



другие типы кластеров:
- могут отсутствовать
- кластеры с центром
- кластеры с перемычками
- кластеры ленточные

кластеризация

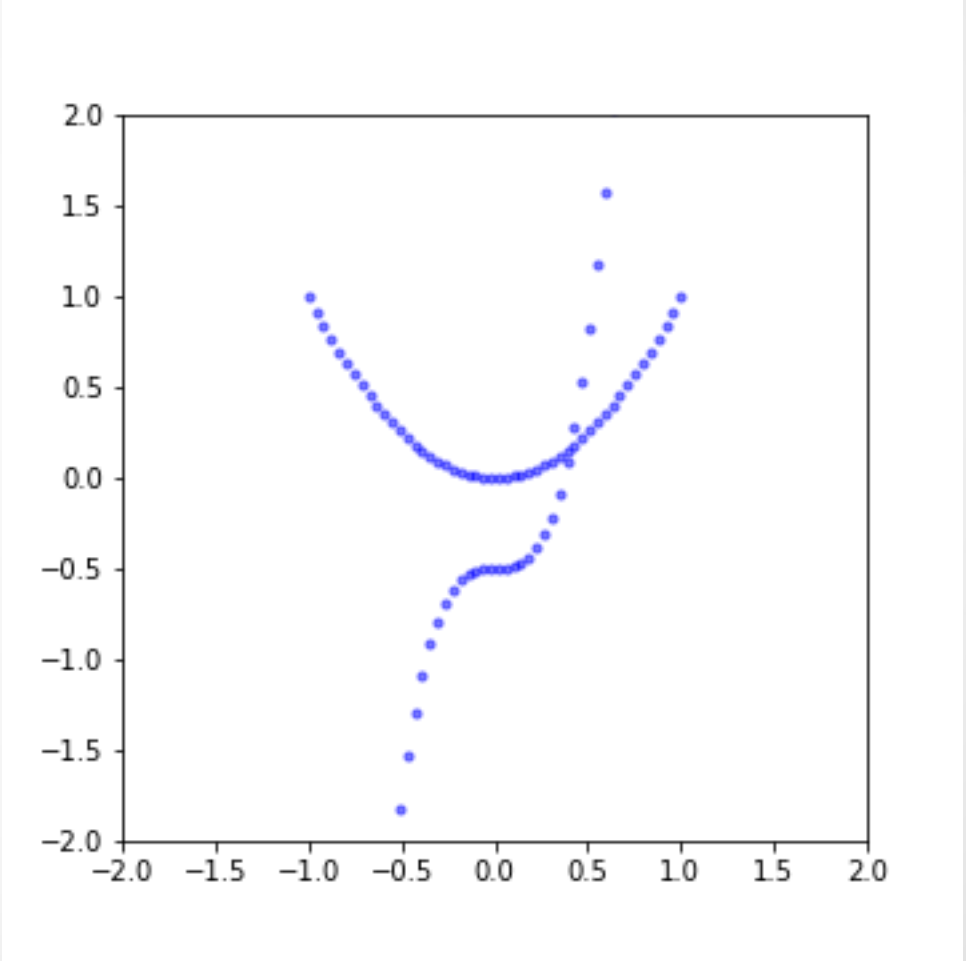
тип кластера: кластеры с шумом



другие типы кластеров:
- могут отсутствовать
- кластеры с центром
- кластеры с перемычками
- кластеры ленточные
- кластеры с наложением

кластеризация

тип кластера: кластеры по типу регулярности



другие типы кластеров:
- могут отсутствовать
- кластеры с центром
- кластеры с перемычками
- кластеры ленточные
- кластеры с наложением
- кластеры с шумом

кластеризация

оценки кластеризации $a : X \to Y$

$$ri = \frac{\sum_{i<j} [a_i = a_j] \rho(x_i, x_j)}{\sum_{i<j} [a_i = a_j]} \to min$$

среднее внутрикластерное расстояние

$$ro = \frac{\sum_{i<j} [a_i \neq a_j] \rho(x_i, x_j)}{\sum_{i<j} [a_i = a_j]} \to max$$

среднее межкластерное расстояние

отношение внутрикластерного и межкластерного расстояний

$$\frac{ri}{ro} \to min$$

кластеризация

метод к-средних (k-means)

количество кластеров как параметр,

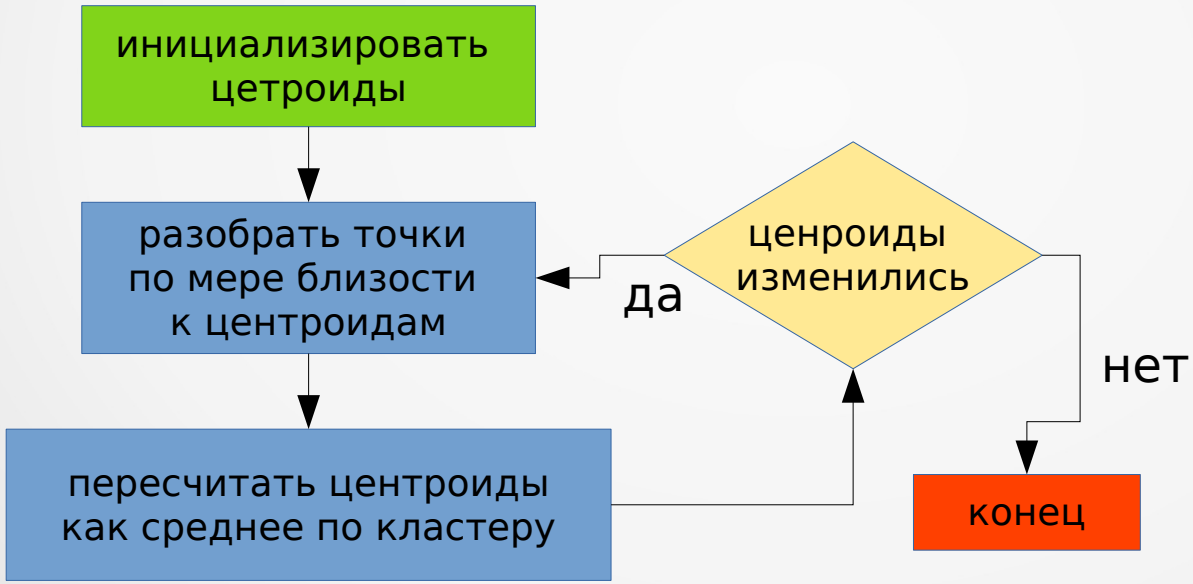
цель - найти точки-центроиды

кластеризация

метод к-средних (k-means)

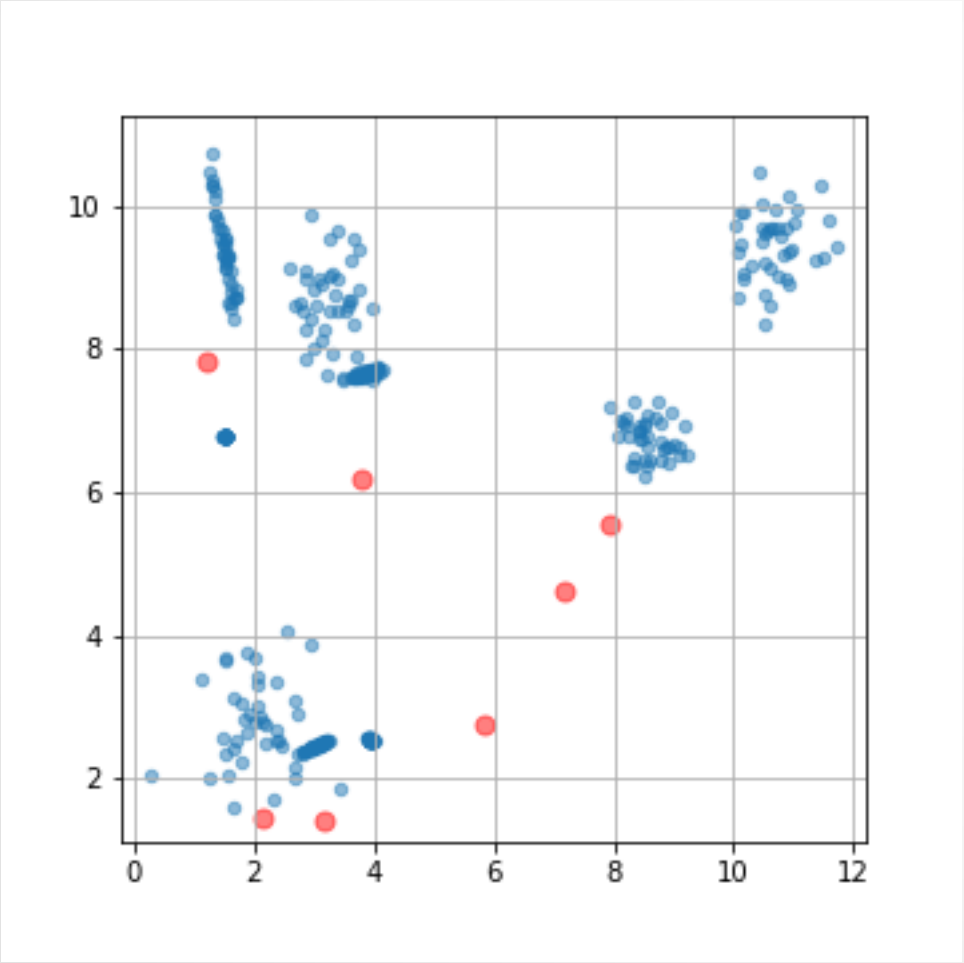
количество кластеров как параметр,

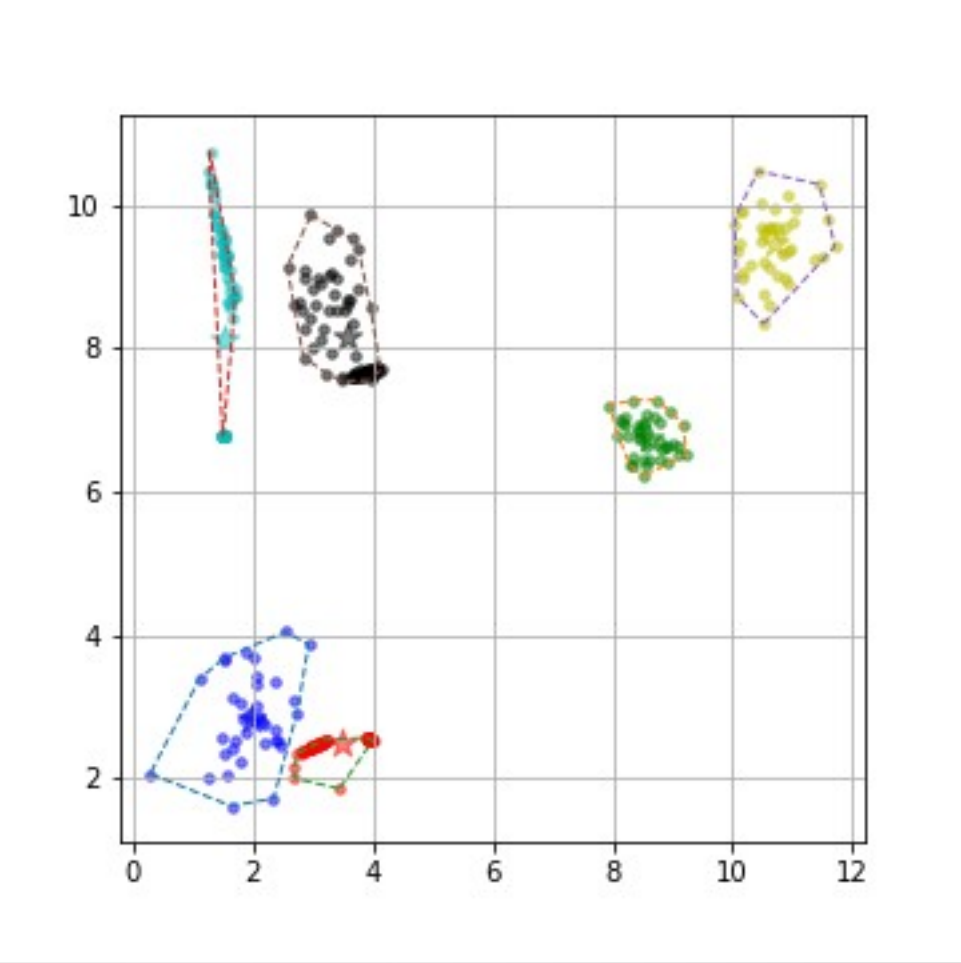
цель - найти точки-центроиды



кластеризация

k-means: начальное состояние и результат





кластеризация

метод ФОРЭЛ (ФОРмальные ЭЛементы)

фиксируем радиус R кластеров,

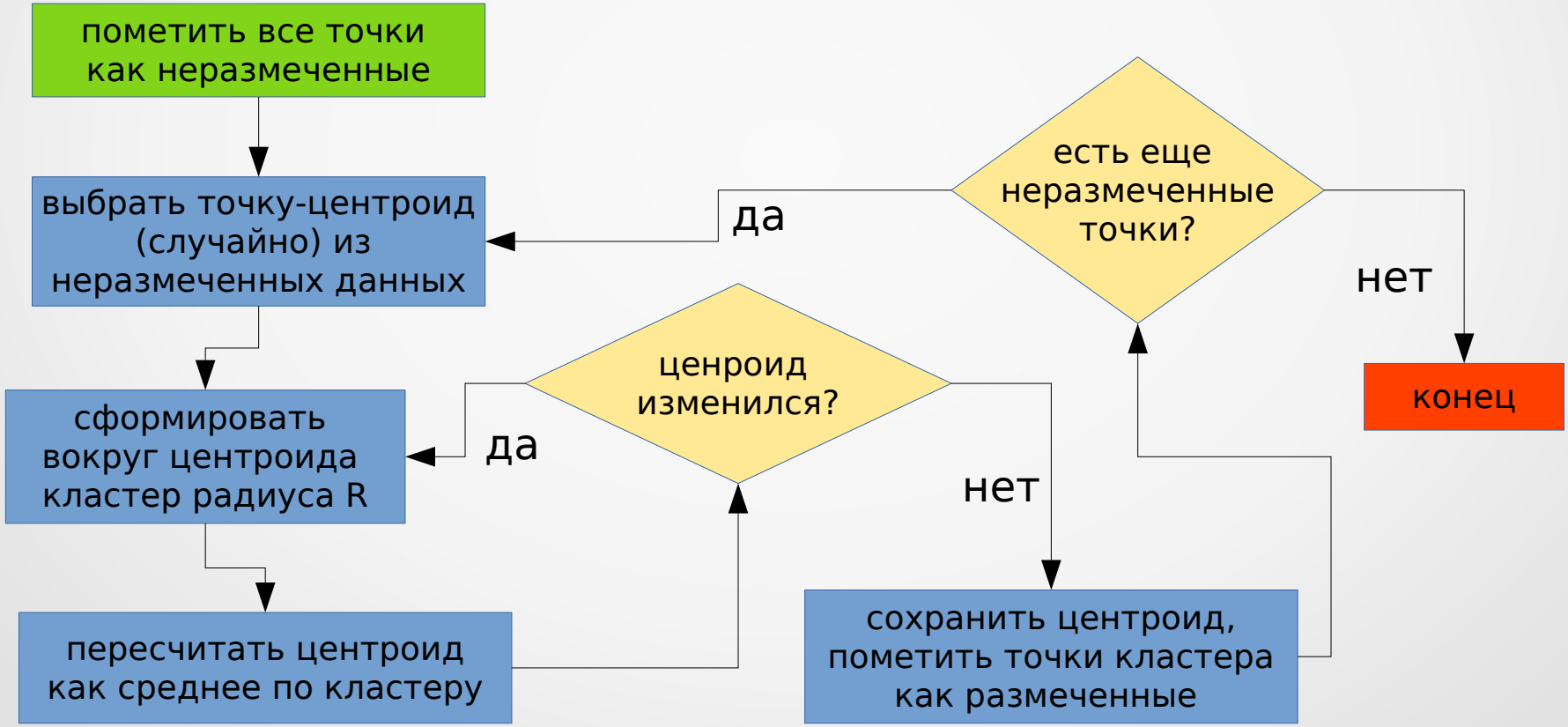
цель - найти точки-центроиды

кластеризация

метод ФОРЭЛ (ФОРмальные ЭЛементы)

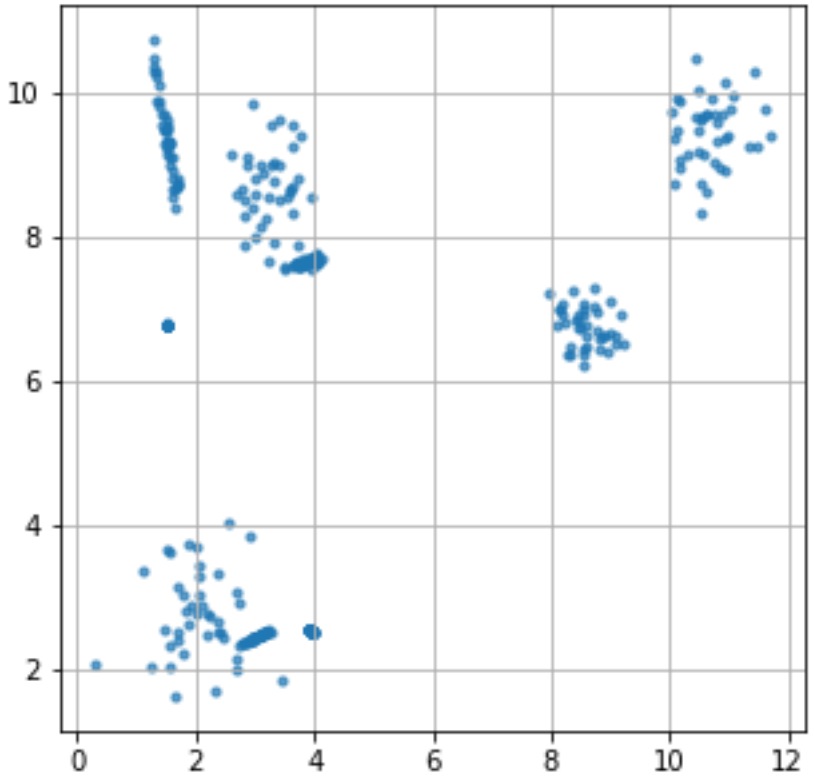
фиксируем радиус R кластеров,

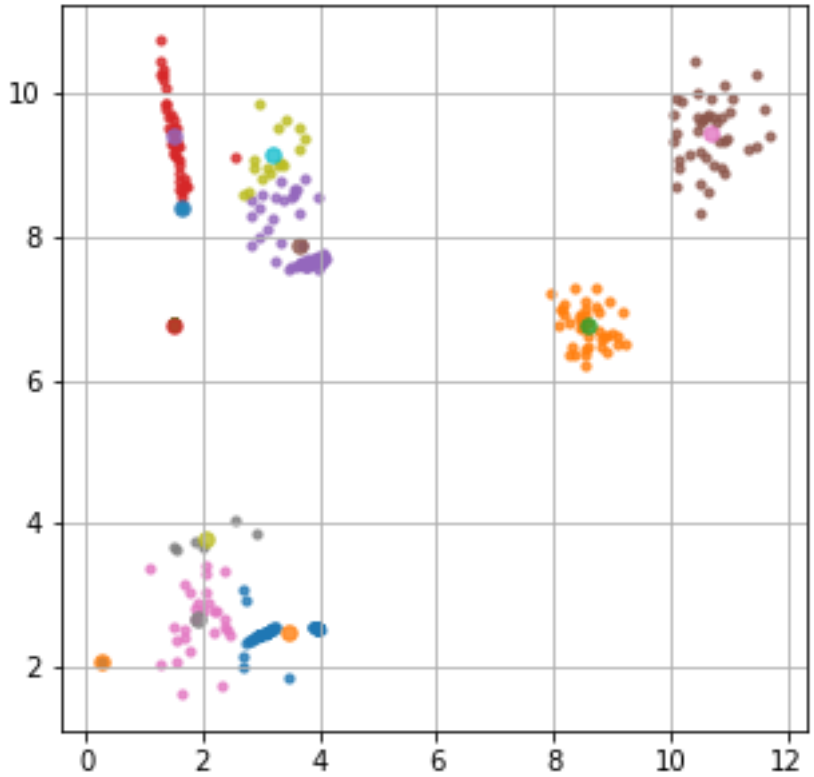
цель - найти точки-центроиды



кластеризация

ФОРЭЛ: начальное состояние и результат





кластеризация

метод КНП (Кратчайший Незамкнутый Путь)

параметр - количество кластеров k

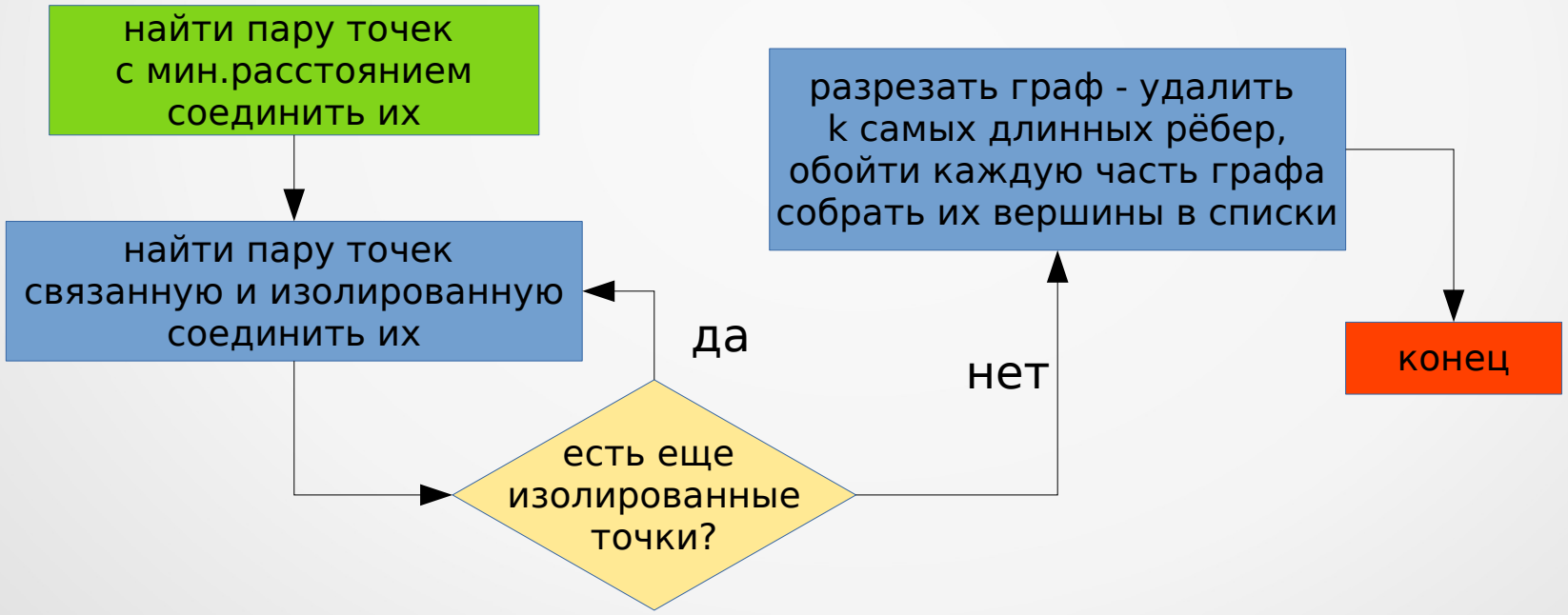
цель - построить ациклический граф на точках

кластеризация

метод КНП (Кратчайший Незамкнутый Путь)

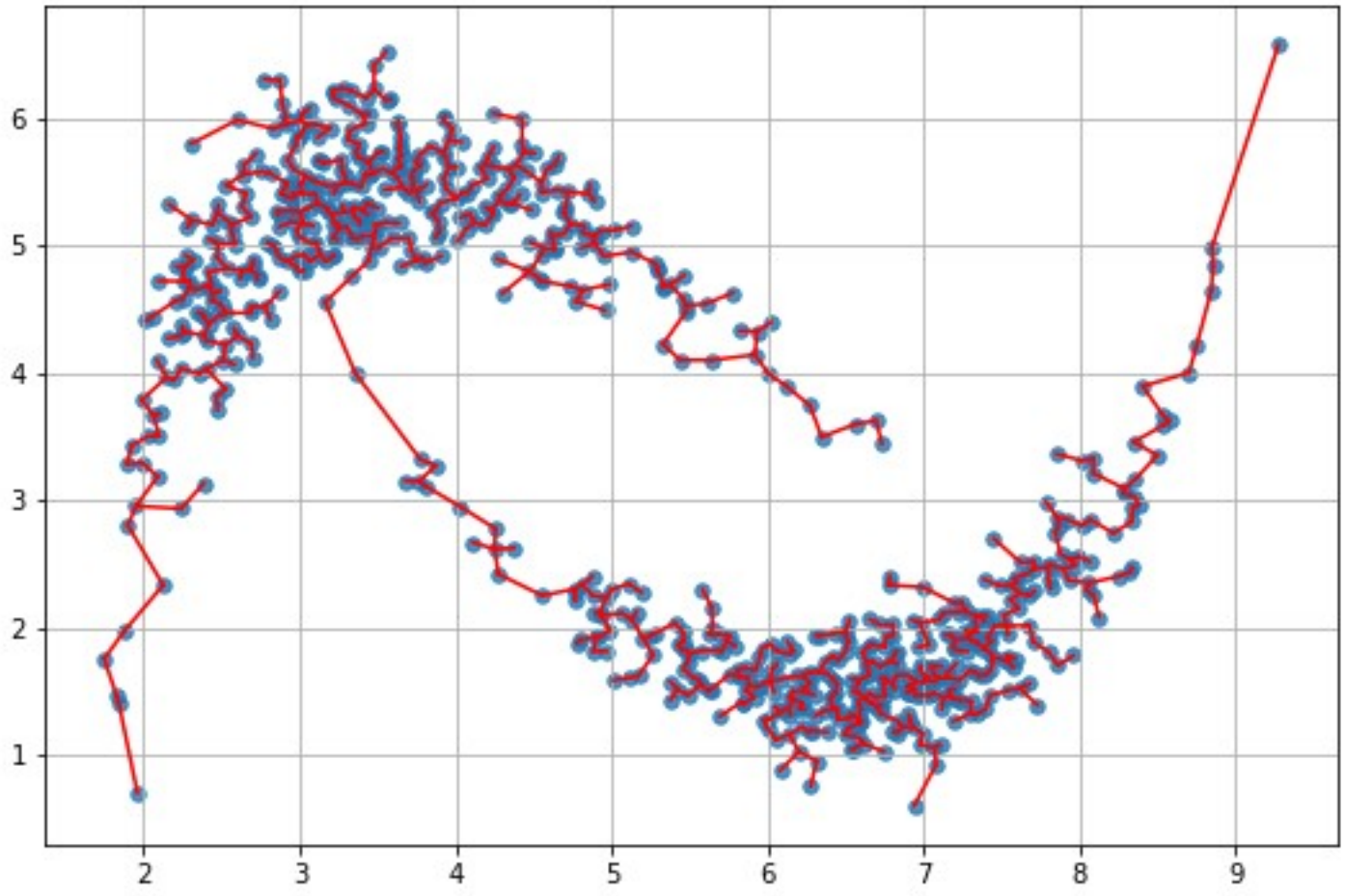
параметр - количество кластеров k

цель - построить ациклический граф на точках



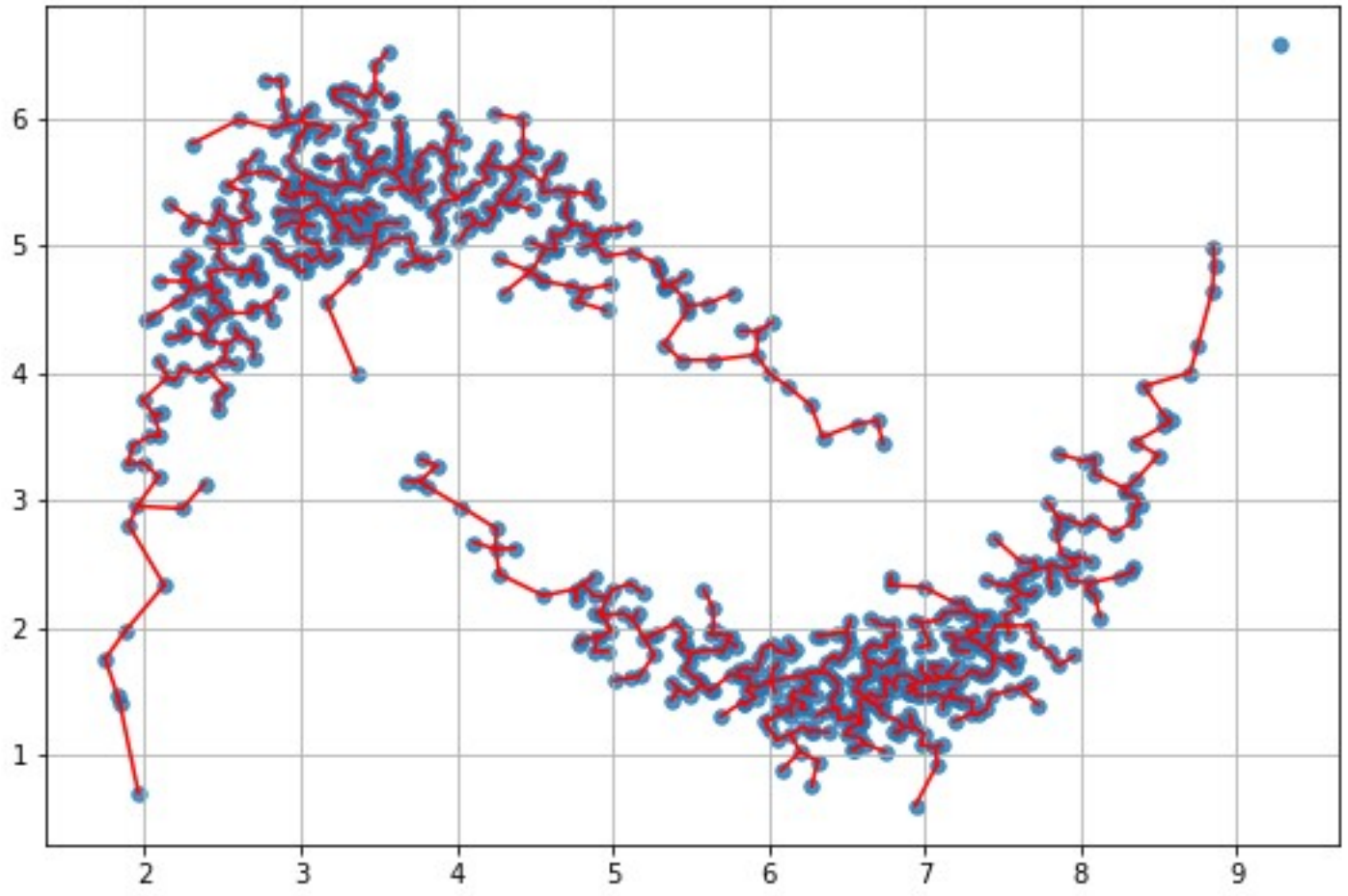
кластеризация

КНП: полный граф



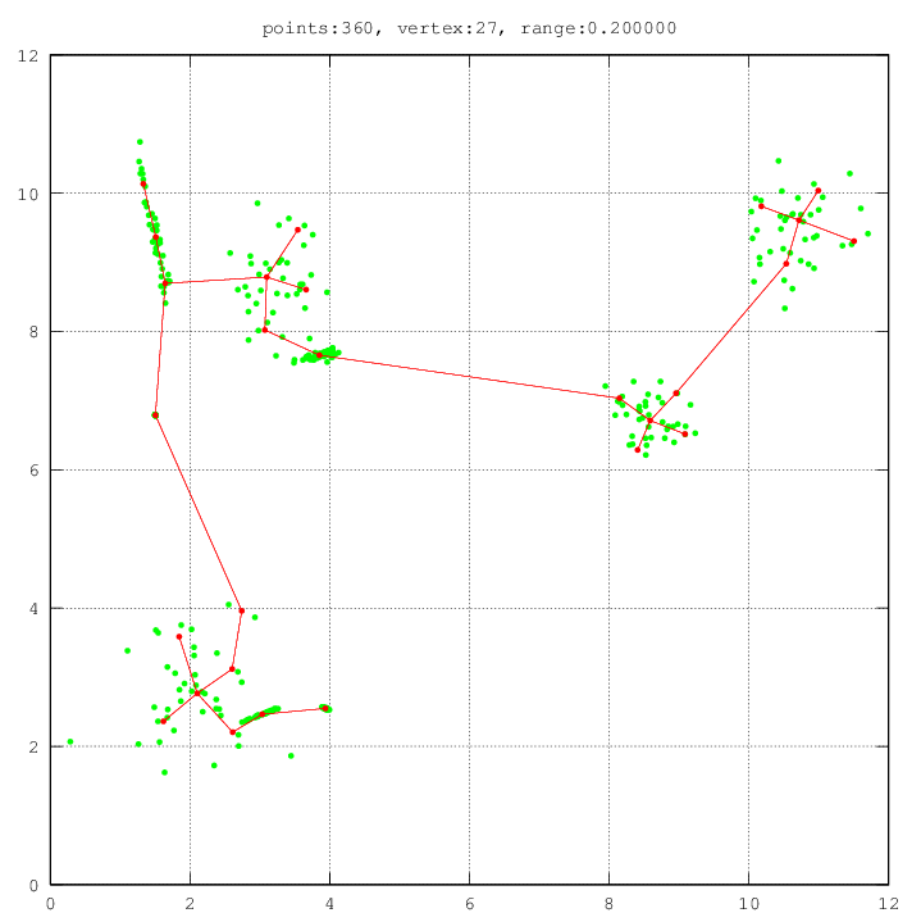
кластеризация

КНП: разрезанный граф



кластеризация

ФОРЭЛ + КНП



кластеризация

метод DBSCAN

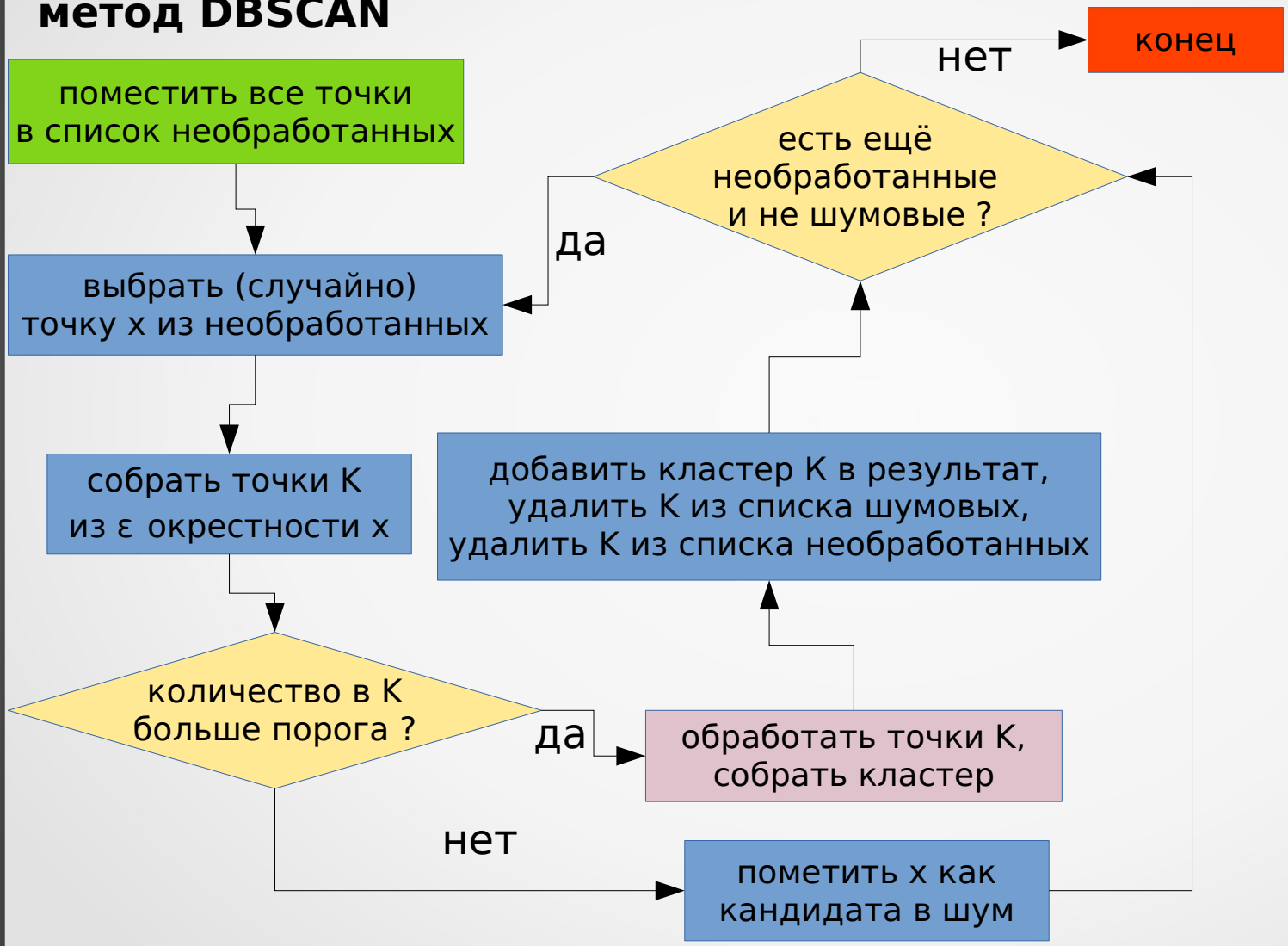
фиксируем размер окрестности точки

минимальное количество объектов в кластере

точки делим на корневые, граничные и шум

кластеризация

метод DBSCAN

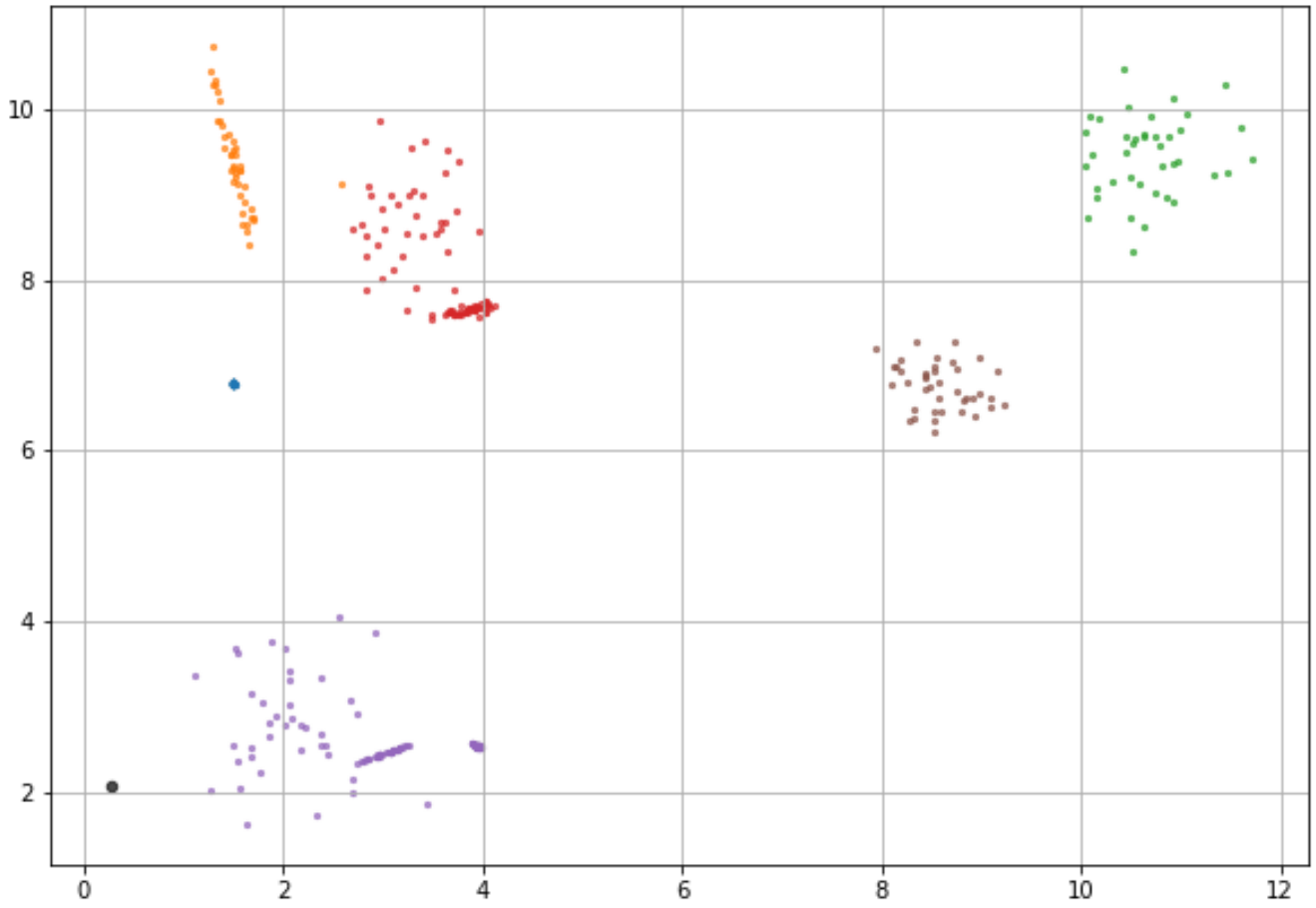


кластеризация

метод DBSCAN

кластеризация

метод DBSCAN - результат



кластеризация

иерархическая кластеризация

идея - последовательное объединение близких групп объектов

вход: данные
выход: история объединения групп в виде дерева (дендрограмма)

нужен метод оценки расстояний между множествами точек

кластеризация

иерархическая кластеризация

идея - последовательное объединение близких групп объектов

вход: данные
выход: история объединения групп в виде дерева (дендрограмма)

нужен метод оценки расстояний между множествами точек

- расстояние между центрами множеств
- наибольшее расстояние среди всех точек множеств
- наименьшее расстояние между всеми точками множеств
- среднее расстояние между всеми точками множеств

кластеризация

иерархическая кластеризация

последовательное объединение близких групп объектов

метод оценки расстояний между множествами точек

расстояние Уорда

$$\rho_{ward}(W,S)=\frac{|W|\cdot|S|}{|W|+|S|}\cdot\rho\left(\frac{\sum_{w\in W} w}{|W|},\frac{\sum_{s\in S} s}{|S|}\right)$$

кластеризация

иерархическая кластеризация

последовательное объединение близких групп объектов

метод оценки расстояний между множествами точек

расстояние Уорда

$$\rho_{ward}(W,S)=\frac{|W|\cdot|S|}{|W|+|S|}\cdot\rho\left(\frac{\sum_{w\in W} w}{|W|},\frac{\sum_{s\in S} s}{|S|}\right)$$

оценка расстояния между объединением множеств точек

формула Ланса-Уильямса

$$\rho_{lw}(U\cup V,S)=\frac{|U|+|S|}{|W|+|S|}\cdot\rho_{ward}(U,S)+\frac{|V|+|S|}{|W|+|S|}\cdot\rho_{ward}(V,S)-\frac{|S|}{|W|+|S|}\cdot\rho_{ward}(U,V)$$

кластеризация

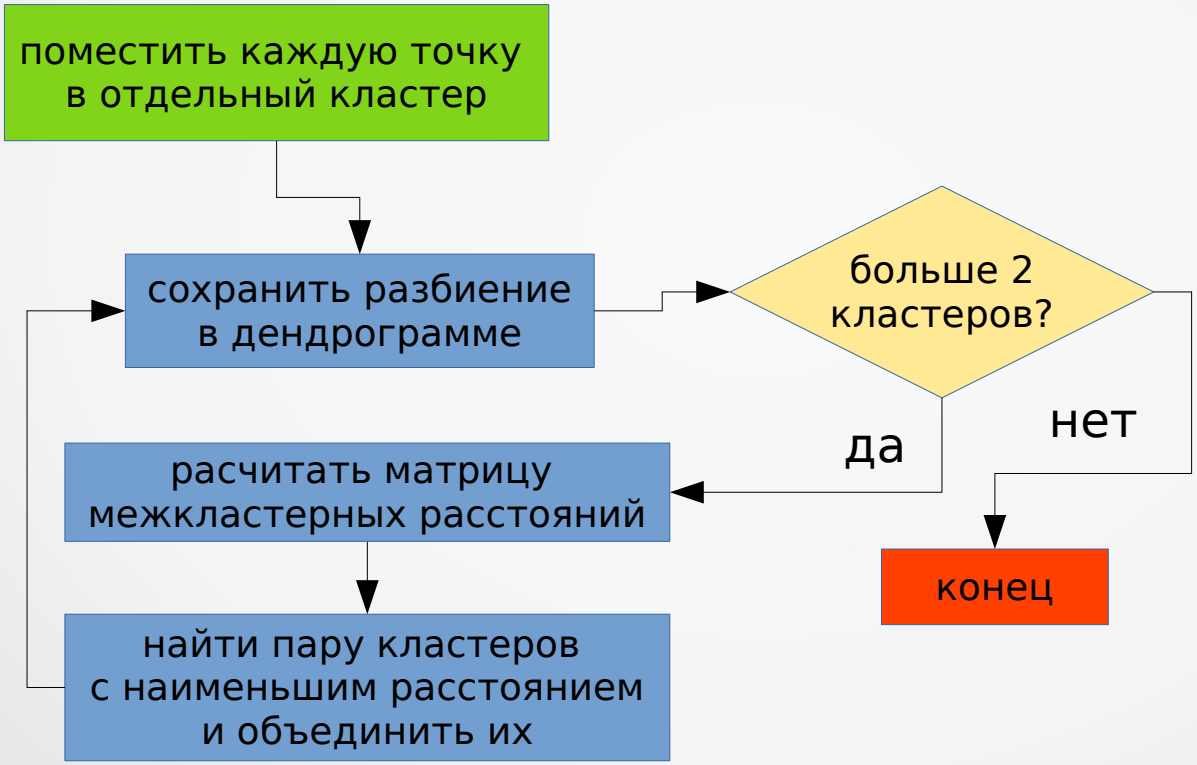
иерархическая кластеризация: базовый алгоритм

последовательное объединение близких групп объектов

кластеризация

иерархическая кластеризация: базовый алгоритм

последовательное объединение близких групп объектов



кластеризация

иерархическая кластеризация: регулировка глубины

последовательное объединение близких групп объектов

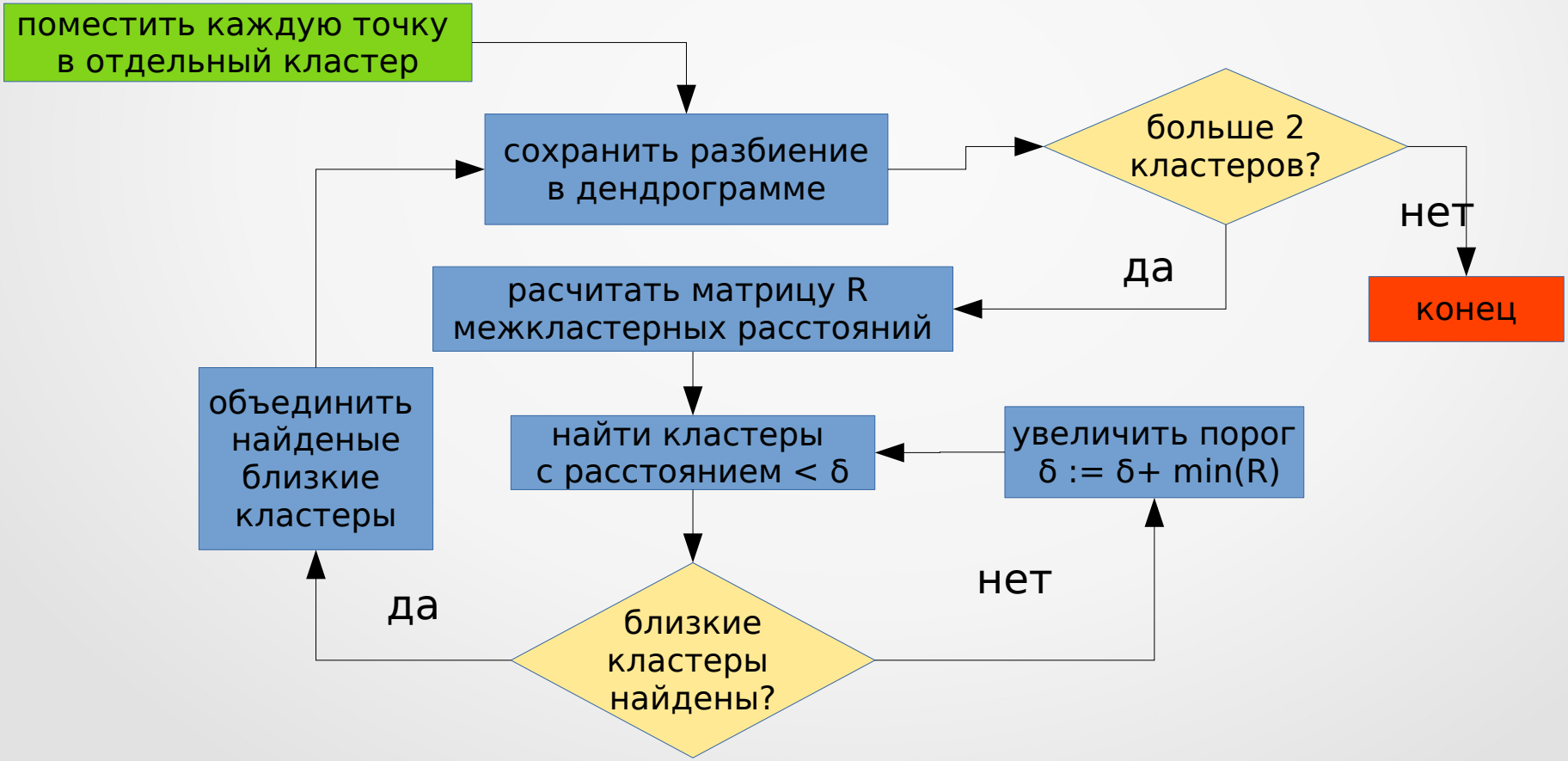
введём параметр - порог межкластерного расстояния δ

кластеризация

иерархическая кластеризация: регулировка глубины

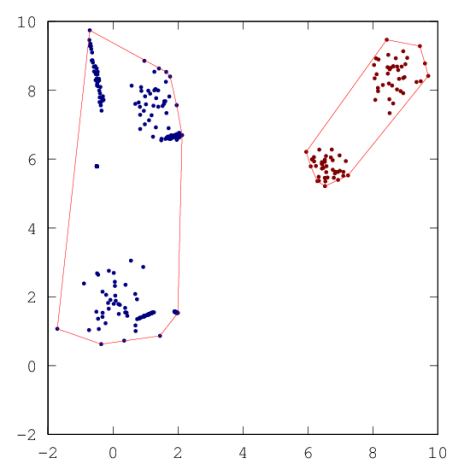
последовательное объединение близких групп объектов

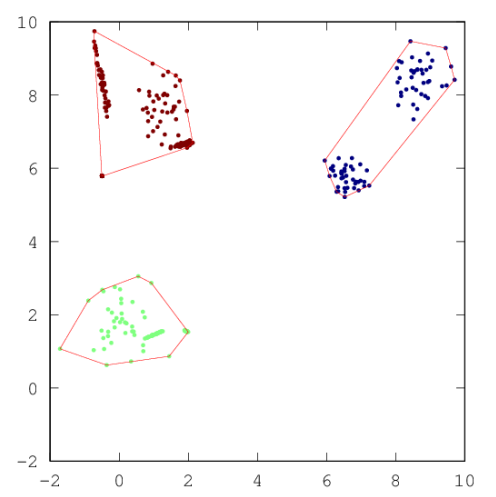
введём параметр - порог межкластерного расстояния δ

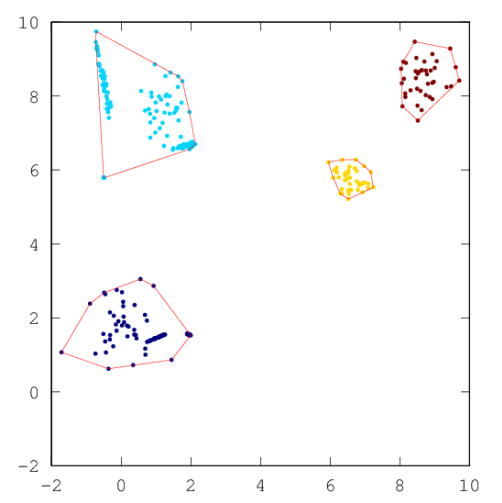


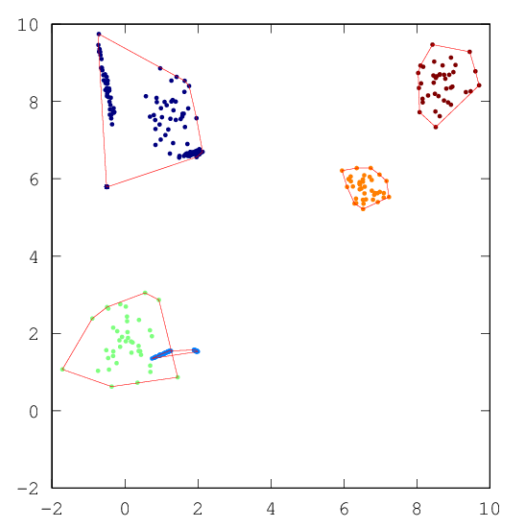
кластеризация

иерархическая кластеризация
последовательное объединение близких групп объектов

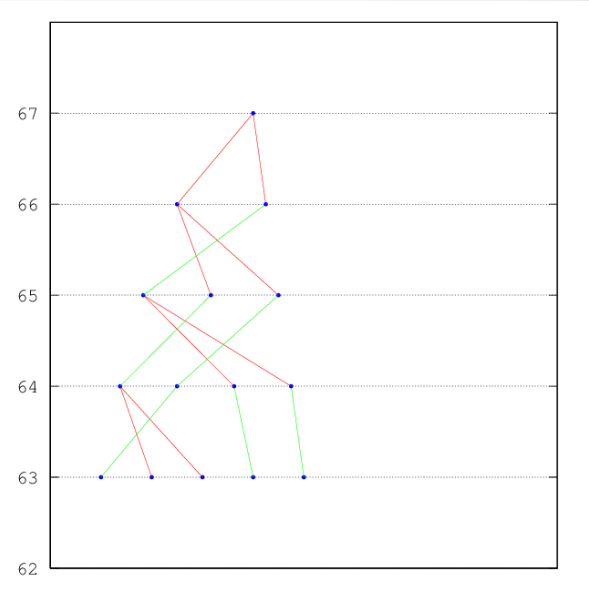








вершина дендрограммы
в 67 слоёв



кластеризация

приложение - автоматический агрегатор новостей

КЛАСТЕР 1:

Около 18 тысяч человек покинули подконтрольные боевикам районы Алеппо За минувшие сутки из подконтрольных боевикам районов сирийского города Алеппо было выведено около 17,971 тысячи жителей, в их числе 7,542 тысячи детей. Об этом в субботу, 10 декабря, сообщает ТАСС со ссылкой на российский Центр примирения враждующих сторон в Арабской Республике.

Битва за Алеппо: повстанцы просят дать им вывезти раненых Сирийские повстанцы просят о пятидневном перемирии, чтобы эвакуировать раненых из районов в восточной части Алеппо, после того как они вывели все свои отряды из исторического центра — Старого города.

КЛАСТЕР 2:

Финальная распродажа! Chery Tiggo от 19990 руб (199,9 млн)
«Китайские автомобили» объявляют финальную распродажу популярных кроссоверов Chery Tiggo FL! На автомобили в максимальной комплектации установлена специальная цена 19 990 рублей (199,9 млн). Количество автомобилей ограничено!

Не успели купить новый автомобиль в «черную пятницу»? Не нашли ничего подходящего в дилерских автосалонах? Не беда: автосалон «Китайские автомобили» объявляет «черные субботы»! «Черная суббота» — это не шестой трудовой день в советской стране, а желанный праздник для покупателей новеньких авто!

кластеризация: литература

git clone *https://github.com/mechanoid5/ml_lectorium.git*

- К.В. Воронцов Методы кластеризации. - курс "Машинное обучение" ШАД Яндекс 2014
- Е.С.Борисов Кластеризатор на основе алгоритма k-means. *http://mechanoid.kiev.ua/ml-k-means.html*
- Е.С.Борисов Метод кластеризации КНП. *http://mechanoid.kiev.ua/ml-knp.html*
- Е.С.Борисов Метод кластеризации ФОРЭЛ. *http://mechanoid.kiev.ua/ml-forel.html*
- Е.С.Борисов Метод иерархической кластеризации. *http://mechanoid.kiev.ua/ml-lnwl.html*
-

кластеризация

Вопросы ?

кластеризация: практика

источники данных для экспериментов

sklearn.datasets
UCI Repository
kaggle

задание

- реализовать итоговый обход графа для КНП
- реализовать комбинированный метод ФОРЭЛ+КНП
- реализовать иерархический кластеризатор
- применить кластеризаторы для разных наборов данных
- посчитать оценки результатов кластеризации