О задаче кластеризации

Евгений Борисов

метрический подход - использование расстояний между объектами метрика - функция расстояния

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

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

симметрия: $\rho(x,y) = \rho(y,x)$

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

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:
$$\rho(x,y) = \frac{\sum\limits_{i} x_{i} y_{i}}{\sqrt{\sum\limits_{i} x_{i}^{2}} \cdot \sqrt{\sum\limits_{i} y_{i}^{2}}}$$

О ЗАДАЧЕ: обучение «без учителя» (unsupervised learning)

дано:

Х - объекты

ho: X imes X oldsymbol o

найти:

Ү - кластеры (метки)

 $a: X \rightarrow Y$ - кластеризатор

- кластер состоит из близких объектов
- объекты разных кластеров существенно разные

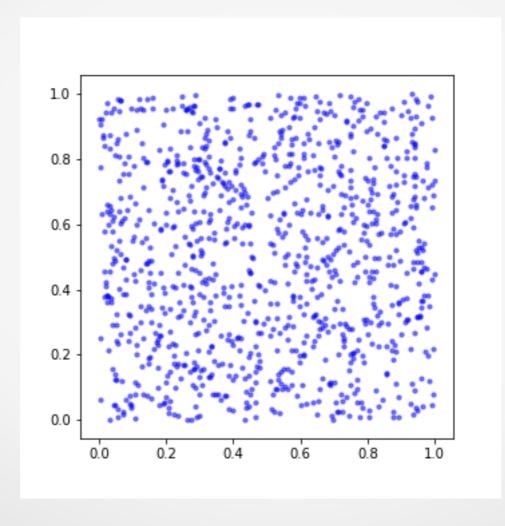
о некорректности (размытости) задачи кластеризации

- 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

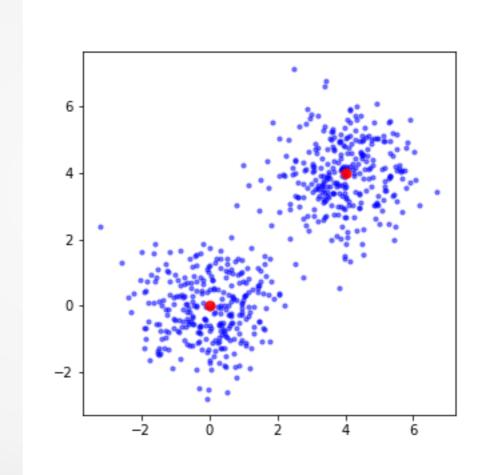
цели кластеризации

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

тип кластеры могут отсутствовать совсем



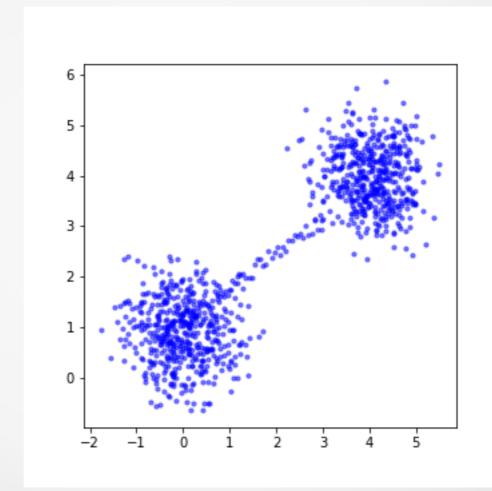
типы кластера: кластеры с центром



другие типы кластеров:

• могут отсутствовать

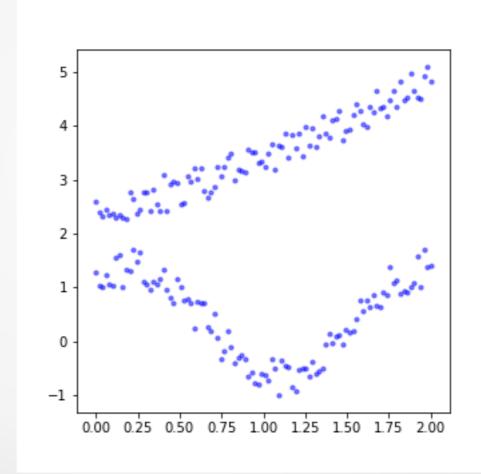
тип кластера: кластеры с перемычками



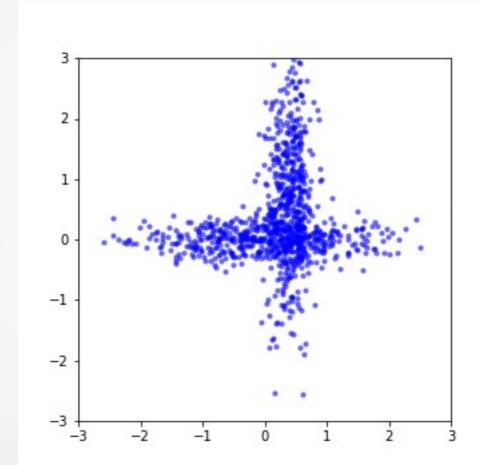
- могут отсутствовать
- кластеры с центром

тип кластера: кластеры ленточные

- могут отсутствовать
- кластеры с центром
- кластеры с перемычками



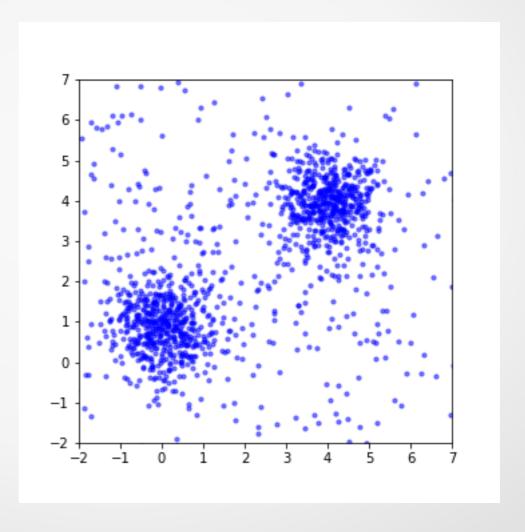
тип кластера: кластеры с наложением



- могут отсутствовать
- кластеры с центром
- кластеры с перемычками
- кластеры ленточные

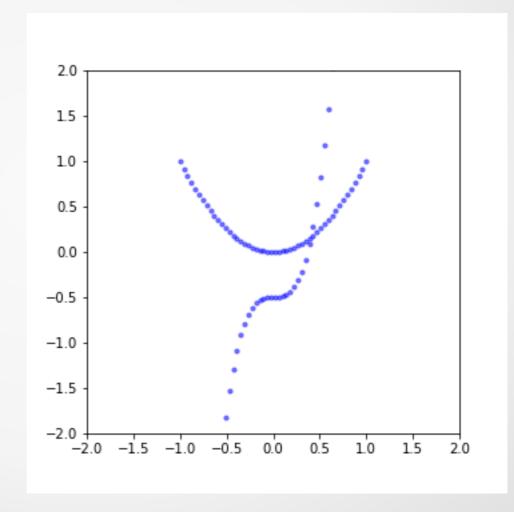
тип кластера: кластеры с шумом

- могут отсутствовать
- кластеры с центром
- кластеры с перемычками
- кластеры ленточные
- кластеры с наложением



тип кластера: кластеры по типу регулярности

- могут отсутствовать
- кластеры с центром
- кластеры с перемычками
- кластеры ленточные
- кластеры с наложением
- кластеры с шумом



оценки кластеризации $a: X \to Y$

$$a: X \rightarrow Y$$

$$ri = \frac{\sum\limits_{i < j} [a_i = a_j]
ho(x_i, x_j)}{\sum\limits_{i < j} [a_i = a_j]} o min$$
 среднее внутрикластерное расстояние

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

среднее межкластерное расстояние

отношение внутрикластерного и межкластерного расстояний

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

метод к-средних (k-means)

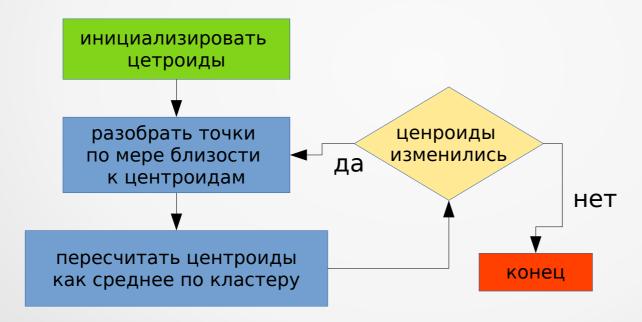
количество кластеров как параметр,

цель - найти точки-центроиды

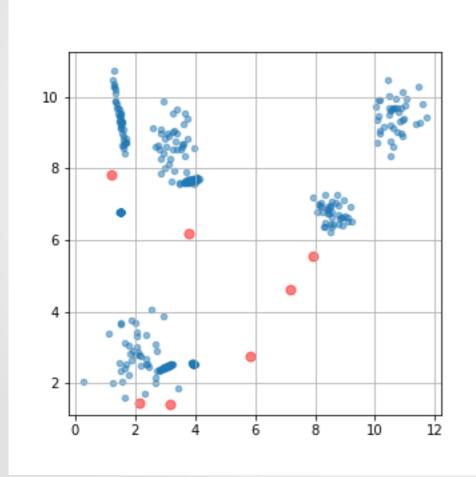
метод к-средних (k-means)

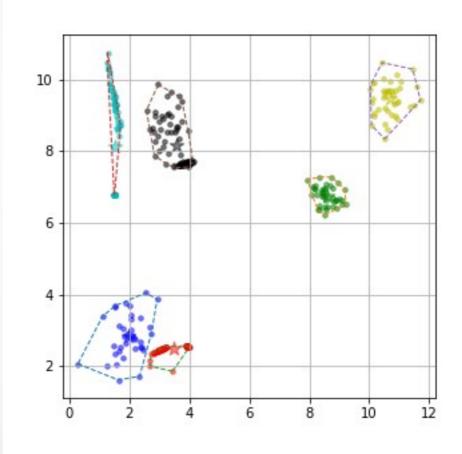
количество кластеров как параметр,

цель - найти точки-центроиды



k-means: начальное состояние и результат





метод MeanShift (ФорЭл - ФОРмальные ЭЛементы)

фиксируем радиус R кластеров,

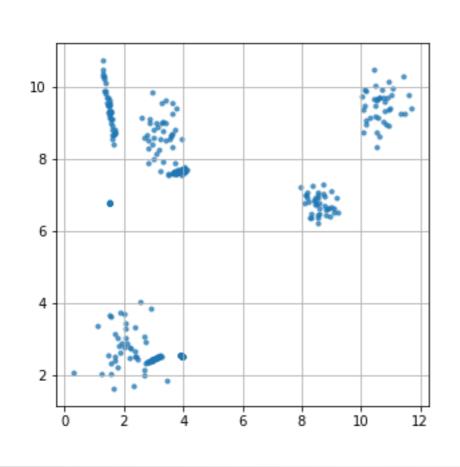
цель - найти точки-центроиды

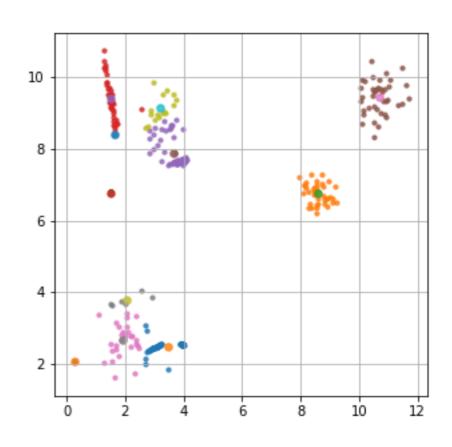
метод MeanShift (ФорЭл - ФОРмальные ЭЛементы)

фиксируем радиус R кластеров, цель - найти точки-центроиды



MeanShift (ФорЭл) начальное состояние и результат





метод КНП (Кратчайший Незамкнутый Путь)

параметр - количество кластеров k

цель - построить ациклический граф на точках

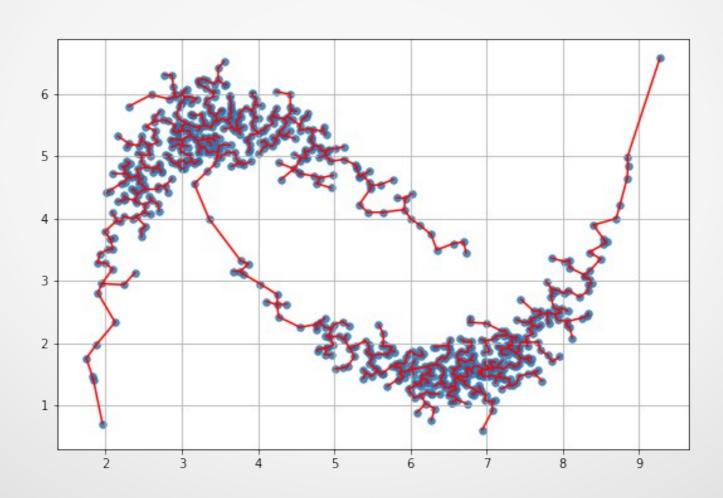
метод КНП (Кратчайший Незамкнутый Путь)

параметр - количество кластеров k

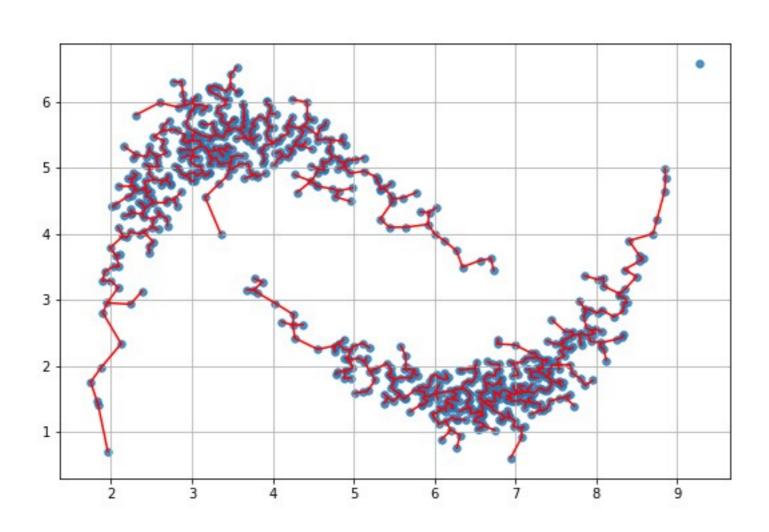
цель - построить ациклический граф на точках



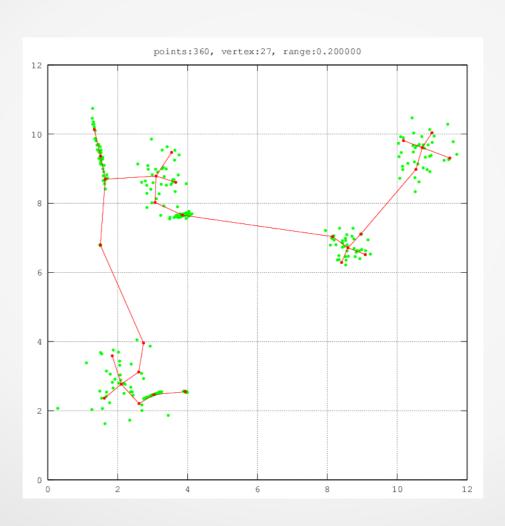
КНП: полный граф



КНП: разрезанный граф



ФорЭл + КНП



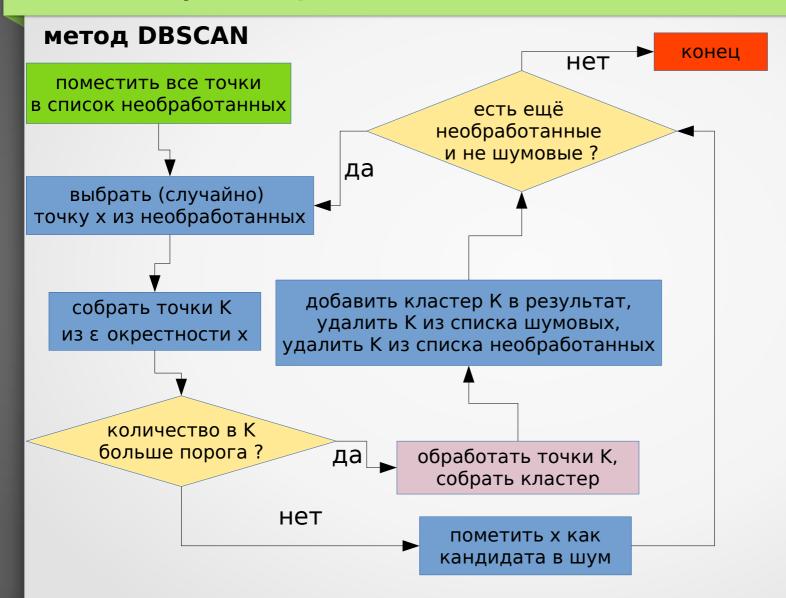
метод DBSCAN

фиксируем размер окрестности точки

минимальное количество объектов в кластере

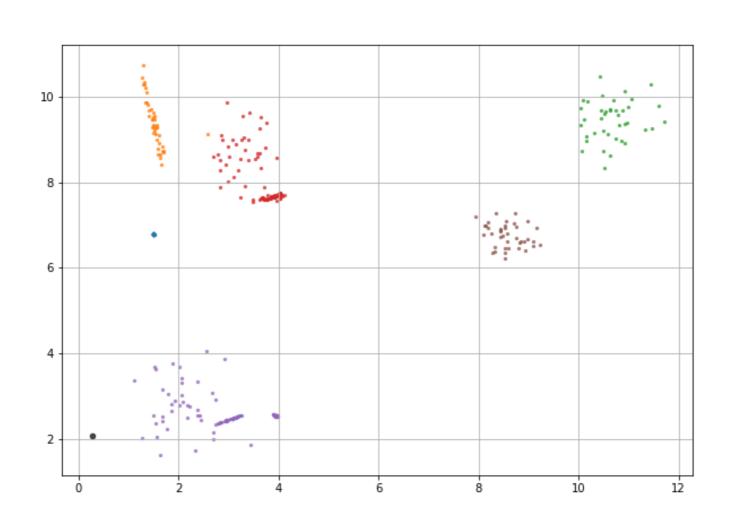
точки делим на корневые, граничные и шум

кластеризация





метод DBSCAN - результат



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

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

иерархическая кластеризация

последовательное объединение близких групп объектов метод оценки расстояний между множествами точек расстояние Уорда

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

иерархическая кластеризация: базовый алгоритм

последовательное объединение близких групп объектов

иерархическая кластеризация: базовый алгоритм

последовательное объединение близких групп объектов



иерархическая кластеризация: регулировка глубины

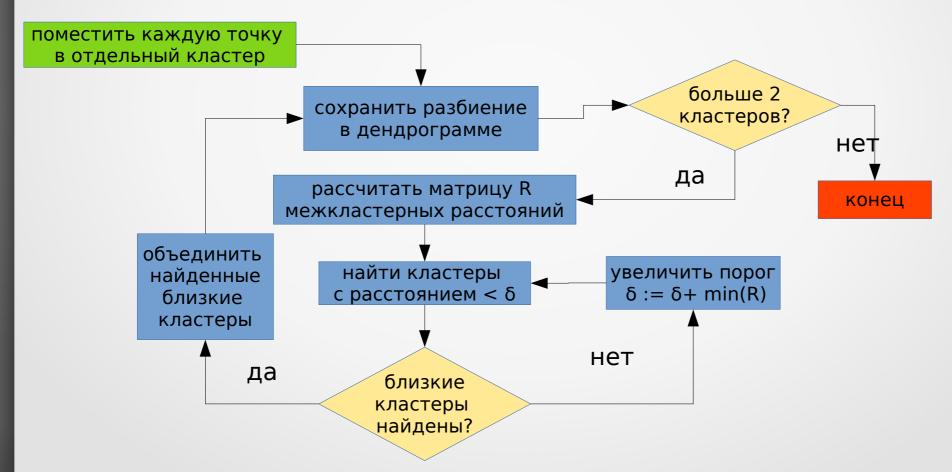
последовательное объединение близких групп объектов

введём параметр - порог межкластерного расстояния δ

иерархическая кластеризация: регулировка глубины

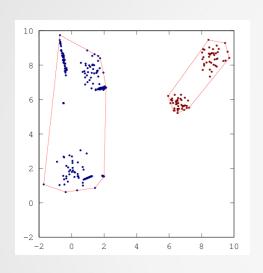
последовательное объединение близких групп объектов

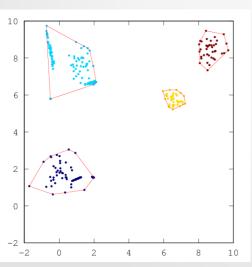
введём параметр - порог межкластерного расстояния δ

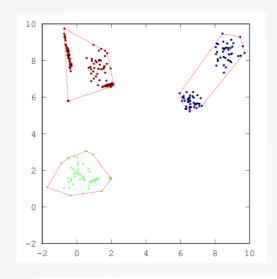


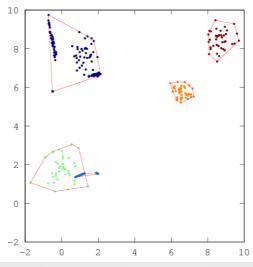
иерархическая кластеризация

последовательное объединение близких групп объектов

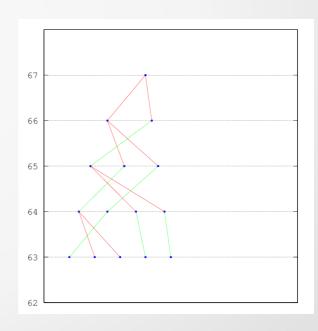








вершина дендрограммы в 67 слоёв



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!

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.su/ml-k-means.html
- E.C.Борисов Метод кластеризации КНП. http://mechanoid.su/ml-knp.html
- E.С.Борисов Метод кластеризации ФОРЭЛ. <u>http://mechanoid.su/ml-forel.html</u>
- Е.С.Борисов Метод иерархической кластеризации. http://mechanoid.su/ml-lnwl.html

•