НЕТОЛОГИЯ
групп

ЗАНЯТИЕ 1.4

КЛАСТЕРИЗАЦИЯ

ЦЕЛИ ЗАНЯТИЯ

В КОНЦЕ ЗАНЯТИЯ ВЫ НАУЧИТЕСЬ:

- производить **кластеризацию данных**

- выбирать **наиболее подходящий алгоритм** для задачи

О ЧЁМ ПОГОВОРИМ И ЧТО СДЕЛАЕМ

1. Задача кластеризации: постановка и примеры

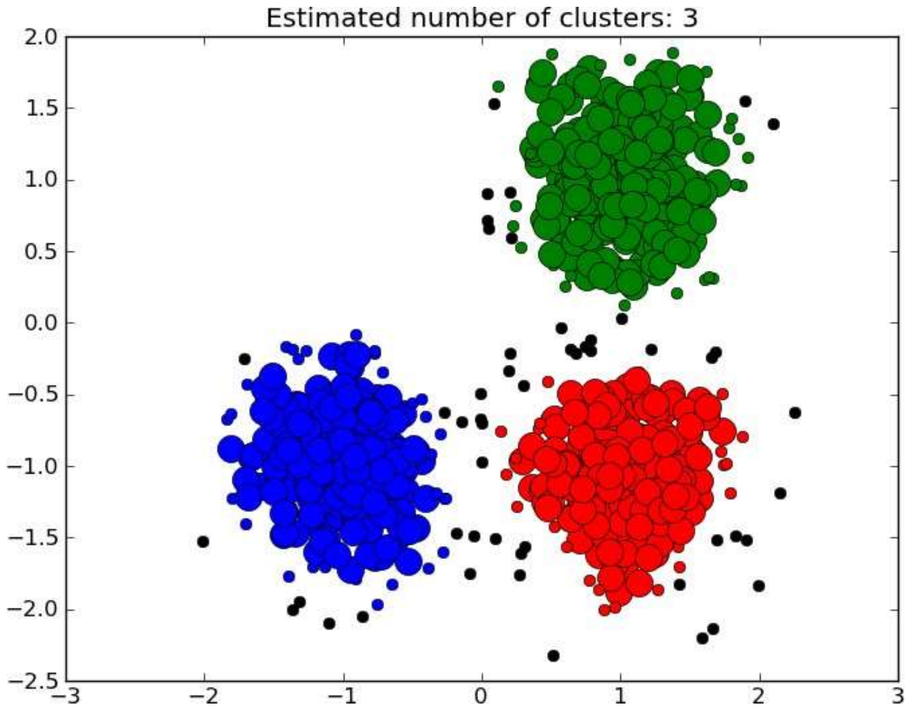
2. Основные алгоритмы

3. Метрики качества кластеризации

1. ЗАДАЧА КЛАСТЕРИЗАЦИИ

ТИПЫ ЗАДАЧ

* классификация
* ранжирование
* регрессия
* **кластеризация**



ПРИМЕРЫ ЗАДАЧ КЛАСТЕРИЗАЦИИ

Пользовательская сегментация. Как выглядят типичные пользователи? (находим сектора, работаем с ними отдельно)

Логистика. Где расположить магазины, чтобы охватить большее кол-во покупателей?

Новости. О чём сейчас пишут СМИ? (Я.Новости кластеризуют новости и выдают их отдельными темами)

EDA. Есть 100млн обращений пользователей. О чём они пишут?

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

$$X^{n \times k} \Rightarrow y^{n \times 1}$$

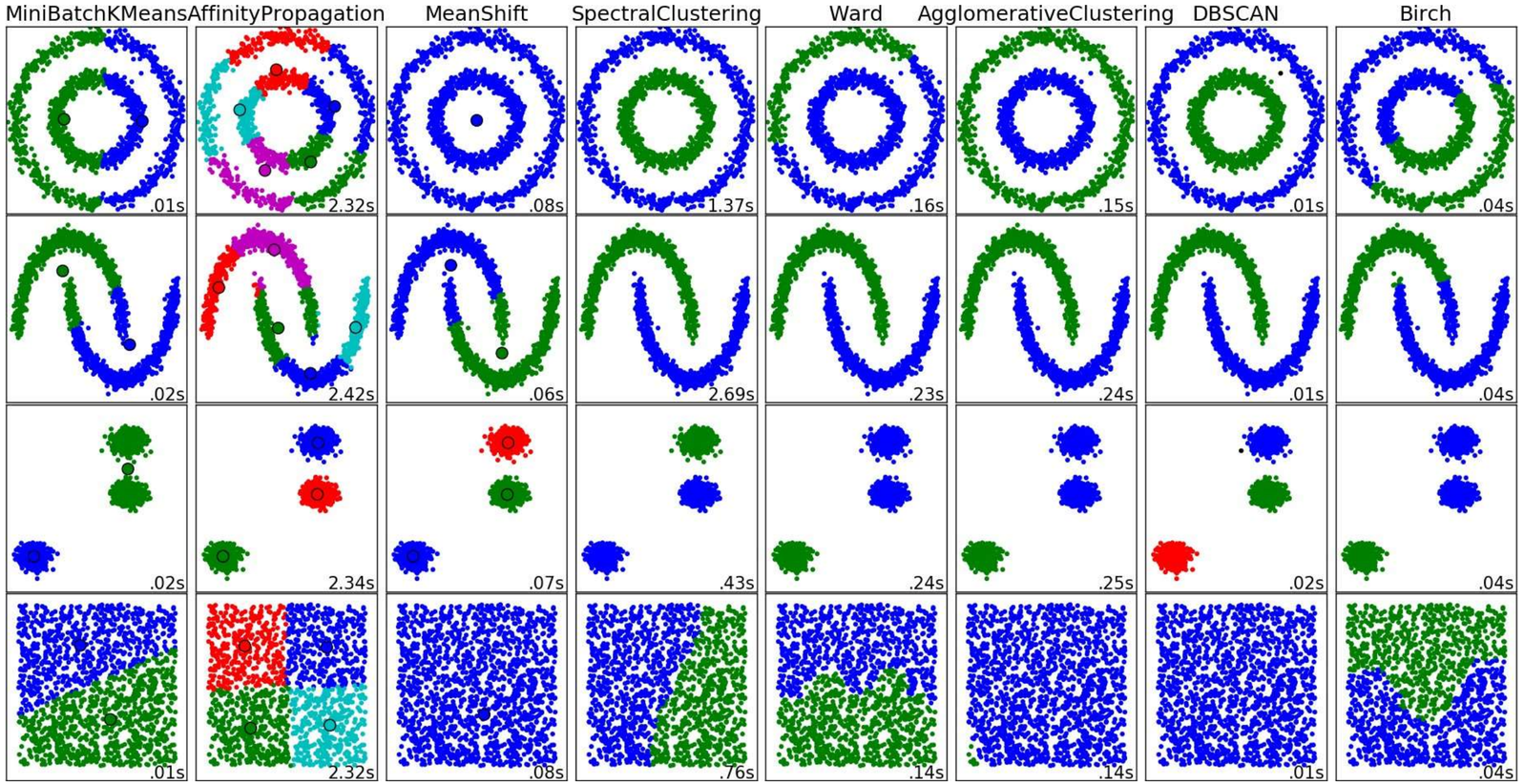
$$\rho : X \times X \to [0, \infty)$$

Каждому объекту поставить в пару метку кластера так, чтобы **близкие** объекты лежали в одном кластере, а далёкие - в разных

Это математически некорректная задача, в ней есть неоднозначности и **нет правильного ответа**

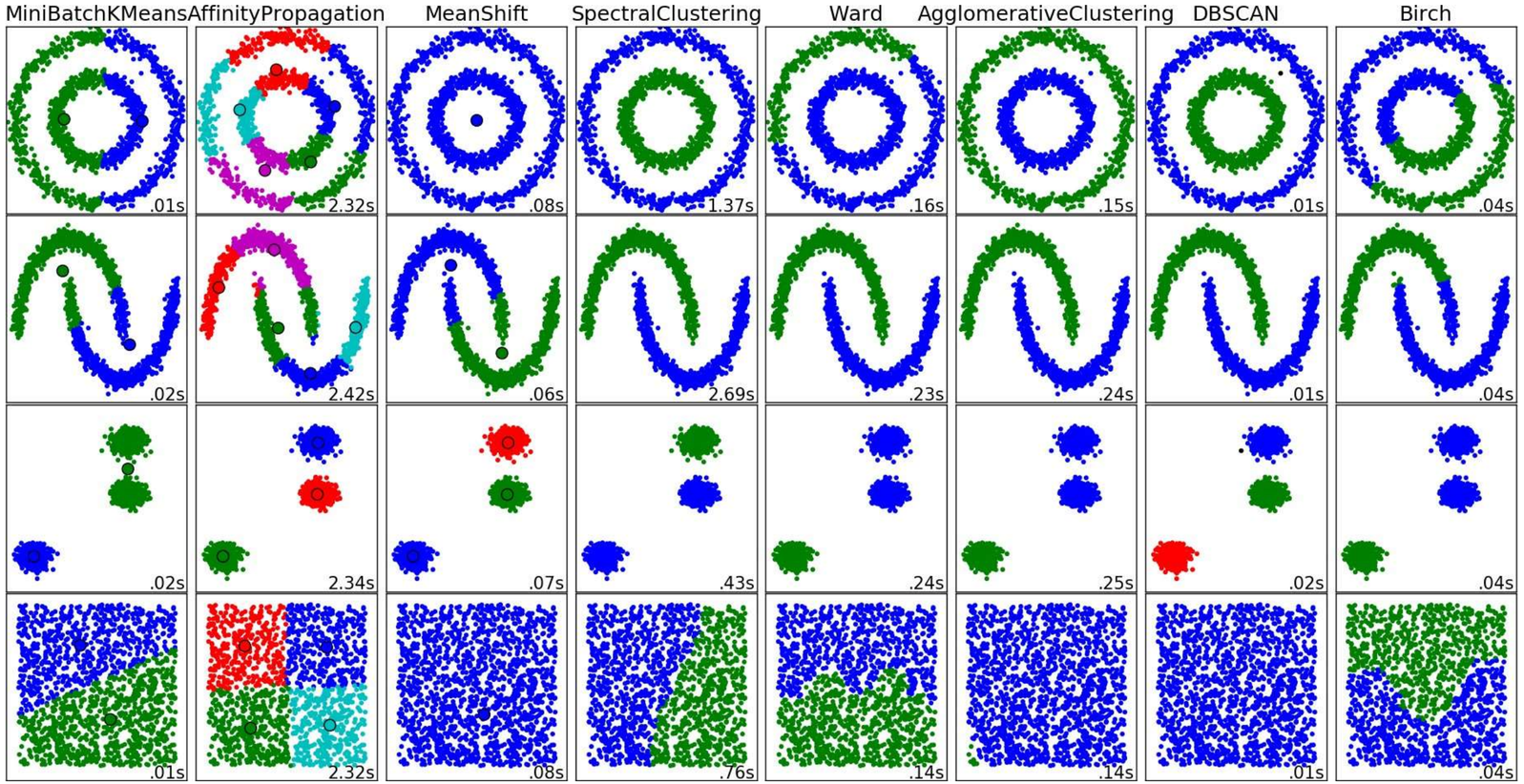
2. АЛГОРИТМЫ КЛАСТЕРИЗАЦИИ

АЛГОРИТМОВ - МНОГО. ЗАЧЕМ?



** sklearn, сравнение кластеризаторов*

АЛГОРИТМОВ - МНОГО. ЗАЧЕМ?



Как и в других задачах:

разные алгоритмы справляются лучше с разными формами зависимостей

** sklearn, сравнение кластеризаторов*

ТИПЫ КЛАСТЕРИЗАЦИИ

Жёсткая кластеризация
(1объект - 1класс)

Мягкая (fuzzy) кластеризация
(1объект - несколько (или 0) классов)

Иерархическая кластеризация
(объект внутри кластера 2.1 -> внутри кластера 2)

PREPROCESSING

PREPROCESSING

Все методы кластеризации основываются на метриках и потому крайне чувствительны к одному масштабу данных, поэтому

StandardScaler - must have

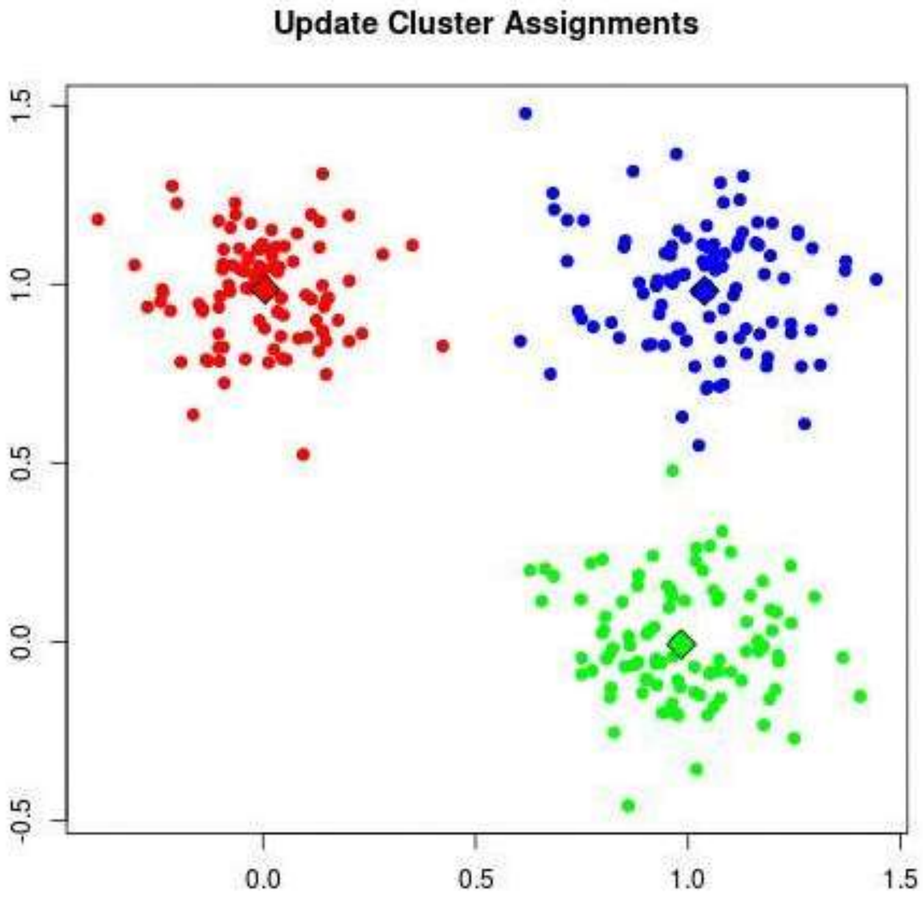
K-MEANS

АЛГОРИТМ

Задать начальные значения центроидов кластеров

Повторять, пока центроиды смещаются:

* присвоить наблюдениям номер кластера с **ближайшим** к ним центром
* передвинуть центроиды кластеров к среднему значению координат членов кластера



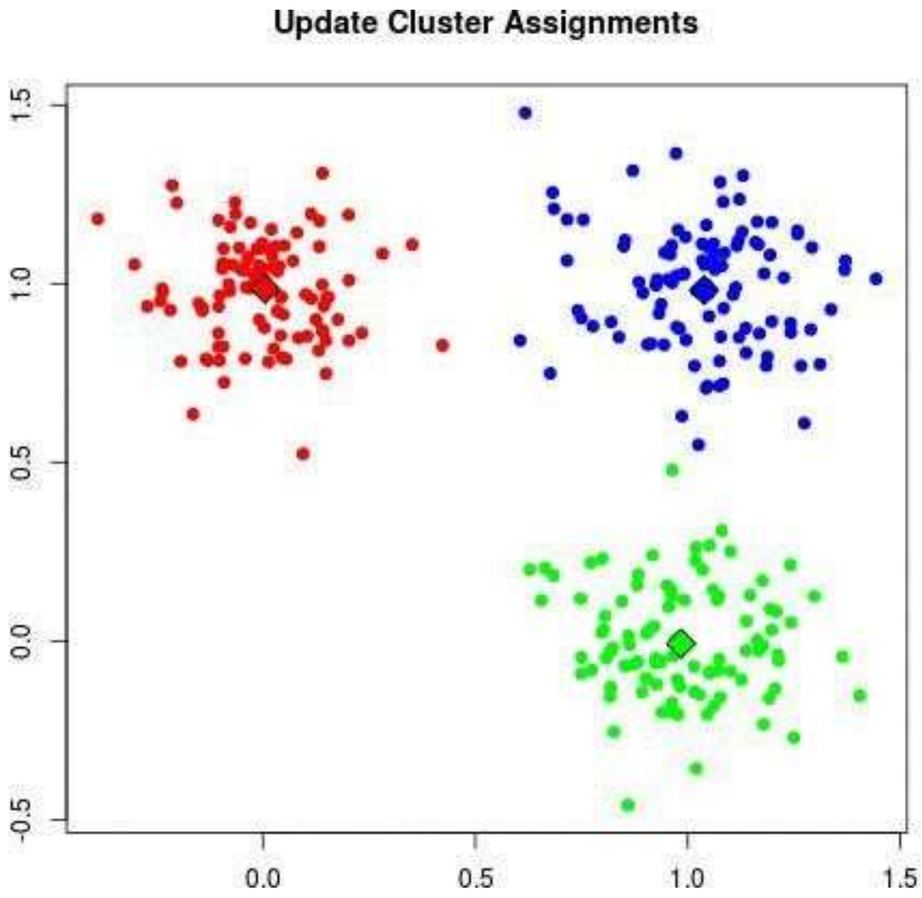
ЦЕЛЬ

Минимизировать внутриклассовые отличия от центроида:

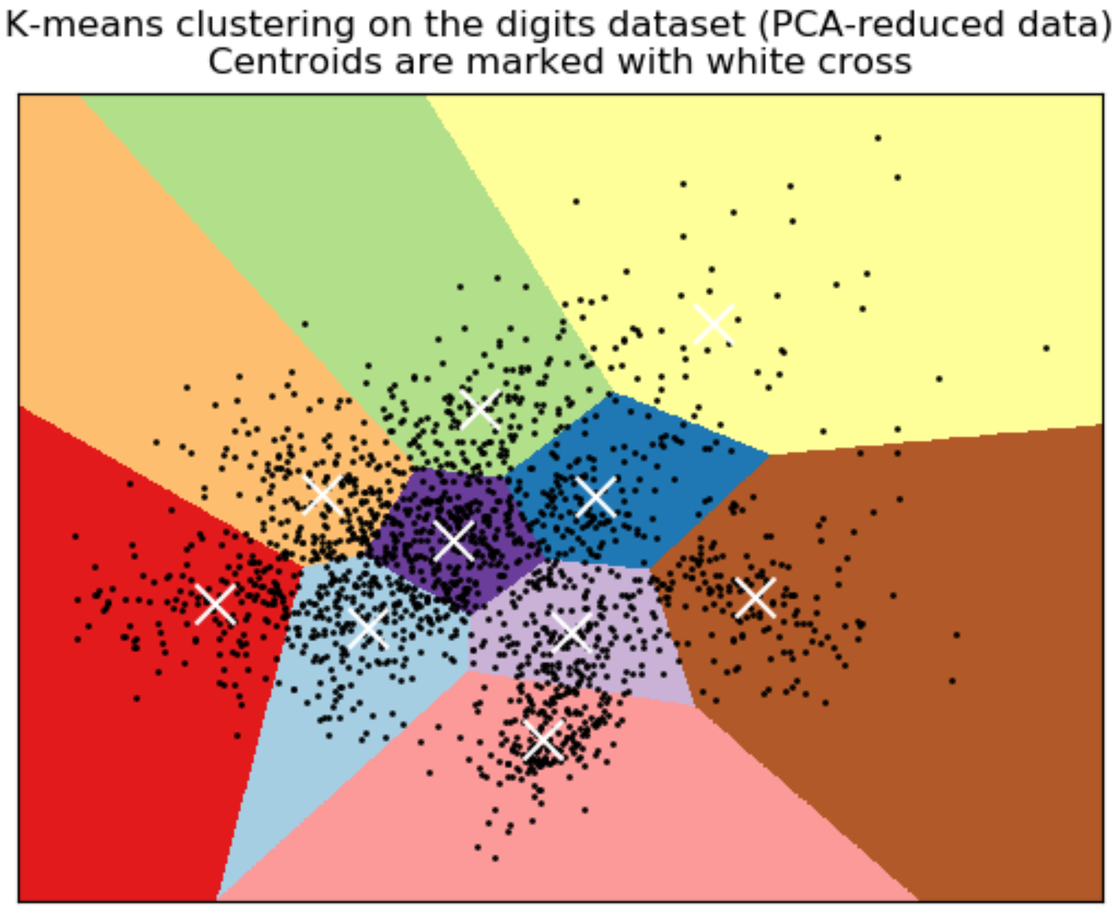
$$\sum_{i=0}^{n} \min_{\mu_j} (\|x_i - \mu_j\|)^2$$

Связанные с этим проблемы:

* предположение о выпуклости и однородности кластеров
* проклятие размерности



ИТОГ

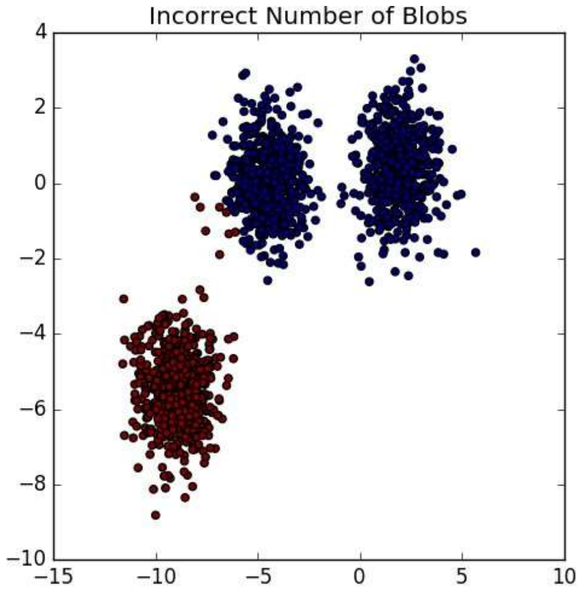


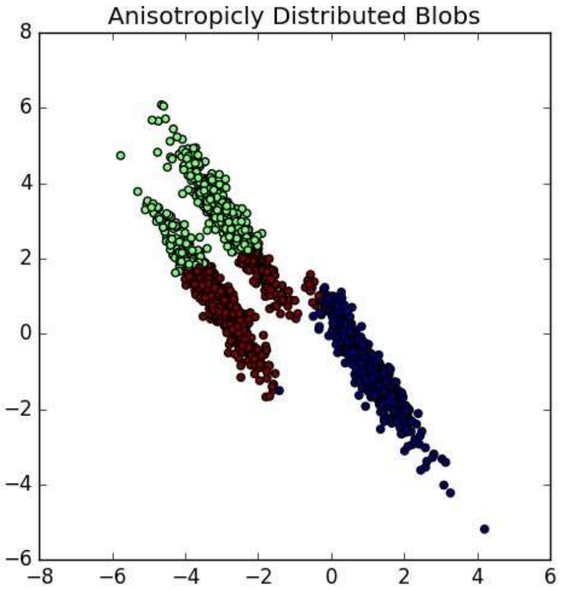
Пространство нарезается на лоскуты из прямых гиперплоскостей

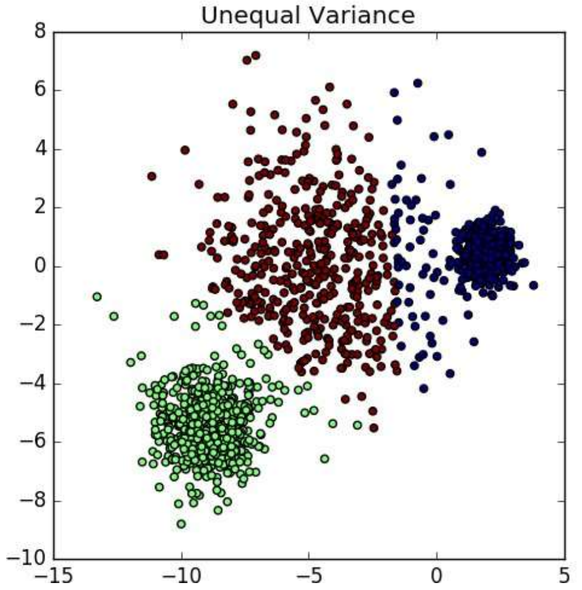
ОГРАНИЧЕНИЯ

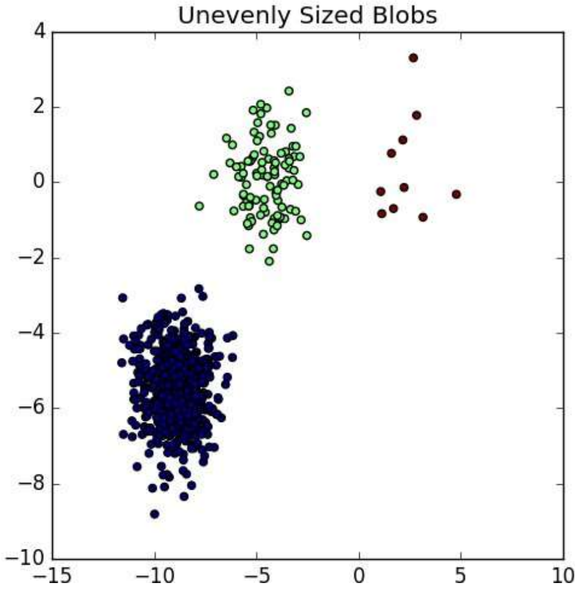
Алгоритм может выдавать контринтуитивные результаты:

1. Если указано не то число кластеров
2. Кластеры - не выпуклые и близко расположены
3. Разная дисперсия близких кластеров









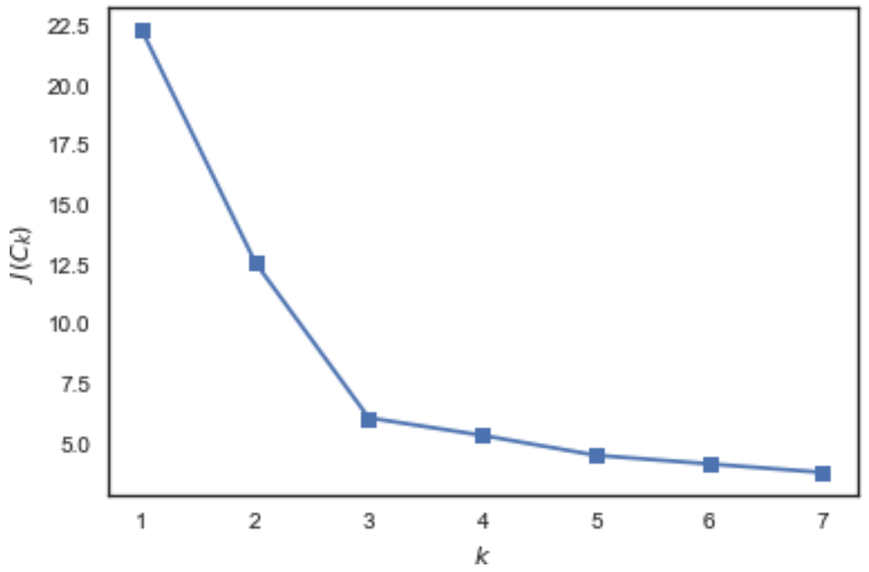
** sklearn*

КОЛИЧЕСТВО КЛАСТЕРОВ

Идея: перебирать от 1 до N кластеров, засечь, с какого момента *качество* перестанет быстро улучшаться

(m.e. k = argmin(ΔJ(Ck+1) / ΔJ(Ck)))*

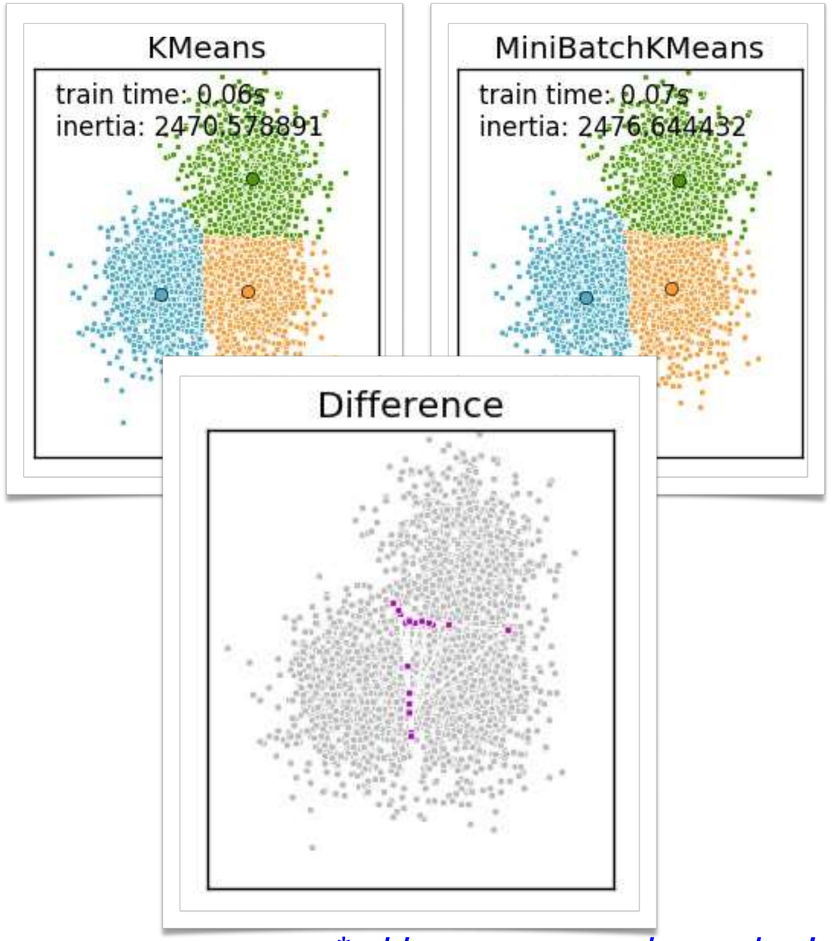
Качество - сумма квадратов расстояний от точек до центроидов кластеров



УСКОРЕНИЕ. MINI BATCH KMEANS

Способ: каждый шаг брать не все точки, а лишь подмножества (batch), обновляя центроиды как среднее признаков объектов кластера как текущего, так и всех предыдущих шагов

Результат: рост скорости с мизерным падением качества



** sklearn, comparison algo's*

РЕАЛИЗАЦИЯ В SKLEARN

sklearn.cluster.KMeans

* n_clusters=8
* init='k-means++'
* n_init=10
* max_iter=300
* tol=0.0001
* precompute_distances='auto'
* verbose=0
* random_state=None
* copy_x=True
* n_jobs=1
* algorithm='auto'

Основные параметры

* n_clusters - количество кластеров для разбиения
* init: 'k-means+', 'random', ndarray - начальное приближение
* max_iter - кол-во итераций
* n_jobs - кол-во процессоров (-1 - max)

Основные характеристики

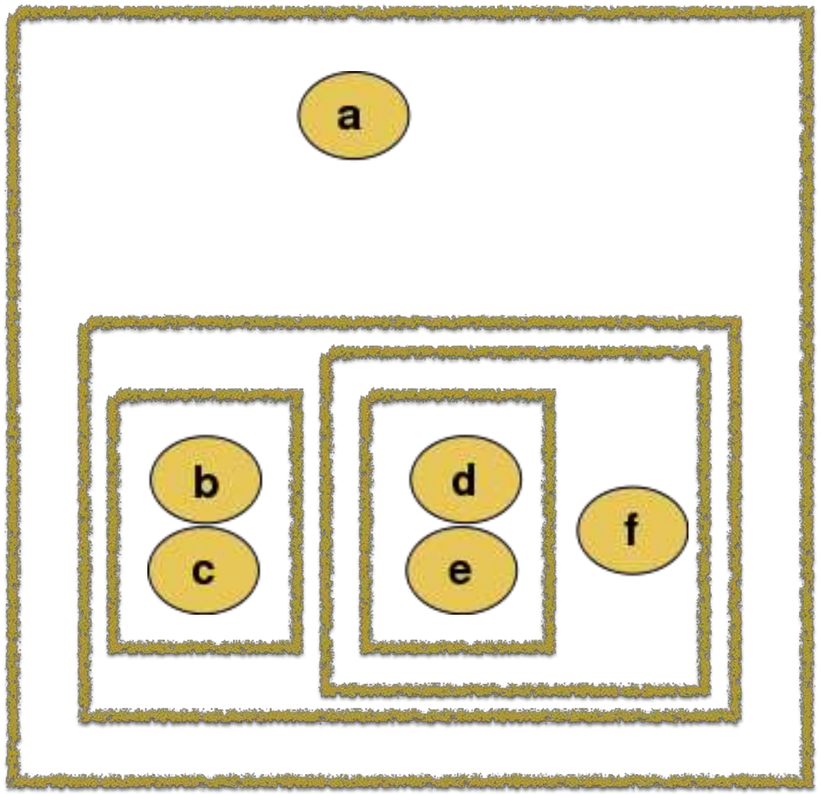
* 11параметров
* по умолчанию: 10 начальных умных запусков на 1 процессоре, кластеризация на 8 групп

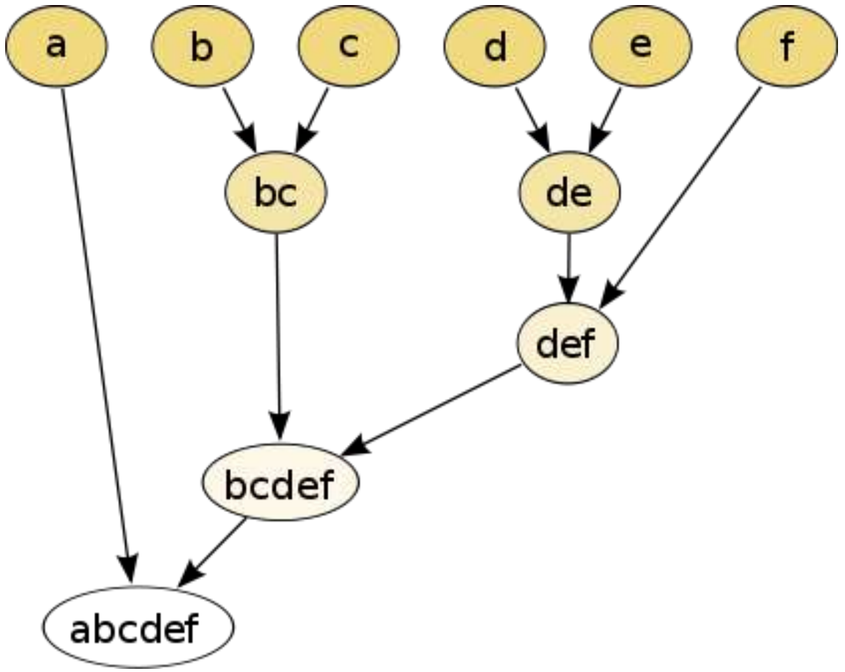
Основные методы

* fit, fit_predict, fit_transform, transform, predict

HIERARCHICAL CLUSTERING

ИДЕЯ



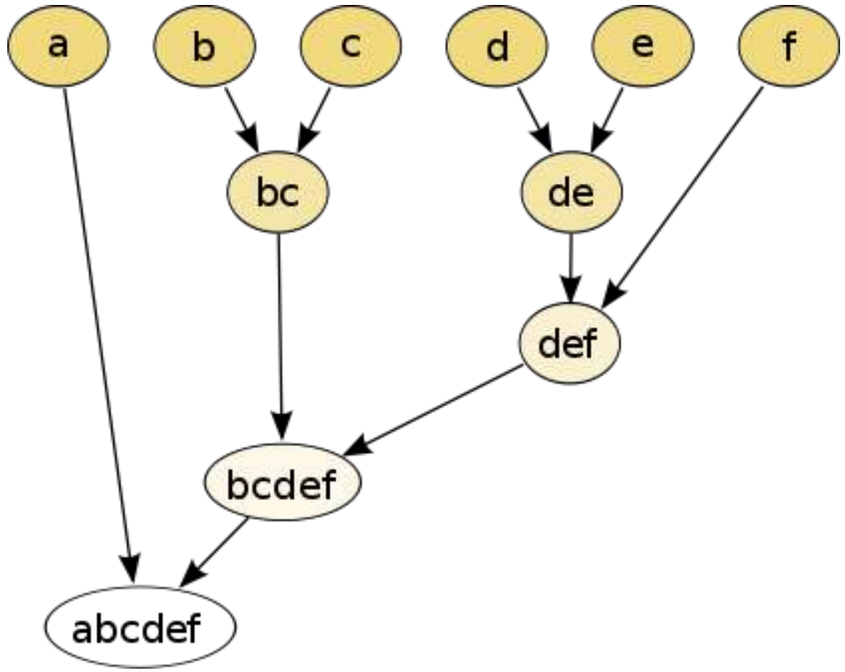


АЛГОРИТМ

Все объекты - отдельные кластеры

Повторять, пока > 1кластера:

* соединить 2 **ближайших** кластера

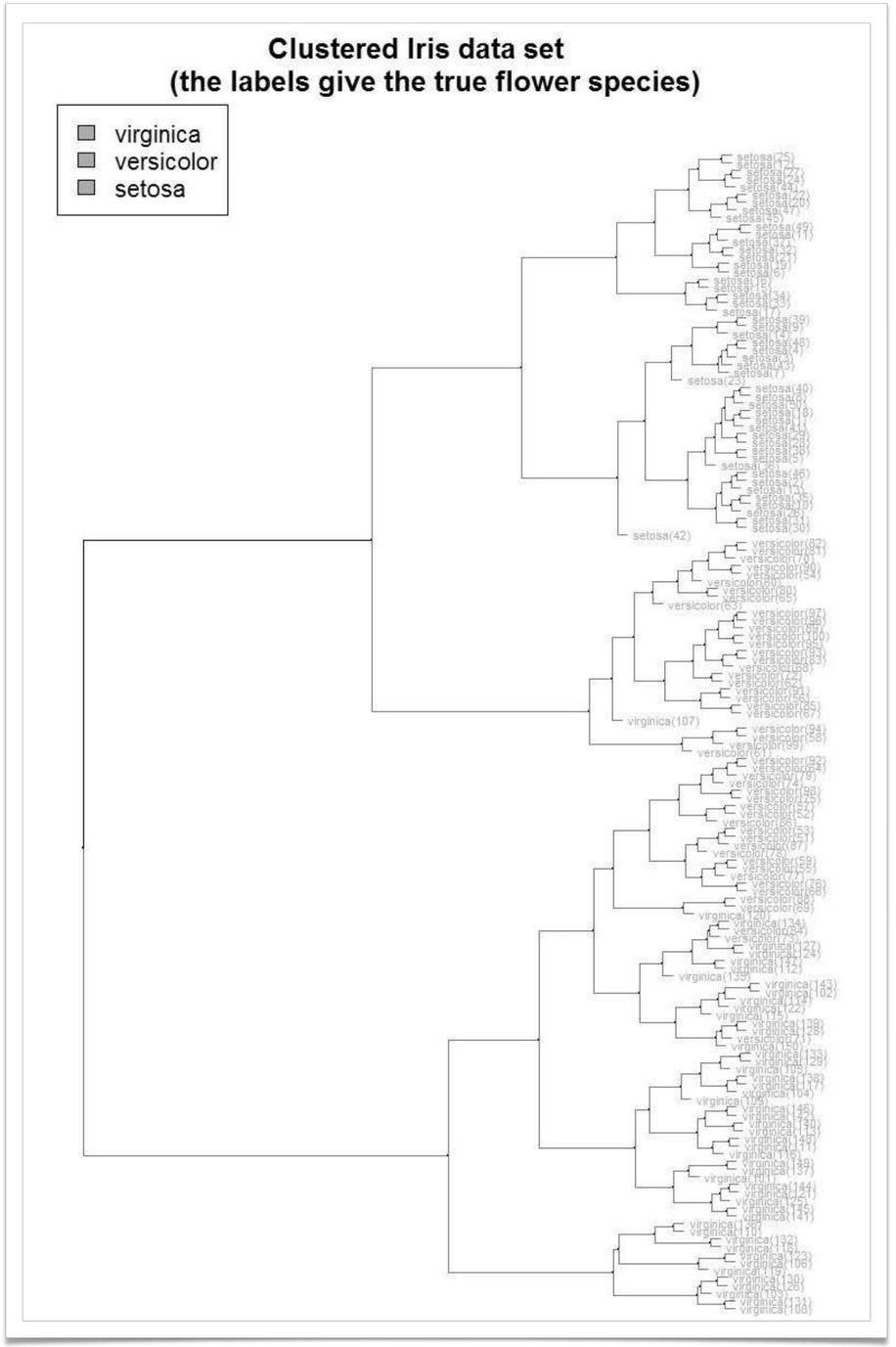


ПРИМЕР

Дендрограмма кластеризации цветков ириса.

Проведена иерархическая кластеризация, визуально отображаемая в виде дендрограммы.

На картинке цветом линии отмечены 3 кластера, а цветом надписи - настоящий вид цветка

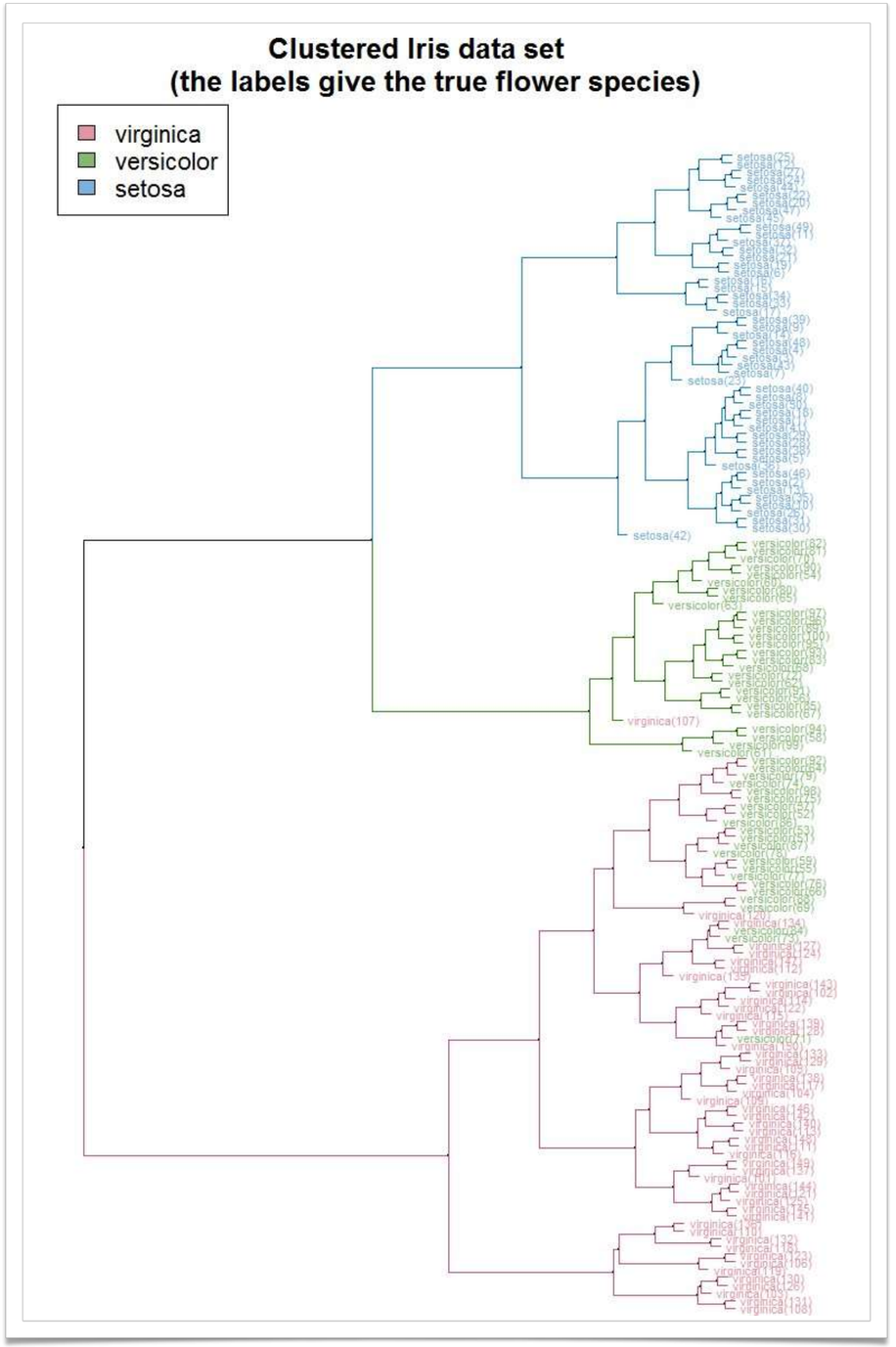


ПРИМЕР

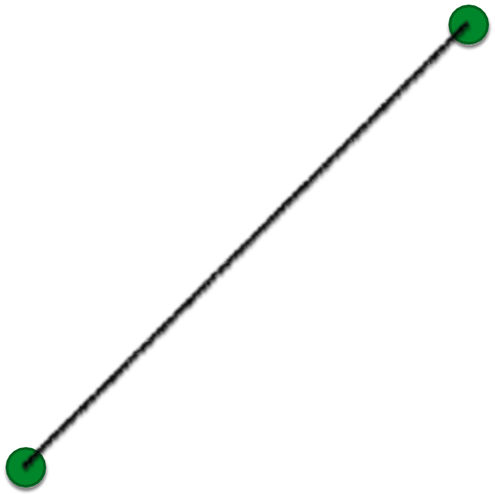
Дендрограмма кластеризации цветков ириса.

Проведена иерархическая кластеризация, визуально отображаемая в виде дендрограммы.

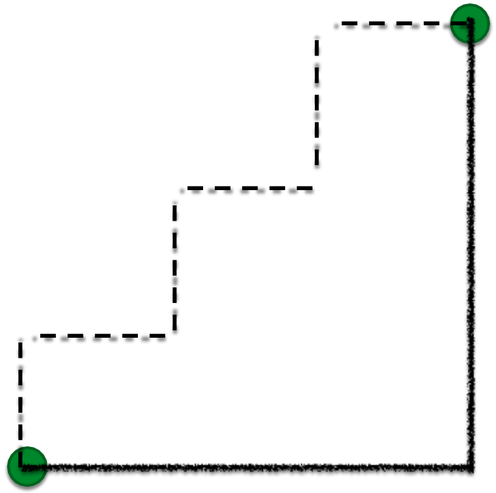
На картинке цветом линии отмечены 3 кластера, а цветом надписи - настоящий вид цветка



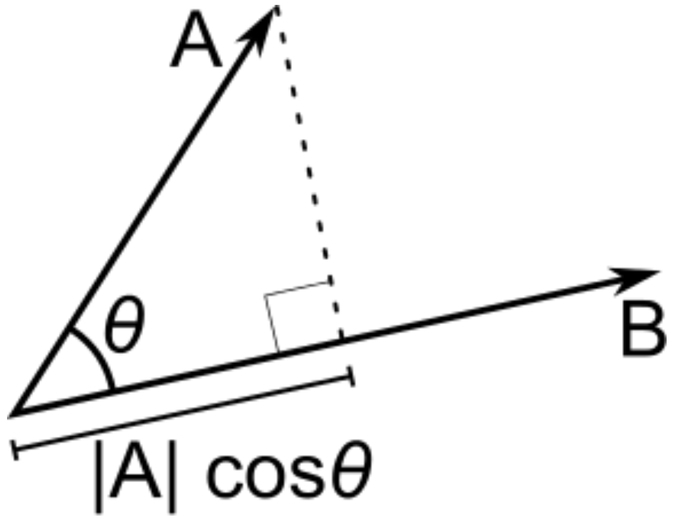
РАССТОЯНИЕ МЕЖДУ ОБЪЕКТАМИ



euclide (l2)



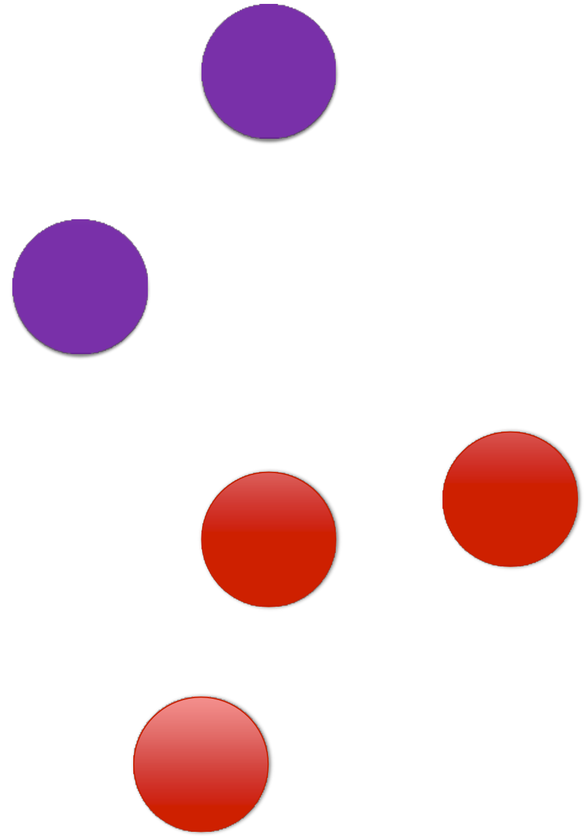
manhattan (l1)



cosine

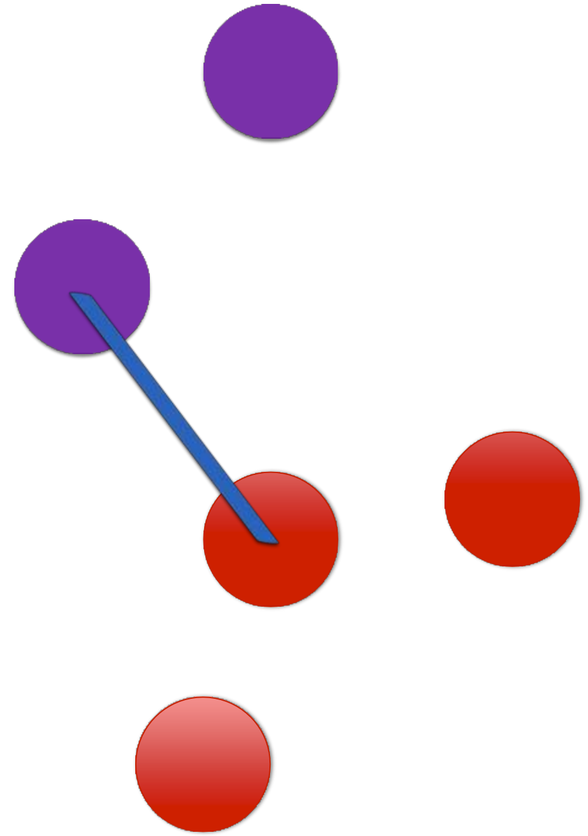
РАССТОЯНИЕ МЕЖДУ КЛАСТЕРАМИ

* Ближнего соседа
* Дальнего соседа
* Групповое среднее
* Расстояние между центрами
* Расстояние Уорда



РАССТОЯНИЕ МЕЖДУ КЛАСТЕРАМИ

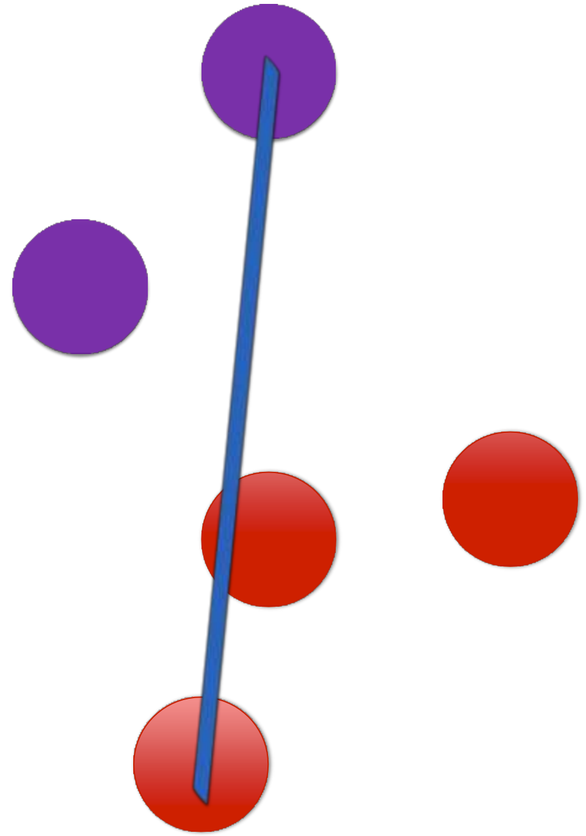
* **Ближнего соседа**
* Дальнего соседа
* Групповое среднее
* Расстояние между центрами
* Расстояние Уорда



$$R^{б}(W,S) = \min_{w,s} \rho(w,s)$$

РАССТОЯНИЕ МЕЖДУ КЛАСТЕРАМИ

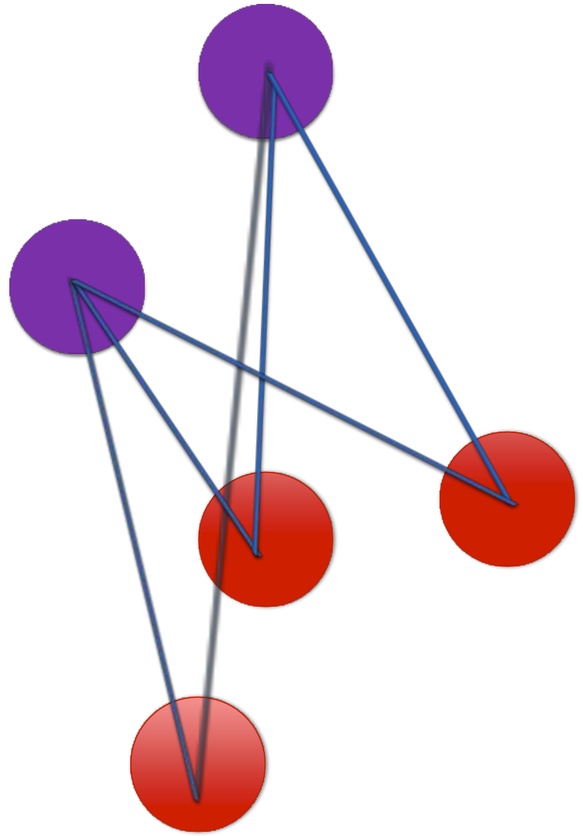
* Ближнего соседа
* **Дальнего соседа**
* Групповое среднее
* Расстояние между центрами
* Расстояние Уорда



$$R^{Д}(W,S) = \max_{w,s} \rho(w,s)$$

РАССТОЯНИЕ МЕЖДУ КЛАСТЕРАМИ

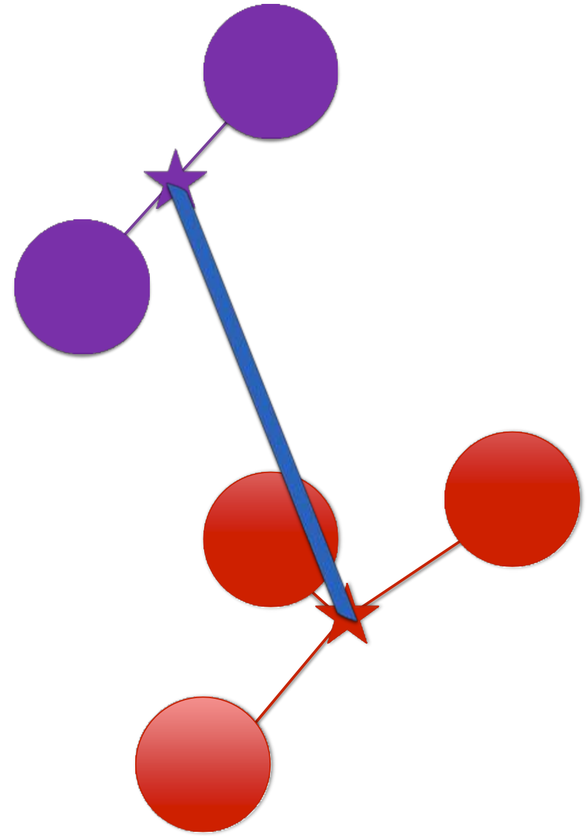
* Ближнего соседа
* Дальнего соседа
* **Групповое среднее**
* Расстояние между центрами
* Расстояние Уорда



$$R^{\Gamma}(W,S) = \frac{1}{|W| * |S|} \sum_{w} \sum_{s} \rho(w,s)$$

РАССТОЯНИЕ МЕЖДУ КЛАСТЕРАМИ

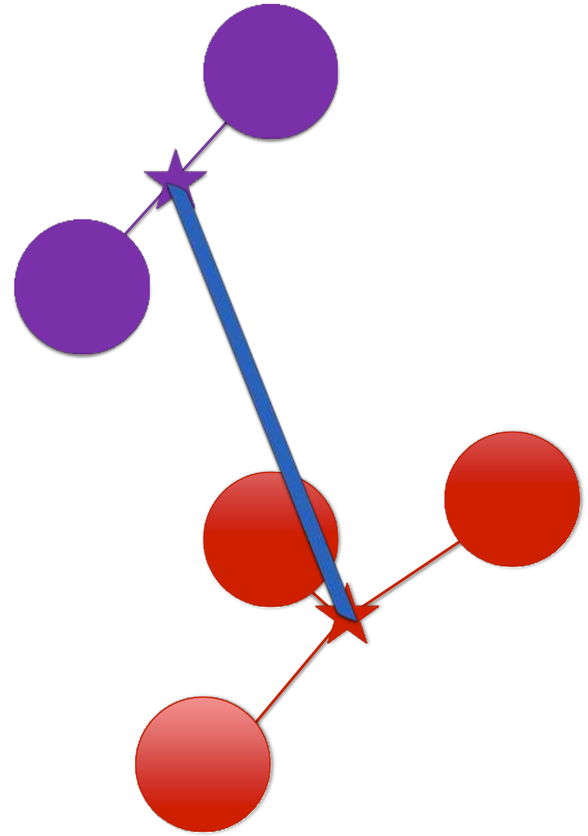
* Ближнего соседа
* Дальнего соседа
* Групповое среднее
* **Расстояние между центрами**
* Расстояние Уорда



$$R^{\text{Ц}}(W,S) = \rho^2\left(\sum_w \frac{w}{|W|}, \sum_s \frac{s}{|S|}\right)$$

РАССТОЯНИЕ МЕЖДУ КЛАСТЕРАМИ

* Ближнего соседа
* Дальнего соседа
* Групповое среднее
* Расстояние между центрами
* **Расстояние Уорда**



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

СВОЙСТА РАССТОЯНИЙ

Расстояние **монотонно, если** при каждом слиянии расстояние между кластерами растёт: $R_2 <= R_3 <= R_4$..

Расстояние между центрами - не монотонно. Остальные - да

Расстояние **растягивающее,** если при каждом слиянии увеличение расстояний между кластерами растёт:

$R_3 - R_2 <= R_4 - R_3 <= R_5 - R_4$..

Расстояние дальнего соседа и Уорда - растягивающие

РЕКОМЕНДУЕМОЕ РАССТОЯНИЕ

Расстояние Уорда (Ward)

Оно:

* монотонное
* растягивающее
* работает с центрами кластеров

РЕАЛИЗАЦИЯ В SKLEARN

AgglomerativeClustering

* n_clusters=2
* affinity='euclidean'
* memory=Memory(cachedir=None)
* connectivity=None
* compute_full_tree='auto'
* linkage='ward'
* pooling_func=<function mean>

Основные параметры

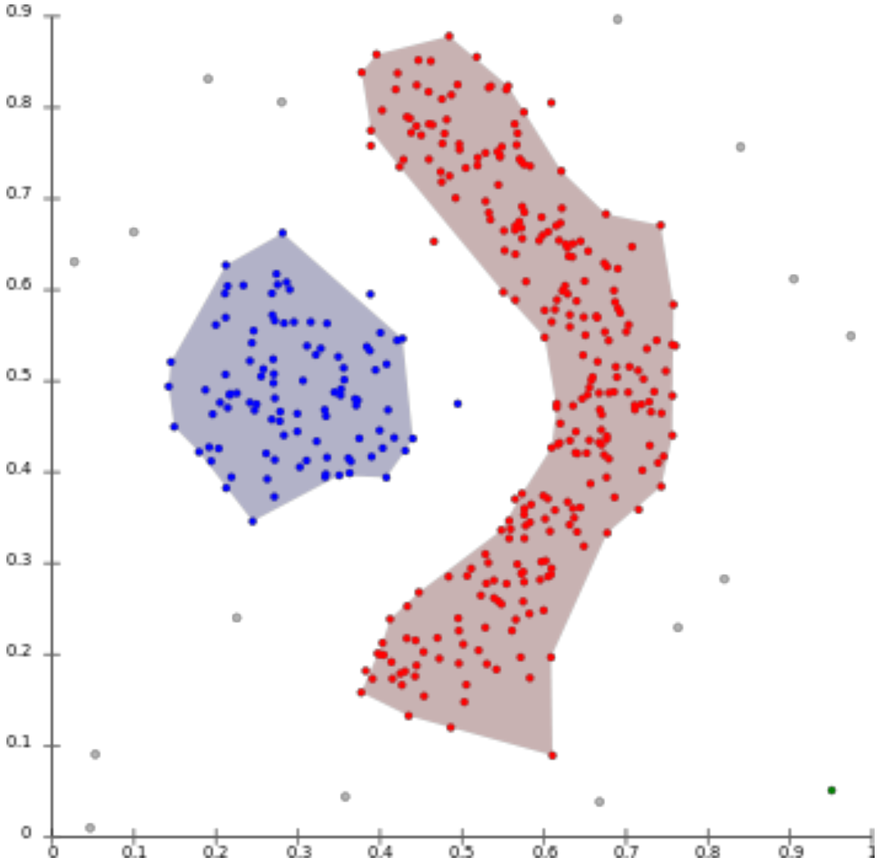
* n_clusters - количество кластеров для разбиения
* linkage: «ward», «complete», «average»
* affinity: "euclidean", "l1", "l2", "manhattan", "cosine", «precomputed» (для linkage= «ward» доступно только евклидово)
* connectivity - априорные знания о структуре данных, подробнее на следующем слайде

Основные методы

* fit, fit_predict

DBSCAN

ИДЕЯ *Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise*

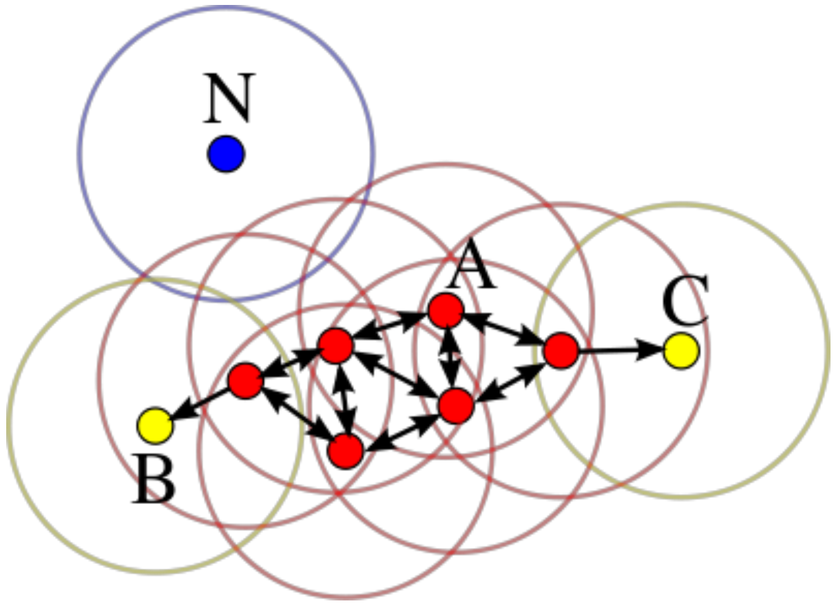


Рассматриваем объекты как ядра, вокруг которых собираются другие объекты

Если не собираются - это выброс

Если ядра связаны - то они и достижимые из них объекты образуют кластер

ИДЕЯ *Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise*



Все точки делятся на 3 типа:

* ядра
  (в eps-окрестности >= N точек)
* достижимые из ядра
  (в eps-окрестности < N точек, > 0 ядер)
* выбросы
  (остальные)

Ядра и достижимые из них точки образуют кластеры

Выбросы не принадлежат ни одному кластеру

РЕАЛИЗАЦИЯ В SKLEARN

DBSCAN

* eps=0.5
* min_samples=5
* metric='euclidean'
* algorithm='auto'
* leaf_size=30
* p=None
* n_jobs=1

Основные параметры

* eps - размер окрестности
* min_samples - кол-во точек в окрестности ядра
* n_jobs - кол-во процессоров для расчёта (-1 - max)

Основные методы

* fit, fit_predict

ДОСТОИНСТВА И НЕДОСТАТКИ

Достоинства:

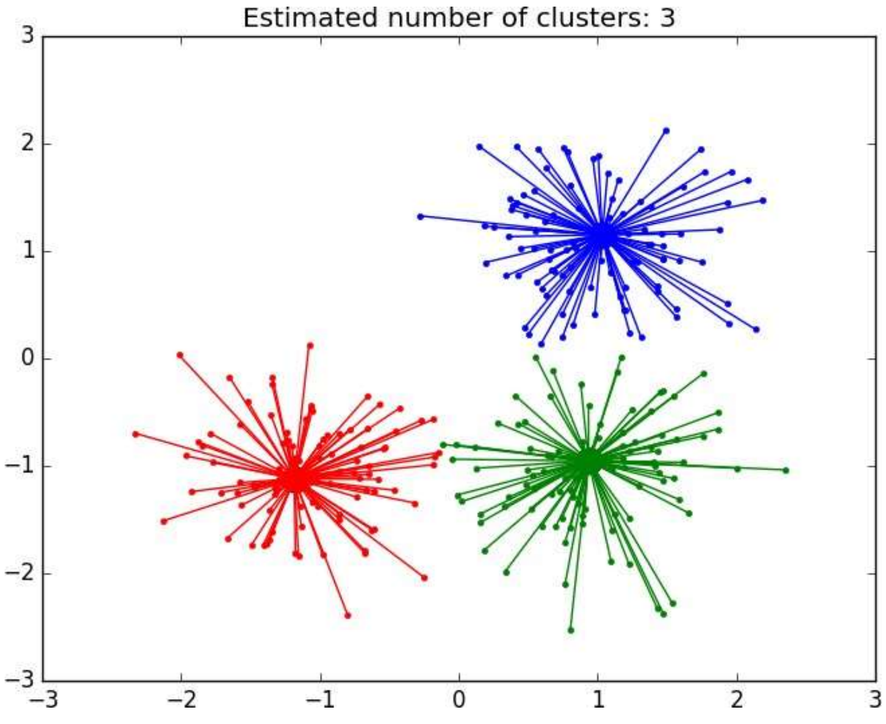
* не нужно указывать кол-во кластеров
* произвольная форма данных
* обнаруживает выбросы

Недостатки:

* сложность выбора комбинации eps+N
* плохо работает с кластерами разной плотности

AFFINITY PROPAGATION

ИДЕЯ



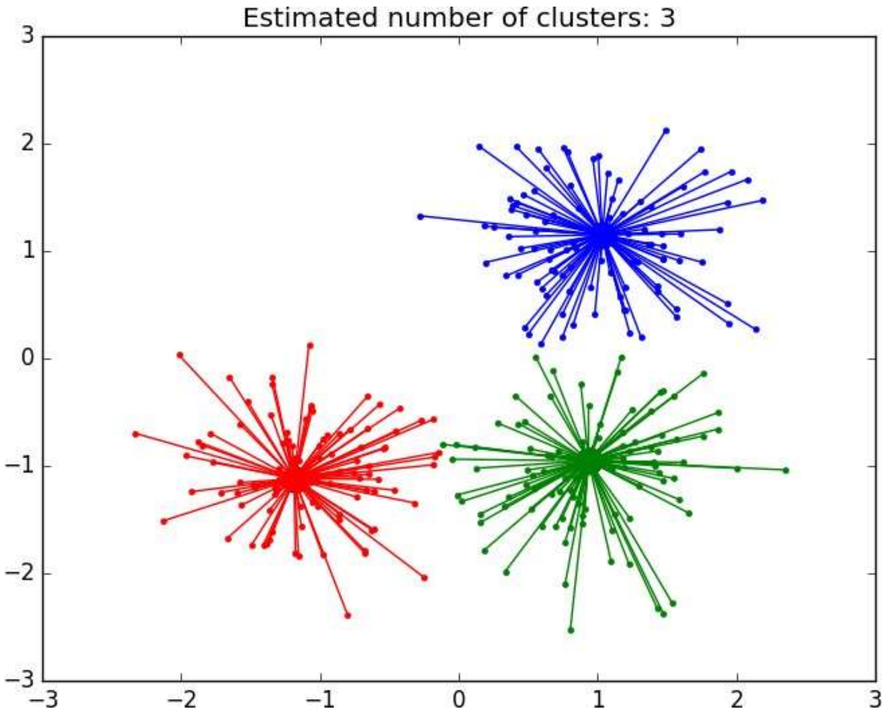
Объекты обмениваются двумя видами сообщений:

* насколько объект 1готов быть экземпляром объекта 2
* насколько объект 2 готов предоставить право быть объекту 1своим экземпляром

Итог:

К объектов - представителей кластеров

АЛГОРИТМ



Установить:

r(i,i) = 0, a(i,i) = 0

Повторять, пока экземпляры меняются:

$$r(i,k) \leftarrow s(i,k) - \max_{k' \neq k} \{a(i,k') + s(i,k')\}$$

$$a(i,k) \leftarrow \min\left(0, r(k,k) + \sum_{i' \notin \{i,k\}} \max(0, r(i',k))\right) \text{ for } i \neq k$$

$$a(k,k) \leftarrow \sum_{i' \neq k} \max(0, r(i',k)).$$

Итог:

экземпляры с r(i,i)+a(i,i) > 0

РЕАЛИЗАЦИЯ В SKLEARN

Affinity Propogation

* damping=0.5
* max_iter=200
* convergence_iter=15
* copy=True
* preference=None
* affinity='euclidean'
* verbose=False

Основные параметры

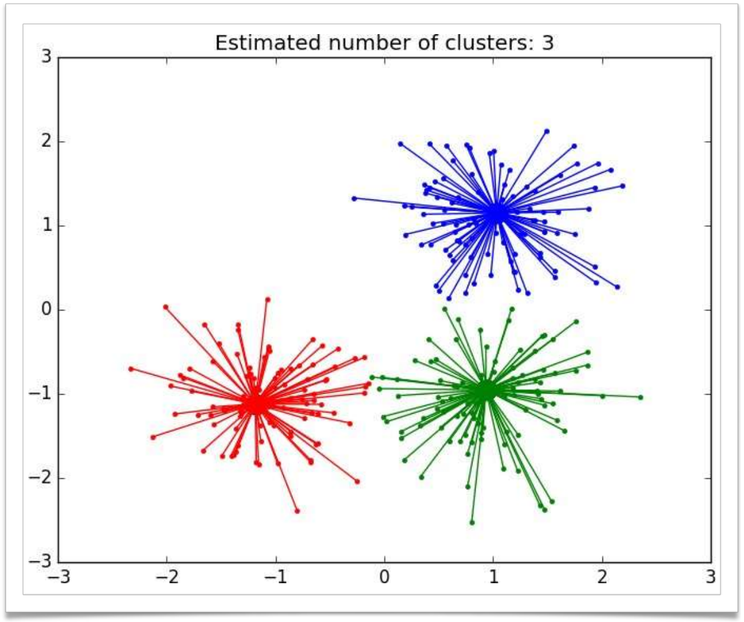
* preference - априорные знания о возможности быть экземпляром
* damping - скорость затухания [0.5-1]
* convergence_iter - условие останова, сколько должно пройти итераций без изменений

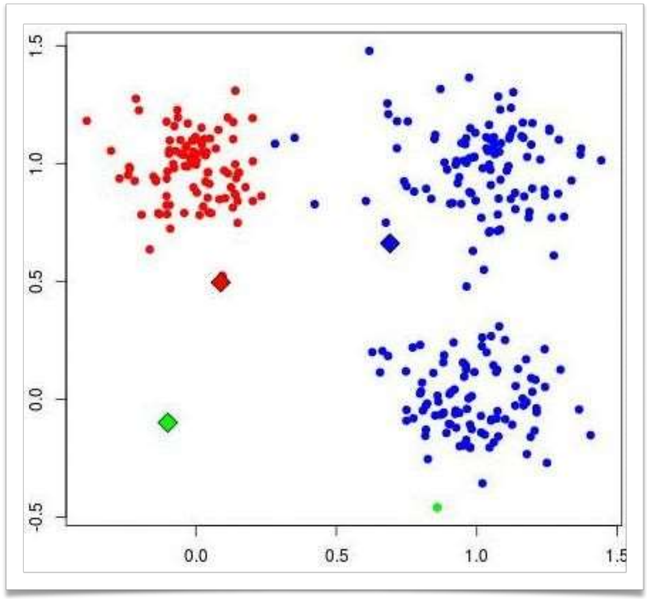
Основные методы

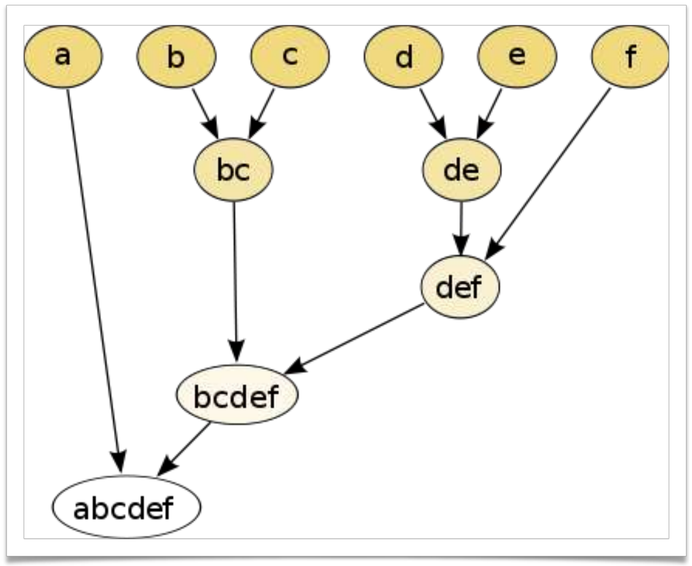
* fit, fit_predict

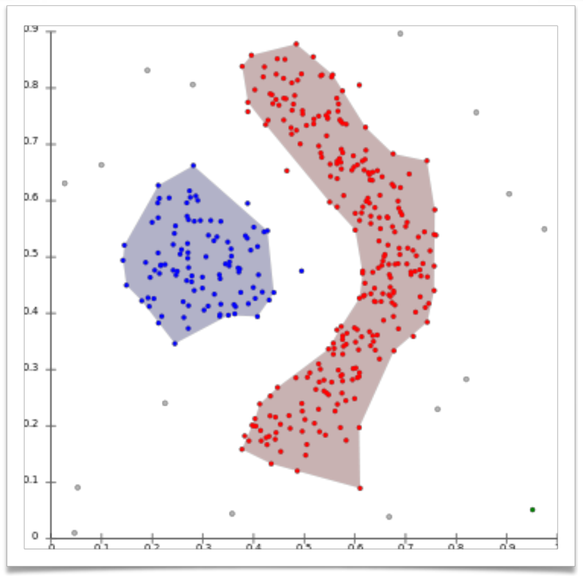
QUIZ

АЛГОРИТМЫ КЛАСТЕРИЗАЦИИ. QUIZ









K-Means

Agglomerative

DBSCAN

Affinity Propogation

КАКОЙ АЛГОРИТМ ВЫБРАТЬ?

Method name	Parameters	Scalability	Usecase	Geometry (metric used)
K-Means	number of clusters	Very large n_samples, medium n_clusters with MiniBatch code	General-purpose, even cluster size, flat geometry, not too many clusters	Distances between points
Affinity propagation	damping, sample preference	Not scalable with n_samples	Many clusters, uneven cluster size, non-flat geometry	Graph distance (e.g. nearest-neighbor graph)
Agglomerative clustering	number of clusters, linkage type, distance	Large n_samples and n_clusters	Many clusters, possibly connectivity constraints, non Euclidean distances	Any pairwise distance
DBSCAN	neighborhood size	Very large n_samples, medium n_clusters	Non-flat geometry, uneven cluster sizes	Distances between nearest points

** sklearn, сравнение кластеризаторов*

3. МЕТРИКИ КАЧЕСТВА КЛАСТЕРИЗАЦИИ

МЕТРИКИ КАЧЕСТВА

* *sklearn, metrics guide*
* *sklearn, metrics descriptions*

ARI: ADJUSTED RANDINDEX

Дано:

y_pred - вектор меток кластеризации

y_true - реальные кластеры

[0, 0, 0, 1, 1, 1]

[2, 2, 2, 7, 7, 7]

ARI ∈ [-1, 1];

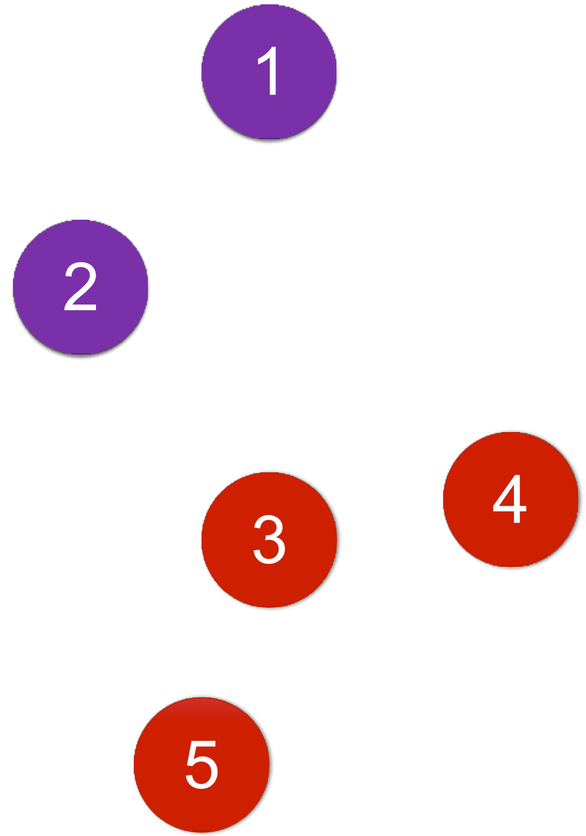
1- точное соответствие

0 - случайное разбиение кластеров

ARI(y_pred, y_true) = 1

Метрике не важны названия кластеров

СИЛУЭТ



нет знания правильных кластеров.

Оценим, насколько сильно **один объект** сидит внутри своего кластера и далеко от ближайшего соседнего:

$$s = \frac{b - a}{max(a, b)}$$

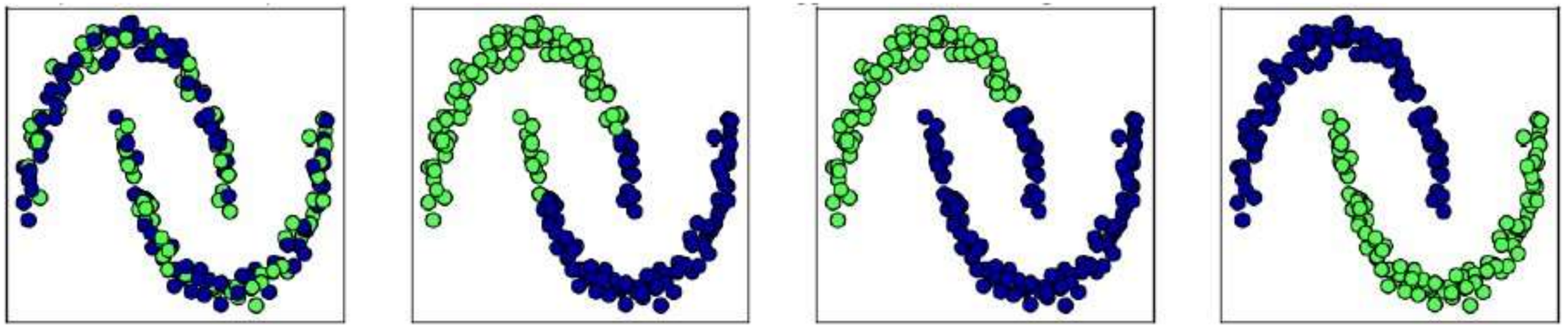
a - среднее расстояние до объектов внутри кластера

b - среднее расстояние до объектов ближайшего кластера

$$s = mean(s)$$

среднее значение по всем объектам - силуэт

СРАВНЕНИЕ МЕТРИК



ARI	0.00	0.50	0.61	1.00
Silhouette	0.00	0.49	0.46	0.38

ЧТО МЫ СЕГОДНЯ УЗНАЛИ

ЧТО МЫ СЕГОДНЯ УЗНАЛИ

1. Кластеризация позволяет **находить структуру** в незамеченных данных, что может послужить **дополнительными признаками** обучения или являться **самодостаточной целью**
2. В задаче кластеризации **нет правильного решения**. Метрики качества служат лишь слабым приближением для создания новых алгоритмов или нахождениям критерия останова
3. Разные алгоритмы кластеризации принципиально **работают по-разному**, для конкретного набора данных необходимо выбирать наиболее подходящий

ПОЛЕЗНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

ПОЛЕЗНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

1. Документация sklearn по кластеризации
2. Метрики sklearn для задач кластеризации
3. Open Data Science, habrahabr: Обучение без учителя: PCA и кластеризация
4. Книжка: Introduction to ML with Python

НЕТОЛОГИЯ
групп

Спасибо за внимание!

Артур Сапрыкин