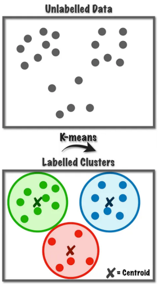
Продвинутая кластеризация

Виктор Китов

victorkitov.github.io



Курс поддержан фондом 'Интеллект'

Победитель конкурса VK среди курсов по IT

Содержание

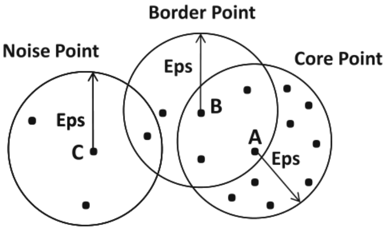
1. Кластеризация, основанная на плотности объектов
    - Алгоритм DBScan

DBScan

k, ε - параметры метода.

Разделим множество объектов на 3 категории:

- основные точки: имеющие$\geq$ k точек внутри ε-окрестности
- пограничные точки: не основные, но содержащие хотя бы одну основную внутри ε-окрестности
- шумовые точки: не основные и не пограничные



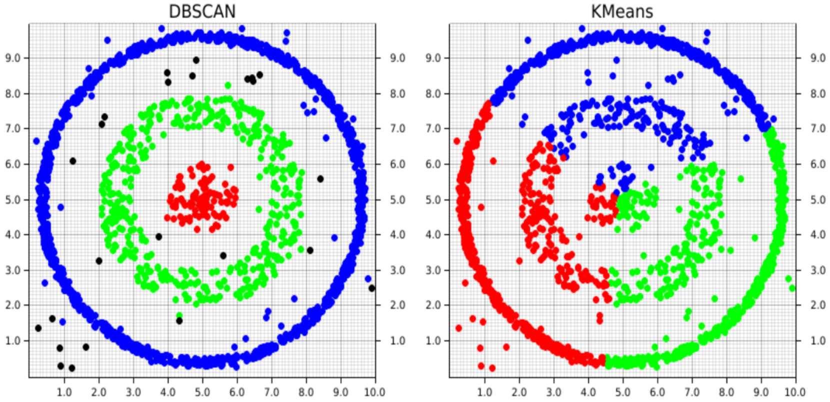
Алгоритм

```
ВХОД: выборка, параметры ε,k.

1) Определить основные/пограничные/шумовые точки,
   используя ε,k.
2) Создать граф: узлы-основные точки, связи - если
   точки на расстоянии ≤ε друг от друга.
3) Определить компоненты связности в графе =кластеры
   (методом распространения).
4) Соотнести основные точки кластерам=компонентам
   связности, а пограничные-по основным в их
   ε окрестности.

ВЫХОД: разбиение на кластеры
   (основных и пограничных точек)
```

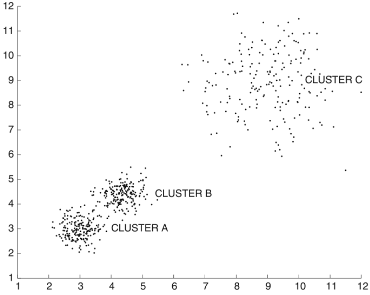
Пример работы DBScan[1]



[1] Источник иллюстрации.

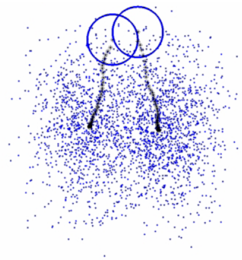
Комментарии

- Соединение основных точек - метод одиночной связи в агломеративной кластеризации с остановкой $\rho > \varepsilon$.
- Преимущества: автоматически определяется # кластеров, устойчиво к выбросам.
- Недостаток: не работает с кластерами разной плотности
  - высокое k-пропустим C; низкое k-A и B объединяться:



Кластеризация сдвигом среднего значения

Кластеризация сдвигом среднего значения (mean shift): точки итеративно сдвигаются в направлении локального увеличения плотности по правилу



Пример сходимости для top-hat ядра $K = \mathbb{I}\left[\frac{\rho(z,x)}{h} \leq 1\right]$

Кластер - итоговый локальный максимум плотности (отбрасываем максимумы с $p(x) < \tau$).

Комментарии

- Правило сдвига:

$$z_0 = x_n, \quad z = \frac{\sum_{k=1}^{N} K(\rho(z_i, x_k)/h) x_k}{\sum_{k=1}^{N} K(\rho(z, x_k)/h)}$$

- Ядро $K(\cdot)$ - некоторая $\downarrow$ ф-ция (ядро).
- Пример: Гауссово ядро

$$K(\rho(x, x')/h) = e^{-\rho(x,x')^2/h^2}$$

- Преимущества:
    - автоматически определяется #кластеров, кластеры могут быть произвольной формы
- Недостаток: вычислительная сложность, нет фильтрации выбросов

Кластеризация mean shift

ВХОД: выборка $x_1, ...x_N$, ядро $K(\cdot)$, ширина окна h.

ДЛЯ $n = 1, ...N$:

$z_n := x_n$

ПОВТОРЯТЬ до сходимости:

$$z_n := \frac{\sum_{k=1}^{N} K(\rho(z_n, x_k)/h)x_k}{\sum_{k=1}^{N} K(\rho(z, x_k)/h)}$$

ассоциировать x_n пику z_n

Объединить почти одинаковые расположения пиков $z_1, ...z_N$.

ВЕРНУТЬ кластеры точек, отнесенных одинаковым пикам плотности.

Содержание

Мотивация иерархической кластеризации

- #кластеров K заранее неизвестно.
- Кластеризация обычно не плоская, а иерархическая с разными уровнями детализации:
  - сайты в интернете
  - книги в библиотеке
  - животные в природе
- Подходы к иерархической кластеризации:
  - сверху вниз
    - более естественное для людей
  - снизу вверху (агломеративная кластеризация)

2. Иерархическая кластеризация
   - Иерархическая кластеризация сверху вниз
   - Иерархическая кластеризация снизу вверх

Алгоритм

```
ВХОД:
выборка объектов, алгоритм плоской кластеризации A,
правила выбора листа и остановки

инициализировать дерево корнем, содержащим все объекты

ПОВТОРЯТЬ
    выбрать лист L по правилу выбора листа
    используя A разбить L на кластеры L_1,...L_K
    добавить листы к T, соответствующие L_1,...L_K
ПОКА выполнено условие остановки
```

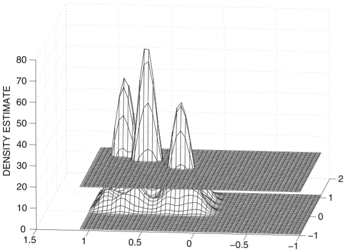
Комментарии

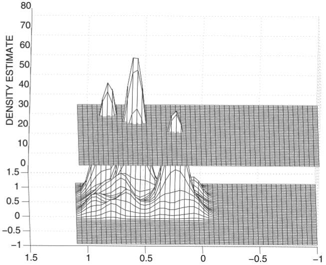
- Алгоритм выбора листа:
  - ближайший к корню
    => сбалансированное дерево по высоте
  - с максимальным числом элементов
    => сбалансированное дерево по #объектов в листах

2. Иерархическая кластеризация
   - Иерархическая кластеризация сверху вниз
   - Иерархическая кластеризация снизу вверх

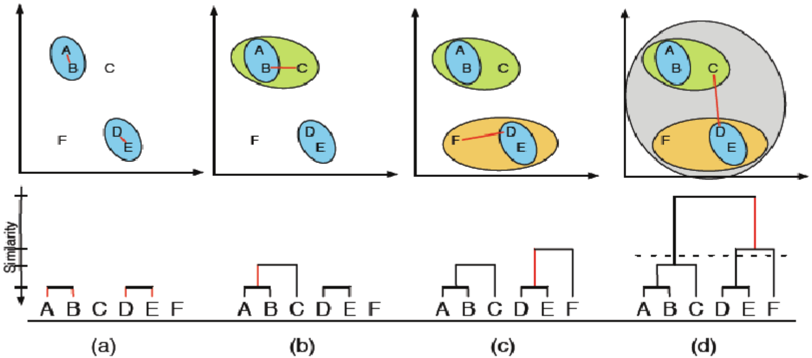
DENCLUE - иерахическое обобщение mean shift

1. Производим кластеризацию методом mean shift.
2. Объединяем кластеры с пиками, соединяемые цепочкой высоко вероятных значений плотности $p(x_{i(k)}) \geq h$.
    - варьируя h получаем иерархическую кластеризацию





Агломеративная кластеризация - идея



Агломеративная кластеризация - алгоритм

инициализировать матрицу попарных расстояний $M \in \mathbb{R}^{N \times N}$
между кластерами из отдельных объектов $\{x_1\}, ...\{x_N\}$

ПОВТОРЯТЬ:

1) выбрать ближайшие кластеры i и j
2) объединить $i, j \to \{i+j\}$
3) удалить строки/столбцы i, j из M
4) добавить строку/столбец для нового $\{i+j\}$

ПОКА не выполнено условие остановки

ВЕРНУТЬ иерархическую кластеризацию

- Условие остановки:
  - Остался 1 кластер либо осталось $\leq K$ кластеров
  - расстояние между ближайшими кластерами$\geq$порога.
- Частичное обучение: если часть классов известна - объединяем i и j, только если там представители одного класса.

Расстояние между кластерами

- Расстояние между объектами => расстояние между кластерами:
  - Метод одиночной связи (single linkage)
  $$\rho(A,B)=\min_{a\in A,b\in B}\rho(a,b)$$
  - Метод полной связи (complete linkage)
  $$\rho(A,B)=\max_{a\in A,b\in B}\rho(a,b)$$
  - Метод средней связи (group average link)
  $$\rho(A,B)=\text{mean}_{\,a\in A,b\in B}\,\rho(a,b)$$
  - Центроидный метод (pair-group method using the centroid average)
  $$\rho(A,B)=\rho(\mu_A,\mu_B)$$
  где $\mu_U=\frac{1}{|U|}\sum_{x\in U}x$ или $m_U=median_{x\in U}\{x\}$

Свойства межкластерных расстояний[3]

- Метод одиночной связи
  - извлекает кластеры произвольной формы
  - может случайно объединить разные кластеры цепочкой выбросов
  - $M_{(i\cup j)k} = \min\{M_{ik}, M_{jk}\}$
- Метод полной связи
  - создает компактные кластеры
  - $M_{(i\cup j)k} = \max\{M_{ik}, M_{jk}\}$
- Метод средней связи[2] и центроидный метод-компромисс между одиночной и полной связью.

---

[2]Как $M_{(i\cup j)k}$ будет пересчитываться для него?
[3]Пусть мы модифицируем $\rho(x, x')$ монотонным преобразованием F: $\rho'(x, x') = F(\rho(x, x'))$. При каких межкластерных расстояниях результат не изменится?

Свойства межкластерных расстояний

Метод средней связи предпочтительнее центроидного, поскольку

- центроидный метод может приводить к немонотонной последовательности расстояний дендрограммы.
    - методы одиночной, полной и средней связи дают монотонную последовательность
- представление кластера его центром не учитывает структуру кластера
- центроидный метод предпочитает более крупные кластера, для которых центроиды получаются в среднем ближе

Комбинация K-средних и агломеративной

- Сложность агломеративной кластеризации K объектов: $O(K^2 \ln K)$
    - через алгоритм кучи
- Для снижения вычислений:
    1. применим K средних к N объектам (сложность $O(N)$)
    2. применим агломеративную кластеризацию к найденным K кластерам

    - она позволяет выделять невыпуклые кластера

Содержание

Оценка качества кластеризации

Оценка качества кластеризации:

- если кластеризация-промежуточный этап: по качеству итоговой задачи
- если нет разметки:
    - используют идею, что кластеризация хороша, если:
        - объекты одного кластера похожи
        - объекты разных кластеров непохожи
- если есть разметка:
    - учитывать инвариантность к переименованию
    - имеет смысл для малого #размеченных объектов
        - иначе - классификация

3. Оценка качества кластеризации
   - Оценки не использующие разметку
   - Оценки, использующие разметку

Метрики качества[4]

- Пусть z_n - номер кластера для x_n.
- Среднее внутрикластерное расстояние:

$$F_0 = \frac{\sum_{i<j} \mathbb{I}\left[z_i = z_j\right] \rho\left(x_i, x_j\right)}{\sum_{i<j} \mathbb{I}[z_i = z_j]}$$

- Среднее межкластерное расстояние:

$$F_1 = \frac{\sum_{i<j} \mathbb{I}\left[z_i \neq z_j\right] \rho\left(x_i, x_j\right)}{\sum_{i<j} \mathbb{I}[z_i \neq z_j]}$$

- Композитные метрики:

$$F_0/F_1,\ F_1 - F_0$$

[4] Какие метрики нужно максимизировать, а какие - минимизировать?

Индекс Дэвиса-Болдуина

- $s_i = \frac{1}{|C_i|}\sum_{n \in C_i} \rho(\mu_i, x_n)$ - диаметр кластера i.
- $d_{ij} = \rho(\mu_i, \mu_j)$ - расстояние между центроидами i и j.
- Качество разделения кластеров i и j:

$$R_{ij} = \frac{s_i + s_j}{d_{ij}}$$

- Индекс Дэвиса-Болдуина:

$$DB = \frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K} \max_{i \neq k} R_{ik}$$

$\oplus$: Быстро вычисляется.

$\ominus$: Поощряет выпуклые кластера

$\ominus$: Из-за центроидов - завязано на Евклидово расстояние

Коэффициент силуэта[5]

Качество кластеризации каждого объекта x_i определим по формуле:

$$Silhouette_i = \frac{d_i - s_i}{\max\{d_i, s_i\}}$$

где среднее расстояние от x_i до объектов

- s_i - того же кластера
- d_i - ближайшего чужого кластера

Общее качество классификации (коэффициент силуэта):

$$Silhouette = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{d_i - s_i}{\max\{d_i, s_i\}}$$

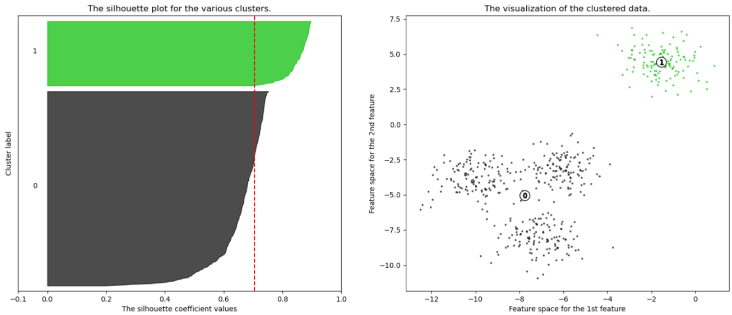
[5] Rousseeuw (1987). "Silhouettes: a Graphical Aid to the Interpretation and Validation of Cluster Analysis". Computational and Applied Mathematics 20: 53–65.

Обсуждение

- Преимущества
  - Интерпретируемость: *Silhouette* $\in [-1, 1]$,
    - 1: идеальная кластеризация
    - 0: случайная кластеризация
    - -1:полностью некорректная (инвертированная) кластеризация
- Недостатки
  - сложность $O(N^2D)$
    - можно рассчитывать по случайной подвыборке
  - поощряет выпуклые кластеры

Подбор #кластеров по силуэту[6]

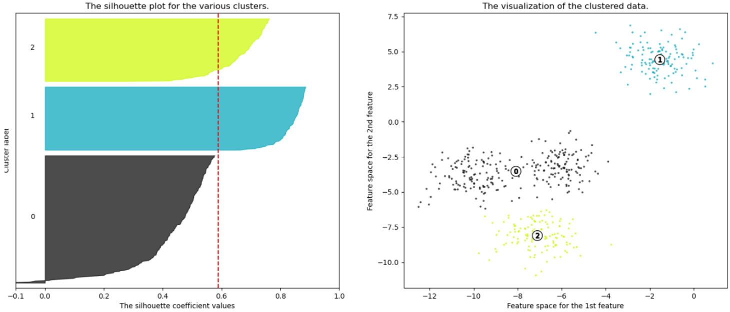
- Отсортируем объекты в каждом кластере по коэффициенту силуэта.
- Качество кластеризации - среднее значение коэффициента и отсутствие отрицательных значений.



[6] Эксперимент в sklearn.

Подбор #кластеров по силуэту[6]

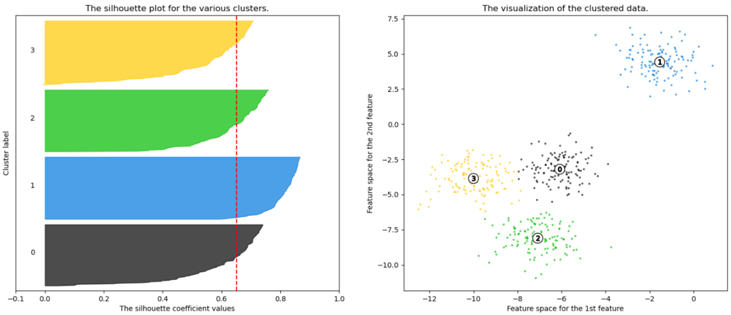
- Отсортируем объекты в каждом кластере по коэффициенту силуэта.
- Качество кластеризации - среднее значение коэффициента и отсутствие отрицательных значений.



[6] Эксперимент в sklearn.

Подбор #кластеров по силуэту[6]

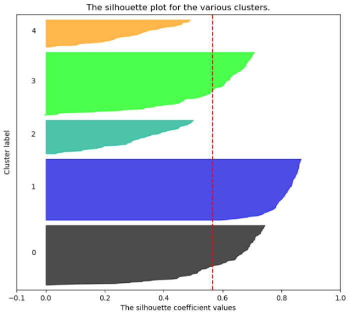
- Отсортируем объекты в каждом кластере по коэффициенту силуэта.
- Качество кластеризации - среднее значение коэффициента и отсутствие отрицательных значений.



[6] Эксперимент в sklearn.

Подбор #кластеров по силуэту[6]

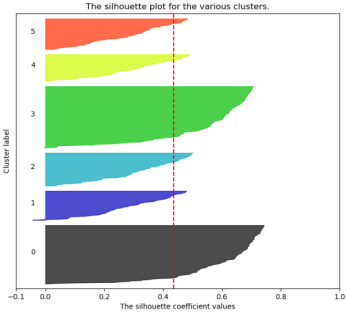
- Отсортируем объекты в каждом кластере по коэффициенту силуэта.
- Качество кластеризации - среднее значение коэффициента и отсутствие отрицательных значений.

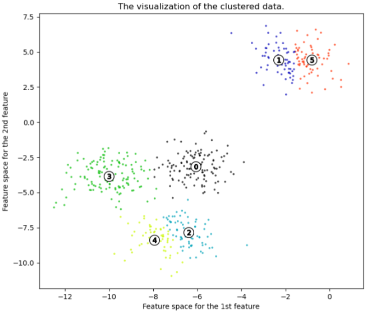


[6] Эксперимент в sklearn.

Подбор #кластеров по силуэту[6]

- Отсортируем объекты в каждом кластере по коэффициенту силуэта.
- Качество кластеризации - среднее значение коэффициента и отсутствие отрицательных значений.





[6] Эксперимент в sklearn.

Индекс Калинского[7]

- Внутрикластерная (within cluster) ковариационная матрица

$$W = \frac{1}{N-K}\sum_{k=1}^{K}\sum_{x\in C_k}(x-\mu_k)(x-\mu_k)^T$$

- Межкластерная (between cluster) ковариационная матрица

$$B = \frac{1}{K-1}\sum_{k=1}^{K}N_k(\mu_k-\mu)(\mu_k-\mu)^T$$

- Индекс Калинского:

$$I = \frac{\mathrm{tr}\, B}{\mathrm{tr}\, W} = \frac{N-K}{K-1}\frac{\mathrm{tr}\left\{\sum_{k=1}^{K}N_k(\mu_k-\mu)(\mu_k-\mu)^T\right\}}{\mathrm{tr}\left\{\sum_{k=1}^{K}\sum_{x\in C_k}(x-\mu_k)(x-\mu_k)^T\right\}}$$

[7] https://www.researchgate.net/publication/233096619_A_Dendrite_Method_for_

Индекс Калинского

- Используем свойства

$$\sum_i \operatorname{tr}\{\alpha_i A_i\} = \sum_i \alpha_i \operatorname{tr} A_i$$

$$\operatorname{tr}\{AB\} = \operatorname{tr}\{BA\},\ \operatorname{tr} a = a\ \forall a \in \mathbb{R}$$

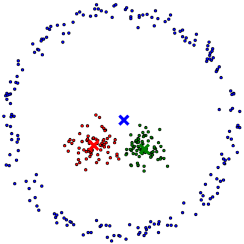
$$I = \frac{\operatorname{tr} B}{\operatorname{tr} W} = \frac{N-K}{K-1} \frac{\operatorname{tr}\left\{\sum_{k=1}^{K} N_k (\mu_k - \mu)(\mu_k - \mu)^T\right\}}{\operatorname{tr}\left\{\sum_{k=1}^{K} \sum_{x \in C_k} (x - \mu_k)(x - \mu_k)^T\right\}}$$

$$= \frac{N-K}{K-1} \frac{\sum_{k=1}^{K} N_k \operatorname{tr}\left\{(\mu_k - \mu)^T (\mu_k - \mu)\right\}}{\sum_{k=1}^{K} \sum_{x \in C_k} \operatorname{tr}\left\{(x - \mu_k)(x - \mu_k)^T\right\}} = \frac{N-K}{K-1} \frac{\sum_{k=1}^{K} N_k \|\mu_k - \mu\|^2}{\sum_{k=1}^{K} \sum_{x \in C_k} \|x - \mu_k\|^2}$$

- Измеряем отношение межкластерного к внутрикластерному разбросу.

Ограничение для невыпуклого кластера

- Сложность $O(ND)$, но поощряет выпуклые кластеры.



- Из-за невыпуклости синего кластера коэффициент силуэта и индекс Калинского будут занижать хорошее качество кластеризации, т.к.
  - s_i велико, а d_i - мало
  - $\sum_{k=1}^{K} N_k \left\|\mu_k - \mu\right\|^2$ мало, а $\sum_{k=1}^{K} \sum_{x \in C_k} \left\|x - \mu_k\right\|^2$ велико

3. Оценка качества кластеризации
    - Оценки не использующие разметку
    - Оценки, использующие разметку

Перекрестная таблица

- Пример перекрестной таблицы (contingency matrix):

	кластер 1	кластер 2	кластер 3
класс 1	5	2	0
класс 2	0	3	4

$\oplus$: Определяем разброс каждого класса по кластерам и разброс кластера по классам.

$\ominus$: Сложно анализировать для большого числа кластеров/классов. Не числовая метрика качества.

Перекрестная таблица

- Пример перекрестной таблицы (contingency matrix):

	кластер 1	кластер 2	кластер 3
класс 1	5	2	0
класс 2	0	3	4

$\oplus$: Определяем разброс каждого класса по кластерам и разброс кластера по классам.

$\ominus$: Сложно анализировать для большого числа кластеров/классов. Не числовая метрика качества.

- Числовая мера качества - Unsupervised Clustering Accuracy:
    - П - все возможные перенумеровки результатов кластеризации

$$ACC\left(\boldsymbol{c},\boldsymbol{z}\right)=\max_{\pi\in\Pi}\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathbb{I}\left[c_n=\pi\left(z_n\right)\right]$$

Матрица сочетаемости

- Матрица сочетаемости $\in \mathbb{R}^{2x2}$ вычисляет счётчики #пар (x_i, x_j).

	$z_i = z_j$	$z_i \neq z_j$
$y_i = y_j$	n_{11}	n_{12}
$y_i \neq y_j$	n_{21}	n_{22}

- Как понять по матрице качество кластеризации?

Матрица сочетаемости

- Матрица сочетаемости $\in \mathbb{R}^{2x2}$ вычисляет счётчики #пар (x_i, x_j).

	$z_i = z_j$	$z_i \neq z_j$
$y_i = y_j$	n_{11}	n_{12}
$y_i \neq y_j$	n_{21}	n_{22}

- Как понять по матрице качество кластеризации?

$\oplus$: Определяем сочетаемость разбиения по классам-кластерам.

$\ominus$: Не даёт единой метрики качества.

Rand index

- Rand index - единая метрика по матрице сочетаемости.
- Пусть $y_1, ...y_N$ - истинная разметка. Обозначим[8]

$$n_{11} = |\{(x_i, x_j) : z_i = z_j \ \& \ y_i = y_j\}|$$

$$n_{22} = |\{(x_i, x_j) : z_i \neq z_j \ \& \ y_i \neq y_j\}|$$

$$\text{RandInd} = RI = \frac{n_{11} + n_{22}}{C_2^N} = \frac{n_{11} + n_{22}}{n_{11} + n_{12} + n_{21} + n_{22}} \in [0, 1]$$

- В чем недостаток?

[8] Это loss или score?

[9] J-близость Жаккарда между множеством пар, у которых совпали классы и множеством пар, у которых совпали кластеры.

Rand index

- Rand index - единая метрика по матрице сочетаемости.
- Пусть $y_1, ...y_N$ - истинная разметка. Обозначим[8]

$$n_{11} = \left|\{(x_i, x_j) : z_i = z_j \;\&\; y_i = y_j\}\right|$$

$$n_{22} = \left|\{(x_i, x_j) : z_i \neq z_j \;\&\; y_i \neq y_j\}\right|$$

$$\text{RandInd} = RI = \frac{n_{11} + n_{22}}{C_2^N} = \frac{n_{11} + n_{22}}{n_{11} + n_{12} + n_{21} + n_{22}} \in [0, 1]$$

- В чем недостаток?$\uparrow RI$ с $\uparrow$#кластеров. Лучше[9]

$$\text{AdjustedRandInd} = \frac{RI - \mathbb{E}\{RI\}}{\max(RI) - \mathbb{E}\{RI\}} \text{ либо } \mathrm{J} = \frac{n_{11}}{n_{11} + n_{12} + n_{21}}$$

[8] Это loss или score?

[9] J-близость Жаккарда между множеством пар, у которых совпали классы и множеством пар, у которых совпали кластеры.

Гомогенность[10]

- Обозначим N=#объектов, n_k=#объектов в кластере k, m_c=#объектов в классе c, n_{ck}=#объектов класса c в кластере k.

$$H_{class} = -\sum_{c=1}^{C} \frac{m_c}{N} \log \frac{m_c}{N}$$

$$H_{clust} = -\sum_{k=1}^{K} \frac{n_k}{N} \log \frac{n_k}{N}$$

$$H_{class|clust} = -\sum_{k=1}^{K} \frac{n_k}{N} \sum_{c=1}^{C} \frac{n_{ck}}{n_k} \log \frac{n_{ck}}{n_k}$$

$H_{class|clust} = 0$ при полном объяснении, $H_{class|clust} = 1$ нет связи

[10] https://aclanthology.org/D07-1043.pdf

Гомогенность

$$\text{Homogeneity} = 1 - \frac{H\left(class|clust\right)}{H\left(class\right)}$$

- Гомогенность показывает долю информации о классах, объясненной кластеризацией.
  - 1: в кластерах представители только 1 класса
  - 0: в кластерах распределение классов=априорному распределению
- Какой недостаток?

Гомогенность

$$\text{Homogeneity} = 1 - \frac{H\left(class|clust\right)}{H\left(class\right)}$$

- Гомогенность показывает долю информации о классах, объясненной кластеризацией.
  - 1: в кластерах представители только 1 класса
  - 0: в кластерах распределение классов=априорному распределению
- Какой недостаток? Гомогенность поощряет $\uparrow$#кластеров
  - =1, когда каждый объект - в своём кластере

Полнота[11]

- Нужна доп. мера полноты (насколько объекты одного класса оказываются в одном кластере)

$$\text{Completeness} = 1 - \frac{H\left(clust|class\right)}{H\left(clust\right)}$$

- Полнота =1, если класс полностью определяет кластер (все объекты класса-в одном кластере)
- Какой недостаток?

[11] https://aclanthology.org/D07-1043.pdf

Полнота[11]

- Нужна доп. мера полноты (насколько объекты одного класса оказываются в одном кластере)

$$\text{Completeness} = 1 - \frac{H(clust|class)}{H(clust)}$$

- Полнота =1, если класс полностью определяет кластер (все объекты класса-в одном кластере)
- Какой недостаток? Полнота поощряет $\downarrow$#кластеров
    - =1, когда все объекты в одном кластере

[11] https://aclanthology.org/D07-1043.pdf

V-мера[12]

- V-мера - среднее гармоническое от гомогенности и полноты.

$$V=\frac{1}{\frac{1}{2}\text{Homogeniety}+\frac{1}{2}\text{Completeness}}$$

- Взвешенный учёт гомогенности и полноты:

$$V_\beta=\frac{1}{\left(\frac{\beta}{1+\beta}\right)\text{Homogeniety}+\frac{1}{1+\beta}\text{Completeness}}$$

- $V=V_\beta$ при $\beta=1$.

[12] https://aclanthology.org/D07-1043.pdf

Нормализованная взаимная информация

- Взаимная информация - степень связи сл. вел. X, Y:

$$MI\left(X,Y\right)=KL\left(P(X,Y)||P(X)P(Y)\right)$$
$$=\sum_{x\in dom(X)}\sum_{y\in dom(Y)}P(x,y)\log\frac{P\left(x,y\right)}{P(x)P(y)}$$

$$MI\left(X,Y\right)=H(Y)-H(Y|X)=H(X)-H(X|Y)$$

- Нормализованная взаимная информация ($NMI\in[0,1]$)[13] - др. вариант агрегации полноты и гомогенности:

$$NMI\left(clust,class\right)=\frac{MI\left(clust,class\right)}{\max\left\{H_{clust},H_{class}\right\}}$$
$$=\frac{H\left(clust\right)-H\left(clust|class\right)}{\max\left\{H_{clust},H_{class}\right\}}=\frac{H\left(class\right)-H\left(class|clust\right)}{\max\left\{H_{clust},H_{class}\right\}}$$

[13] Это loss или score?

Заключение

- Плоская кластеризация:
    - K представителей
        - μ_k - вычисляемый (среднее: K-means [доступно ядерное обобщение], медиана: K medians)
        - μ_k - существующий объект
    - Основанная на плотности
        - DB-scan, mean-shift, DENCLUE
- Иерархическая кластеризация
    - сверху-вниз: рекурсивная плоская кластеризация
    - снизу-вверх (агломеративная)
- Оценка качества кластеризации:
    - размеры кластеров vs. межкластерные расстояния
    - сопостравление кластеров с истинными метками
        - важна инвариантность к перенумеровке кластеров