Методы кластеризации

К. В. Воронцов
vokov@forecsys.ru

Этот курс доступен на странице вики-ресурса
http://www.MachineLearning.ru/wiki
«Машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

май 2013

Постановка задачи кластеризации

Дано:

X — пространство объектов;

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

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

Найти:

Y — множество кластеров и

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

— каждый кластер состоит из близких объектов;

— объекты разных кластеров существенно различны.

Кластеризация — это *обучение без учителя*.

Некорректность задачи кластеризации

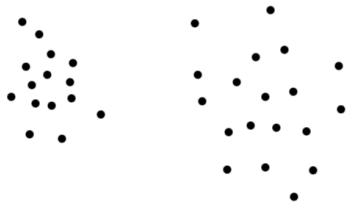
Решение задачи кластеризации принципиально неоднозначно:

- 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 ρ, которую эксперт задаёт субъективно.

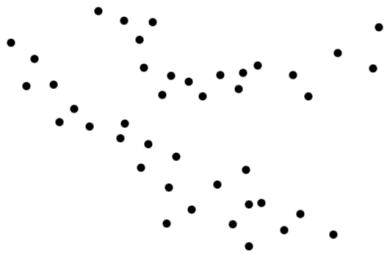
Цели кластеризации

- **Упростить дальнейшую обработку данных**,
  разбить множество X^ℓ 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).

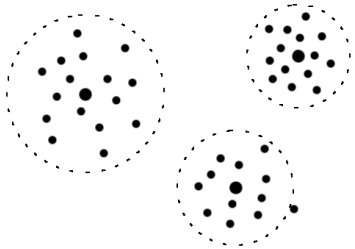
Типы кластерных структур



внутрикластерные расстояния, как правило, меньше межкластерных

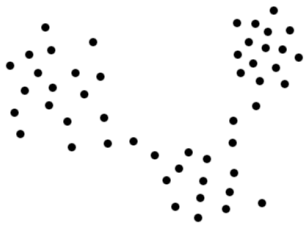


ленточные кластеры

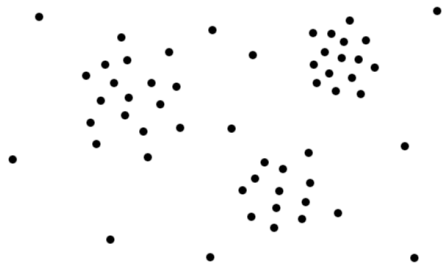


кластеры с центром

Типы кластерных структур



кластеры могут соединяться перемычками



кластеры могут накладываться на разрежен-ный фон из редко расположенных объектов

кластеры могут перекрываться

Типы кластерных структур

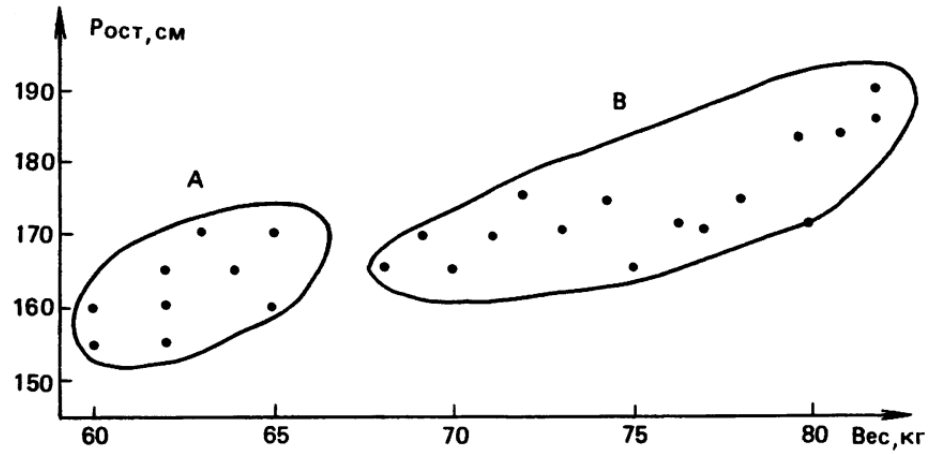
кластеры могут образовываться не по сходству, а по иным типам регулярностей

кластеры могут вообще отсутствовать

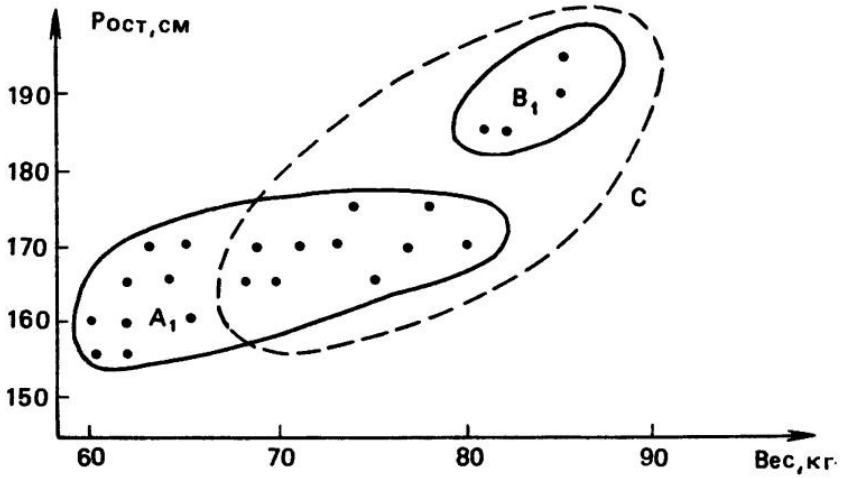
- Каждый метод кластеризации имеет свои ограничения и выделяет кластеры лишь некоторых типов.
- Понятие «тип кластерной структуры» зависит от метода и также не имеет формального определения.

Проблема чувствительности к выбору метрики

Результат зависит от нормировки признаков:



A — студентки,
B — студенты



после перенормировки
(сжали ось «вес» вдвое)

Содержание: методы кластеризации

Алгоритм выделения связных компонент

Выборка представляется в виде графа:
— вершины графа — объекты x_i;
— рёбра — пары объектов с расстоянием $\rho_{ij} = \rho(x_i, x_j) \leqslant R$.

1: **повторять**
2: удалить все рёбра (i, j), для которых $\rho_{ij} > R$;
3: $K :=$ число связных 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 ρ_{ij}
и соединить их ребром;
2: **пока** в выборке остаются изолированные точки
3: найти изолированную точку,
ближайшую к некоторой неизолированной;
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, $U \neq \varnothing$:
3: взять случайную точку $x_0 \in U$;
4: **повторять**
5: образовать кластер с центром в x_0 и радиусом R:
$K_0 := \{x_i \in U \mid \rho(x_i, x_0) \leqslant R\}$;
6: переместить центр x_0 в центр масс кластера:
$x_0 := \frac{1}{|K_0|} \sum\limits_{x_i \in K_0} x_i$;
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

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

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:

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

- Среднее межкластерное расстояние:

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

- Отношение пары функционалов:

$$F_0 / F_1 \to \min .$$

Функционалы качества кластеризации

Случай 2: X — линейное векторное пространство

- Сумма средних внутрикластерных расстояний:

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

$K_y = \{x_i \in X^\ell \mid y_i = y\}$ — кластер y,
μ_y — центр масс кластера y.

- Сумма межкластерных расстояний:

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

где μ — центр масс всей выборки.

- Отношение пары функционалов:

$$\Phi_0 / \Phi_1 \to \min .$$

Агломеративная иерархическая кластеризация

Алгоритм Ланса-Уильямса [1967]

сначала все кластеры одноэлементные:
$t := 1; \quad C_t = \{\{x_1\}, \ldots, \{x_\ell\}\};$
$R(\{x_i\}, \{x_j\}) := \rho(x_i, x_j);$
для всех $t = 2, \ldots, \ell$ (t — номер итерации):
  найти в C_{t-1} два ближайших кластера:
  $(U, V) := \arg\min_{U \neq V} R(U, V);$
  $R_t := R(U, V);$
  слить их в один кластер:
  $W := U \cup V;$
  $C_t := C_{t-1} \cup \{W\} \setminus \{U, V\};$
  для всех $S \in C_t$
    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]:

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

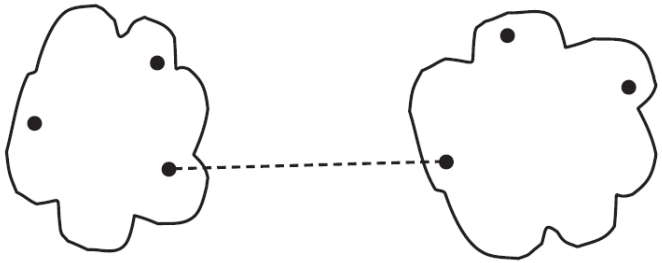
где α_U, α_V, β, γ — числовые параметры.

Частные случаи формулы Ланса-Уильямса

1. Расстояние ближнего соседа:

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

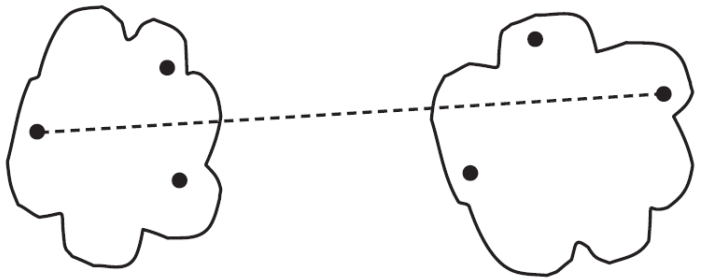
$$\alpha_U = \alpha_V = \tfrac{1}{2},\ \ \beta = 0,\ \ \gamma = -\tfrac{1}{2}.$$



2. Расстояние дальнего соседа:

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

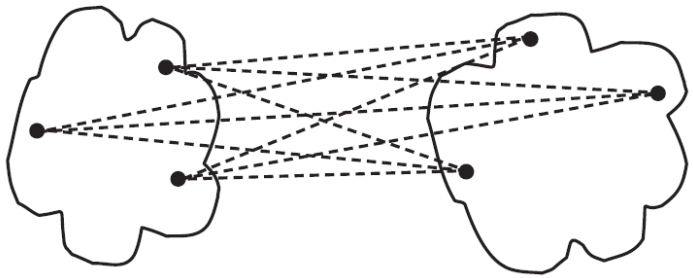
$$\alpha_U = \alpha_V = \tfrac{1}{2},\ \ \beta = 0,\ \ \gamma = \tfrac{1}{2}.$$



3. Групповое среднее расстояние:

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

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



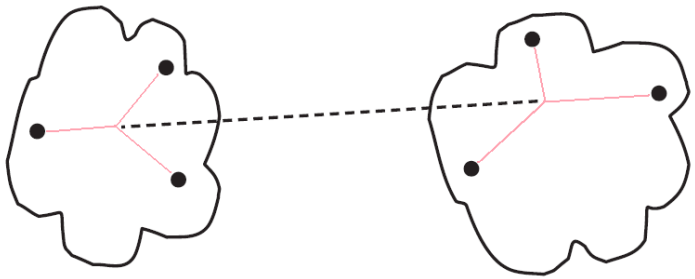
Частные случаи формулы Ланса-Уильямса

4. Расстояние между центрами:

$$R^{\text{ц}}(W,S) = \rho^2\Big(\sum_{w\in W}\frac{w}{|W|}, \sum_{s\in S}\frac{s}{|S|}\Big);$$

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

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



5. Расстояние Уорда:

$$R^{\text{у}}(W,S) = \frac{|S||W|}{|S|+|W|}\,\rho^2\Big(\sum_{w\in W}\frac{w}{|W|}, \sum_{s\in S}\frac{s}{|S|}\Big);$$

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

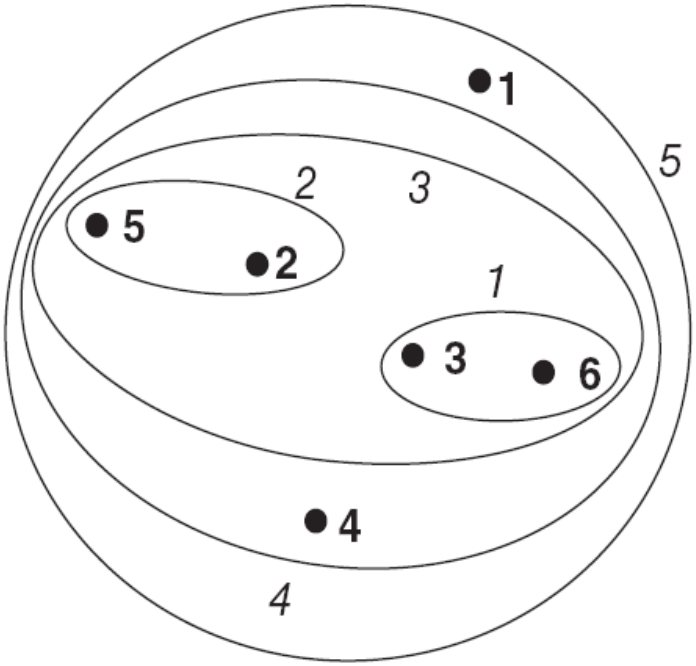
Проблема выбора

Какой тип расстояния лучше?

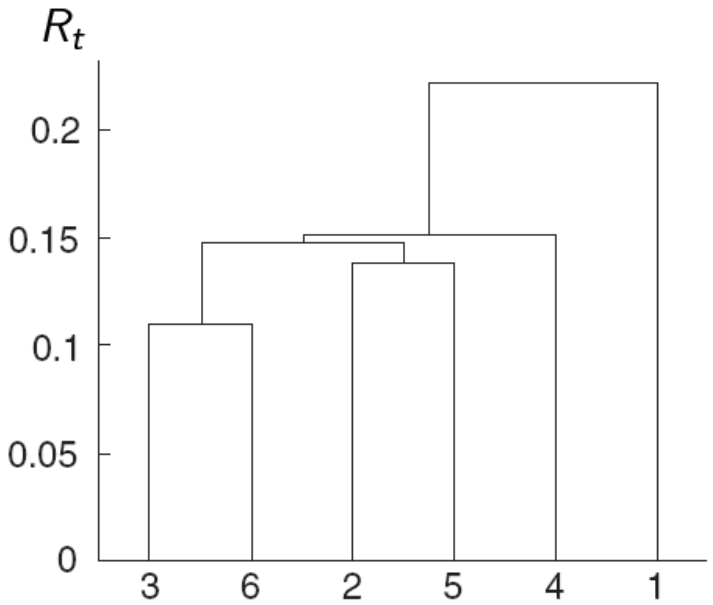
Визуализация кластерной структуры

1. Расстояние ближнего соседа:

Диаграмма вложения



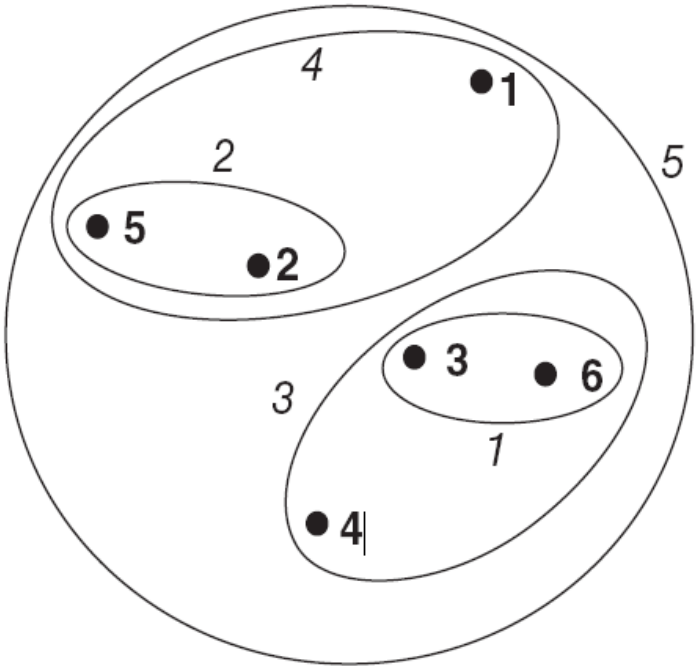
Дендрограмма



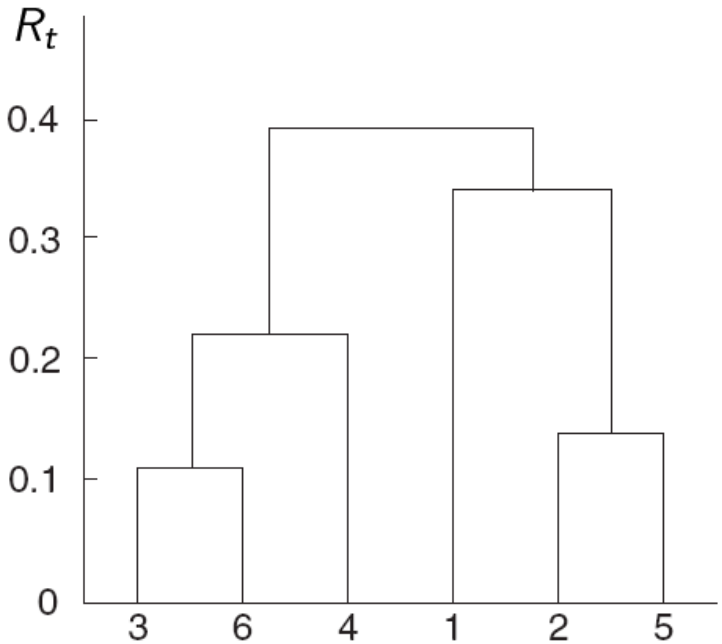
Визуализация кластерной структуры

2. Расстояние дальнего соседа:

Диаграмма вложения



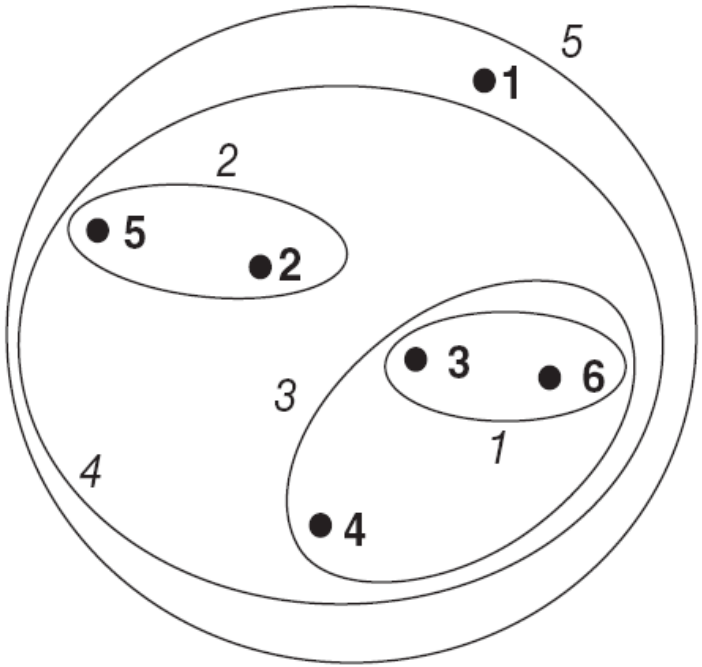
Дендрограмма



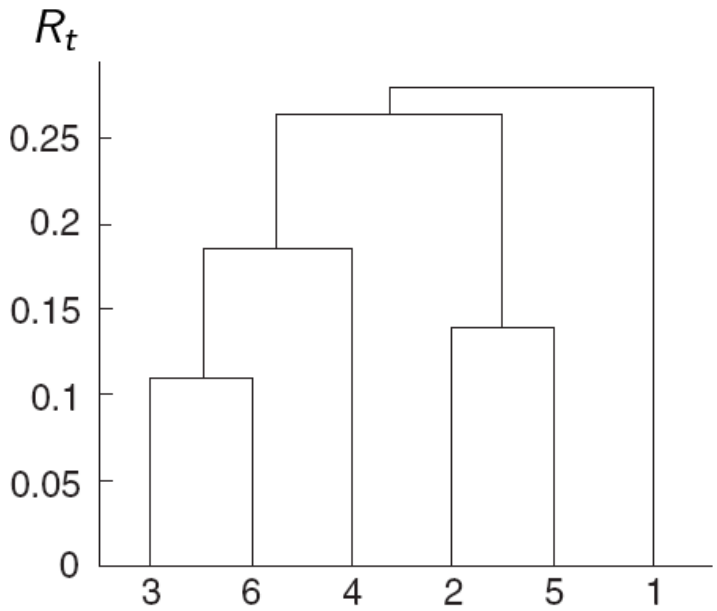
Визуализация кластерной структуры

3. Групповое среднее расстояние:

Диаграмма вложения



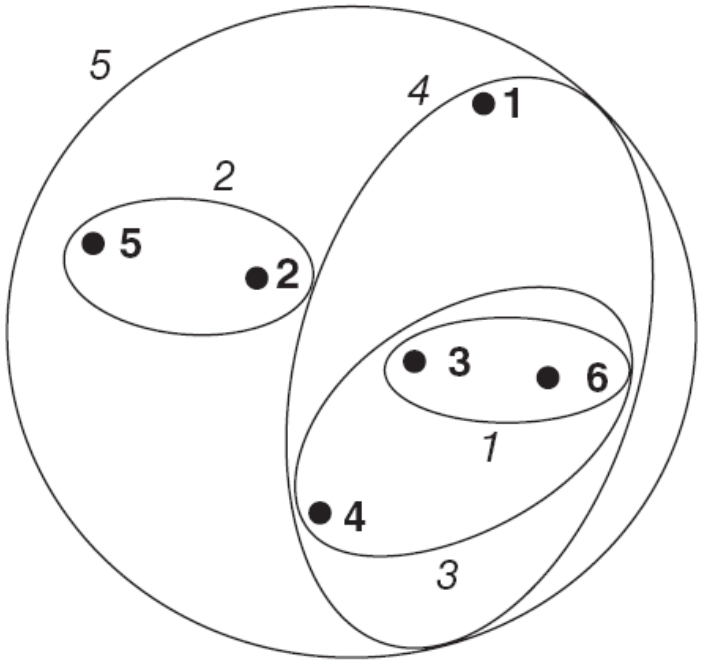
Дендрограмма



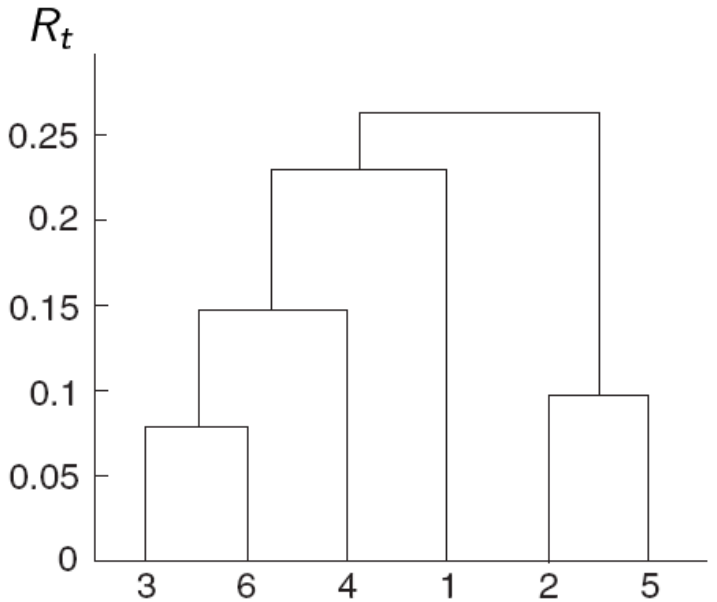
Визуализация кластерной структуры

5. Расстояние Уорда:

Диаграмма вложения



Дендрограмма



Свойство монотонности

Определение

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

Теорема (Миллиган, 1979)

Кластеризация монотонна, если выполняются условия

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

Если кластеризация монотонна, то дендрограмма не имеет самопересечений.

$R^{ц}$ не монотонно; $R^{б}$, $R^{д}$, $R^{г}$, $R^{у}$ — монотонны.

Свойства сжатия и растяжения

Определение

Кластеризация *сжимающая*, если $R_t \leqslant \rho(\mu_U, \mu_V), \ \forall t$.
Кластеризация *растягивающая*, если $R_t \geqslant \rho(\mu_U, \mu_V), \ \forall t$.
Иначе кластеризация *сохраняет метрику пространства*.

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

$R^{б}$ — сильно сжимающее;
$R^{д}$, $R^{у}$ — растягивающие;
$R^{г}$, $R^{ц}$ — сохраняют метрику пространства.

Проблема повышения эффективности алгоритма

Проблема эффективности:

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

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

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

Идея повышения эффективности:

- перебирать лишь наиболее близкие пары:

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

- периодически увеличивать параметр δ.

Быстрый (редуктивный) алгоритм Ланса-Уильямса

1: сначала все кластеры одноэлементные:
$t := 1; \quad C_t = \{\{x_1\}, \ldots, \{x_\ell\}\};$
$R(\{x_i\}, \{x_j\}) := \rho(x_i, x_j);$
2: выбрать начальное значение параметра δ;
$P(\delta) := \{(U, V) \mid U, V \in C_t,\ R(U, V) \leqslant \delta\};$
3: **для всех** $t = 2, \ldots, \ell$ (t — номер итерации):
4: **если** $P(\delta) = \varnothing$ **то** увеличить δ так, чтобы $P(\delta) \neq \varnothing$;
5: $(U, V) := \underset{(U,V) \in P(\delta)}{\arg\min} R(U, V);$
$R_t := R(U, V);$
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** $R(W, S) \leqslant \delta$ **то** $P(\delta) := P(\delta) \cup \{(W, S)\};$

Свойство редуктивности

Всегда ли быстрый алгоритм строит ту же кластеризацию?

Определение (Брюинош, 1978)

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

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

Теорема

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

Свойство редуктивности

Теорема (Диде и Моро, 1984)

Расстояние R является редуктивным, если

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

Утверждение

Всякое редуктивное расстояние является монотонным.

$R^{ч}$ не редуктивное; $R^{б}$, $R^{д}$, $R^{г}$, $R^{у}$ — редуктивные.

Рекомендации и выводы

Стратегия выбора параметра δ на шагах 2 и 4:

- Если $|C_t| \leqslant n_1$, то $P(\delta) := \{(U, V)\colon U, V \in C_t\}$.
- 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 $R^{\text{у}}$ — 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^ℓ случайна, независима, из смеси распределений

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

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

Гипотеза (о пространстве объектов и форме кластеров)

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

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

$\mu_y = (\mu_{y1}, \ldots, \mu_{yn})$ — центр кластера y;
$\Sigma_y = \operatorname{diag}(\sigma_{y1}^2, \ldots, \sigma_{yn}^2)$ — диагональная матрица ковариаций;

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

EM-алгоритм (повторение)

1: начальное приближение w_y, μ_y, Σ_y для всех $y \in Y$;
2: **повторять**
3: E-шаг (expectation):

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

4: M-шаг (maximization):

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

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

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

5: $y_i := \arg\max_{y \in Y} g_{iy}, \quad i = 1, \ldots, \ell;$
6: **пока** y_i не перестанут изменяться;

Метод k-средних (k-means)

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

1: начальное приближение центров μ_y, $y \in Y$;
2: **повторять**
3: аналог E-шага:
отнести каждый x_i к ближайшему центру:
$y_i := \arg\min_{y \in Y} \rho(x_i, \mu_y)$, $i = 1, \ldots, \ell$;
4: аналог M-шага:
вычислить новые положения центров:
$$\mu_{yj} := \frac{\sum_{i=1}^{\ell} [y_i = y] f_j(x_i)}{\sum_{i=1}^{\ell} [y_i = y]}, \quad y \in Y, \quad j = 1, \ldots, n;$$
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 EM и k-means:

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

Гибридные варианты по пути упрощения EM:

- EM с жёсткой кластеризацией на E-шаге;
- EM 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:

$a\colon X \to Y$ — алгоритм кластеризации.

Как приспособить EM-алгоритм:

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

Как приспособить k-means:

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

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 EM-алгоритму)