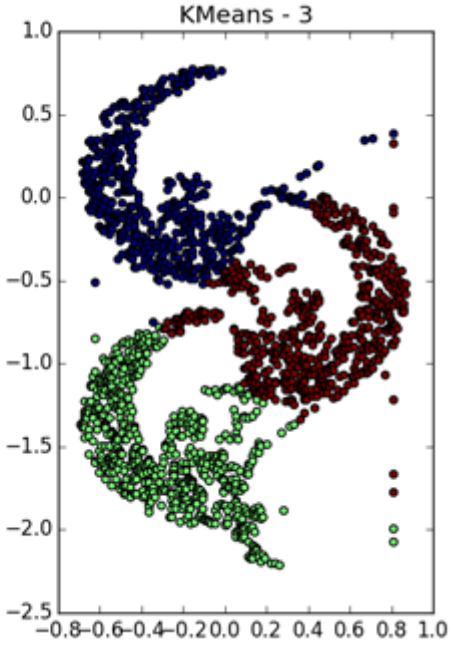
Задача кластеризации данных



Группа людей, действуя совместно, может свершить такое, о чем поодиночке они не могли бы и мечтать.

Франклин Рузвельт

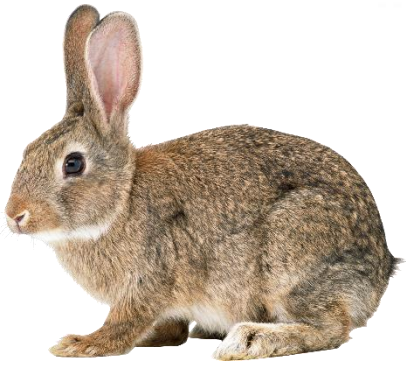
Содержание

- Разделительная кластеризация
- Иерархическая кластеризация
- Плотностная кластеризация
- **Нечеткая кластеризация**
- Меры качества кластеризации

Четкая *vs.* нечеткая кластеризация

A

B



C

D

E

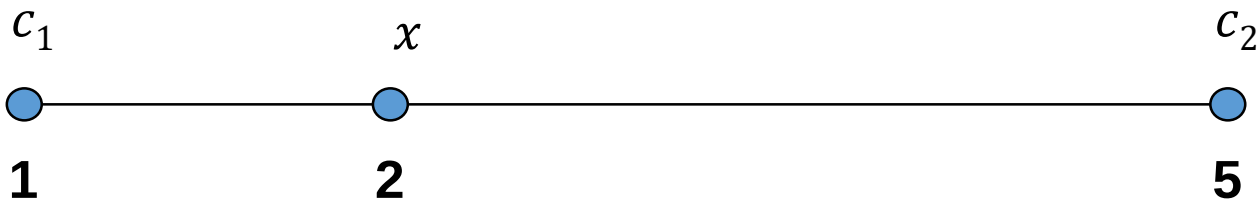
Objects	C_1	C_2
A	1	0
B	1	0
C	0	1
D	0	1
E	0	1

Objects	$P(C_1)$	$P(C_2)$
A	0.90	0.10
B	0.80	0.20
C	0.15	0.85
D	0.30	0.70
E	0.25	0.75

Четкая кластеризация

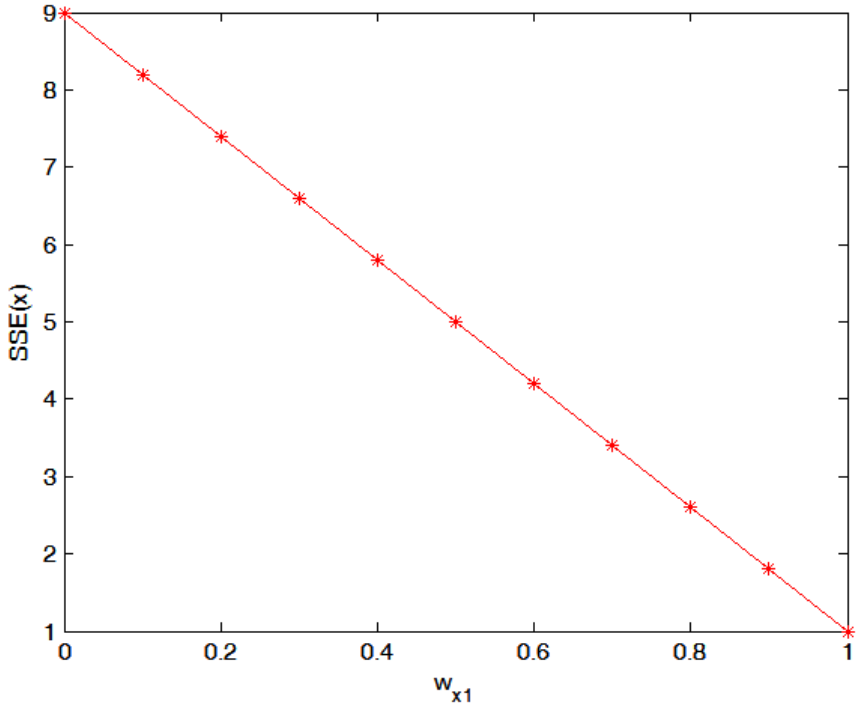
- $SSE = \sum_{j=1}^{k} \sum_{i=1}^{n} w_{ij}\, dist(x_i, c_j)^2$
- w_{ij} – вес факта $x_i \in c_j$, $\sum_{j=1}^{k} w_{ij} = 1$
- Минимизация SSE
  - Фиксировать c_j и найти w_{ij}
  - Фиксировать w_{ij} и вычислить c_j
- $w_{ij} \in \{0,1\}$

Четкая кластеризация



$$SSE(x) = w_{x1}(2-1)^2 + w_{x2}(5-2)^2 = w_{x1} + 9w_{x2}$$

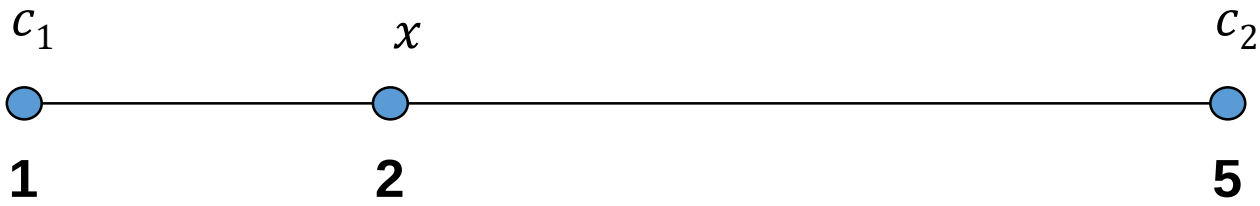
$SSE(x) \to min$ при
$w_{x1} = 1, w_{x2} = 0$



Нечеткая кластеризация

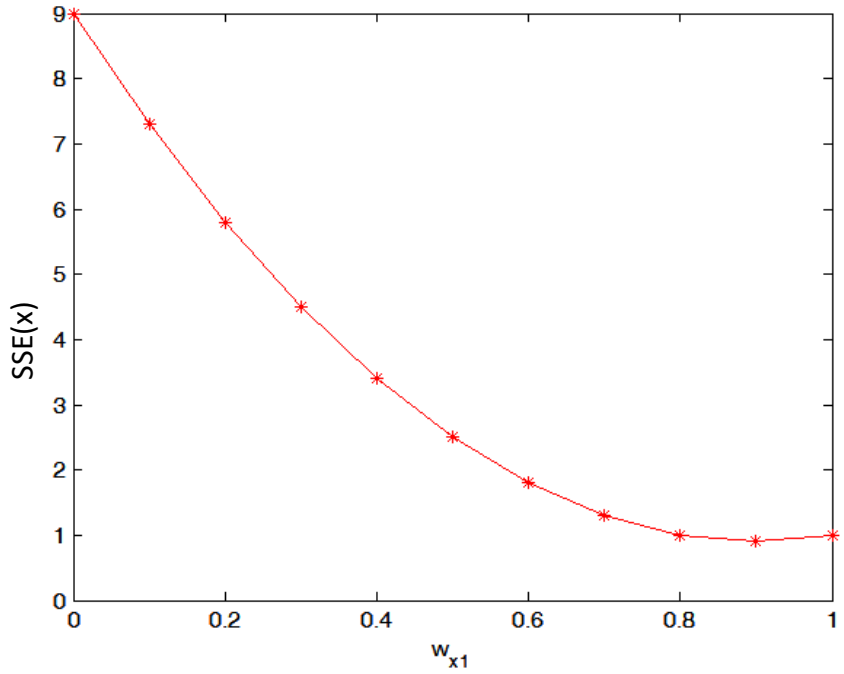
- $SSE = \sum_{j=1}^{k} \sum_{i=1}^{n} w_{ij}^{m} \, dist(x_i, c_j)^2$
- w_{ij} – вес факта $x_i \in c_j$, $\sum_{j=1}^{k} w_{ij} = 1$
- $m > 1$ – «размытость» кластеров (обычно $m = 2$)
- Минимизация SSE
  - Фиксировать c_j и найти w_{ij}
  - Фиксировать w_{ij} и вычислить c_j
- $w_{ij} \in [0,1]$

Нечеткая кластеризация



$$SSE(x) = w_{x1}^2(2-1)^2 + w_{x2}^2(5-2)^2 = w_{x1}^2 + 9w_{x2}^2$$

$SSE(x) \to min$ при
$w_{x1} = 0.9, w_{x2} = 0.1$



Алгоритм Fuzzy *c*-Means

- k – количество кластеров
- $X = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ – множество d-мерных точек
- $C \in \mathbb{R}^{k \times d}$ – *матрица центроидов*
  - c_j – центр j-го кластера (d-мерный вектор)
- $U \in \mathbb{R}^{n \times k}$ – *матрица принадлежности*
  - $0 \le u_{ij} \le 1$ – степень принадлежности (расстояние) между точкой x_i и центроидом c_j
- Минимизируемая *целевая функция*
  - $J_{FCM}(X, k, m) = \sum_{j=1}^{k} \sum_{i=1}^{n} u_{ij}^{m} \, dist(x_i, c_j)^2$
  - $m > 1$ – размытость

x	$x_{i,1}$	…	$x_{i,d}$
1			
…			
n			

c	$c_{j,1}$	…	$c_{j,d}$
1			
…			
k			

u	1	…	k
1			
…			
n			

Алгоритм Fuzzy *c*-Means

Input: X, k, m, ε

Output: U

$s := 0, U^{(0)} := (u_{ij})$ {initialization}

repeat

{computation of new centroids' coordinates}

Compute $C^{(s)} := (c_j)$ using

$$\forall j, l \quad c_{jl} = \frac{\sum_{i=1}^{n} u_{ij}^m \cdot x_{il}}{\sum_{i=1}^{n} u_{ij}^m}$$

where $u_{ij} \in U^{(s)}$

{update matrixes values}

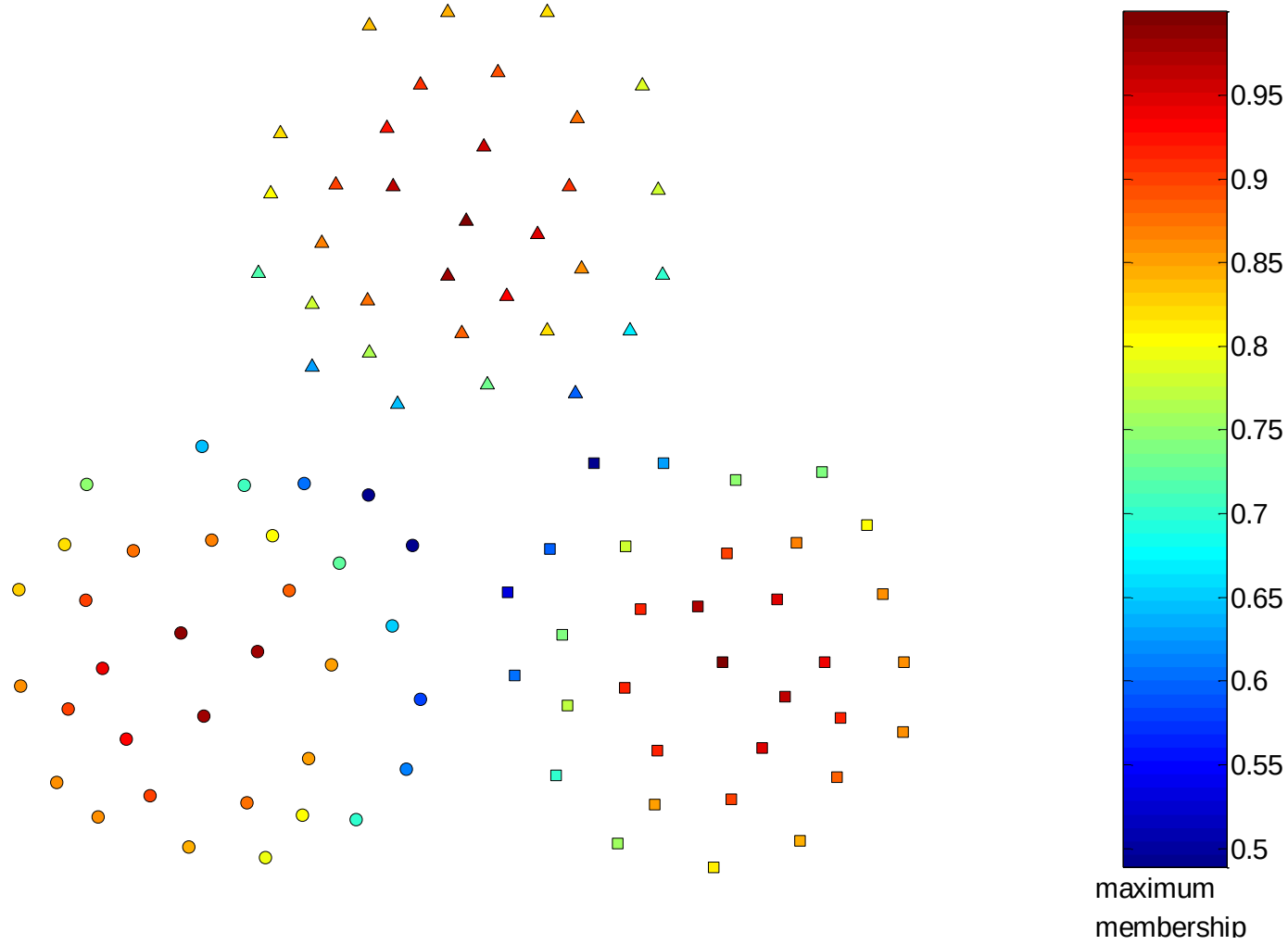
Compute $U^{(s)}$ and $U^{(s+1)}$ using

$$u_{ij} = \sum_{t=1}^{k} \left(\frac{\rho(x_i, c_j)}{\rho(x_i, c_t)} \right)^{\frac{2}{1-m}}$$

$s := s + 1$

until $\max_{ij}\{|u_{ij}^{(s)} - u_{ij}^{(s-1)}|\} \geqslant \varepsilon$

Алгоритм Fuzzy c-Means: пример работы

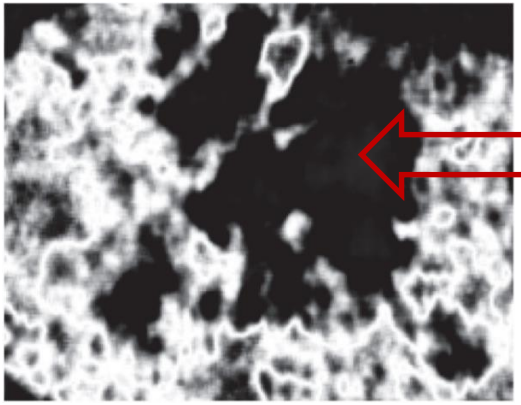


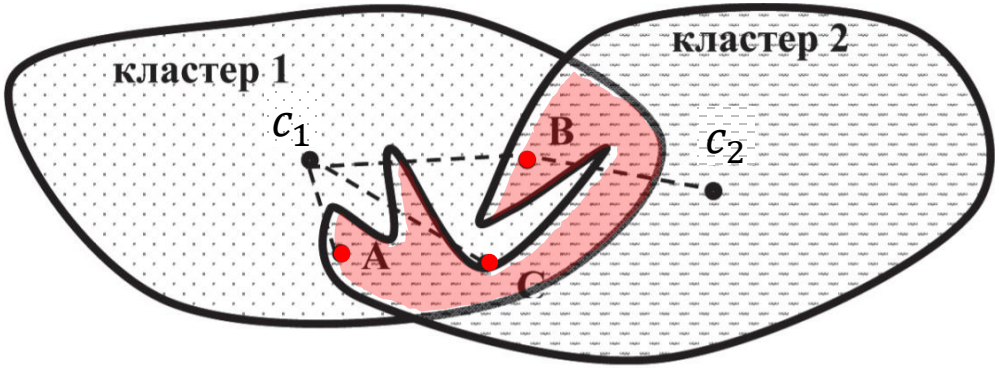
За и против Fuzzy *c*-Means

- Достоинства
  - Дает лучшие результаты для перекрывающихся кластеров и сравнительно лучшие результаты, чем k-means
- Недостатки
  - Количество кластеров необходимо задавать
  - Меньшее значение ε улучшает результаты, но ценой большего количества итераций

Применение нечеткой кластеризации

- Сегментация радиологических изображений





- Восстановление пропущенных данных
  - Нечеткая кластеризация точек без пропущенных координат
  - Создание прототипов: замена пропущенных координат соотв. координатами центроидов
  - Выбор прототипа с минимальным расстоянием до центроида

Литература

- Tan P.-N., Steinbach M., Karpatne A., Kumar V. Introduction to Data Mining. 2nd Edition. Pearson, 2019. 839 p. ISBN: 978-0-13-312890-1
  - 8.2.1 Fuzzy Clustering, pp. 621-626