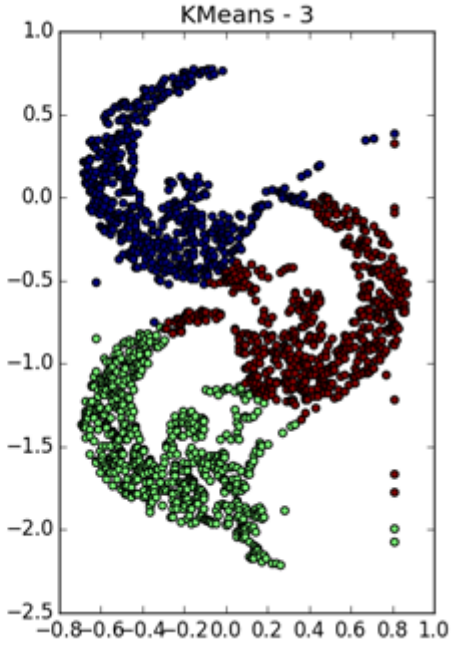
Задача кластеризации данных



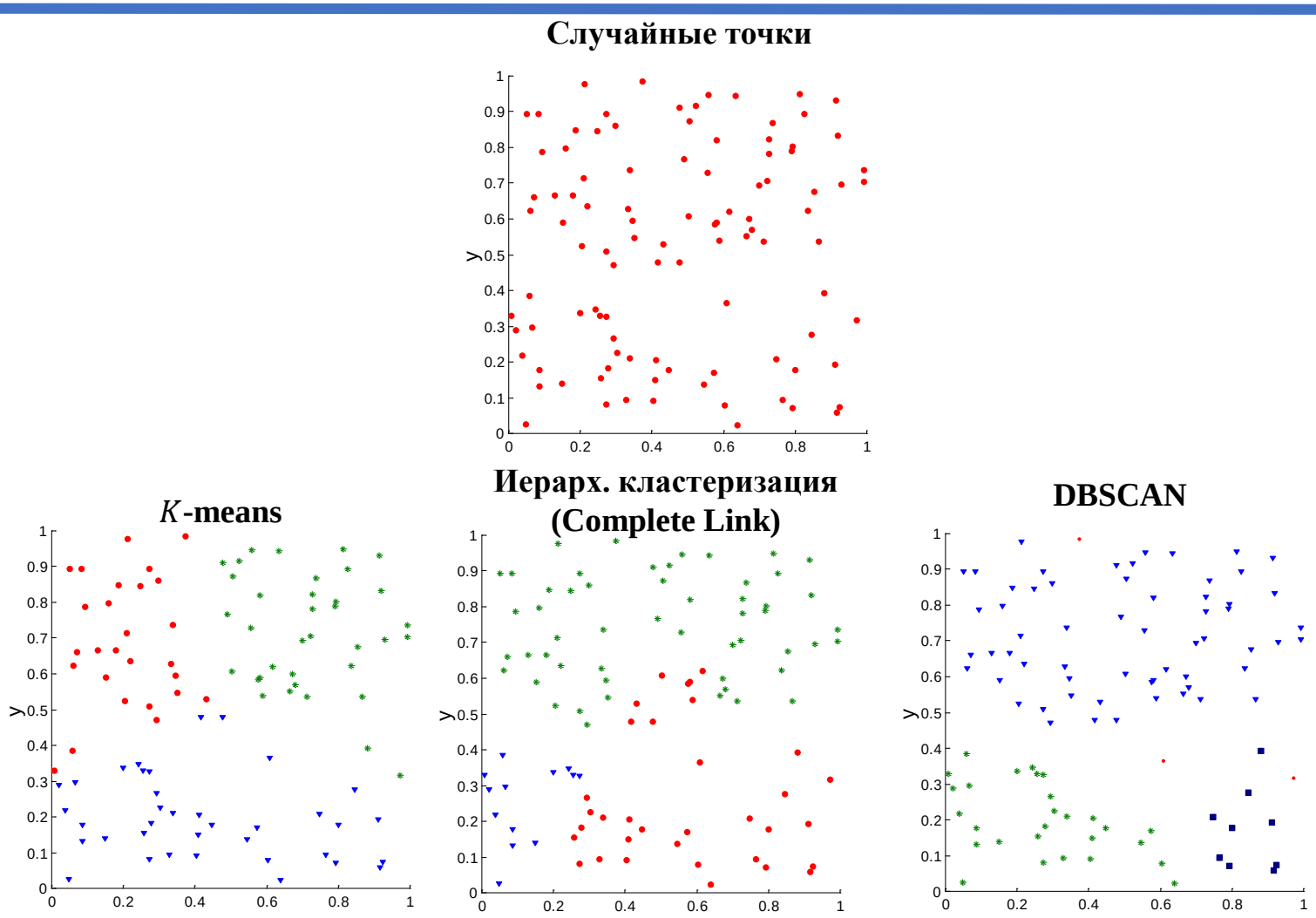
Группа людей, действуя совместно,
может свершить такое,
о чем поодиночке они не могли бы и мечтать.

Франклин Рузвельт

Содержание

- Основные концепции
- Разделительная кластеризация
- Иерархическая кластеризация
- Плотностная кластеризация
- Нечеткая кластеризация
- **Оценка качества кластеризации**

Оценка неслучайности кластеризуемых данных



- Кластеризация даст осмысленные результаты, если исходные данные имеют неслучайную структуру
- Насколько исходные данные близки к нормальному распределению?

Критерий Хопкинса

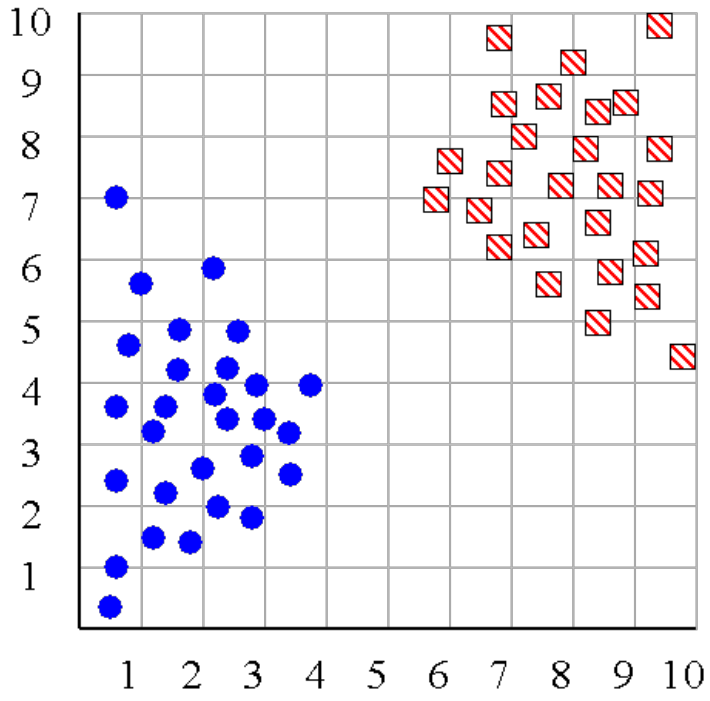
- Равномерные случайные выборки из D: $p_1, \dots, p_n$ и $q_1, \dots, q_n$
  - $x_i = \min\limits_{v \in D} \mathrm{dist}(p_i, v)$
  - $y_i = \min\limits_{v \in D} \mathrm{dist}(q_i, v)$
- Число Хопкинса

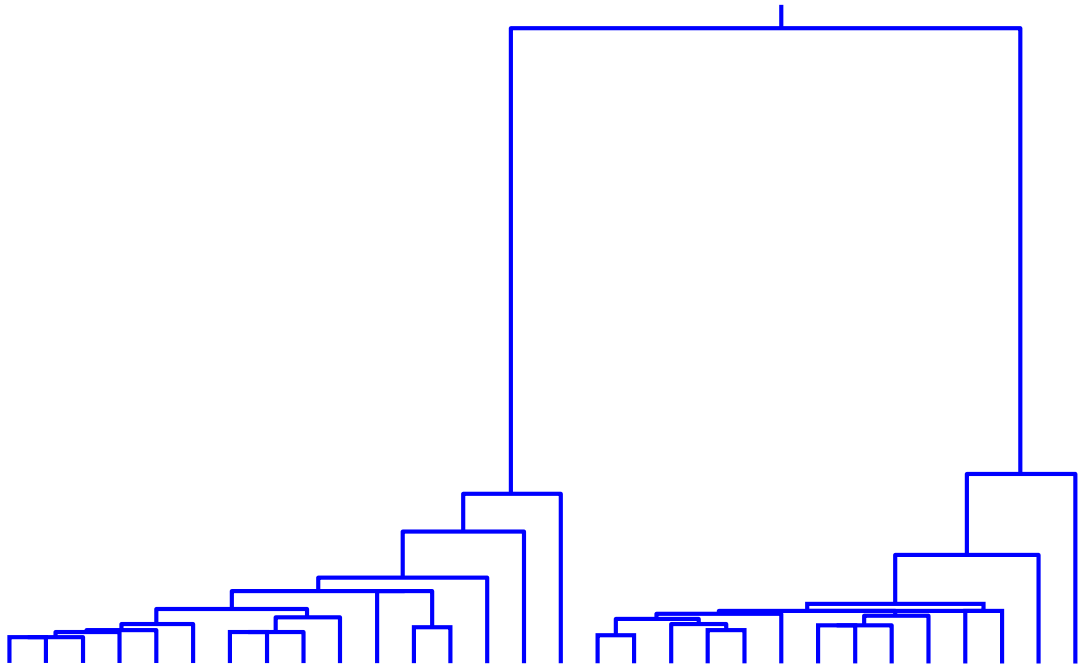
$$H = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{\sum_{i=1}^{n} y_i + \sum_{i=1}^{n} x_i}$$

- Критерий
  – если D равномерно распределено, то $\sum_{i=1}^{n} y_i \approx \sum_{i=1}^{n} x_i$, т.е. $H \approx 0.5$
  – если в D существенные перекосы, то $\sum_{i=1}^{n} y_i \ll \sum_{i=1}^{n} x_i$, т.е. $H \approx 0$
- Повторить выборку и вычисления, на основе медианы/среднего сделать вывод о тенденции к группированию в данных:
  – если $H \geq 0.5$, то кластеры не будут осмысленными
  – если $H \leq 0.25$, то кластеры будут осмысленными

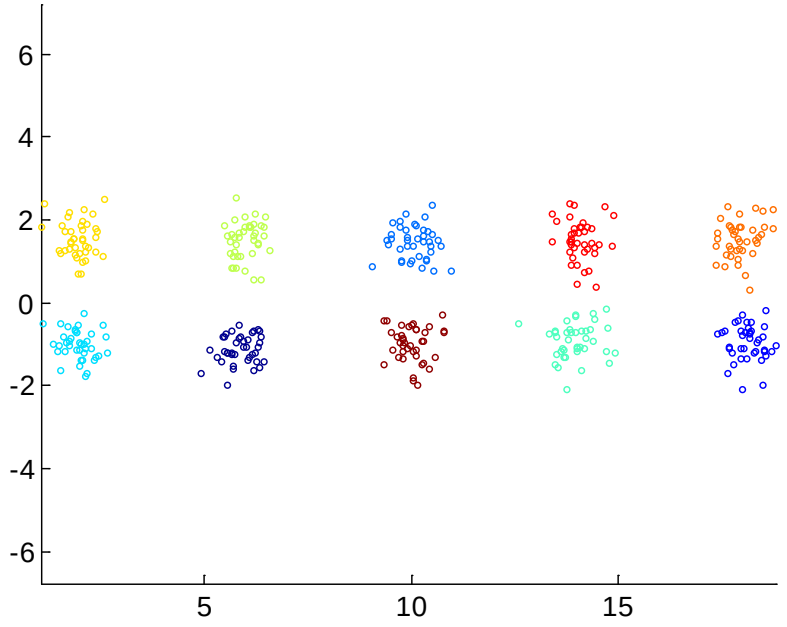
Оптимальное число кластеров: эмпирические методы

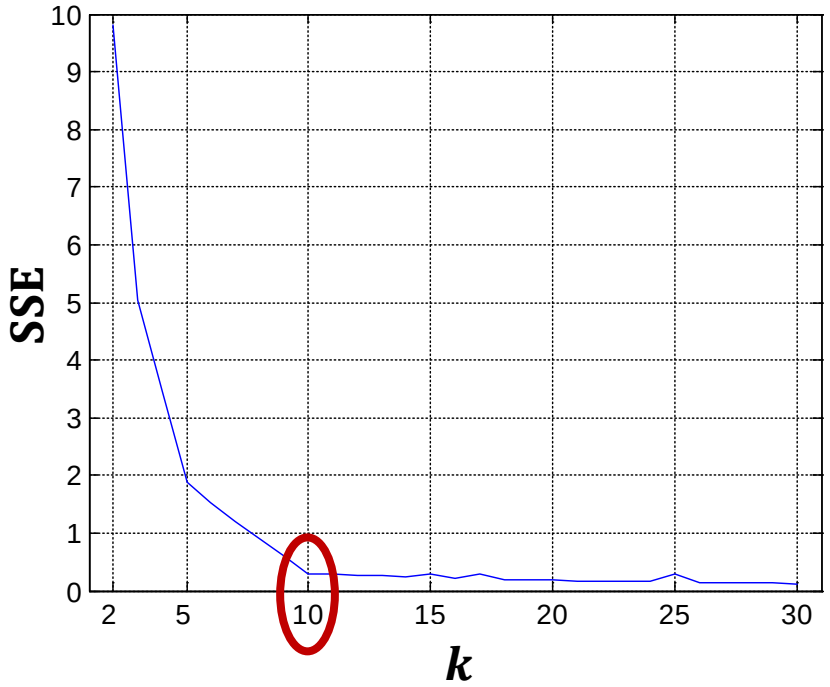
- $k = \sqrt{n/2}$ (надеемся, что в каждом кластере $\sqrt{2n}$ объектов)
- Визуализация иерархической кластеризации





Оптимальное число кластеров: метод локтя



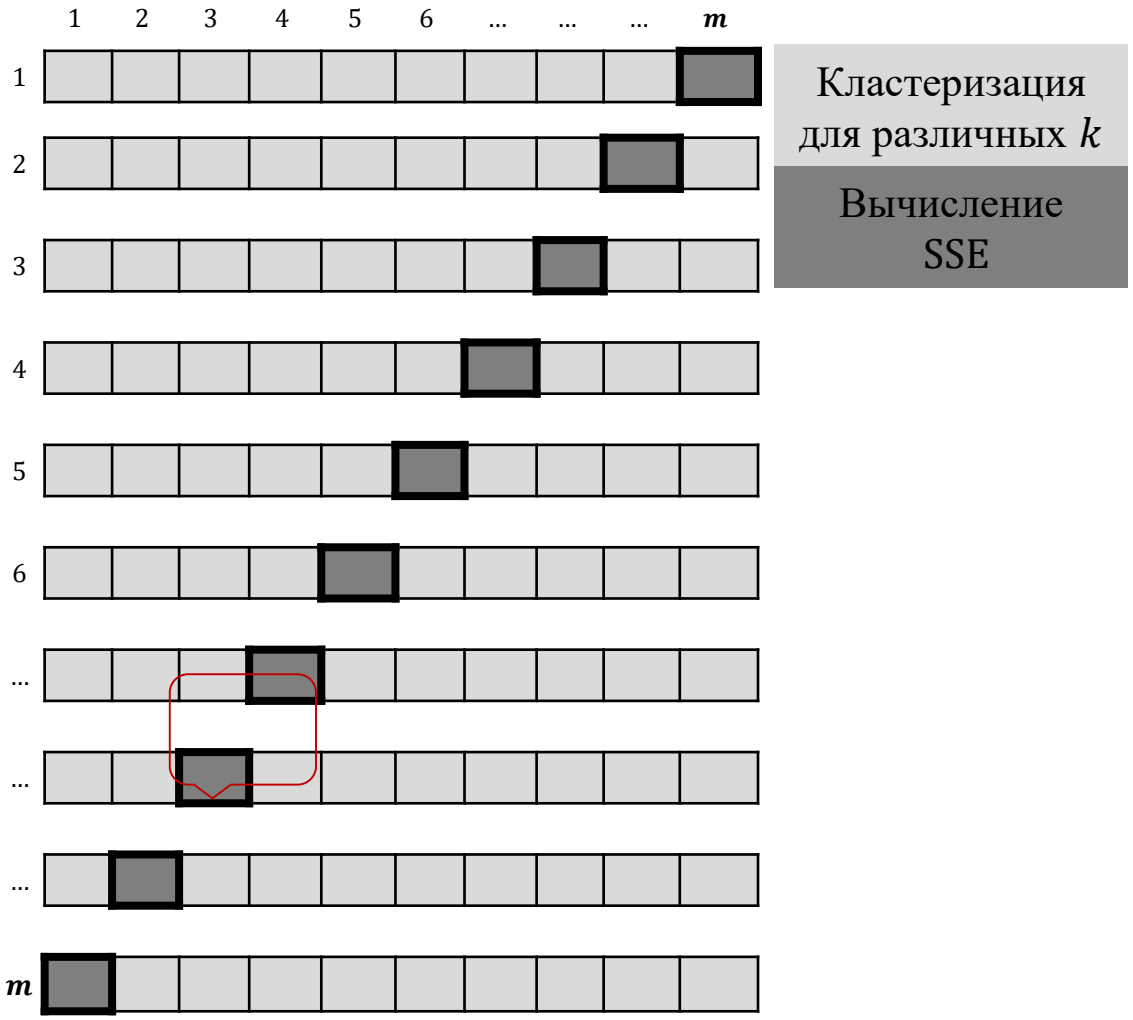


$$\mathrm{SSE}(D) = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{|C_i|} dist^2(c_i, x_j)$$

$D = \{x_j\}$ – исходное множество, c_i – центроид кластера C_i

Кросс-валидация для оптимального числа кластеров

- Разбить исходное множество на m частей
- Для различных k
  - Выполнить кластеризацию $m-1$ частей
  - Для m-й части вычислить $\mathrm{SSE} = \Sigma \mathrm{dist}^2(c, x)$, где x – объект этой части, c – ближайший к нему центроид
  - Повторить кластеризацию и вычисление SSE для всех частей
  - Вычислить среднее SSE
- Взять значение k, при котором среднее значение SSE минимально



Оценка качества кластеризации через корреляцию

- Матрица расстояний:

$$(d_{ij}) = dist(x_i, x_j)$$

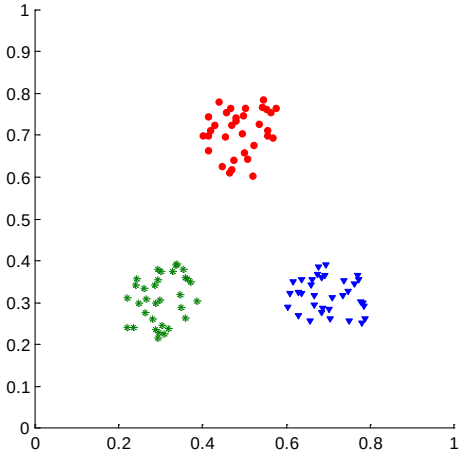
- Матрица идеальной схожести:

$$(s_{ij}) = \begin{cases} 0, & x_i \in C_p \wedge x_j \in C_q \\ 1, & x_i, x_j \in C_p \end{cases}$$

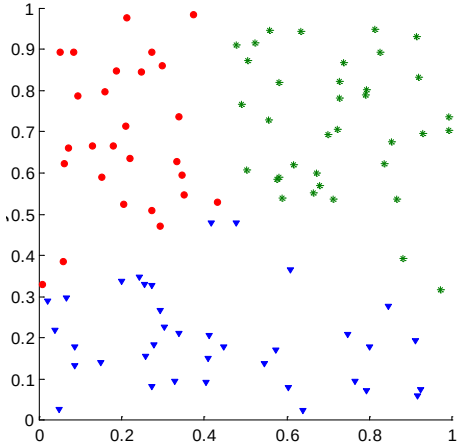
- Вычислить $corr_{d,s}$

  Высокая корреляция покажет, что объекты одного кластера близки друг к другу

Corr = -0.9235



Corr = -0.5810



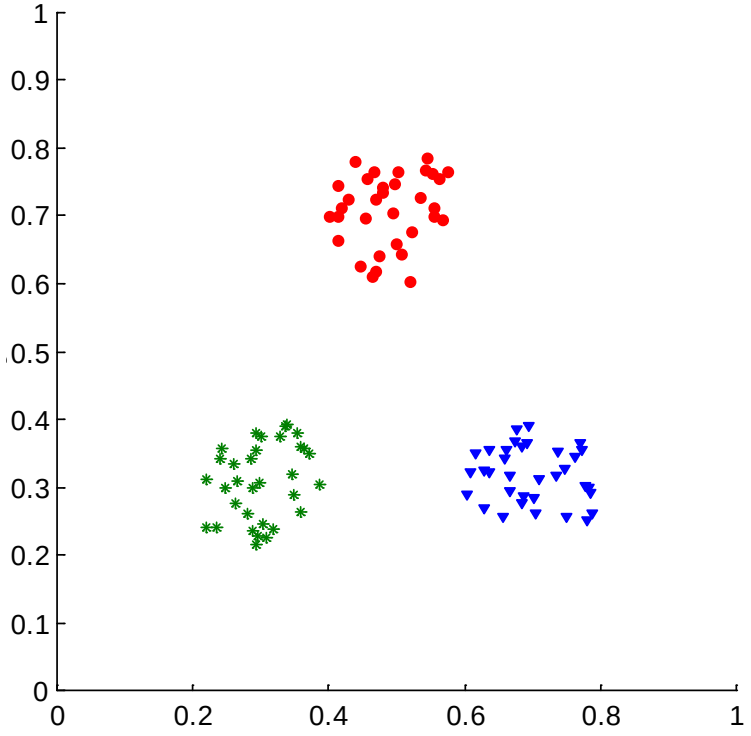
$$\mathrm{Corr}_{xy} = \frac{\Sigma(x_i - \bar{x}) \times (y_i - \bar{y})}{\sqrt{\Sigma(x_i - \bar{x})^2 \times \Sigma(y_i - \bar{y})^2}}$$

Шкала Чеддока силы корреляции

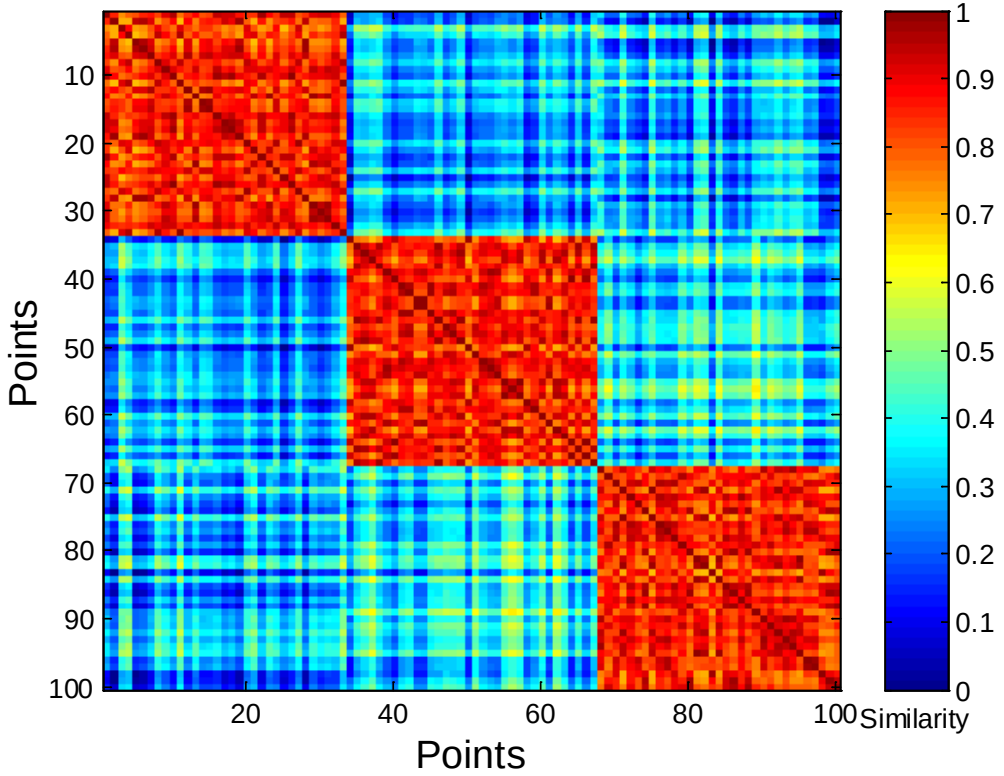
$+1.0$	идеальная положительная
$+0.9$	очень сильная положительная
$+0.7$	сильная положительная
$+0.4$	умеренная положительная
$+0.1$	слабая положительная
0.0	отсутствие корреляции
-0.1	слабая отрицательная
-0.4	умеренная отрицательная
-0.7	сильная отрицательная
-0.9	очень сильная отрицательная
-1.0	идеальная отрицательная

Визуальная оценка по матрице расстояний

- Упорядочить объекты кластеризованного множества по меткам кластеров и визуализировать матрицу расстояний (схожести)

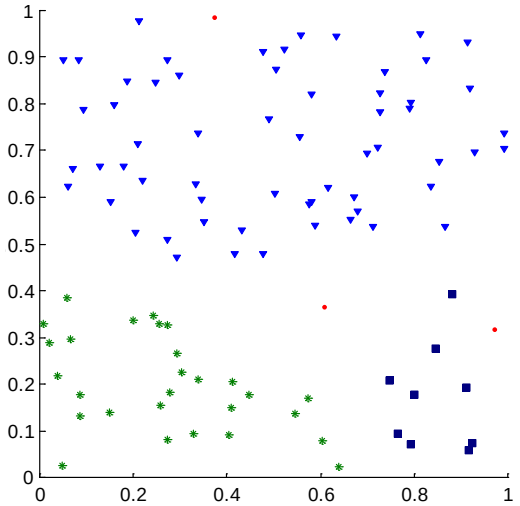


Кластеризация данных с **неслучайной** структурой

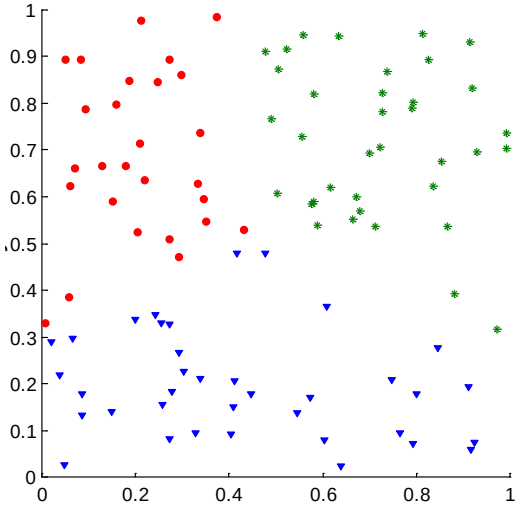


Визуальная оценка по матрице расстояний

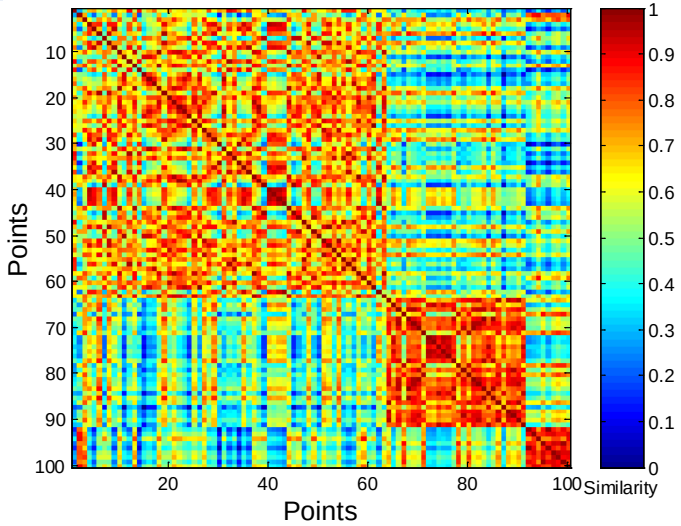
DBSCAN

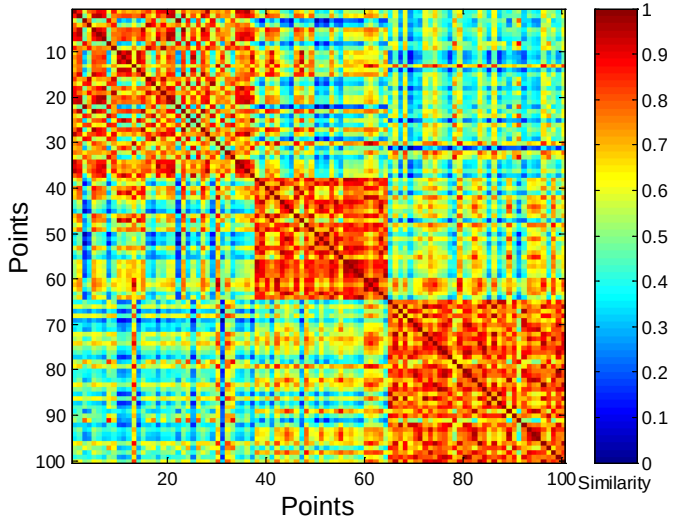


k-Means



Кластеризация данных со случайной структурой

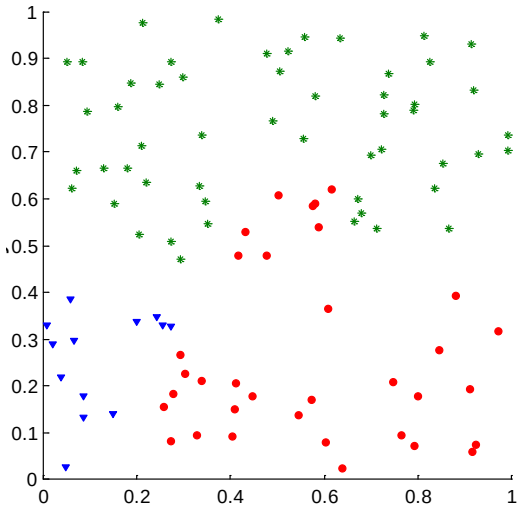


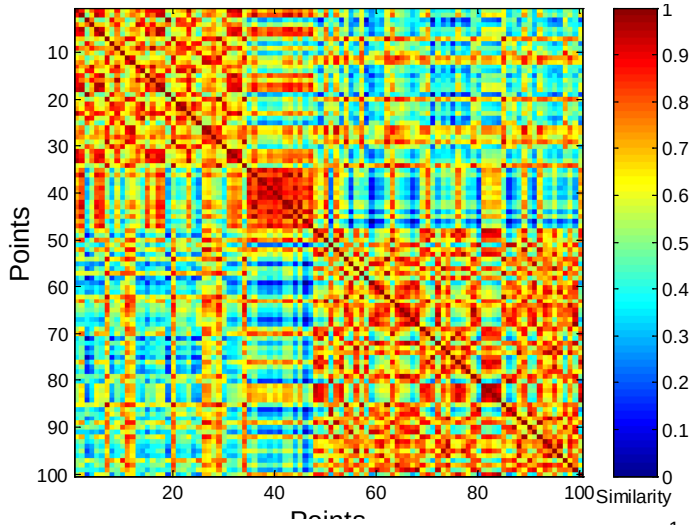


Визуальная оценка по матрице расстояний

Иерарх. класт-я (Complete linkage)

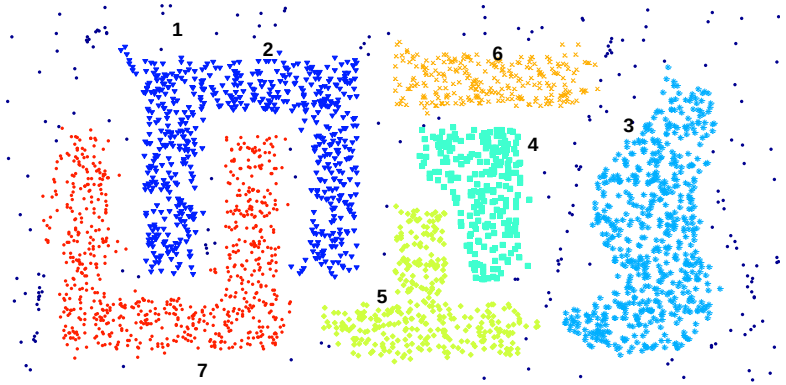
Кластеризация данных со случайной структурой

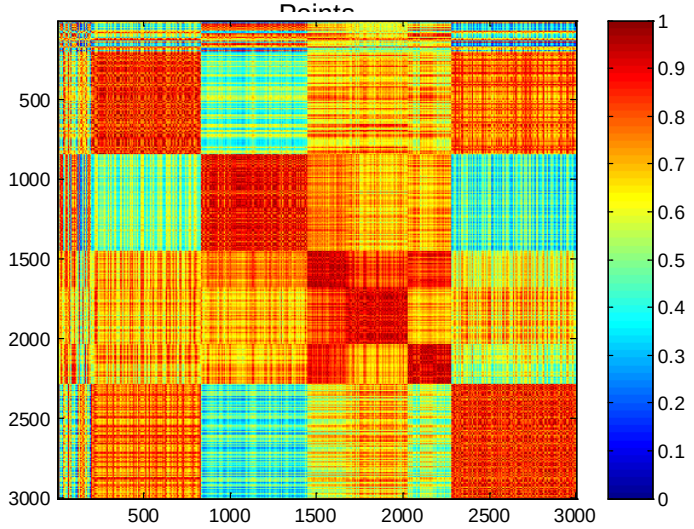




DBSCAN

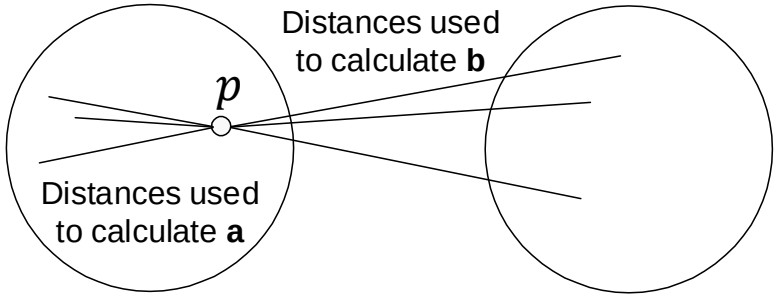
Кластеризация данных с **неслучайной** структурой



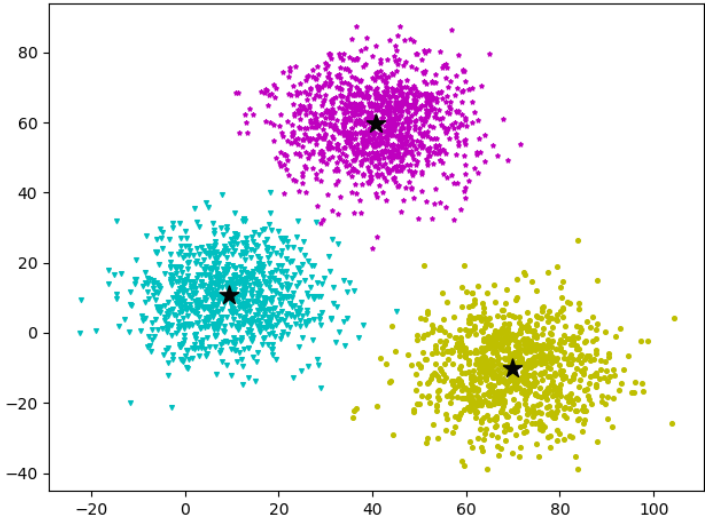


Силуэтный коэффициент

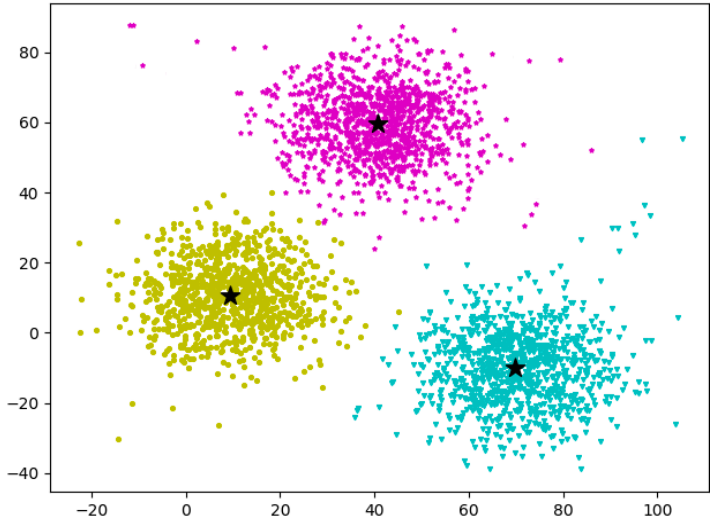
- ***Сцепление*** точки с другими точками того же кластера:
  среднее расстояние от данной точки до других точек кластера
  $$a(p) = \frac{1}{|C_i| - 1} \sum_{q \in C_i \wedge q \neq p} \mathrm{dist}(p, q)$$
- ***Отдаленность*** точки от точек других кластеров:
  минимум среднего расстояния до точек других кластеров
  $$b(p) = \min_{C_j \neq C_i} \frac{1}{|C_j|} \sum_{q \in C_j} \mathrm{dist}(p, q)$$
- Силуэтный коэффициент
  - для одной точки: $s(p) = \frac{b(p) - a(p)}{\max\{a(p), b(p)\}}$
  - для множества точек: $S(D) = \frac{1}{|D|} \sum_{p \in D} s(p)$
- $-1 \leq s, S \leq 1$
  - чем ближе к 1, тем выше качество кластеризации
  - при отрицательном значении качество кластеризации низкое



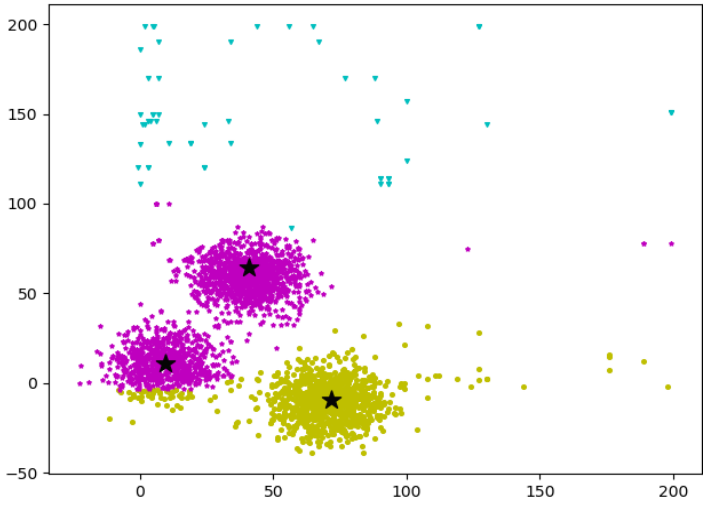
Пример: вычисление силуэтного коэффициента



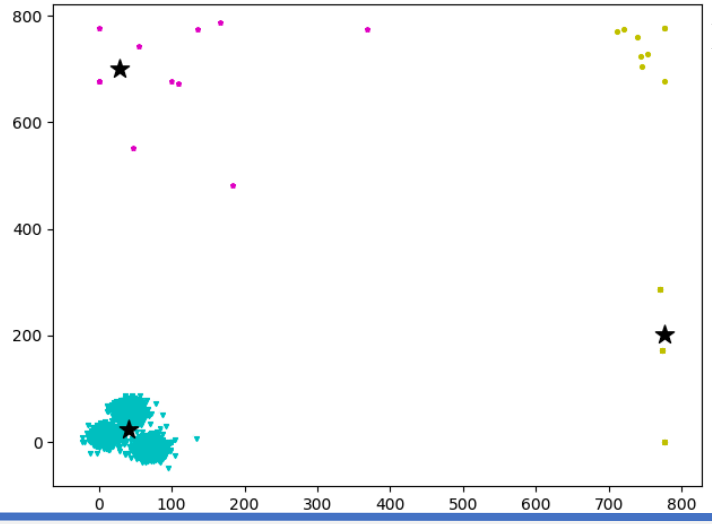
В данных нет шума
S=0.88



В 3% данных есть шум
S=0.62



В 5% данных есть шум
S=0.39



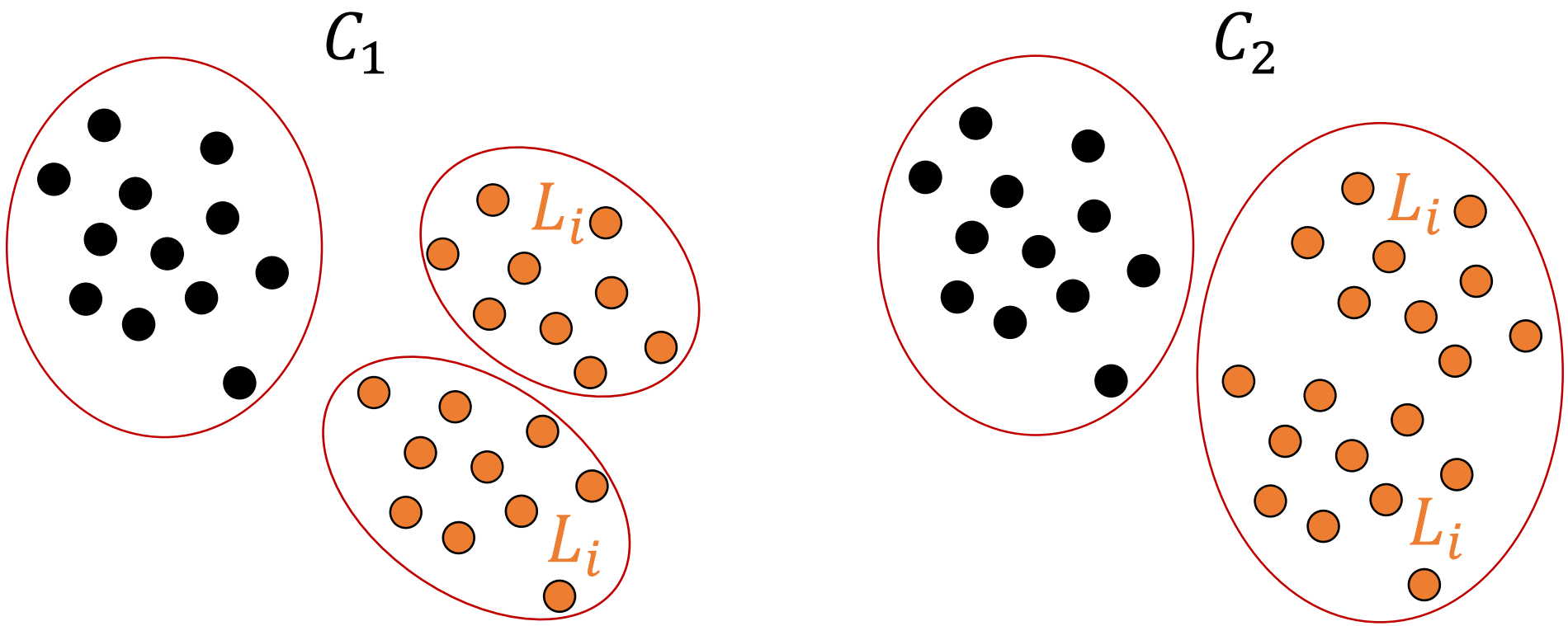
В 10% данных есть шум
S=-0.05

Оценка качества на основе предварительной классификации

- Результат кластеризации множества объектов:
  - C
- Результат классификации множества объектов:
  - C_g (ground truth)
  - Классы: $L_1, \ldots, L_n$
- Метрика качества кластеризации:
  - $Q(C, C_g)$

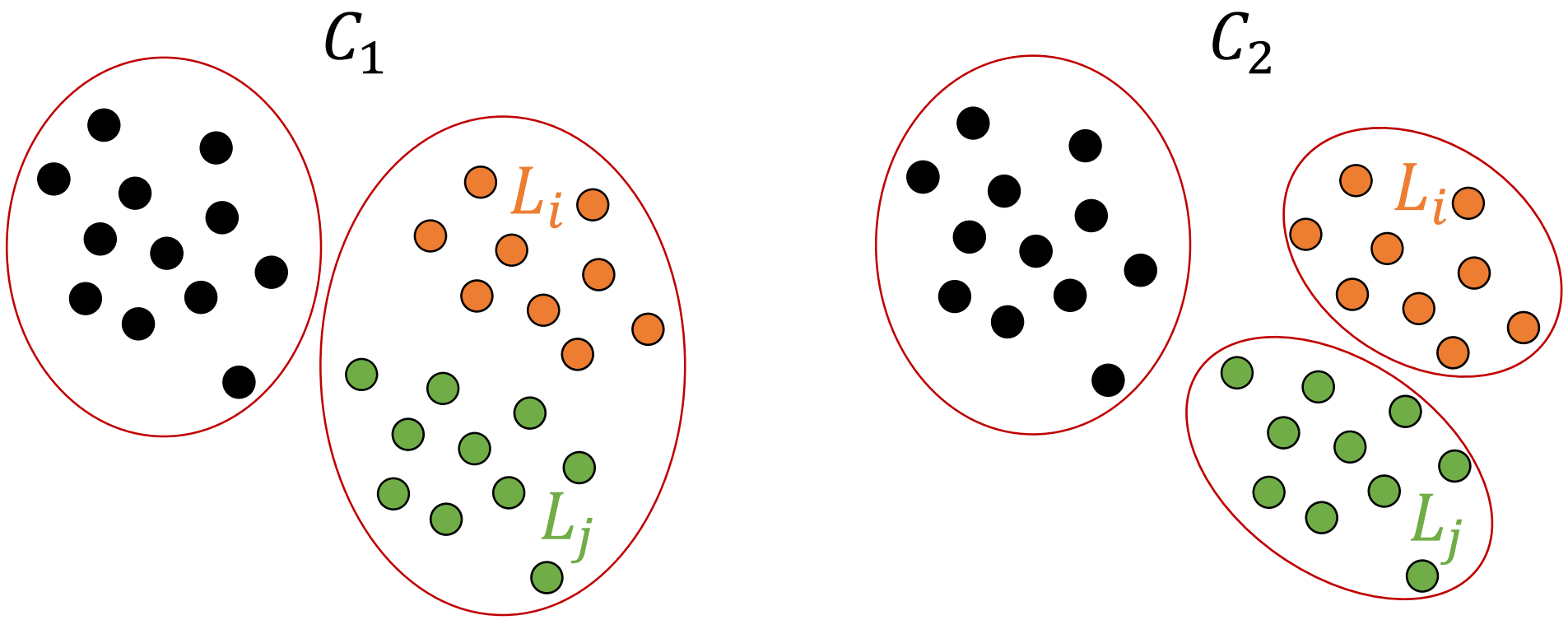
Однородность кластеров

$$Q(C_1, C_g) < Q(C_2, C_g)$$



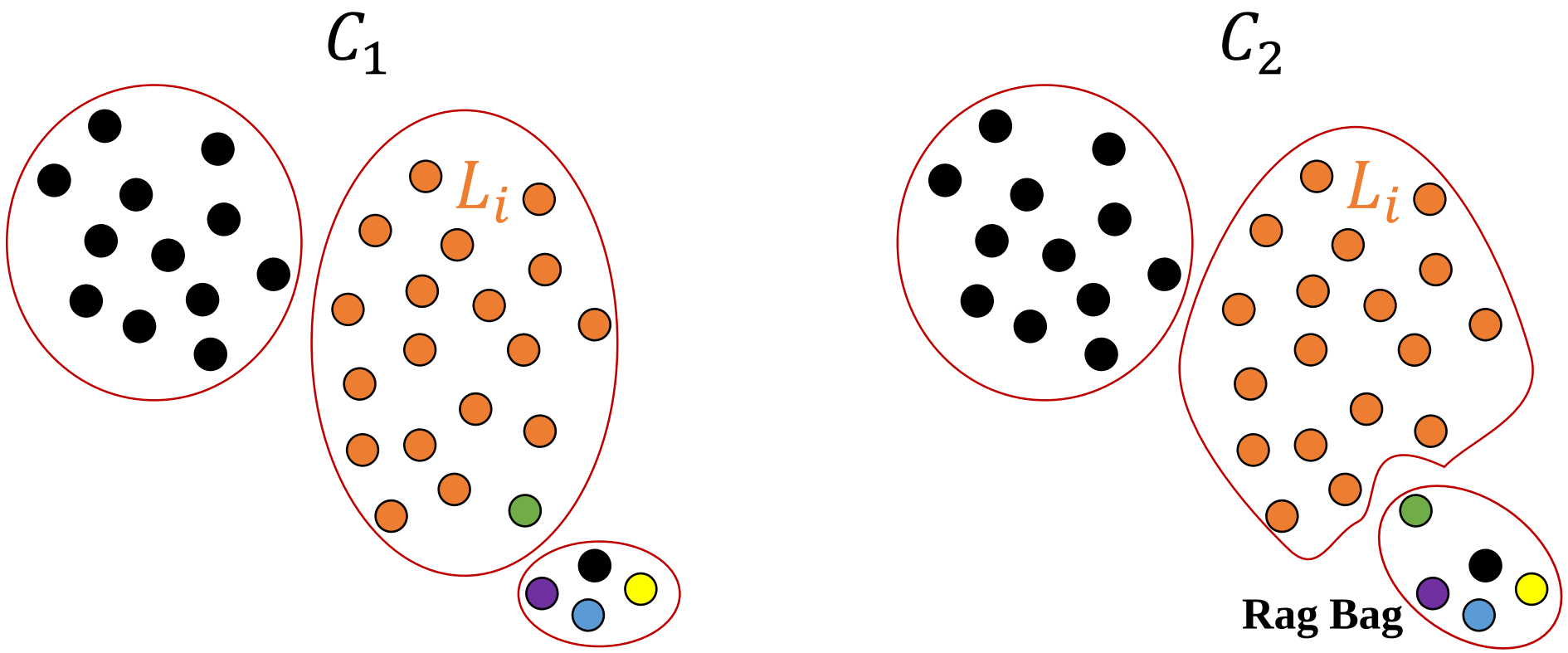
Полнота кластеров

$$Q(C_1, C_g) < Q(C_2, C_g)$$



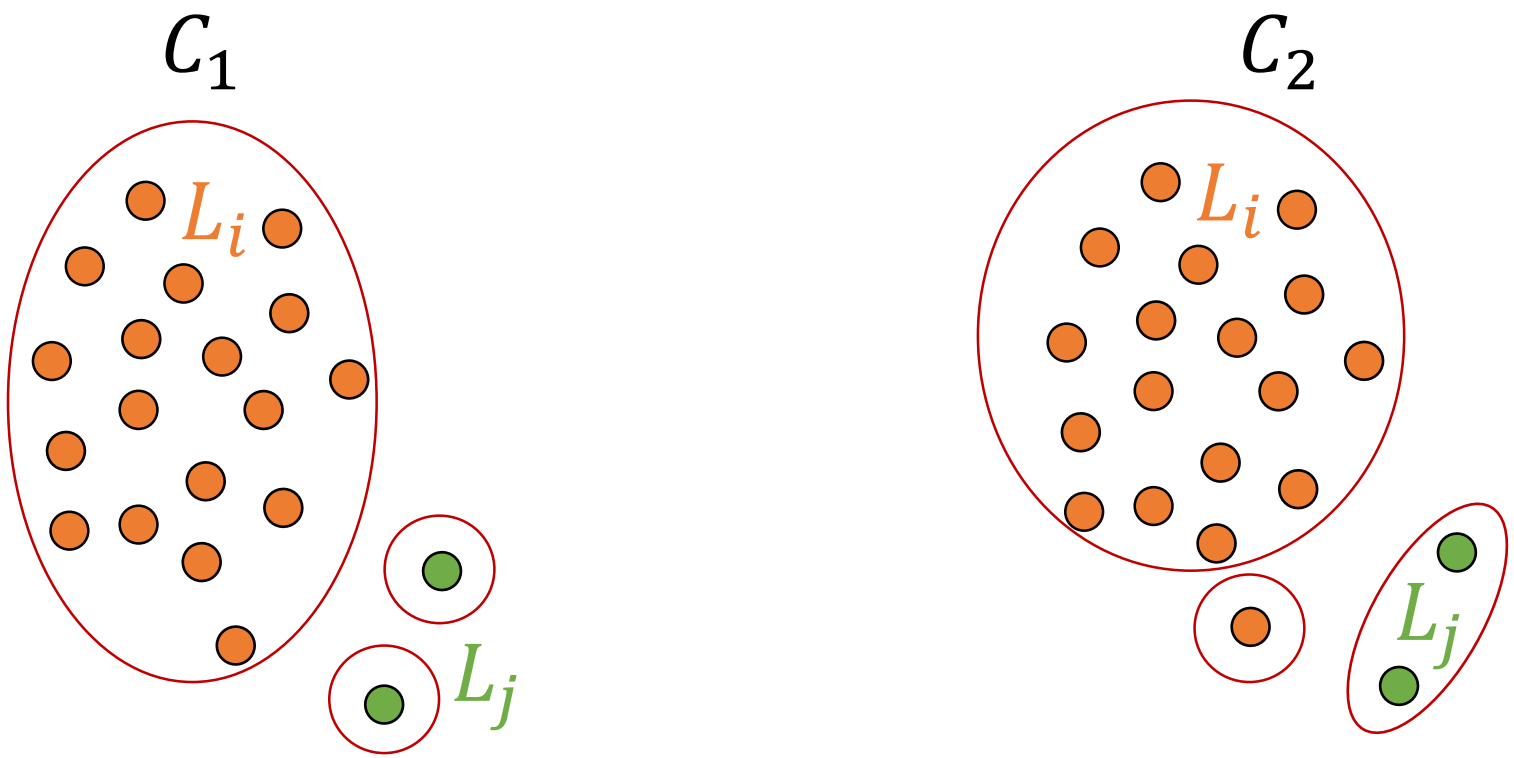
Согласованность объектов в кластерах

$$Q(C_1, C_g) < Q(C_2, C_g)$$



Сохранение маломощных кластеров

$$Q(C_1, C_g) < Q(C_2, C_g)$$



Точность и полнота кластеризации

- Кластеризуемые объекты: $D = \{x_1, \dots, x_n\}$
- Классы объектов: $L(x_i)$
- Кластеры объектов: $C(x_i)$
- Корректность кластеризации пары объектов:

$$Correct(x_i, x_j) = \begin{cases} 1, L(x_i) = L(x_j) \Leftrightarrow C(x_i) = C(x_j) \\ 0, \text{иначе} \end{cases}$$

Точность и полнота кластеризации

- $$BCubed\ precision = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{\sum_{\{x_j \in D\ |i \neq j \wedge C(x_i)=C(x_j)\}} Correct(x_i,x_j)}{|\{x_j \in D \mid i \neq j \wedge C(x_i)=C(x_j)\}|}$$

- $$BCubed\ recall = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{\sum_{\{x_j \in D|i \neq j \wedge L(x_i)=L(x_j)\}} Correct(x_i,x_j)}{|\{x_j \in D \mid i \neq j \wedge L(x_i)=L(x_j)\}|}$$

Литература

- Han J., Kamber M., Pei J. Data Mining: Concepts and Techniques. 3rd Edition. Morgan Kaufmann, 2012. 740 p. ISBN 978-0123814791

  10.6 Evaluation of Clustering, pp. 483-490

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

  7.5 Cluster Evaluation, pp. 571-612