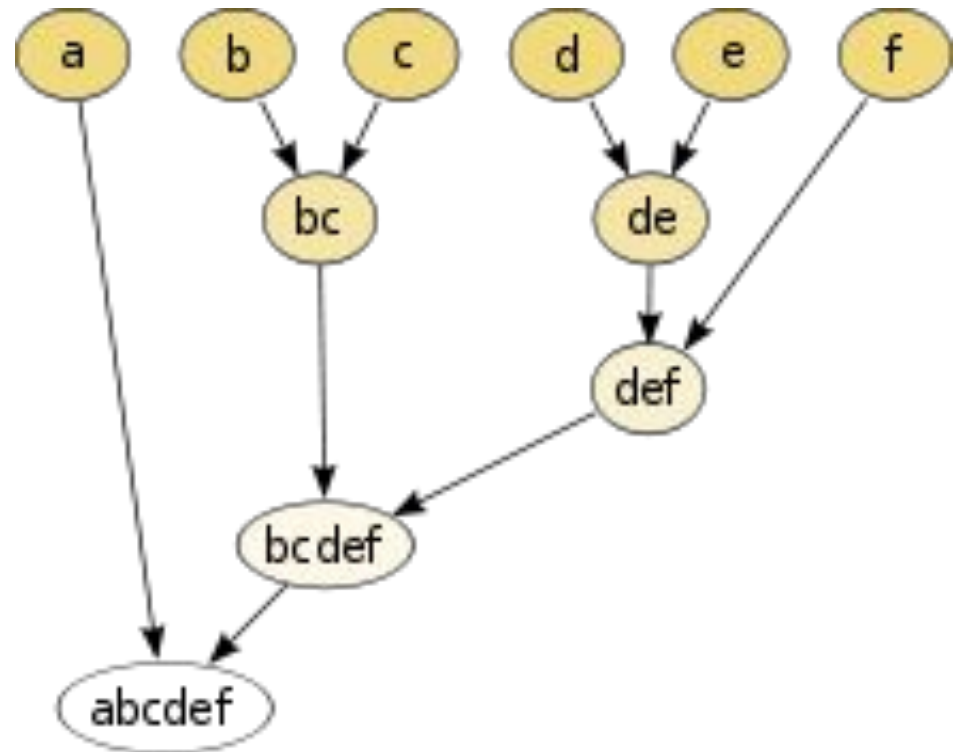


Иерархическая кластеризация

Камалов М.В.

- Иерархическая кластеризация – алгоритмы таксономии (биологическая таксономия)



- Дендограмма

- Многомерное шкалирование
- Карты Кохонена

Типы иерархической кластеризации

- Дивизимный (нисходящий)
- Алгомеративный (восходящий)

Расстояния между

- **кластерами**
для одноэлементных кластеров

$$R(\{x\}, \{x'\}) = \rho(x, x').$$

- Универсальная формула расстояние между кластерами. Ланс и Уильямс 1967 году

$$R(U \cup V, S) = \alpha_U R(U, S) + \alpha_V R(V, S) + \beta R(U, V) + \gamma |R(U, S) - R(V, S)|,$$

Расстояние на практике

Расстояние ближнего соседа:

$$R^b(W, S) = \min_{w \in W, s \in S} \rho(w, s); \quad \alpha_U = \alpha_V = \frac{1}{2}, \beta = 0, \gamma = -\frac{1}{2}.$$

Расстояние дальнего соседа:

$$R^d(W, S) = \max_{w \in W, s \in S} \rho(w, s); \quad \alpha_U = \alpha_V = \frac{1}{2}, \beta = 0, \gamma = \frac{1}{2}.$$

Среднее расстояние:

$$R^c(W, S) = \frac{1}{|W||S|} \sum_{w \in W} \sum_{s \in S} \rho(w, s); \quad \alpha_U = \frac{|U|}{|W|}, \alpha_V = \frac{|V|}{|W|}, \beta = \gamma = 0.$$

Расстояние между центрами:

$$R^u(W, S) = \rho^2 \left(\sum_{w \in W} \frac{w}{|W|}, \sum_{s \in S} \frac{s}{|S|} \right); \quad \alpha_U = \frac{|U|}{|W|}, \alpha_V = \frac{|V|}{|W|}, \beta = -\alpha_U \alpha_V, \gamma = 0.$$

Расстояние Уорда:

$$R^y(W, S) = \frac{|S||W|}{|S|+|W|} \rho^2 \left(\sum_{w \in W} \frac{w}{|W|}, \sum_{s \in S} \frac{s}{|S|} \right); \quad \alpha_U = \frac{|S|+|U|}{|S|+|W|}, \alpha_V = \frac{|S|+|V|}{|S|+|W|}, \beta = \frac{-|S|}{|S|+|W|}, \gamma = 0.$$

Агломеративная кластеризация Ланса-Уильямса

- 1: инициализировать множество кластеров C_1 :
 $t := 1; C_t = \{\{x_1\}, \dots, \{x_\ell\}\};$
- 2: **для всех** $t = 2, \dots, \ell$ (t — номер итерации):
- 3: найти в C_{t-1} два ближайших кластера:
 $(U, V) := \arg \min_{U \neq V} R(U, V);$
 $R_t := R(U, V);$
- 4: изъять кластеры U и V , добавить слитый кластер $W = U \cup V$:
 $C_t := C_{t-1} \cup \{W\} \setminus \{U, V\};$
- 5: **для всех** $S \in C_t$
- 6: вычислить расстояние $R(W, S)$ по формуле Ланса-Уильямса;

СВОЙСТВО МОНОТОННОСТИ

$$R_2 \leq R_3 \leq \dots \leq R_\ell.$$

- Теорема Миллигана 1997г.
 - 1) $\alpha_U \geq 0, \alpha_V \geq 0;$
 - 2) $\alpha_U + \alpha_V + \beta \geq 1;$
 - 3) $\min\{\alpha_U, \alpha_V\} + \gamma \geq 0.$
- Из перечисленных выц R^u не является
МОНОТОННЫМ

Свойства растяжения и сжатия

- Растягивающие R^d и R^y
- Сжимающие R^b
- Сохраняющие метрику пространств R^c и R^z
- Определяется через отношения $R_t / \rho(\mu_U, \mu_V)$
- Гибкое расстояние

$$\alpha_U = \alpha_V = (1 - \beta)/2, \quad \gamma = 0, \quad \beta < 1.$$
$$\beta = -0,25$$

Свойство редуктивности

- Ускорение алгоритма кластеризации

$$\{(U, V) : R(U, V) \leq \delta\}$$

- Определение Брюиноша 1978г.

$$\{S \mid R(U \cup V, S) < \delta, R(U, V) \leq \delta\} \subseteq \{S \mid R(S, U) < \delta \text{ или } R(S, V) < \delta\}.$$

- Теорема Диде и Моро 1984г.

1) $\alpha_U \geq 0, \alpha_V \geq 0;$

2) $\alpha_U + \alpha_V + \min\{\beta, 0\} \geq 1;$

3) $\min\{\alpha_U, \alpha_V\} + \gamma \geq 0.$

Быстрая агломеративная кластеризация на основе

НЕЛЮКТИВНОСТИ

- 1: инициализировать множество кластеров C_1 :
 $t := 1; C_t = \{\{x_1\}, \dots, \{x_\ell\}\};$
- 2: выбрать начальное значение параметра δ ;
- 3: $P(\delta) := \{(U, V) \mid U, V \in C_t, R(U, V) \leq \delta\};$
- 4: **для всех** $t = 2, \dots, \ell$ (t — номер итерации):
- 5: **пока** $P(\delta) = \emptyset$
- 6: увеличить δ ;
- 7: найти в $P(\delta)$ пару ближайших кластеров:
 $(U, V) := \arg \min_{(U, V) \in P(\delta)} R(U, V);$
 $R_t := R(U, V);$
- 8: изъять кластеры U и V , добавить слитый кластер $W = U \cup V$:
 $C_t := C_{t-1} \cup \{W\} \setminus \{U, V\};$
- 9: **для всех** $S \in C_t$
- 10: вычислить расстояние $R(W, S)$ по формуле Ланса-Уильямса;
- 11: **если** $R(W, S) \leq \delta$ **то**
- 12: $P(\delta) := P(\delta) \cup \{(W, S)\};$

Определение числа кластеров

- Число кластеров $K = \ell - t + 1$.

- Ограничение $K_0 \leq K \leq K_1$

- Выбор количество t множеств

$$\ell - K_1 + 1 \leq t \leq \ell - K_0 + 1.$$

Достоинства и недостатки

- Метод ближнего соседа обладает цепочечным эффектом
- Метод дальнего соседа на раннем этапе может объединять довольно несхожие группы
- Метод расстояния между центрами масс «золотая середина»
- Метод Уорда чаще восстанавливает наилучшую кластеризацию

ИСТОЧНИКИ

- <http://www.ccas.ru/voron/download/Clustering.pdf>
- <https://yadi.sk/i/MelajPEXcG84H>
- <http://logic.pdmi.ras.ru/~sergey/teaching/ml/11-cluster.pdf>

Спасибо за внимание!