Klaszterezés, 2. rész

Csima Judit

BME, VIK,
Számítástudományi és Információelméleti Tanszék

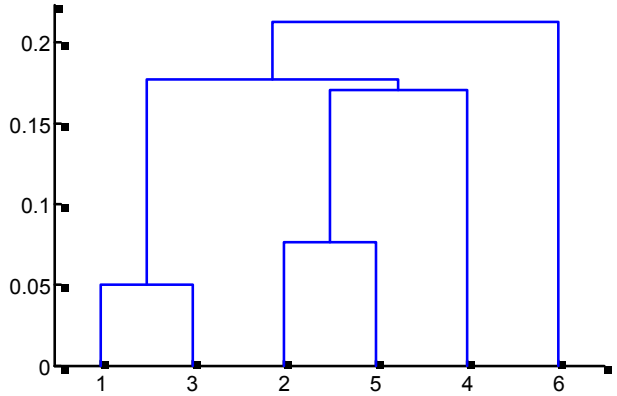
2017. április 24.

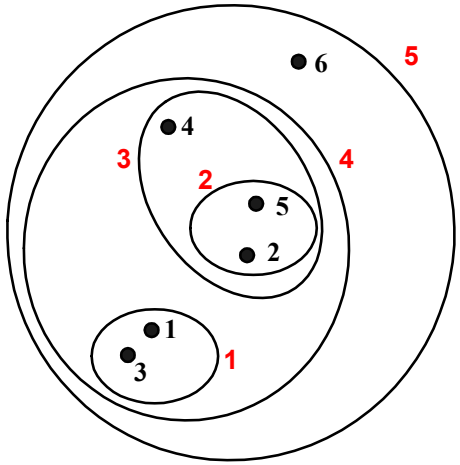
Hierarchikus klaszterezés

- egymásba ágyazott klasztereket hoz létre
- nem kell előre megmondani, hogy hány klasztert szeretnénk, a teljes algo futása után a dendogram vágásaival lehet előállítani különböző számú klasztereket
- két fő fajtája van: agglomerative és divisive

Hierarchical Clustering

- Produces a set of nested clusters organized as a hierarchical tree
- Can be visualized as a dendrogram
  - A tree like diagram that records the sequences of merges or splits





Két fajta hierarchikus klaszterzés

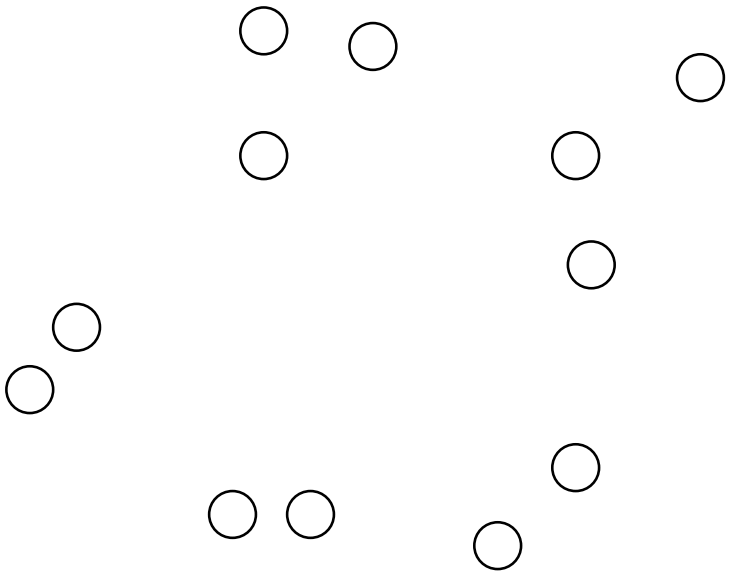
- agglomerative:
  - az elején minden ponz külön klaszter
  - minden lépésben összevonom a két legközelebbi klasztert
- divisive:
  - az elején egy klaszter van az összes ponttal
  - minden lépésben valahogy szétvágom az egyik klasztert

Agglomerative clustering

- kell egy távolságfogalom (vagy hasonlóság) a pontokra: L_2 pl.
- azt is kell definiálnom, hogy mi lesz két klaszter távolsága: sok lehetőség, mindjárt nézzük őket, ezt tároljuk a proximity matrix-ban (itt is tárolhatok hasonlóságot vagy távolságot)
- algo:
  - az elején minden csúcs egy klaszter, a proximity matrix a pontok közti távolságot vagy hasonlóságot tartalmazza
  - amíg egynél több klaszter van: kiválasztom a két legközelebbi (leghasonlóbb) klasztert, összevonom őket és frissítem a proximity matrix-ot

Starting Situation

- Start with clusters of individual points and a proximity matrix

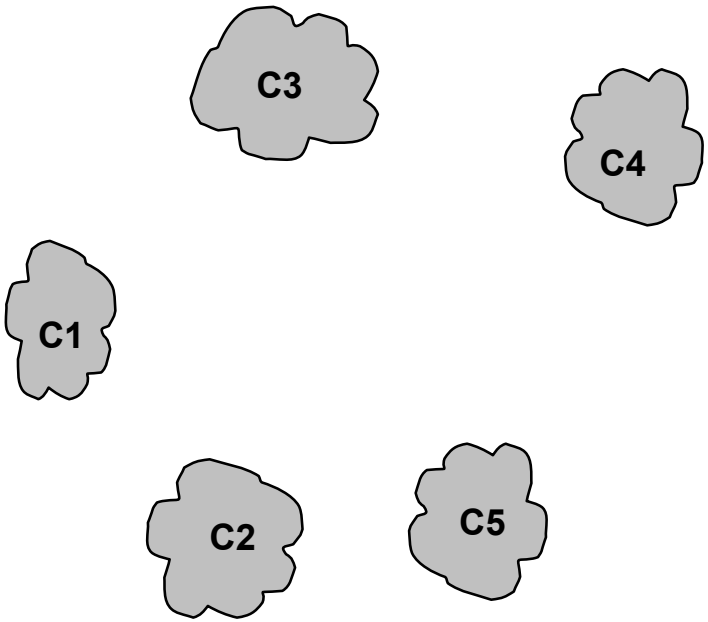


	p1	p2	p3	p4	p5	. . .
p1						
p2						
p3						
p4						
p5						
.						
.						
.						

Proximity Matrix

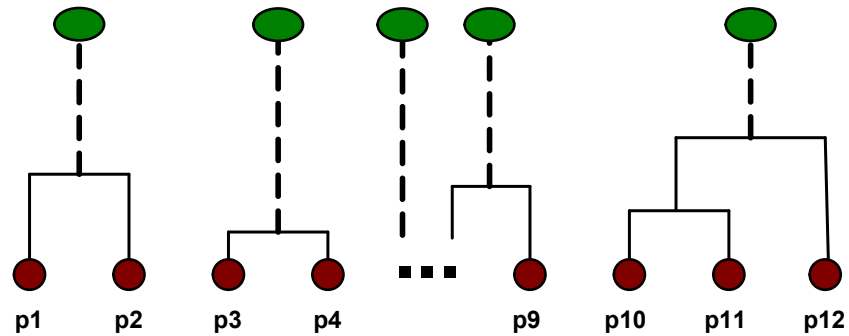
Intermediate Situation

- After some merging steps, we have some clusters



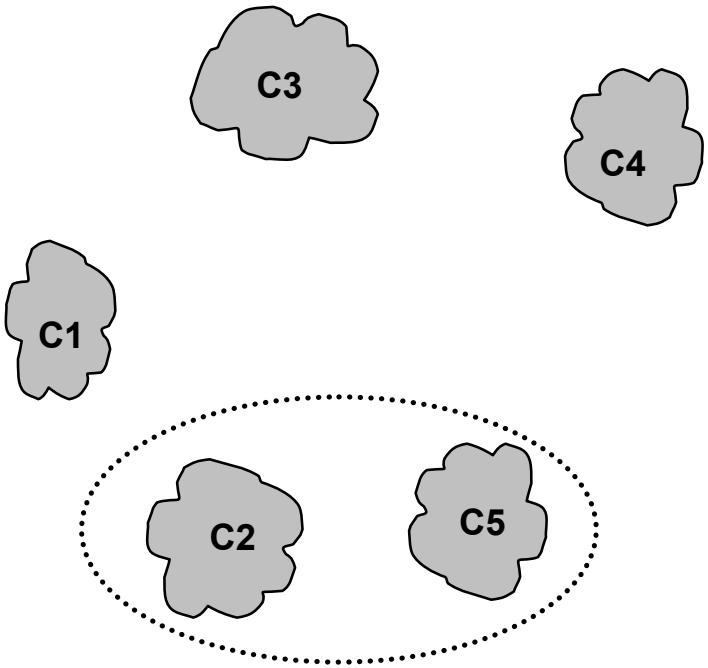
	C1	C2	C3	C4	C5
C1					
C2					
C3					
C4					
C5					

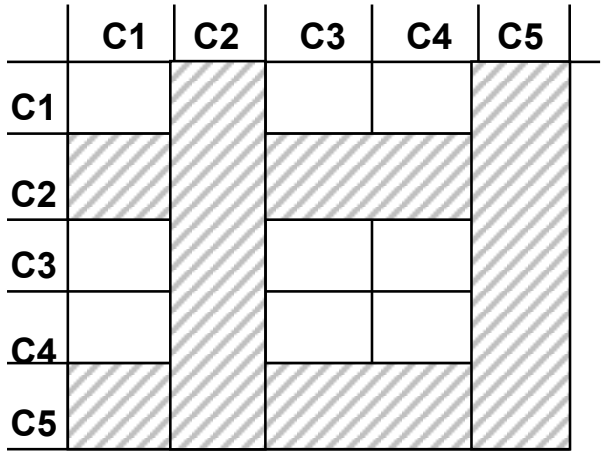
Proximity Matrix



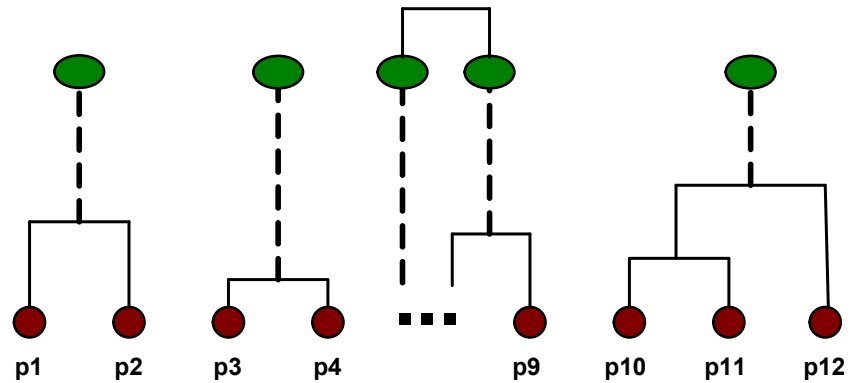
Intermediate Situation

- We want to merge the two closest clusters (C2 and C5) and update the proximity matrix.



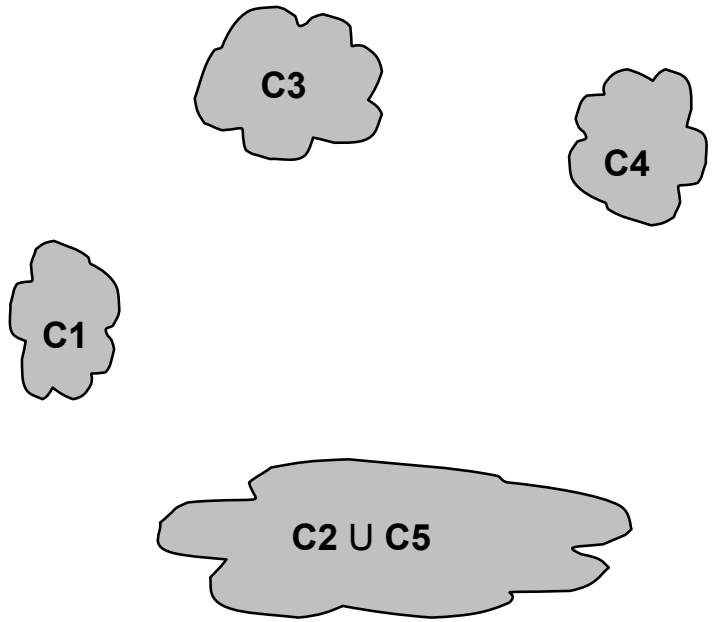


Proximity Matrix



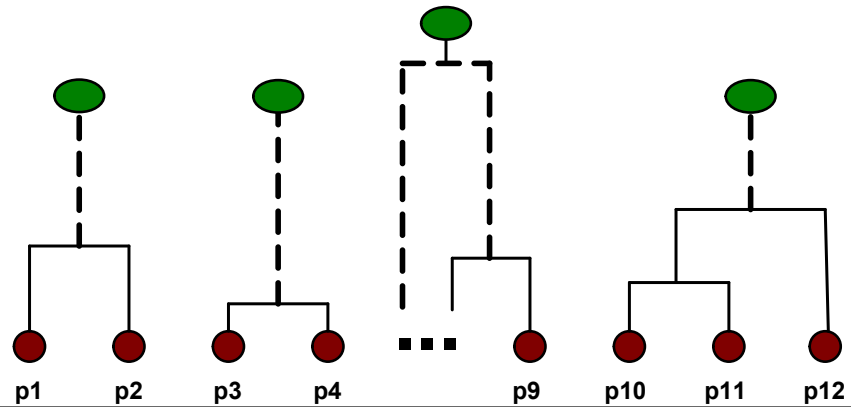
After Merging

- The question is “How do we update the proximity matrix?”



	C1	C2 U C5	C3	C4
C1		?		
C2 U C5	?	?	?	?
C3		?		
C4		?		

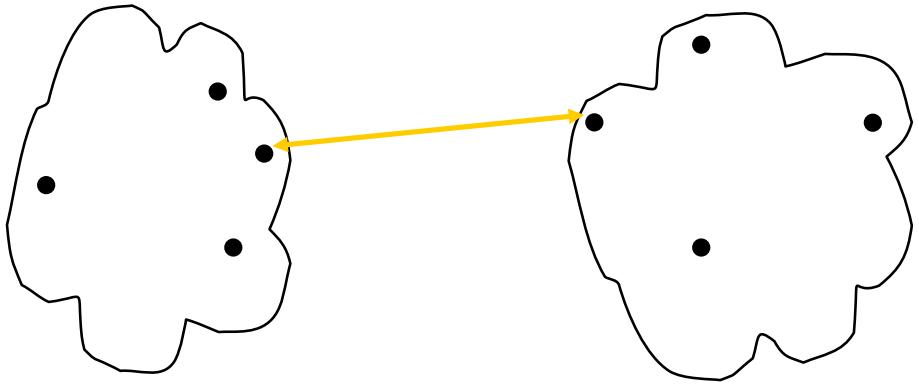
Proximity Matrix



Hogyan definiáljuk két klaszter távolságát?

- MIN vagy single link:
  két klaszter távolsága/hasonlósága = a legkisebb távolság/legnagyobb hasonlóság, ami felvevődik két, külön klaszterben levő pont között
- MAX vagy complete link:
  két klaszter távolsága = a legnagyobb távolság/legkisebb hasonlóság, ami felvevődik két, külön klaszterben levő pont között

How to Define Inter-Cluster Similarity

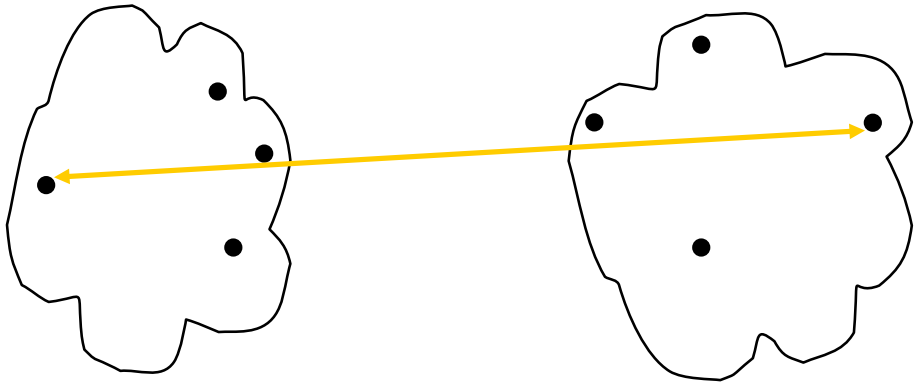


	p1	p2	p3	p4	p5	. . .
p1						
p2						
p3						
p4						
p5						
.						
.						
.						

Proximity Matrix

- MIN
- MAX
- Group Average
- Distance Between Centroids
- Other methods driven by an objective function
  - Ward's Method uses squared error

How to Define Inter-Cluster Similarity



	p1	p2	p3	p4	p5	. . .
p1						
p2						
p3						
p4						
p5						
.						
.						
.						

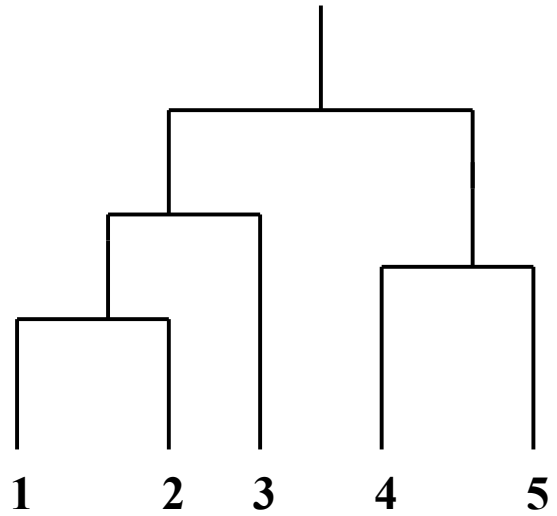
Proximity Matrix

- MIN
- MAX
- Group Average
- Distance Between Centroids
- Other methods driven by an objective function
  - Ward's Method uses squared error

Cluster Similarity: MIN or Single Link

- Similarity of two clusters is based on the two most similar (closest) points in the different clusters
  - Determined by one pair of points, i.e., by one link in the proximity graph.

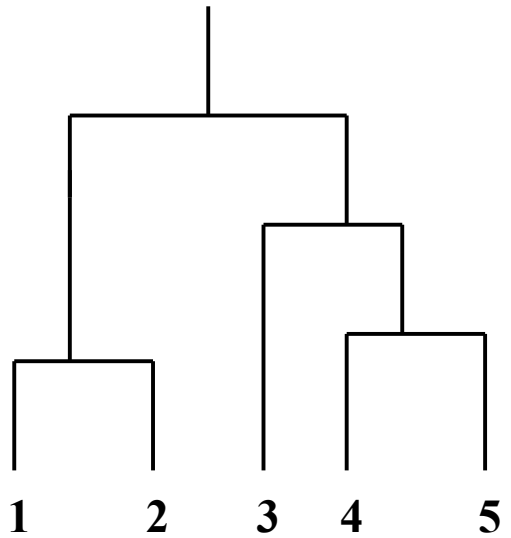
	I1	I2	I3	I4	I5
I1	1.00	0.90	0.10	0.65	0.20
I2	0.90	1.00	0.70	0.60	0.50
I3	0.10	0.70	1.00	0.40	0.30
I4	0.65	0.60	0.40	1.00	0.80
I5	0.20	0.50	0.30	0.80	1.00



Cluster Similarity: MAX or Complete Linkage

- Similarity of two clusters is based on the two least similar (most distant) points in the different clusters
  - Determined by all pairs of points in the two clusters

	I1	I2	I3	I4	I5
I1	1.00	0.90	0.10	0.65	0.20
I2	0.90	1.00	0.70	0.60	0.50
I3	0.10	0.70	1.00	0.40	0.30
I4	0.65	0.60	0.40	1.00	0.80
I5	0.20	0.50	0.30	0.80	1.00



Klaszterek távolsága - átlagos távolság

- átlagos távolság: minden nem egy klaszterben levő pontpár távolságát figyelembe vesszük, ezt átlagoljuk
- $dist(C_i, C_j) = \dfrac{\sum_{p \in C_i, q \in C_j} dist(p, q)}{|C_i||C_j|}$
- ugyanez mehet hasonlósággal is távolság helyett

Klaszterek távolsága centroidok használatával

- centroidok távolsága alapján összevonni: a legközelebbi centroidpárhoz tartozó klaszterek vonódnak össze
- Ward's method: azt a két klasztert vonjuk össze, amelyik esetén az SSE legkevésbé nő

Hierarchikus klaszterezés: előnyök, hátrányok

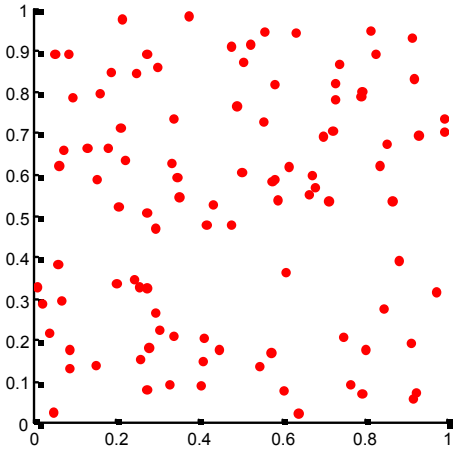
- ha két klasztert összevonok, azt már nem lehet visszacsinálni: érzékeny a zajra és outlier-ekre
- n pont esetén $O(n^3)$ a lépésszám, mert legfeljebb n darab $O(n^2)$-es menet van
- ha a klaszterezési feladat egy hirarchia keresést jelent (pl. taxonómia), akkor pont jó ez
- klaszterszám meghatározható az algo futása után
- sokszor Kmeans-szel együtt használják: egy kisebb mintán hierarchikus klaszterezés, az így kapott klaszterek centroidjaival kezdve pedig egy Kmeans ezután

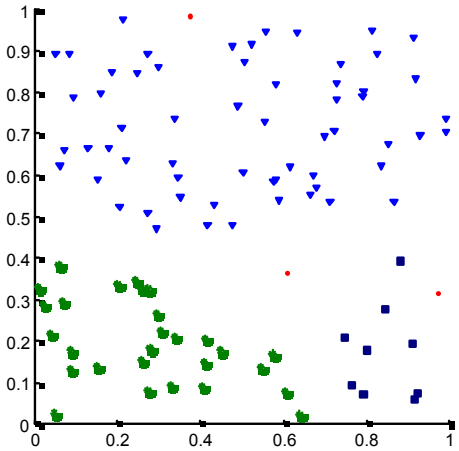
Klaszterezés értékelése, motiváció

- szeretnénk valahogyan mérni, hogy mennyire jó egy klaszterzés
- miért?
  - el akarjuk kerülni, hogy ott is klasztert lássunk, ahol nincs: vannak-e valós klaszterek az adatban vagy csak mi találtunk?
  - két különböző klaszterezést ill. klaszterező algoritmust össze akarunk hasonlítani
- ez nehezebb, mint az osztályozás esetén volt

Clusters found in Random Data

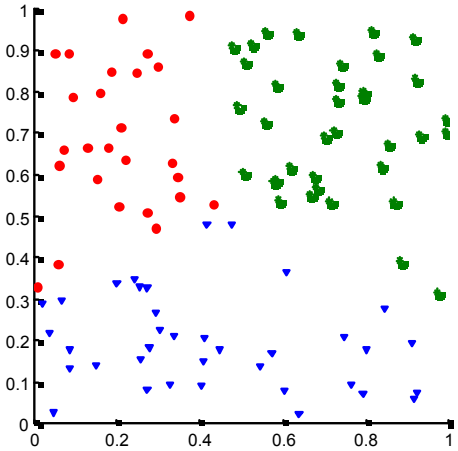
Random Points

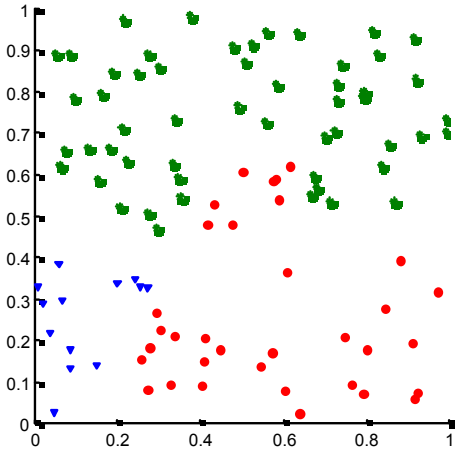




DBSCAN

K-means





Complete Link

Nehézségek

- osztályozásnál volt jó mérőszám: ismertek a valódi címkék, ezek alapján accuracy, precision, recall, F-measure
- most (általában) külső segítség nélkül, csak az adatok alapján kell megítélni egy klaszterezés jóságát
- több megközelítés van

Lehetséges értékelés külső címkéket használva

- van valami címkézés, ami ismert (szakértő is osztályozta az eseteket)
- ekkor hasonló van, mint az osztályozás: entrópia, purity, F-measure
- csak itt a címke a klaszter neve és az a kérdés, hogy ez mennyire esik egybe a szakértő csoportosításával

External Measures of Cluster Validity: Entropy and Purity

Table 5.9. K-means Clustering Results for LA Document Data Set

Cluster	Entertainment	Financial	Foreign	Metro	National	Sports	Entropy	Purity
1	3	5	40	506	96	27	1.2270	0.7474
2	4	7	280	29	39	2	1.1472	0.7756
3	1	1	1	7	4	671	0.1813	0.9796
4	10	162	3	119	73	2	1.7487	0.4390
5	331	22	5	70	13	23	1.3976	0.7134
6	5	358	12	212	48	13	1.5523	0.5525
Total	354	555	341	943	273	738	1.1450	0.7203

entropy For each cluster, the class distribution of the data is calculated first, i.e., for cluster j we compute p_{ij}, the 'probability' that a member of cluster j belongs to class i as follows: $p_{ij} = m_{ij}/m_j$, where m_j is the number of values in cluster j and m_{ij} is the number of values of class i in cluster j. Then using this class distribution, the entropy of each cluster j is calculated using the standard formula $e_j = \sum_{i=1}^{L} p_{ij} \log_2 p_{ij}$, where the L is the number of classes. The total entropy for a set of clusters is calculated as the sum of the entropies of each cluster weighted by the size of each cluster, i.e., $e = \sum_{i=1}^{K} \frac{m_i}{m} e_j$, where m_j is the size of cluster j, K is the number of clusters, and m is the total number of data points.

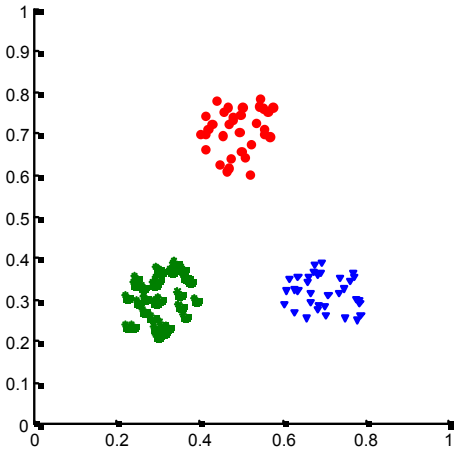
purity Using the terminology derived for entropy, the purity of cluster j, is given by $purity_j = \max p_{ij}$ and the overall purity of a clustering by $purity = \sum_{i=1}^{K} \frac{m_i}{m} purity_j$.

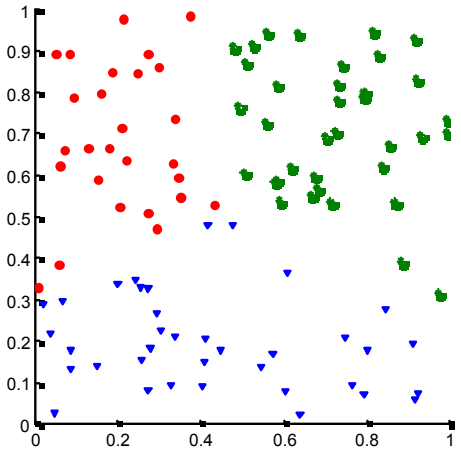
Proximity matrix-szal vett korreláció

- proximity matrix: ki kihez van közel, két pont mennyire hasonló
- klasztermátrix (incidence matrix) : $A_{ij} = 1$, ha a két pont ugyanott van és 0, ha nem
- nézzük meg, hogy ez a két mátrix mennyire hasonló
- hogyan nézzük meg?
  - korreláció
  - a szemünkkel

Measuring Cluster Validity Via Correlation

- Correlation of incidence and proximity matrices for the K-means clusterings of the following two data sets.



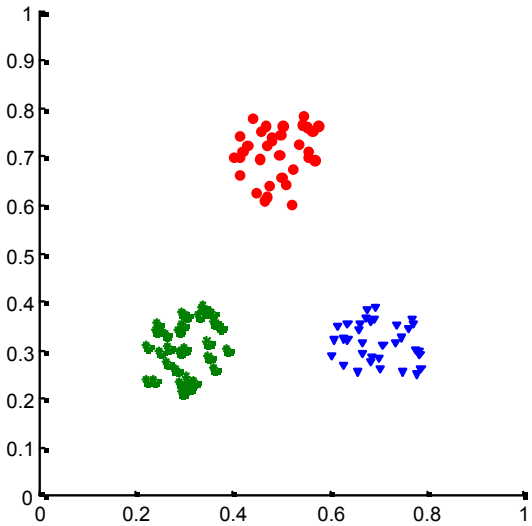


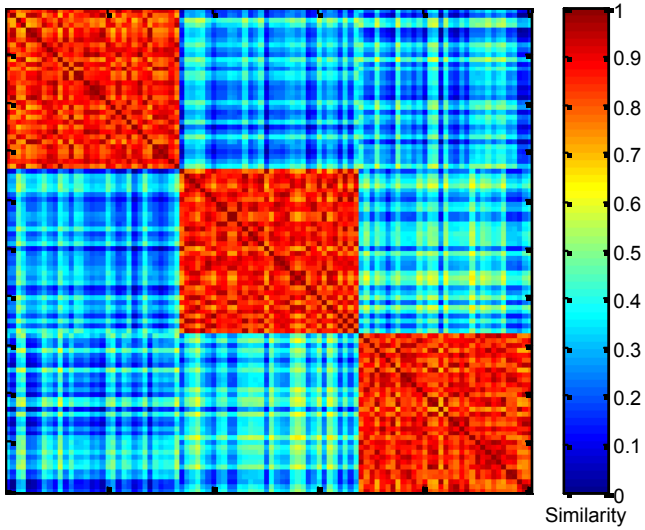
Corr = -0.9235

Corr = -0.5810

Using Similarity Matrix for Cluster Validation

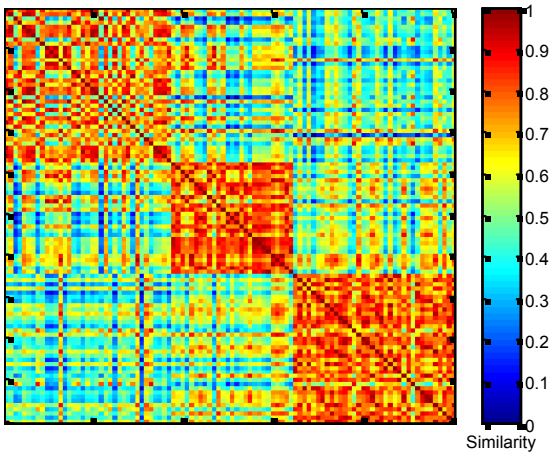
- Order the similarity matrix with respect to cluster labels and inspect visually.

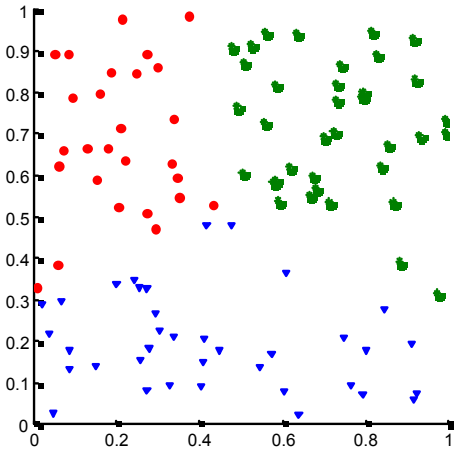




Using Similarity Matrix for Cluster Validation

- Clusters in random data are not so crisp

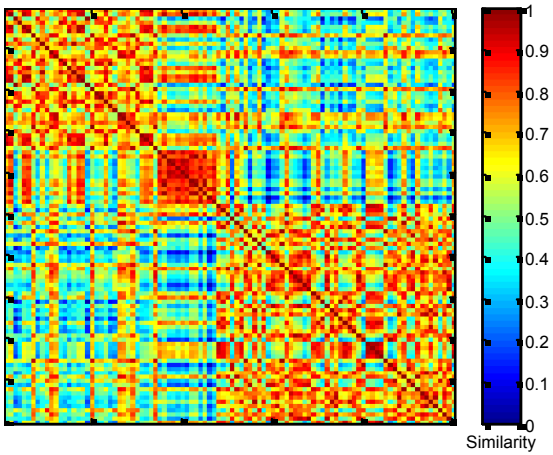


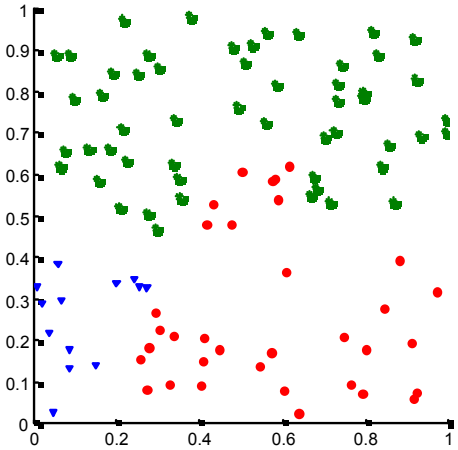


K-means

Using Similarity Matrix for Cluster Validation

- Clusters in random data are not so crisp





Complete Link

SSE használata a klaszterezés értékelésére

- két klaszterezés összehasonlítható így: melyiknek kisebb az SSE-je?
- egy adott klaszterezés jóságának megítélése:
  - mekkora az esélye, hogy egy adott elemszámú random mintában ekkora SSE jön ki?
  - ehhez generálok sok véletlen mintát és megnézem, hogy milyen eloszlás lesz az SSE-re
  - ha úgy tűnik, hogy kicsi annak az esélye, hogy véletlenül olyan kicsi SSE jön ki, mint a miénk, akkor ez vleg egy jó klaszterezés

Statistical Framework for SSE

- Example
  - Compare SSE of 0.005 against three clusters in random data
  - Histogram shows SSE of three clusters in 500 sets of random data points of size 100 distributed over the range 0.2 – 0.8 for x and y values