



Занятие 9

Кластеризация

10 апреля 2013



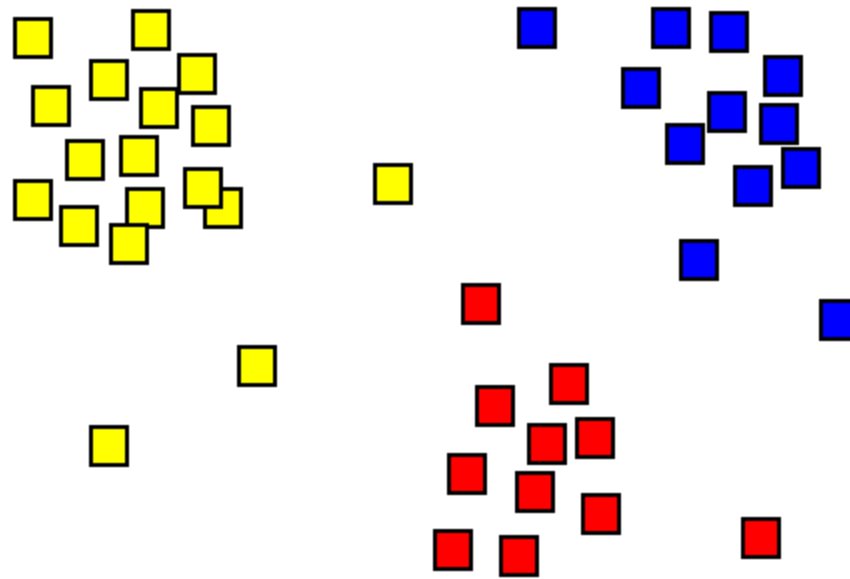
Overview

- Понятие кластеризации
- Меры расстояний
- Классификация алгоритмов

Кластеризация (или кластерный анализ) — это задача разбиения множества объектов на группы, называемые **кластерами**.

Внутри каждой группы должны оказаться «похожие» объекты, а объекты разных группы должны быть как можно более отличны.

Например:



Меры расстояний

- ✓ Евклидово расстояние

Наиболее распространенная функция расстояния. Представляет собой геометрическое расстояние в многомерном пространстве:

$$\rho(x, x') = \sqrt{\sum_i^n (x_i - x'_i)^2}$$

- ✓ Квадрат евклидова расстояния

Применяется для придания большего веса более отдаленным друг от друга объектам. Это расстояние вычисляется следующим образом:

$$\rho(x, x') = \sum_i^n (x_i - x'_i)^2$$

✓ Расстояние городских кварталов (манхэттенское расстояние)

В большинстве случаев эта мера расстояния приводит к таким же результатам, как и для обычного расстояния Евклида. Однако для этой меры влияние отдельных больших разностей (выбросов) уменьшается (т.к. они не возводятся в квадрат).

$$\rho(x, x') = \sum_i^n |x_i - x'_i|$$

✓ Расстояние Чебышева

Это расстояние может оказаться полезным, когда нужно определить два объекта как «различные», если они различаются по какой-либо одной координате.

$$\rho(x, x') = \max(|x_i - x'_i|)$$

✓ Матрицы корреляций

В R есть встроенная функция `dist()` для подсчета расстояний между строками матрицы:

```
dist(x, method="euclidean", diag=FALSE, upper=FALSE)
```

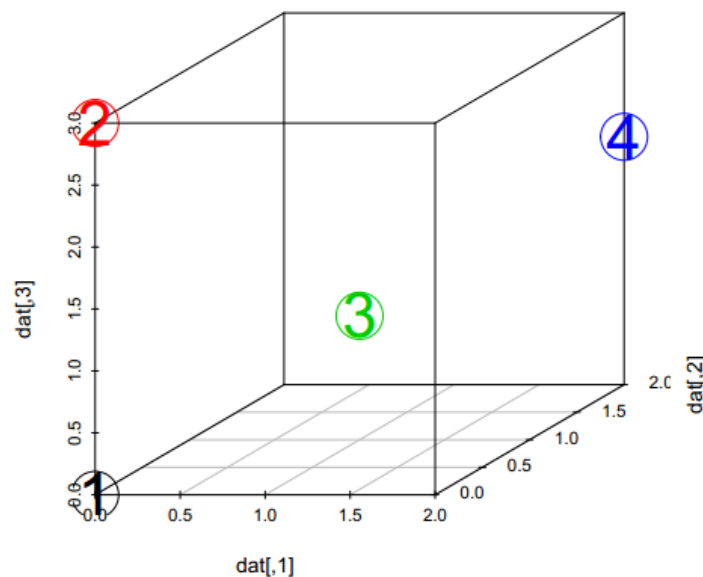
Методы:

"euclidean", "maximum", "manhattan", "canberra", "binary" или "minkowski"

```
dat <- rbind(samp1=c(0,0,0), samp2=c(0,0,3), samp3=c(1,1,1),  
            samp4=c(2,2,2))
```

dat

	[, 1]	[, 2]	[, 3]
samp1	0	0	0
samp2	0	0	3
samp3	1	1	1
samp4	2	2	2



```
> dist(dat, method="euclidian")
      samp1      samp2      samp3
samp2 3.000000
samp3 1.732051 2.449490
samp4 3.464102 3.000000 1.732051
```

```
> as.matrix(dist(dat, method="euclidian"))
      samp1      samp2      samp3      samp4
samp1 0.000000 3.000000 1.732051 3.464102
samp2 3.000000 0.000000 2.449490 3.000000
samp3 1.732051 2.449490 0.000000 1.732051
samp4 3.464102 3.000000 1.732051 0.000000
```

Какие бывают алгоритмы кластеризации

- ✓ Иерархические алгоритмы (также называемые алгоритмами таксономии) строят не одно разбиение выборки на непересекающиеся кластеры, а систему вложенных разбиений.

На выходе мы получаем **дерево кластеров**, корнем которого является вся выборка, а листьями — наиболее мелкие кластера.

- ✓ Неиерархические («плоские») алгоритмы строят одно разбиение объектов на кластеры.

Алгоритмы иерархической кластеризации

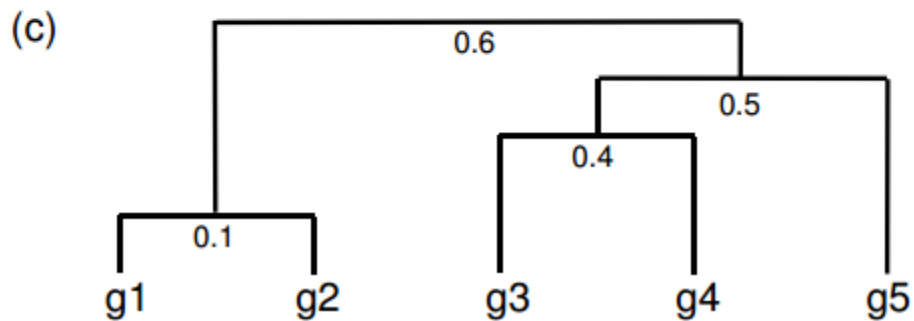
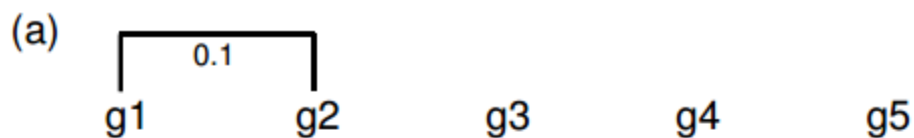
Два основных типа: восходящие и нисходящие алгоритмы.

- ✓ Нисходящие алгоритмы работают по принципу «сверху-вниз»: в начале все объекты помещаются в один кластер, который затем разбивается на все более мелкие кластеры. **top-down**
- ✓ Восходящие алгоритмы в начале работы помещают каждый объект в отдельный кластер, а затем объединяют кластеры во все более крупные, пока все объекты выборки не будут содержаться в одном кластере. **bottom-up**

Таким образом строится система вложенных разбиений. Результаты таких алгоритмов обычно представляют в виде дерева – дендрограммы. Классический пример такого дерева – классификация животных и растений.

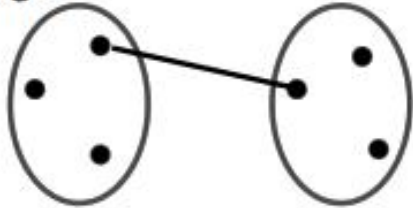
Bottom-up

1. Найти 2 кластера (или объекта) с наименьшим расстоянием между ними
2. Объединить их в один кластер
3. Пересчитать расстояния между кластерами
4. Вернуться к шагу 1



Как вычислять «расстояния» между кластерами?

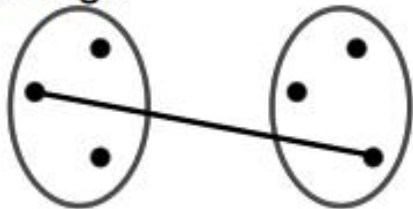
Single Linkage



Одиночная связь (расстояния ближайшего соседа)

Результирующие кластеры имеют тенденцию объединяться в цепочки.

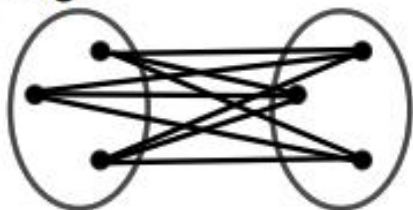
Complete Linkage



Полная связь (расстояние наиболее удаленных соседей)

работает очень хорошо, когда объекты происходят из отдельных групп

Average Linkage



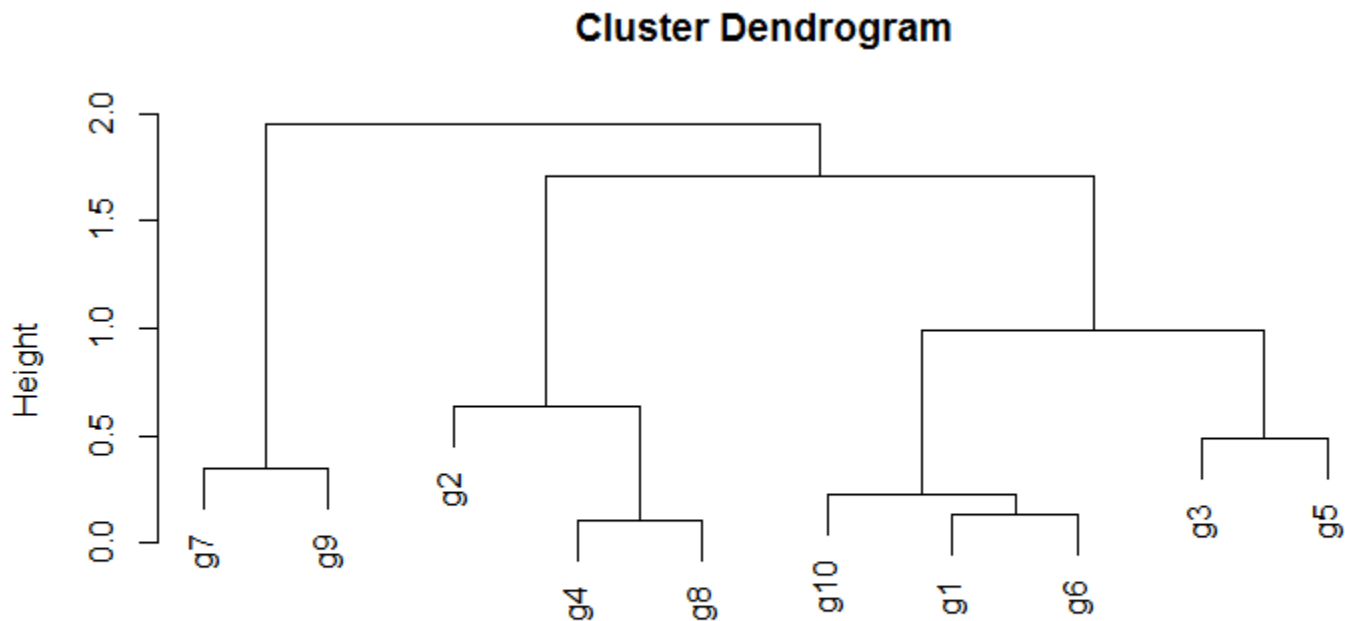
Взвешенное (**WPGMA** - weighted pair group method with averaging)

$$(AB) \text{ и } C+(DE) = (55 + 90) / 2 = 72.5$$

или невзвешенное (**UPGMA** - unweighted PGMA)
попарное среднее:

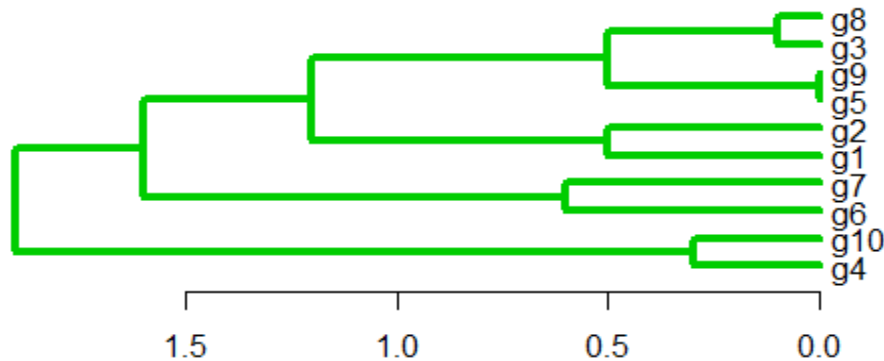
$$(AB) \text{ и } C+(DE) = (55 + 2 \times 90) / 3 = 78.33$$

```
y <- matrix(rnorm(50), 10, 5, dimnames=list(paste("g", 1:10, sep=""), paste("t", 1:5, sep=""))) # генерируем данные
c <- cor(t(y), method="spearman"); d <- as.dist(1-c)
hr <- hclust(d, method = "complete", members=NULL)
plot(hr)
```



```
as.dist(1 - cor(t(y), method = "pearson"))
hclust (*, "complete")
```

```
plot(as.dendrogram(hr), edgePar=list(col=3, lwd=4), horiz=T)
```



```
str(as.dendrogram(hr))
```

```
--[dendrogram w/ 2 branches and 10 members at h = 1.9]
|--[dendrogram w/ 2 branches and 2 members at h = 0.3]
| |--leaf "g4"
| `--leaf "g10"
`--[dendrogram w/ 2 branches and 8 members at h = 1.6]
|--[dendrogram w/ 2 branches and 2 members at h = 0.6]
| |--leaf "g6"
| `--leaf "g7"
`--[dendrogram w/ 2 branches and 6 members at h = 1.2]
|--[dendrogram w/ 2 branches and 2 members at h = 0.5]
| |--leaf "g1"
| `--leaf "g2"
`--[dendrogram w/ 2 branches and 4 members at h = 0.5]
|--[dendrogram w/ 2 branches and 2 members at h = 2.22e-16]
| |--leaf "g5"
| `--leaf "g9"
`--[dendrogram w/ 2 branches and 2 members at h = 0.1]
| |--leaf "g3"
| `--leaf "g8"
```

Выдача в виде скобочной структуры:

```
library(ctc); hc2Newick(hr)
```

```
"((g7:0.174726218492745,g9:0.174726218492745):0,((g2:0.26766991502818,(g4:0.0523033203513996,g8:0.0523033203513996):0.26766991502818):0,((g10:0.0444120439304247,(g1:0.0680271558561211,g6:0.0680271558561211):0.0444120439304247):0,(g3:0.243351630808965,g5:0.243351630808965):0):0);"
```

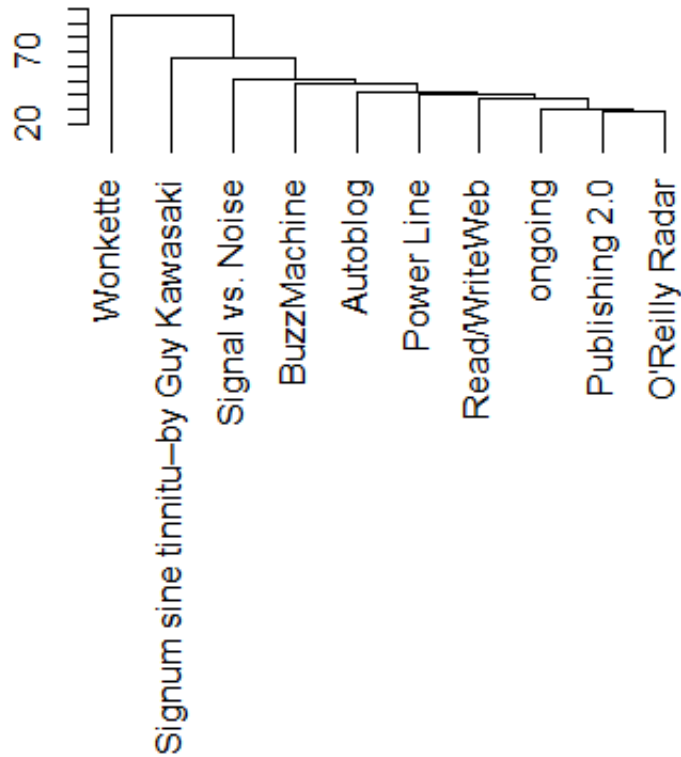
Анализ частоты встречаемости слов в блогах

```
idx <- sample(1:dim(blogdata)[1], 10)
blogdataSample <- blogdata[idx,]
blogdataSample$Blog <- NULL
hc <- hclust(dist(blogdataSample), method="single")
plot(hc, hang=-1, labels=blogdata$Blog[idx])
```

	Blog	china	kids	music	yahoo	want	wrong	service	tech	saying
8	GigaOM	6	0	0	2	1	0	3	1	0
63	456 Berea Street	0	0	0	0	10	3	1	0	0
3	Publishing 2.0	0	0	7	4	0	1	3	6	0
88	Derek Powazek	0	1	0	0	0	0	0	1	0
14	Online Marketing Report	0	0	0	3	0	0	0	0	0
66	TechEBlog	1	0	4	0	1	0	0	0	0
71	Dave Shea's mezzoblue	0	0	0	0	0	1	0	0	0
27	Gizmodo	2	0	6	1	0	0	0	2	0
79	Joi Ito's Web	0	0	4	2	0	0	3	0	0
65	Pharyngula	0	0	0	0	0	0	0	0	0

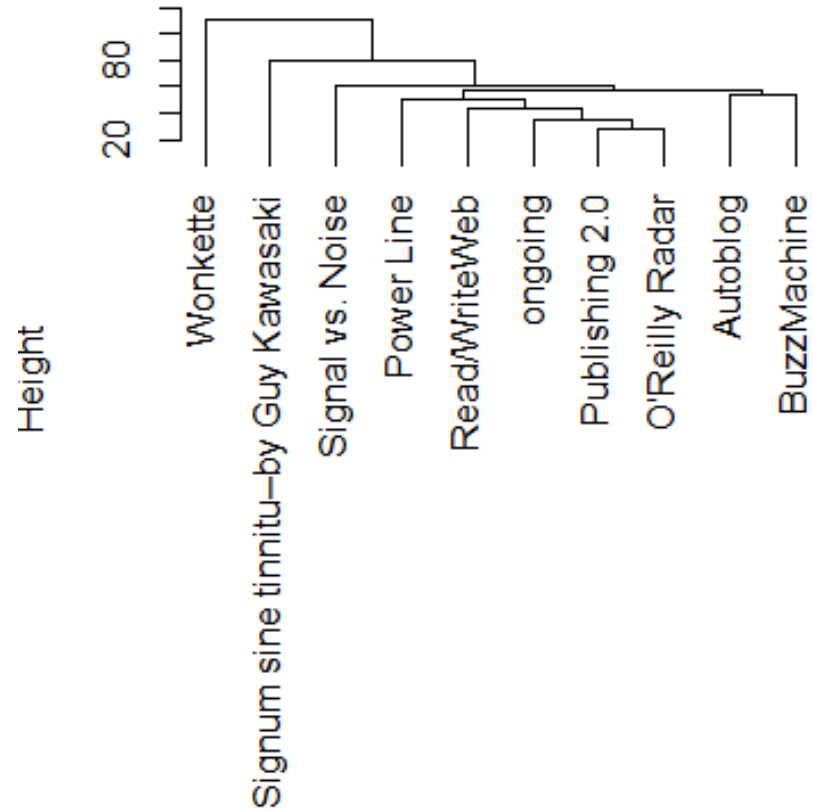
Данные можно скачать: <http://kiwitobes.com/clusters/blogdata.txt>

Cluster Dendrogram



```
dist(blogdataSample)  
hclust (*, "single")
```

Cluster Dendrogram



```
dist(blogdataSample)  
hclust (*, "complete")
```

```
hc <- hclust(dist(blogdataSample),  
method="single")
```

```
hc <- hclust(dist(blogdataSample),  
method="complete")
```


Еще полезные команды

✓ `cutree(tree, k = NULL, h = NULL)`

Обрезает дендрограмму так, чтобы получилось k кластеров или по определенной высоте h

✓ `heatmap()`

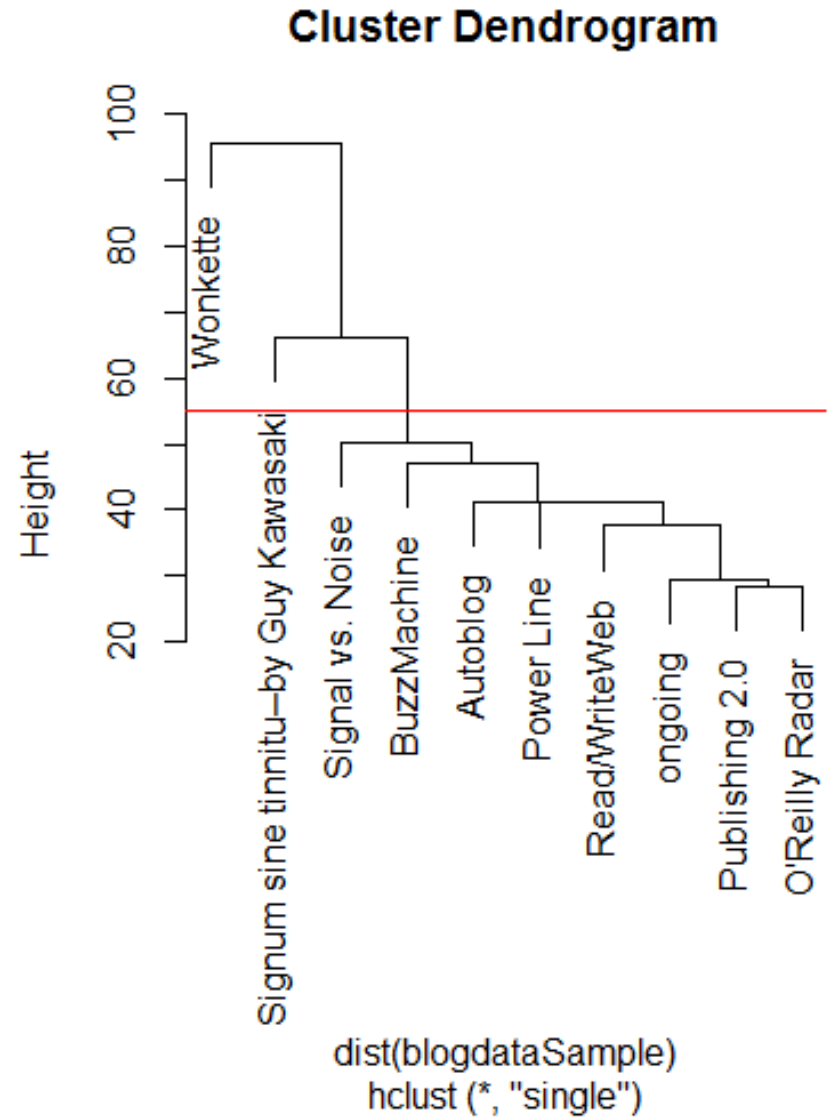
Строит heatmap, сверху и слева – дендрограмма для кластеризации по столбцам и по строкам.

Обрезаем дерево

```
mycl <- cutree(hc, k=3)  
plot(hc); abline(h=55, col="red")
```

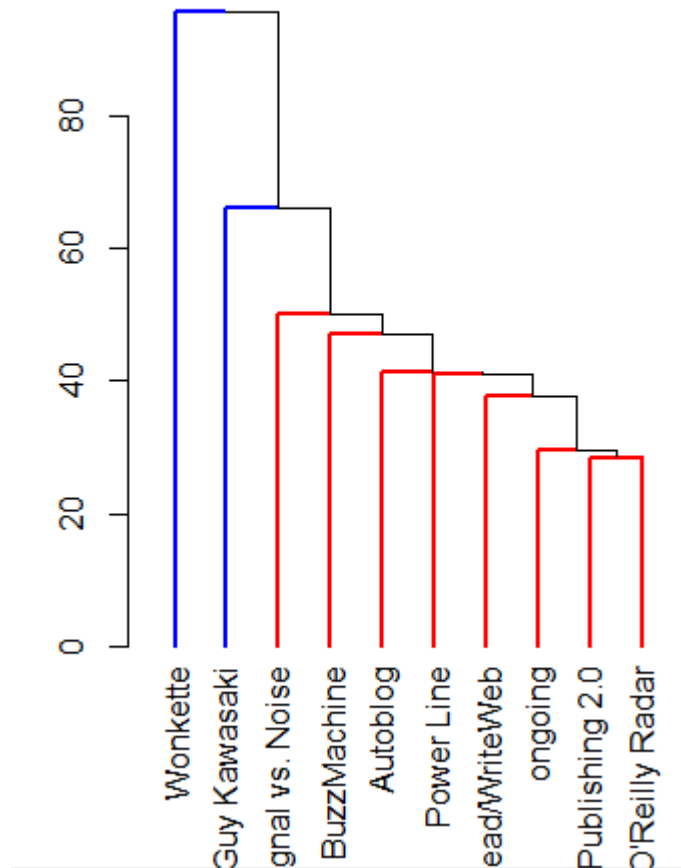
Дополнительные функции:

```
library(dynamicTreeCut)  
help(cutreeDynamic)
```



Красим ветки

```
dend_colored <- dendrapply(as.dendrogram(hc), dendroCol, keys=c("Wonkette", "Signum sine  
tinnitu--by Guy Kawasaki"), xPar="edgePar", bgr="red", fgr="blue", lwd=2, pch=20)  
plot(dend_colored)
```



Важно

- Даже для полностью случайных данных на выходе будет кластеризация
- Алгоритм «жадный», без итеративности, выборы, сделанные на ранних этапах будут сильно влиять на итог
- Дендрограмма не уникальна для каждой кластеризации: левые и правые ветви можно менять местами
- В R функция `hclust()` помещает более «плотные» кластеры на левую часть дендрограммы (облегчает восприятие)



Неиерархическая кластеризация

- ✓ K-Means
- ✓ Principal Component Analysis
- ✓ Multidimensional Scaling
- ✓ Biclustering
- ✓ Many Additional Techniques

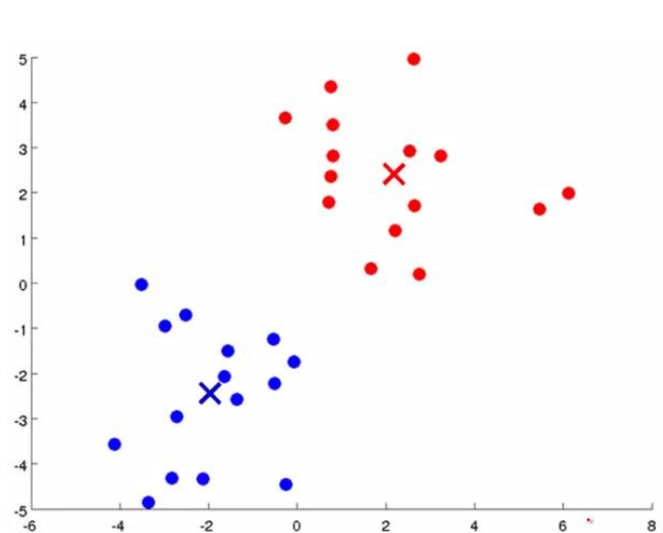
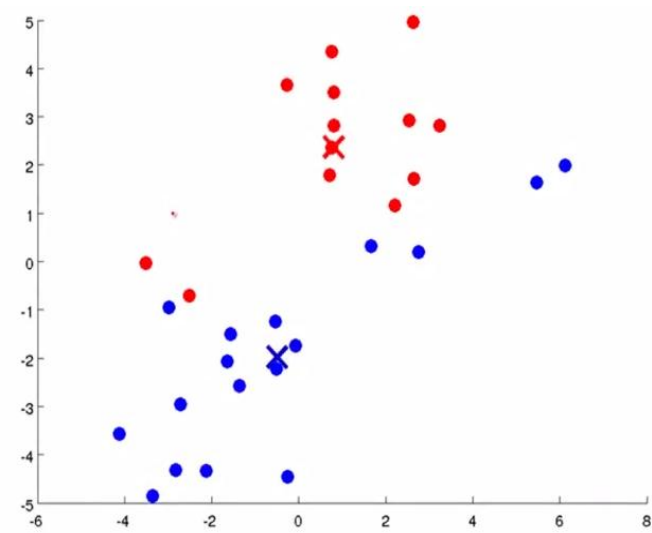
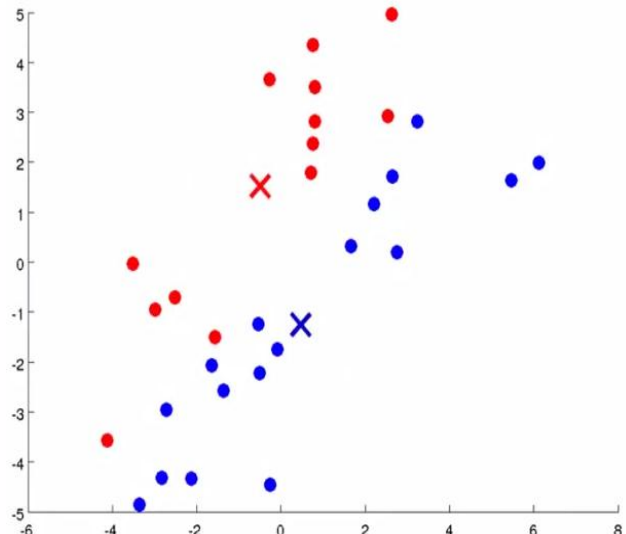
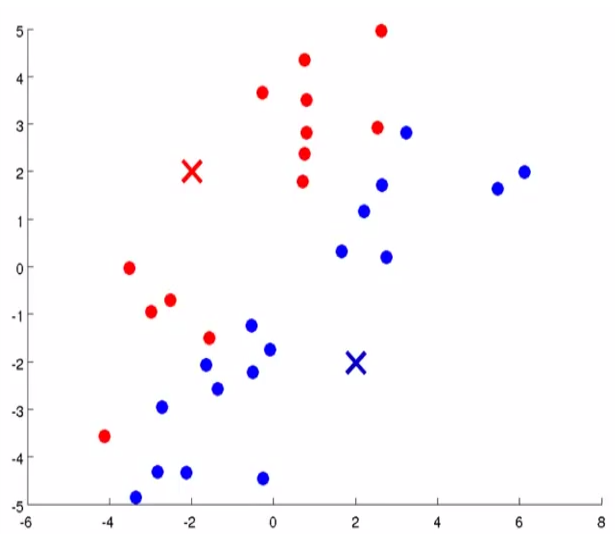
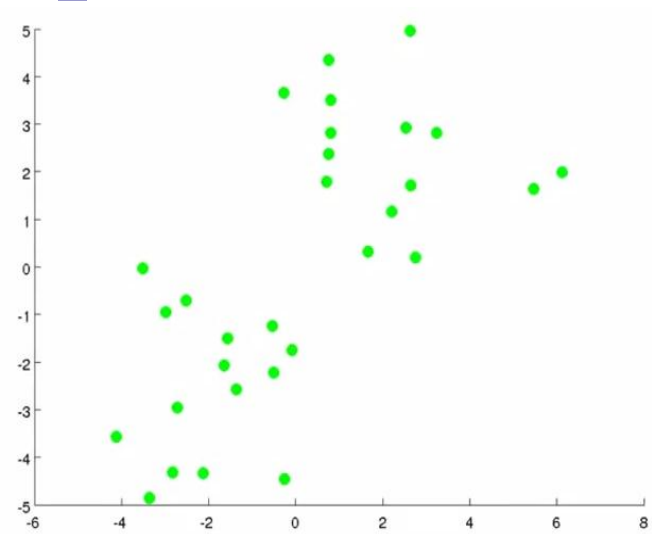
K-means

1. Выбираем количество кластеров (k)
2. Случайно разделяем точки на k кластеров
3. Рассчитываем «центр» для каждого кластера
4. Рассчитываем расстояния от каждой точки до каждого центра
5. Помещаем точку в кластер, к центру которого она ближе всего
6. Повторяем до тех пор, пока точки не перестанут перемещаться между кластерами

kmeans() из *stats* package,

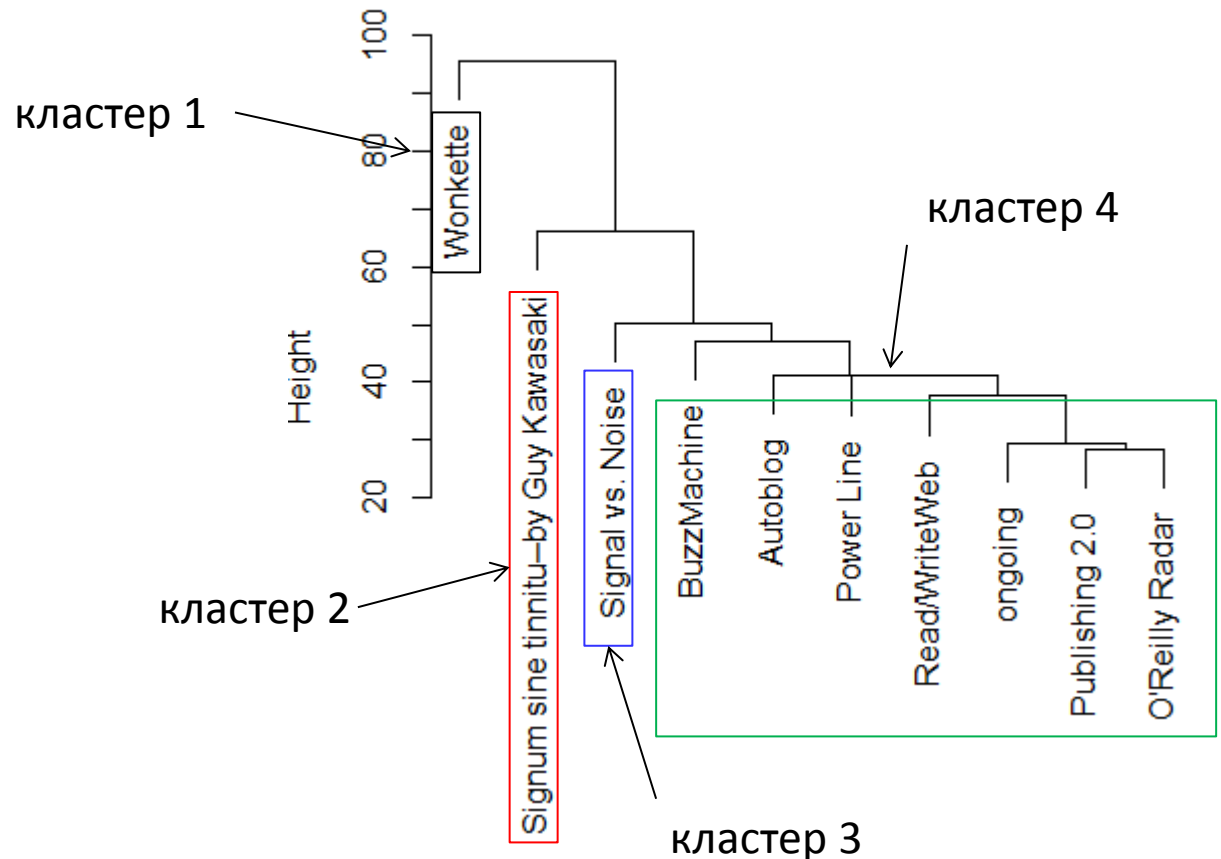
kcca() из [flexclust](#) package

trimkmeans() из [trimcluster](#) package.



```
km <- kmeans(blogdataSample, 4)
```

Cluster Dendrogram



Clustering vector:

ongoing	wonkette
4	1
Autoblog	Read/writeweb
4	4
signal vs. Noise	Publishing 2.0
3	4
O'Reilly Radar	Signum sine tinnitu--by Guy Kawasaki
4	2
BuzzMachine	Power Line
4	4

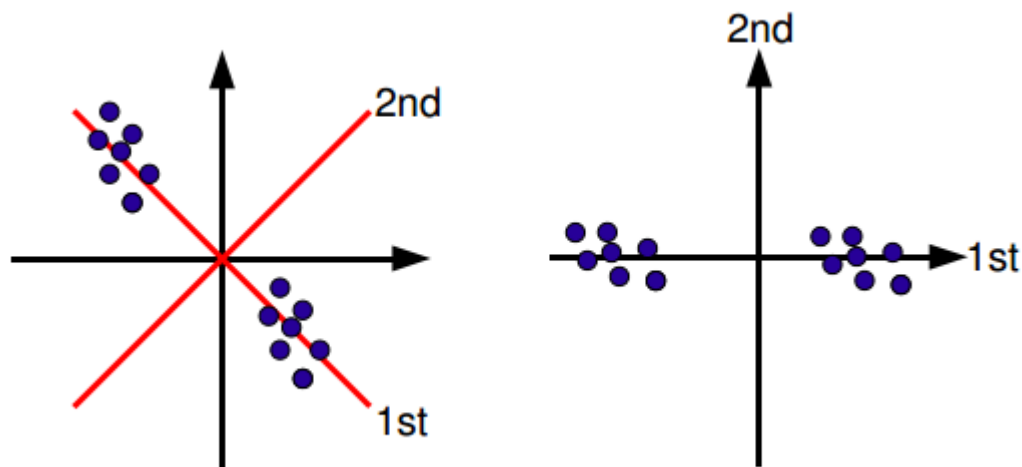


Метод главных компонент

(Principal component analysis, PCA)

- ✓ один из основных способов уменьшить размерность данных, потеряв наименьшее количество информации
- ✓ Преобразование некоторого набора возможно скоррелированных переменных в набор линейно нескоррелированных переменных – главных компонент
- ✓ Число главных компонент всегда меньше или равно количеству начальных переменных
- ✓ Первая компонента имеет наибольшую возможную дисперсию (т.е. объясняет вариабильность данных настолько, насколько это возможно)
- ✓ Каждая следующая компонента имеет наибольшую дисперсию при условии, что она ортогональна предыдущим

PCA – по сути ортогональное линейное преобразование, переводящее данные в новую систему координат.

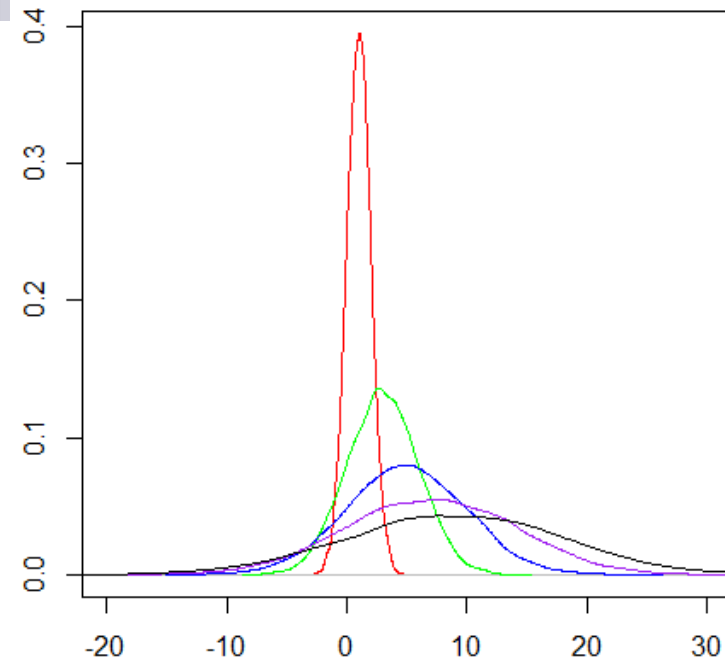


Principal Component	1 st	2 nd	3 rd	Other
Proportion of Variance	62%	34%	3%	rest

1st and 2nd principal components explain 96% of variance.

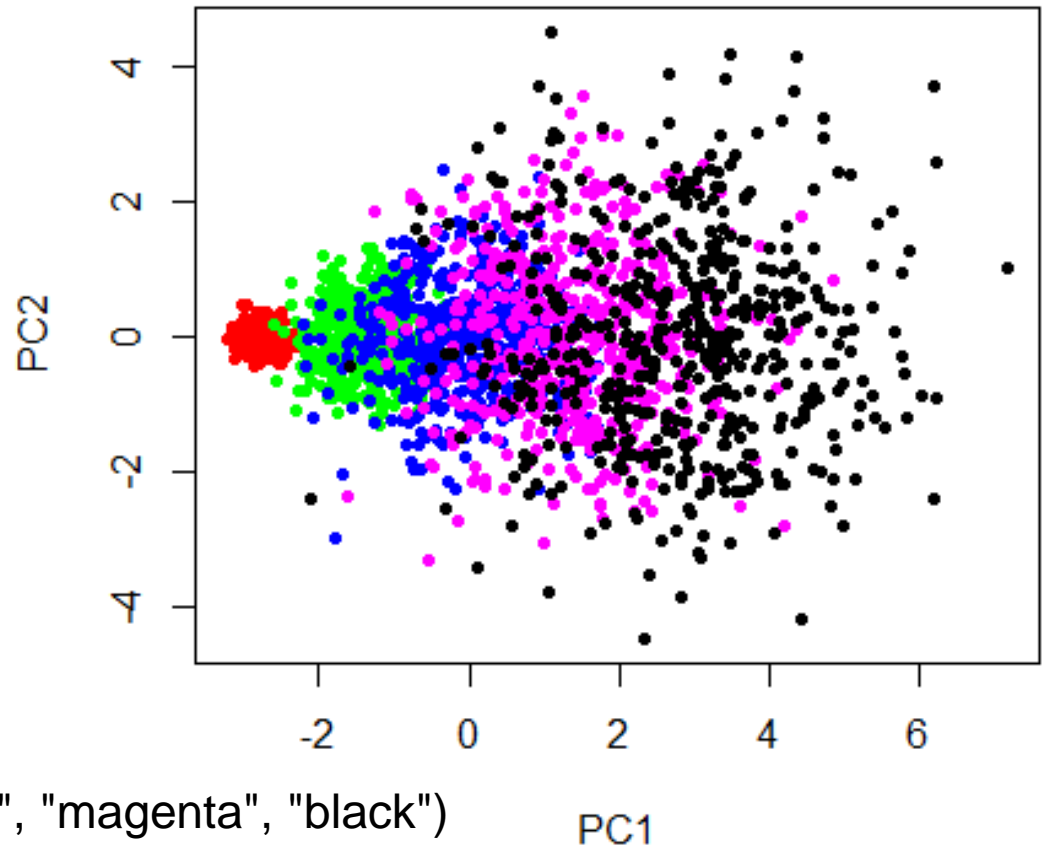
```
z1 <- rnorm(10000, mean=1, sd=1)
z2 <- rnorm(10000, mean=3, sd=3)
z3 <- rnorm(10000, mean=5, sd=5)
z4 <- rnorm(10000, mean=7, sd=7)
z5 <- rnorm(10000, mean=9, sd=9)
mydata <- matrix(c(z1, z2, z3, z4, z5), 2500, 20, byrow=T, dimnames=list(paste("R",
1:2500, sep=""), paste("C", 1:20, sep="")))
# генерируем матрицу, 2500 строк и 20 столбцов
```

```
pca <- prcomp(mydata, scale=T)
```

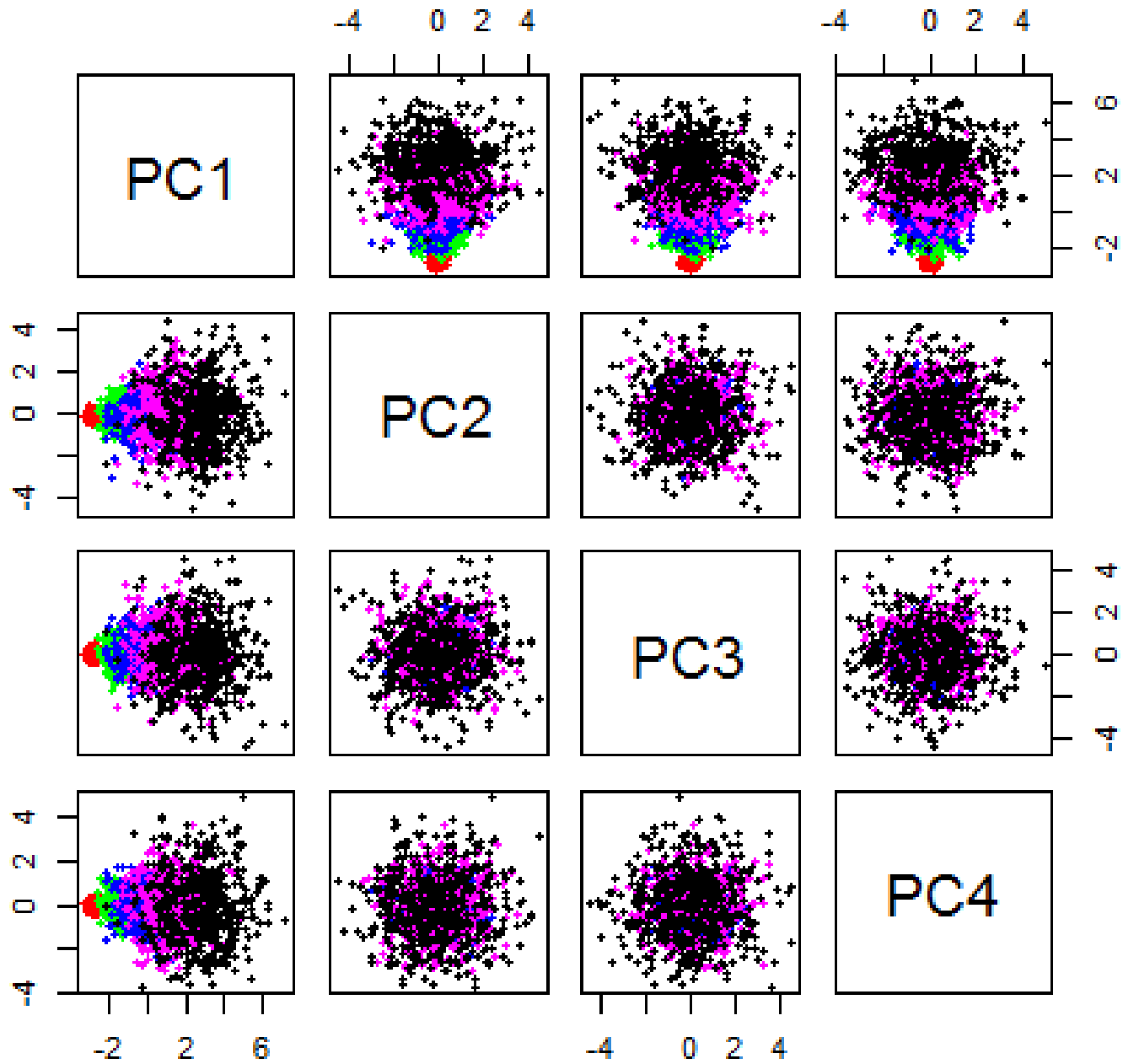


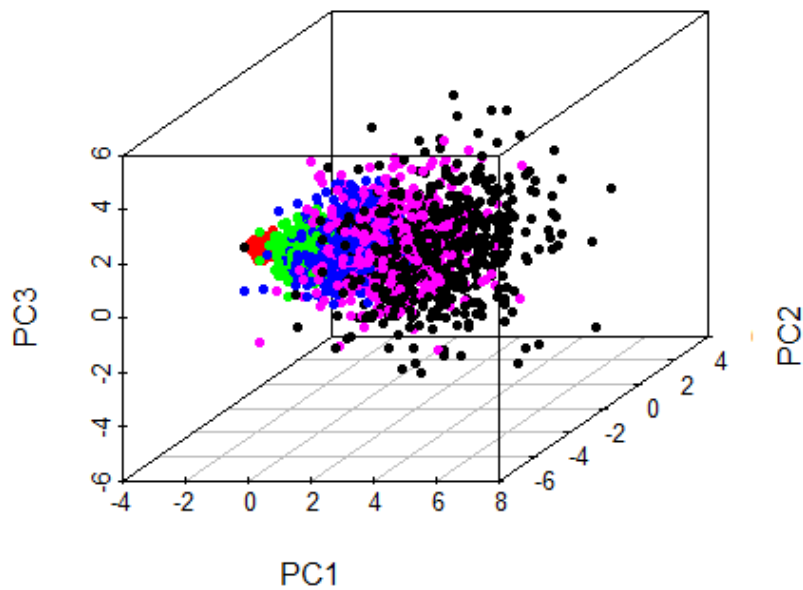
```
summary(pca) # Выводит на экран summary для всех компонент
summary(pca)$importance[, 1:6] # для первых шести компонент
```

	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6
Standard deviation	2.151885	0.9901776	0.9758579	0.9586941	0.9454844	0.9412403
Proportion of Variance	0.231530	0.0490200	0.0476100	0.0459500	0.0447000	0.0443000
Cumulative Proportion	0.231530	0.2805500	0.3281700	0.3741200	0.4188200	0.4631200



```
mycolors <- c("red", "green", "blue", "magenta", "black")
plot(pca$x, pch=20, col=mycolors[sort(rep(1:5, 500))])
```





```
pca$x[,1:3]
```

- здесь содержатся коэффициенты для перехода в новую систему координат, по первым 3 компонентам: можно использовать для дальнейшей кластеризации

Многомерное шкалирование

- ✓ На входе - попарные сходства/различия анализируемых объектов (матрица расстояний)
- ✓ На выходе числовые значения координат, которые приписываются каждому объекту в некоторой новой системе координат, с сохранением (насколько это возможно) попарных расстояний между объектами

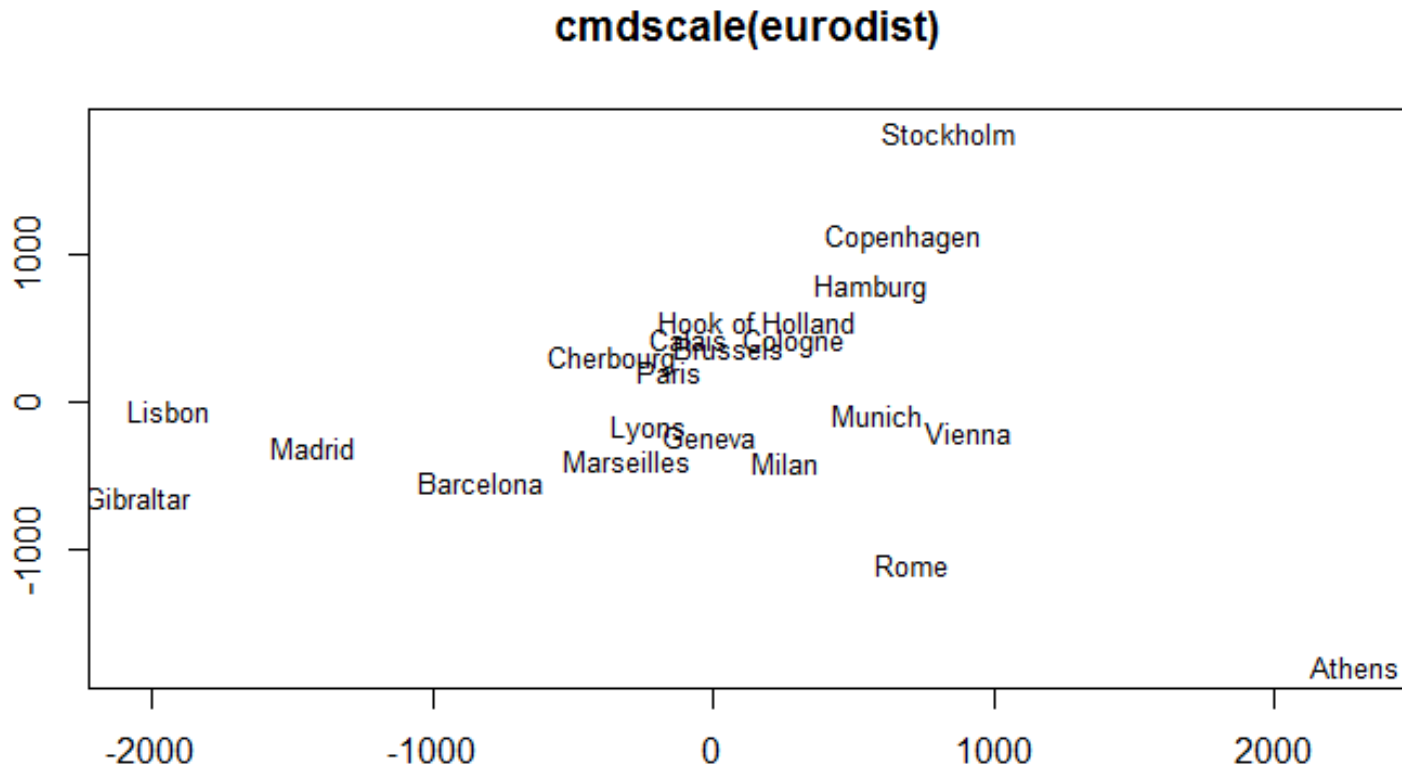
```
loc <- cmdscale(eurodist)
```

```
# MDS для географических расстояний между европейскими городами
```

```
plot(loc[,1], -loc[,2], type="n", xlab="", ylab="", main="cmdscale(eurodist)")
```

```
text(loc[,1], -loc[,2], rownames(loc), cex=0.8)
```

```
# строим график, минус нужен для того, чтобы перевернуть график в нужную ориентацию
```





The end