Базовые модели машинного обучения: кластеризация

Гирдюк Дмитрий Викторович
Першин Антон Юрьевич, Ph.D.
Никольская Анастасия Николаевна

Программа «Большие данные и распределенная цифровая платформа»
Санкт-Петербургский государственный университет

Практика по дисциплине «Технологии ИИ»
22 апреля 2023 г.

Обучение без учителя

→ *Обучение без учителя* (unsupervised learning) – это тип машинного обучения, который ищет ранее необнаруженные закономерности в наборе данных без ранее существовавших меток и с минимальным или полностью отсутствующим контролем человека.

→ Задача обучения без учителя покрывает не только *кластеризацию*, но и

- *поиск ассоциативных правил*
- *заполнение пропущенных значений*
- *поиск аномалий*
- *сокращение размерности и визуализация данных*

Постановка задачи кластеризации

→ *Кластерный анализ* или *кластеризация* – это задача группировки набора объектов таким образом, чтобы объекты в одной группе (называемой кластером) были более похожи (в некотором смысле) друг на друга, чем на объекты в других группах (кластерах).

→ Проще говоря, имеем

- Пространство объектов $X = \{x_i\}_{i=1}^n, x_i \in \mathbb{R}^m$ и выборку из него $\widehat{X}$
- Мера расстояния между объектами $\rho : X \times X \to R^+$

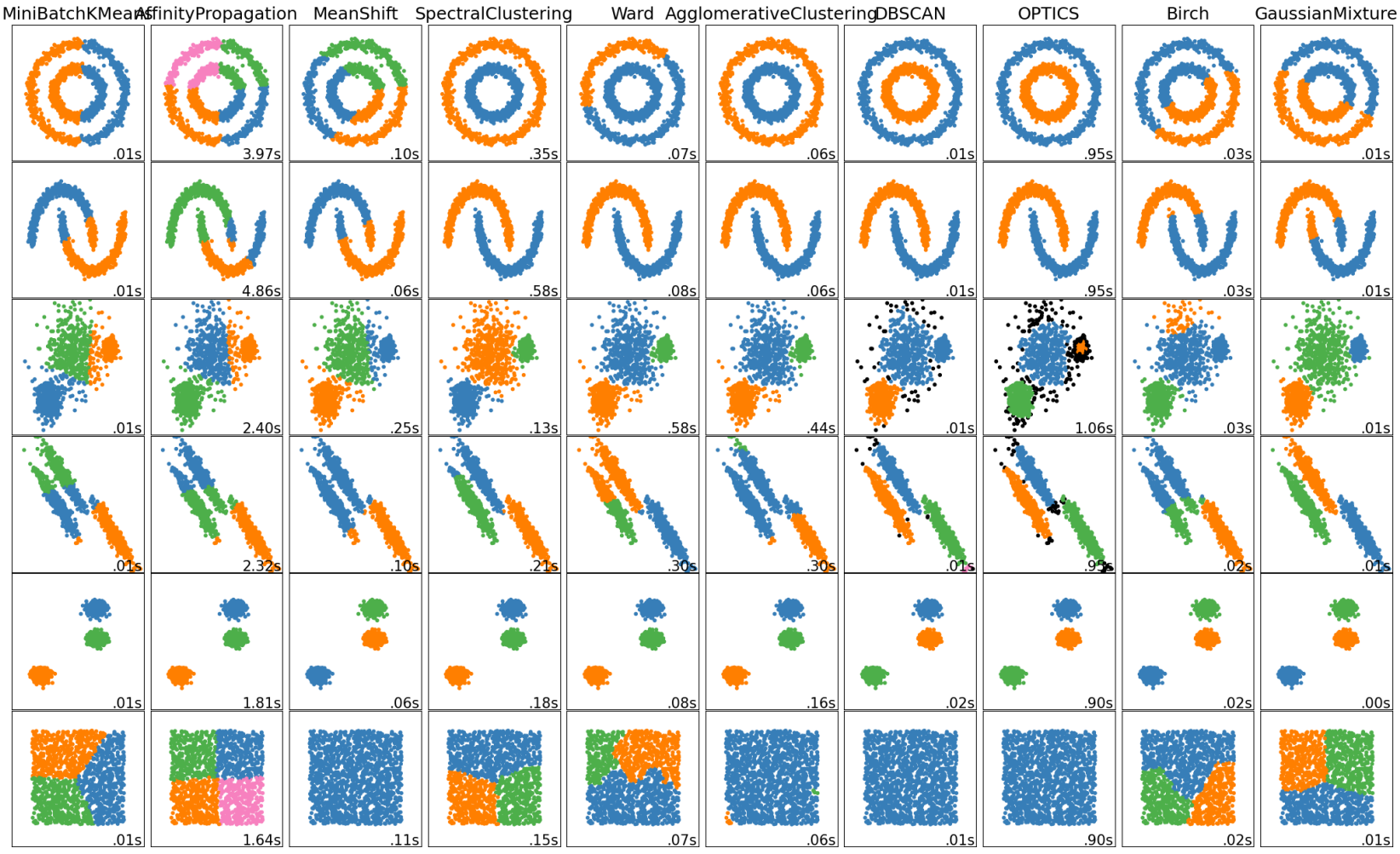
Хотим получить

- Множество групп/кластеров $Y = \{y_i\}_{i=1}^n, y_i \in \mathbb{N}$
- Алгоритм кластеризации $\alpha : X \to Y$

Приложения

- → Разделение на группы с целью упрощения работы (отдельные модели для каждой группы).
- → Сокращение объемов наблюдений и сжатие данных (например, квантизация нейронных сетей).
- → Выделение новизны/аномалий.
- → Построение иерархии/таксономии объектов.

Примеры кластеризации



Источник изображения

Классификация алгоритмов

В большинстве источников выделяют пять групп алгоритмов

- → *Основанные на центроидах* (centroid based): **k-means**, k-modes, k-medoids, **Meanshift**, FCM, Affiniy propagation.
- → *Иерархические* (hierarchical): **агломеративные** (Ward, single/average/complete linkage), BIRCH, на основе теории графов (выделение связных компонент и минимальное остовное дерево), **Spectral Clustering**, CURE, ROCK, Chameleon, Echidna, SNN, CACTUS, GRIDCLUST.
- → *Основанные на плотности* (density based): **DBSCAN**, OPTICS, DBCLASD, GDBSCAN, DENCLU, SUBCLU.
- → *Сеточные* (grid based): STING, Wave cluster, BANG, CLIQUE, OptiGrid, MAFIA, ENCLUS, PROCLUS, ORCLUS, FC, STIRR.
- → *Основанные на модели данных* (model based): **Expectation Maximization** (EM), COBWEB, CLASSIT, SOM.

k-means

→ Алгоритм k-means – один из самых простых и популярных алгоритмов кластеризации, заключающийся в поиске заранее заданного числа кластеров путем минимизации суммы квадратов внутрикластерных расстояний между точками кластеров и соответствующих им центроидами.

→ Получаемая оптимизационная задача вычислительно трудна (NP-сложная), однако разработано достаточно много эвристических алгоритмов, позволяющих достаточно быстро отыскать локальный минимум.

Формальное определение

→ Пусть $S = \{S_1, S_2, \ldots, S_k\}$ есть разбиение выборки на k непересекающихся множеств.

→ Тогда задача минимизации суммы квадратов внутрикластерных расстояний может быть записана следующим образом

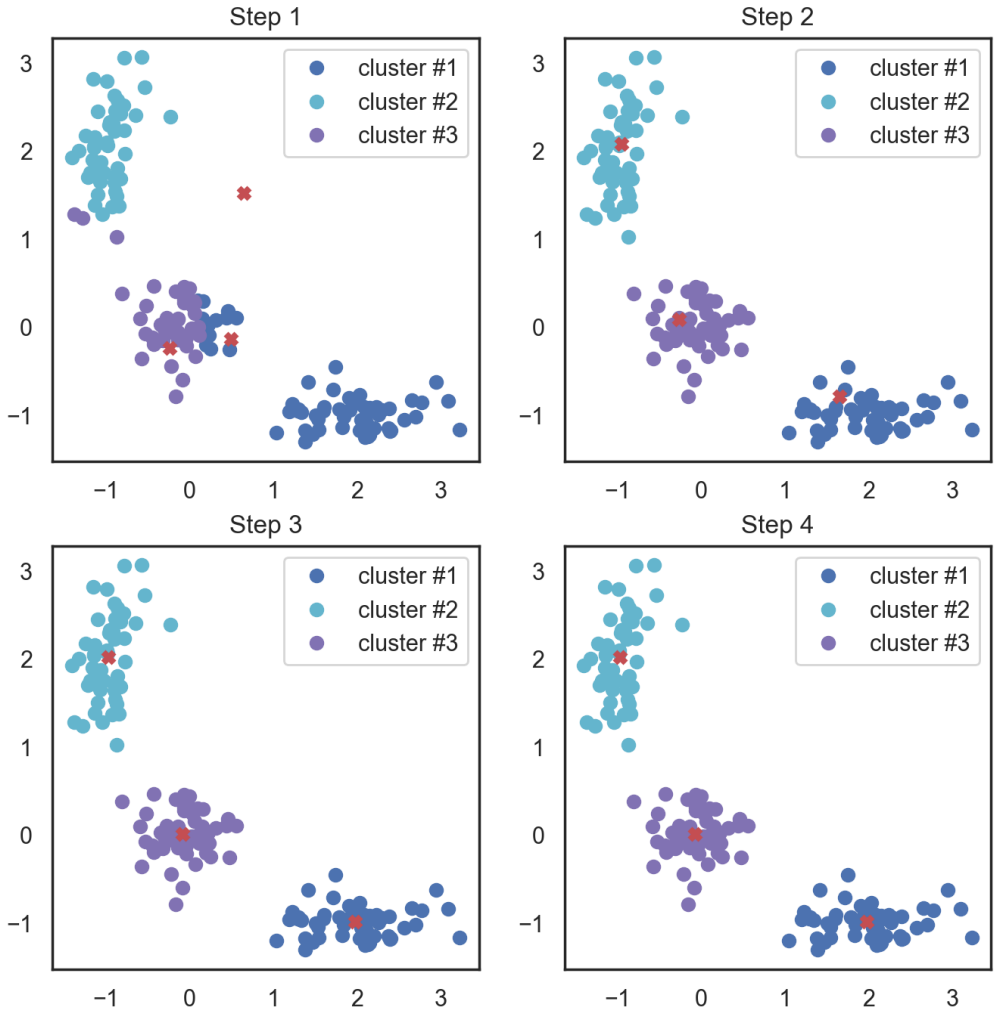
$$\arg\min_S \sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in S_i} ||x - \mu_i||^2 = \arg\min_S \sum_{i=1}^{k} |S_i| \operatorname{Var} S_i,$$

$$\mu_i = \frac{1}{|S_i|} \sum_{x \in S_i} x$$

k-means: описание алгоритма Ллойда

1. Зафиксировав число кластеров, произвольным образом инициализируем k центроид. Это могут быть наблюдения из выборки, произвольные точки в пространстве данных или что-нибудь более умное, вроде использования эмпирической плотности распределения данных (k-means++).
2. Относим каждое наблюдение к кластеру, чей центроид (центр тяжести) находится к наблюдению ближе всего.
3. Обновляем центроиды с учетом всех входящих в каждый кластер наблюдений.
4. Повторяем шаги 2 и 3 фиксированное количество раз или до тех пор, пока все центроиды не стабилизируются (т.е. изменяются по норме не больше заранее заданного ε).

k-means: пример



Источник изображения

k-means: алгоритм Ллойда

Algorithm 1: k-means

input : Выборка $X = \{x_1, \ldots, x_n\}$, количество кластеров k и ε

Произвольным образом инициализируем k центроид μ_i

while *True* **do**

Относим наблюдения к ближайшим центроидам:

$$S_i := \left\{x_p : ||x_p - \mu_i||^2 \leqslant ||x_p - \mu_j||^2, 1 \leqslant j \leqslant k\right\}$$

Обновляем центроиды:

$$\mu_i = \frac{1}{|S_i|} \sum_{x \in S_i} x$$

if $\max_{i,j} |g_{ij} - g_{ij}^0| < \varepsilon$ **then**

Завершить работу

k-means: обсуждение

→ Отличное базовое решение.

→ Алгоритм метрический, потому либо нормализуем данные, либо определяем специальную метрику.

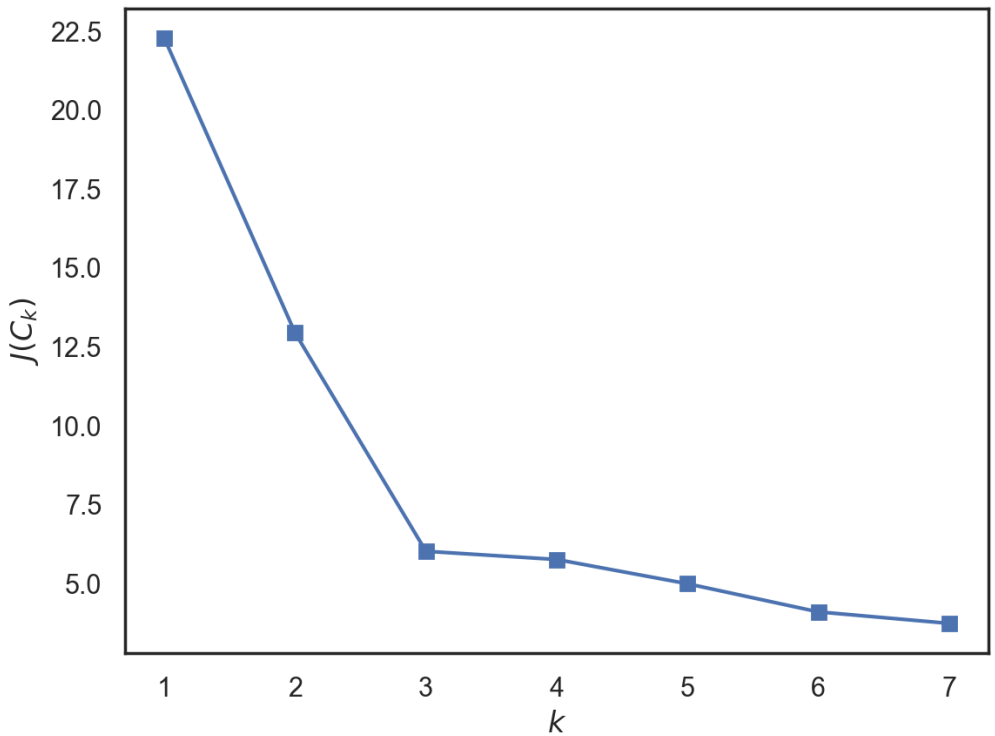
→ Алгоритм прост и понятен, имеет большое количество всевозможных обобщений (k-medians, k-medoids, k-means++ и т.д.).

→ Не гарантируется достижение глобального минимума суммарного квадратичного отклонения, а только одного из локальных минимумов. Кроме того, полученные кластеры зачастую стремятся иметь сферическую форму ввиду вида целевой функции.

→ Результат зависит от выбора исходных центров кластеров, их оптимальный выбор неизвестен. Чаще всего алгоритм запускают несколько раз и выбирают то разбиение, которое показало наименьшее значение целевой функции.

k-means: эвристика выбора числа кластеров

→ Число кластеров необходимо задавать заранее. На практике производят разбиения для различных значений k, строят график значений целевой функции и ищут такое значение k, после которого значение целевой функции перестает сильно изменяться (так называемый «метод локтя»).



Источник изображения

k-means: sklearn

→ k-means реализован в sklearn'е.

→ Кроме числа кластеров n_clusters основными гиперпараметрами являются:

- init. Метод инициализации центроид. k-means++ (стандартный), рандомный и определенный пользователем.
- n_init. Количество запусков алгоритма (было описано ранее на слайдах).
- algorithm. Алгоритм Ллойда или Элкана. Второй является модификацией алгоритма Ллойда: ускорение работы путем исключения некоторого числа вычислений расстояний за счет использования неравенства треугольника.

DBSCAN

→ Density-Based Spatial Clustering of Appliations with Noise (DBSCAN) – алгоритм кластеризации, основанный на плотности точек, изначально разработанный с целью кластеризации в базах данных, содержащих геометрические представления наблюдений.

→ Основными преимуществами алгоритма авторы выделили минимальную необходимость понимания предметной области данных при подборе гиперпараметров метода, а также способность обнаруживать кластеры произвольной формы.

→ Алгоритм достаточно прост, наряду с k-means один из самых популярных.

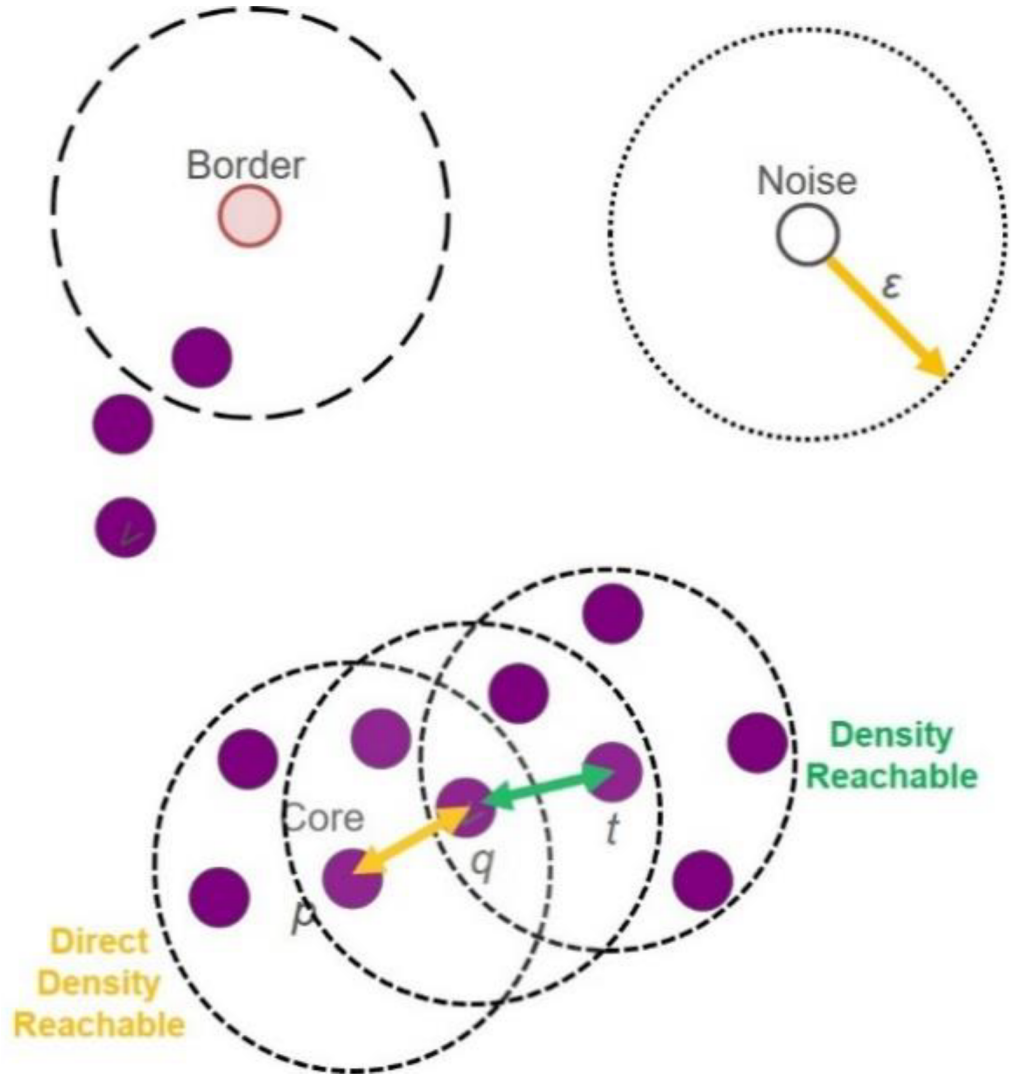
DBSCAN: описание алгоритма

→ Алгоритм имеет 2 гиперпараметра: величина окрестности точки ε и минимальное количество наблюдений в окрестности *MinPts*

→ При кластеризации точка может быть причислена к одному из 3 типов:

- корневая: в ее ε-окрестности не менее *MinPts* точек
- граничная: в ее ε-окрестности меньше *MinPts* точек, но среди них есть как минимум одна корневая
- шумовая: не корневая и не граничная

DBSCAN: иллюстрация типов наблюдений



Источник изображения

DBSCAN: алгоритм

Algorithm 2: DBASCAN

input : Выборка $X = \{x_1, \ldots, x_n\}$, параметры ε и $MinPts$
$U = X, K = \emptyset, a = 0, a_1, \ldots, a_n = -1;$
while $U \neq \emptyset$ **do**
    Взять $x \in U$;
    if $|U_\varepsilon(x)| < MinPts$ **then**
        Пометить x как потенциально шумовую точку;
    else
        $K = U_\varepsilon(x), a = a + 1;$
        for $x' \in K$ **do**
            if $|U_\varepsilon(x)| \geq MinPts$ **then**
                $K = K \cup U_\varepsilon(x');$
            else
                пометить x' как граничную точку кластера K;
        foreach $x_i \in K$ **do** $a_i = a;$
        $U = U \setminus K;$

DBSCAN: Подбор гиперпараметров

- $\rightarrow$ Общая идея состоит в построении графика, по ординате у которого расстояние до *MinPts*-го соседа, а по абсциссе – точки, отсортированные в порядке увеличения этого расстояния.
- $\rightarrow$ Существенный скачок в значении идентифицирует выбросы, посему задавая некоторый процент на их число можно определить ε.
- $\rightarrow$ Обычно строят несколько таких графиков для различных значений *MinPts*.
- $\rightarrow$ В некоторых источниках значение *MinPts* предлагают выбирать равным $\dim X + 1$, Где-то встречается $2 * \dim X$

DBSCAN: sklearn

→ Есть реализация в sklearn'е. Кроме того, там же представлена модификация алгоритма под названием OPTICS, фактически отличающаяся от него тем, что задает интервал для значений ε, что позволяет выделять кластеры с различными плотностями.

→ Основные гиперпараметры:

- eps и min_samples. ε и *MinPts* соответственно.
- algorithm. Способ поиска соседей: брутфорс, ball-дерево, KD-дерево, и автоматический подбор подходящего с учетом обучающей выборки (дефолтное).
- leaf_size. Максимальный размер листа в дереве, если выбрано ball/KD-дерево.
- metric и p. Метрику можно как реализовать самостоятельно, так и использовать из имеющегося: Минковского (p – ее параметр) и ее частные случаи (Чебышева и Манхэттенская).