TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
Fakulta mechatroniky, informatiky
a mezioborových studií

Shlukování

Petr Červa, František Kynych
24. 10. 2024 | MVD

Část I.:
Úvod do problematiky

Učení s učitelem (supervised learning)

- Algoritmy se učí na základě dat, u kterých jsou člověkem připraveny příslušné správné značky ve formě
  - Příslušnosti ke třídě – úloha klasifikace
  - Hodnoty závislé veličiny – úloha regrese

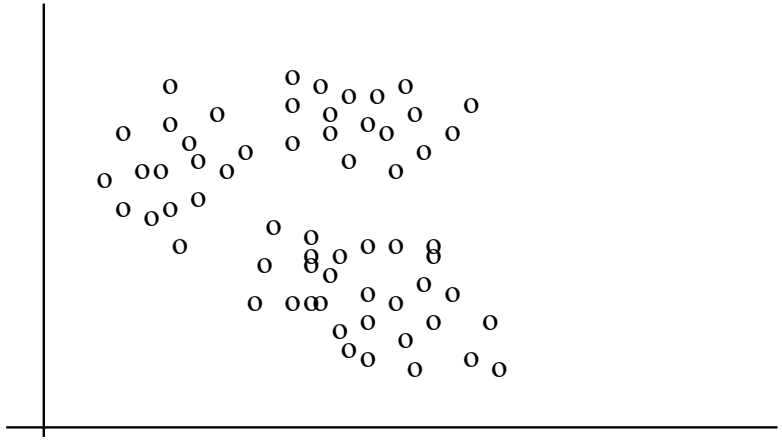
Učení bez učitele (unsupervised learning)

- Algoritmy se učí na základě dat, u kterých nejsou člověkem připraveny žádné značky
  - Neučí se klasifikovat
  - Neučí se ani predikovat
- Algoritmy bez učitele místo toho hledají vnitřní strukturu dat
  - Ani tato struktura není ale předem označkována

Shluková analýza ~ hledání vnitřní struktury

- Cílem je rozdělit data do několika skupin, resp. shluků (angl. clusters)
- Musí přitom platit, že:
  - Data uvnitř jednoho shluku jsou si vzájemně podobná
  - Data uvnitř jednoho shluku se liší od dat ve všech ostatních shlucích

Lze v obrázku najít nějaké shluky a kolik?



Co je obecně třeba ke shlukování?

- Metriky pro měření vzdálenosti mezi daty
- Metriky pro měření vzdálenosti (podobnosti) mezi shluky
- Metriky pro vyhodnocování úspěšnosti shlukování

Metriky pro měření vzdálenosti mezi daty

Typicky používané vzdálenostní funkce pro P dimenzí:

- Euklidovská vzdálenost (Euclidean dist.)

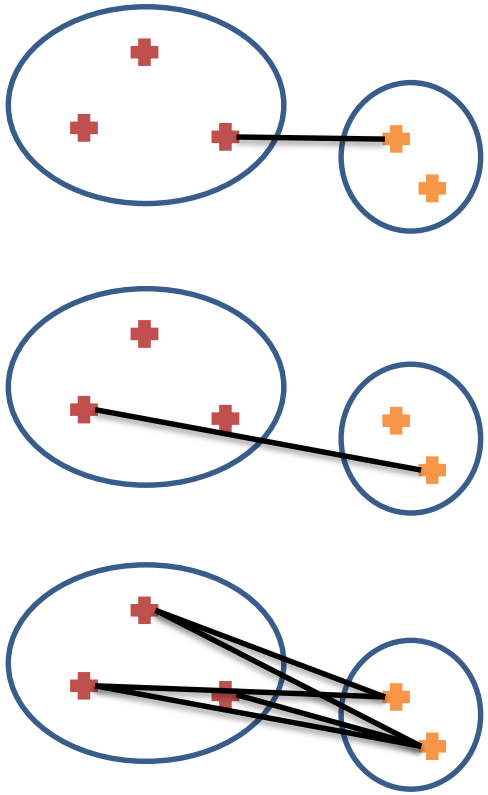
$$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{P} (x_i - z_i)^2}$$

- Vzdálenost v městských blocích (Manhattan dist.)

$$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) = \sum_{i=1}^{P} |x_i - z_i|$$

Metriky pro určování podobnosti shluků

1) **Min** – (single linkage) podobnost (vzdálenost) dvou nejvíce podobných vzorků přiřazených do shluků
   - Hrozí nebezpečí vytvoření shluků jen na základě vzájemné blízkosti dvou outlierů
2) **Max** – (complete linkage) podobnost dvou nejméně podobných vzorků
3) **Group average** – průměrná hodnota podobnosti pro všechny možné dvojice vzorků z obou shluků
4) **Vzdálenost centroidů**



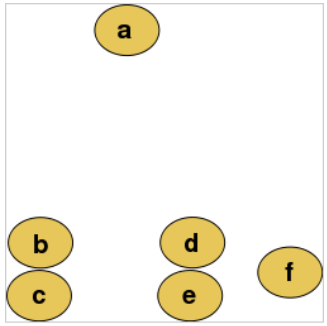
Vyhodnocování úspěšnosti shlukování

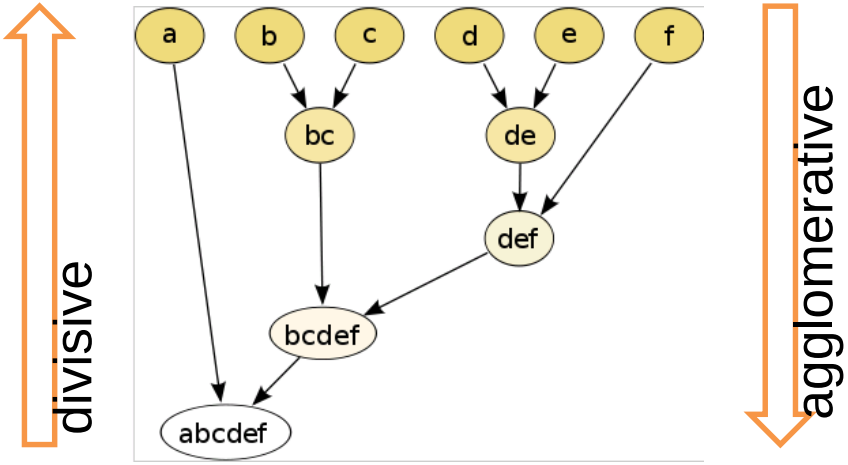
- Nejobtížnější problém
  - Data nejsou označkovaná (učení bez učitele)
  - Výsledek se často ohodnocuje na základě posouzení expertem
- Bere se přitom v potaz:
  - Vnitřní kompaktnost shluku
    - Jak moc jsou data vzdálena od centroidu
  - Vzájemná izolace shluků
    - Centroidy jednotlivých shluků by od sebe měly být co nejvíce vzdáleny

http://www.mit.edu/~9.54/fall14/slides/Class13.pdf

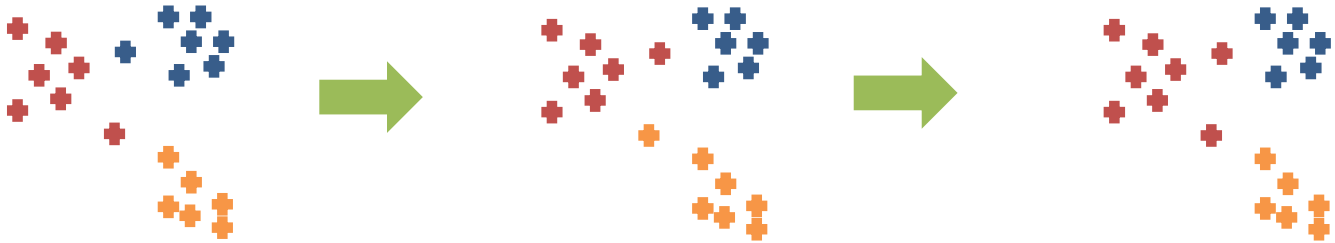
Metody shlukování

- Hierarchické shlukování:





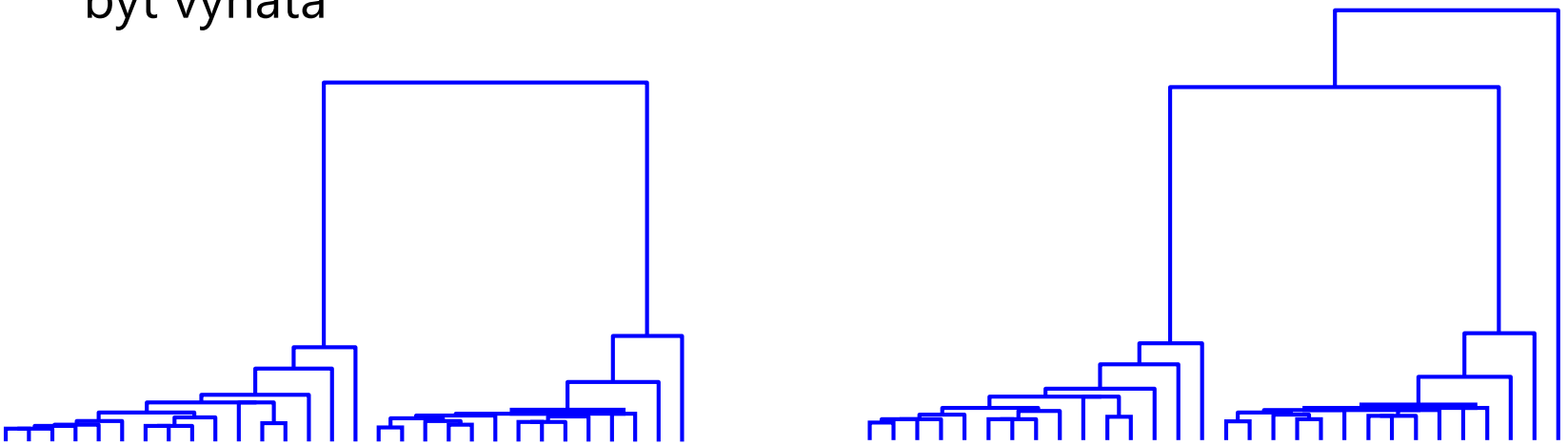
- Nehierarchické shlukování:
  - Samoorganizující neuronové sítě
  - K-Means



Část II.:
Hierarchické shlukování

Hierarchické shlukování

- Jednotlivé kroky procesu shlukování je možné zaznamenat pomocí tzv. dendrogramu
- Dendrogram reflektuje míru podobnosti jednotlivých shluků, umožňuje tak odhadnout optimální počet shluků; příp. identifikovat tzv. outliery
- Nevýhodou je, že data jednou zařazená do shluku již nemohou být vyňata



TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
Fakulta mechatroniky, informatiky
a mezioborových studií

Část III.:
Nehierarchické shlukování

Algoritmus K-průměrů (K-means)

- Pro zvolené číslo K se hledá **rozklad trénovací množiny** na K podmnožin (shluků) tak, že každý $j-t$ý shluk má svého reprezentanta (centroid) $\boldsymbol{\mu}_j$ a je charakterizován součtem vzdáleností mezi ostatními prvky shluku a centroidem.
- **Kritériem** vhodnosti rozkladu je **součet všech dílčích vzdáleností** přes všechny shluky.

$$J = \sum_{j=1}^{K} \sum_{i=1}^{N} \left\| \boldsymbol{x}_i^{(j)} - \boldsymbol{\mu}_j \right\|$$

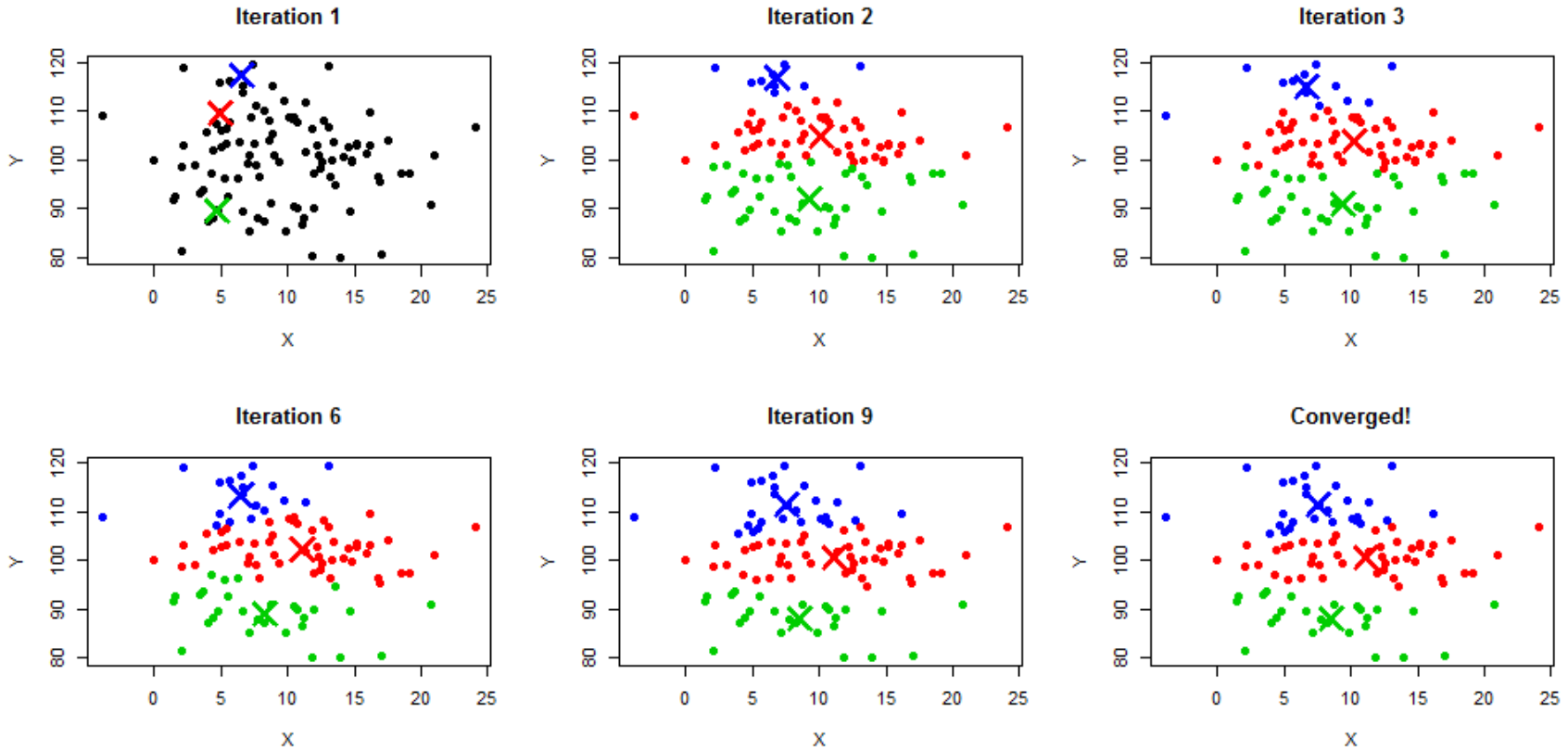
- Toto kritérium se snažíme **minimalizovat**

Algoritmus K-průměrů (K-means)

- Algoritmus je založen na **iteračním postupu**:

1. Zvolíme K prvků TrM jako prvotní odhady centroidů.
2. Zařadíme každý prvek TrM do jedné z K skupin na základě nejmenší vzdálenosti k centroidu.
3. Pro každou skupinu vypočteme nový centroid tak, aby měl nejmenší vzdálenost ke všem prvkům skupiny.
4. Vyhodnotíme celkové kritérium a v případě, že se jeho hodnota liší od předchozí hodnoty o méně než ▪, iterační proces zastavíme, jinak návrat na krok 2.

Ilustrace průběhu algoritmu K-průměrů



http://www.learnbymarketing.com/methods/k-means-clustering/

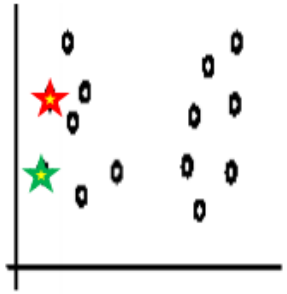
K-means – silné stránky

- Jednoduchý na implementaci a pochopení
- Výpočetní náročnost je O(TKN), kde
  - N je počet dat
  - K je počet shluků
  - T je počet iterací
    - Protože K a T je obvykle malé, je K-means považován za lineární
- Nejpopulárnější algoritmus
  - Výsledky se obtížně porovnávají, nelze určit nejlepší algoritmus

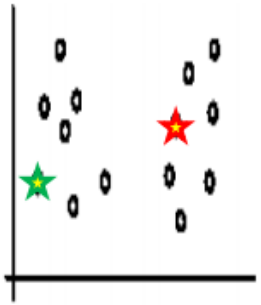
K-means – slabé stránky

- Není zajištěno dosažení globálního minima kriteriální funkce
- Výsledné centroidy mohou záviset na volbě počátečních centroidů
  - Proces lze opakovat s různými počát. centroidy a vybrat pak to řešení, které má minimální hodnotu kriteriální funkce
- Náchylný na přítomnost outlierů
  - Lze částečně eliminovat – viz dále
- Nefunguje pro všechna rozložení příznaků
- Na shlukovaných datech je nutné umět spočítat střední hodnotu
- Algoritmus neřeší otázku nejvhodnějšího čísla K

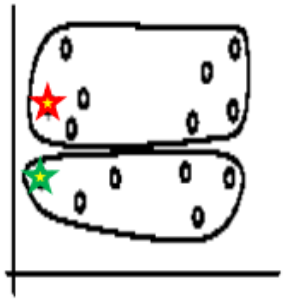
K-means – závislost na inicializaci



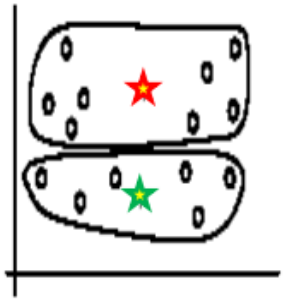
Random selection of seeds (centroids)



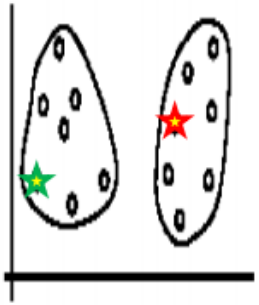
Random selection of seeds (centroids)



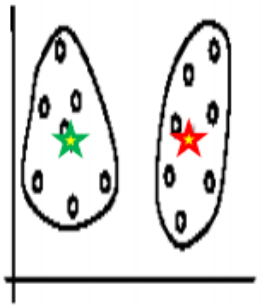
Iteration 1



Iteration 2



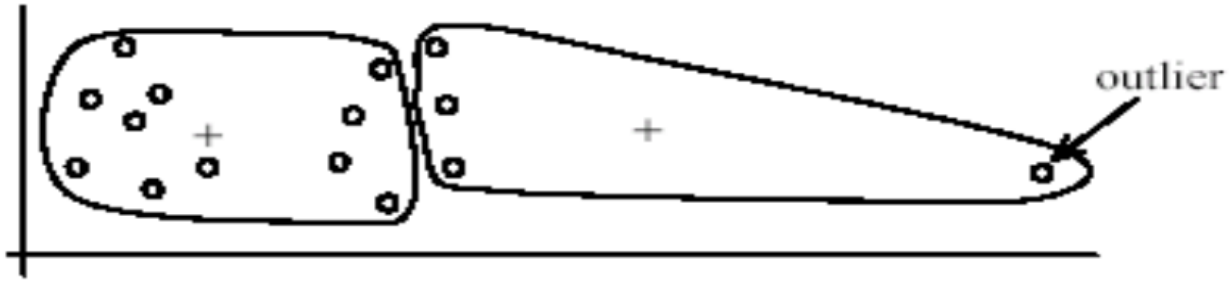
Iteration 1



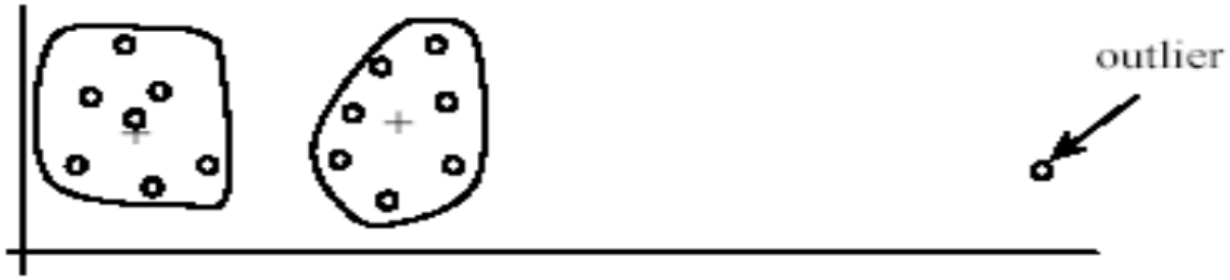
Iteration 2

http://www.mit.edu/~9.54/fall14/slides/Class13.pdf

K-means – outliery



(A): Undesirable clusters



(B): Ideal clusters

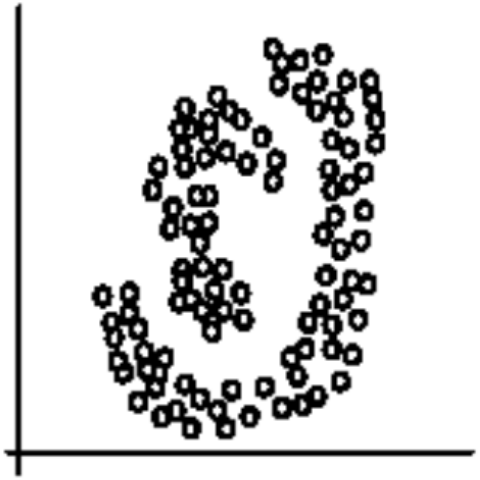
http://www.mit.edu/~9.54/fall14/slides/Class13.pdf

K-means – potlačení vlivu outlierů

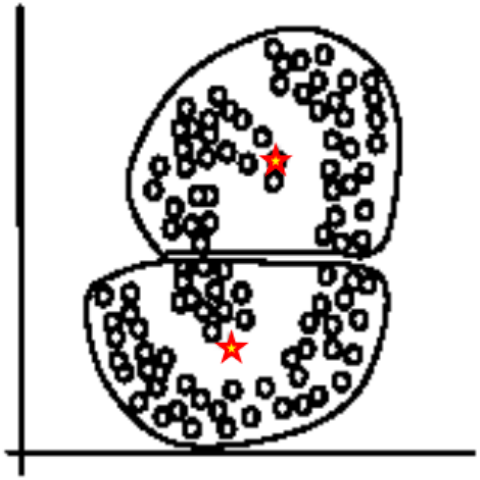
- Je možné odstranit data, která jsou nejvíce vzdálená od centroidů
  - Odstranění je vhodné provádět pouze pokud jsou body vzdáleny ve více iteracích po sobě.
- Je možné data náhodně navzorkovat – vybrat pro výpočet polohy centroidu jen menší množství bodů
  - Outlier pak nemusí být vybrán a nemusí negativně ovlivnit výsledek

K-means – nevhodná rozložení dat

- K-means je vhodný pro data, která jsou rozložena uvnitř vícerozměrné koule nebo elipsoidu
- Jinak může selhat:



(A): Two natural clusters



(B): *k*-means clusters

http://www.mit.edu/~9.54/fall14/slides/Class13.pdf

Algoritmus LBG (Linde, Buzo, Gray)

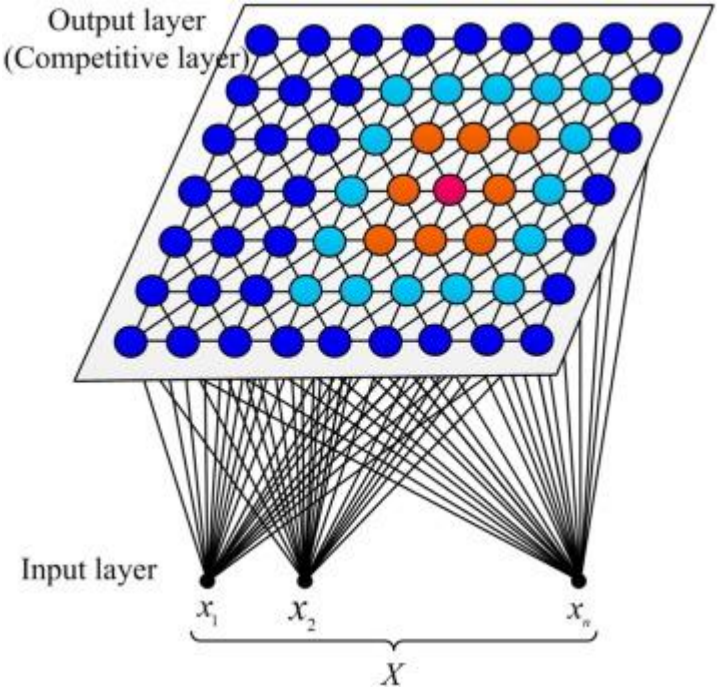
Na rozdíl od K-means řeší též nalezení čísla K

- Dvojnásobně iterační procedura (pro K, i pro určení centroidů)
  1. **Inicializace**: Nastav $K = 1$. Najdi centroid.
  2. **Rozdělení** (K=2K): Pro každou dosavadní skupinu urči dva nové počáteční centroidy.
  3. **Nalezení nových centroidů**: S celou TrM a s číslem K proveď K-means alg. Urči hodnotu kriteriální funkce.
  4. **Ukončení**: Je-li dosaženo cílové číslo K nebo se hodnota kriteriální funkce již významně nemění, skonči, jinak zpět na krok 2.

Pozn. V kroku 2 je také možné rozdělit pouze největší shluk. Pak K=K+1

Samoorganizující neuronové sítě (SOM)

- Název pochází z angl. Self Organizing Network
- SOM mají vstupní a výstupní vrstvu
- Neurony ve výstupní vrstvě bývají uspořádány do vícerozměrné struktury
- Ke každému neuronu je přiřazen vektor vah $\boldsymbol{w}_i$
  - **Určuje polohu neuronu v prostoru**
- Okolo každého neuronu je definován jeho blízké okolí (region) R



SOM - učení

- Trénovací data se zpracovávají vzorek po vzorku
- Pro $i-t$ý neuron a $j-t$ý vzorek se vypočte vzdálenost $\|\boldsymbol{w}_i - \boldsymbol{x}_j\|$
- Váhy neuronu, který je vzorku nejblíže, se aktualizují podle vztahu

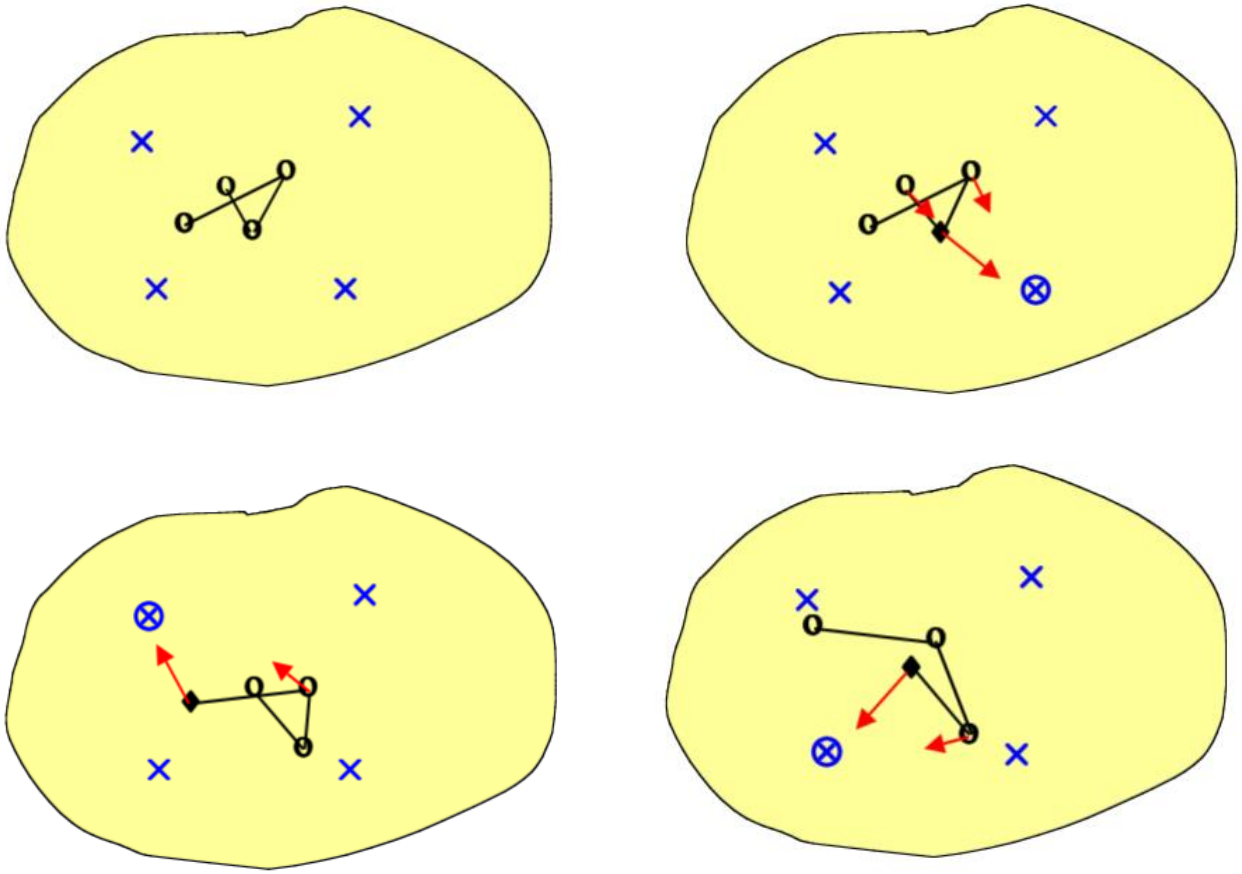
$$\boldsymbol{w}_{t+1,best} = \boldsymbol{w}_{t,best} + \alpha\left(\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{w}_{t,best}\right)$$

  - Vektor $\boldsymbol{w}_{best}$ se tedy posune směrem k vektoru $\boldsymbol{x}_j$
- Váhy neuronů v rámci regionu nejbližšího neuronu se posunou méně:

$$\boldsymbol{w}_{t+1,r} = \boldsymbol{w}_{t,r} + \beta\left(\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{w}_{t,r}\right), \qquad \beta < \alpha$$

=> Poloha nejbližších neuronů se posune směrem k vektoru $\boldsymbol{x}_j$

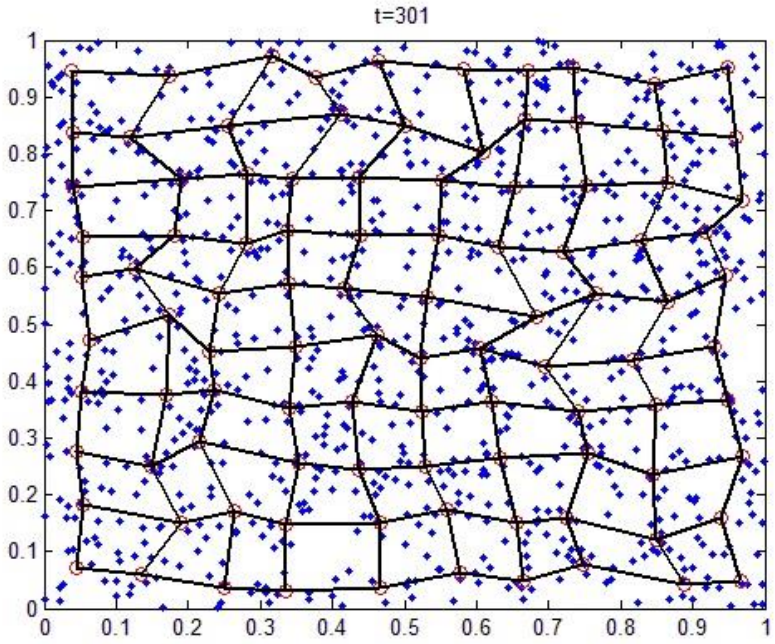
SOM – ilustrace procesu učení



http://www.mit.edu/~9.54/fall14/slides/Class13.pdf

SOM – výsledek učení

- Během učení se neurony posouvají směrem k trén. vektorům
- Síť se podle polohy těchto vektorů sama organizuje
- Ve výsledku neurony zaujmou polohu centroidů shluků přítomných v datech



https://www.mathworks.com/matlabcentral/mlc-downloads/downloads/submissions/46481/versions/1/screenshot.jpg

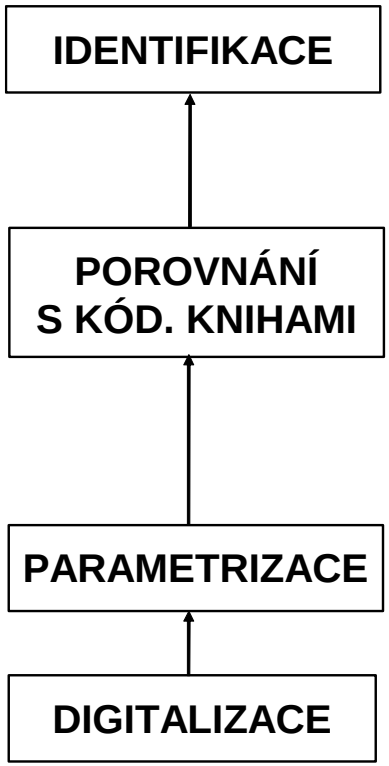
Část IV.:
Využití shlukování

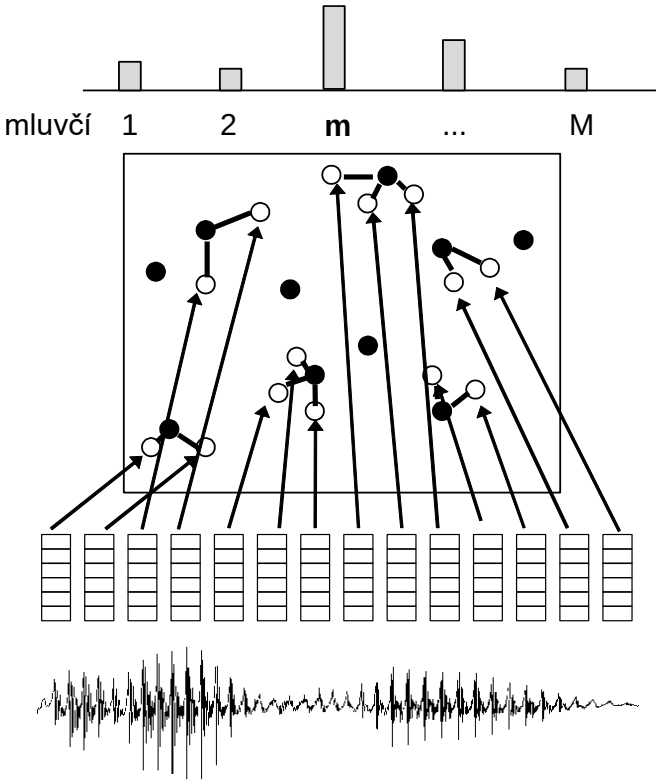
Rozpoznávání osob podle hlasu

- **Fáze trénování**
  - Každá osoba v trénovací množině namluví několik minut řeči.
  - Nahrávky se zparametrizují
  - Vypočtou se příznakové vektory pro každých 10 ms řeči.
  - Příznakové vektory vytvoří v obrazovém prostoru shluky, které se identifikují a reprezentují svými etalony.
  - Tento proces se nazývá také jako vektorová kvantizace
  - Pozice etalonů pak vytvářejí tzv. **kódovou knihu**, která charakterizuje každou osobu.

Rozpoznávání osob podle hlasu

- **Fáze testování:**





vzdálenosti od kód. knih

Kódová kniha mluvčího **m**
plnými kolečky jsou vyznačeny centroidy
prázdnými kolečky pozice vektorů
tlustou čarou vzdálenosti od centroidů (kvantizační chyba)

vyhledávání nejbližších centroidů

vektory příznaků

vzorkovaný signál (mluvčí **m**)

Rozpoznávání osob podle hlasu

- **Fáze trénování**
  - Každá osoba v trénovací množině namluví několik minut řeči.
  - Nahrávky se zparametrizují
  - Vypočtou se příznakové vektory pro každých 10 ms řeči.
  - Příznakové vektory vytvoří v obrazovém prostoru shluky, které se identifikují a reprezentují svými etalony.
  - Tento proces se nazývá také jako vektorová kvantizace
  - Pozice etalonů pak vytvářejí tzv. **kódovou knihu**, která charakterizuje každou osobu.

Další aplikace

- Shlukování dokumentů
  - Doporučení podobných, shlukování do kategorií
- Segmentace zákazníků
  - Vytvoření skupin na základě jejich nákupů
- Detekce pojistných podvodů
  - Včasná detekce podvodných vzorů
- Shlukování akcií
  - Vytvoření shluků vysoce korelovaných akcií
    - Pomůže diversifikovat portfolio
- Komprese obrazu

Užitečná literatura / kurzy

- Unsupervised learning – Clustering