Обучение без учителя: кластеризация. Снижение размерности данных PCA.

Екатерина Кондратьева

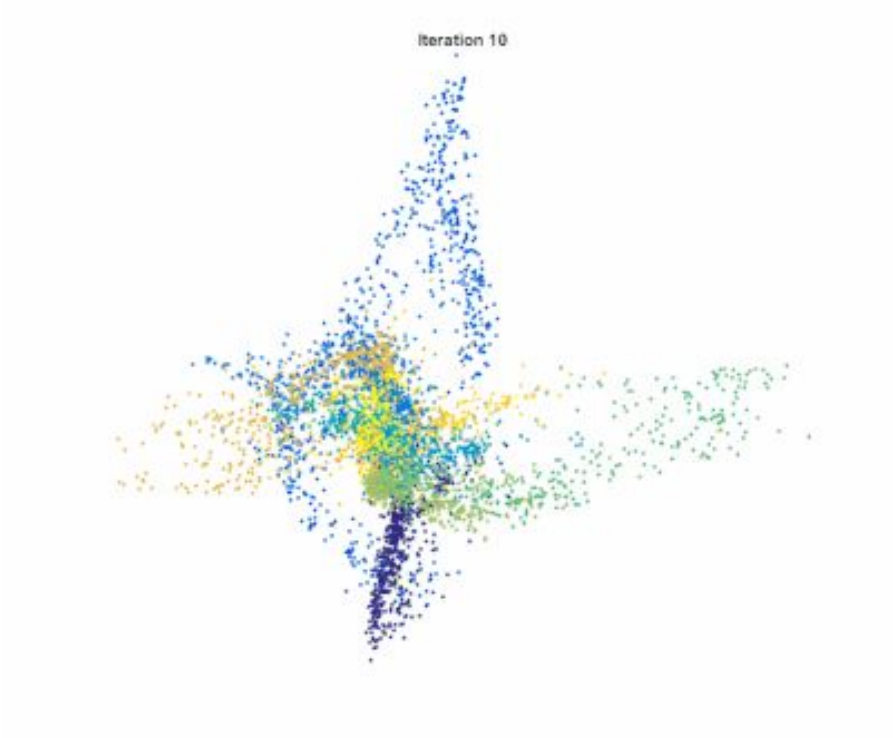
Обучение без учителя (unsupervised learning):

Или анализ данных без разметки. В зависимости от предположений о данных и задаче можно условно разделить на:

1. кластерный анализ (кластеризация), агрегация.
2. обнаружение аномалий (anomaly detection)
3. методы снижения размерности (dimensionality reduction, component analysis, feature engineering)

1. Кластерный анализ

Кластеризация текстов



https://cai.tools.sap/blog/introduction-text-clustering/

Кластеризация

Кластерный анализ (англ. cluster analysis) — многомерная статистическая процедура, выполняющая сбор данных, содержащих информацию о выборке объектов, и затем упорядочивающая объекты в сравнительно однородные группы. Задача кластеризации относится к статистической обработке, а также к широкому классу задач обучения без учителя.

Реализации алгоритмов: https://scikit-learn.org/0.18/auto_examples/cluster/plot_cluster_comparison.html, https://scikit-learn.org/stable/modules/clustering.html#k-means

Лекция: https://ru.coursera.org/lecture/unsupervised-learning/vybor-mietoda-klastierizatsii-RZSVo

Unsupervised learning: https://ru.coursera.org/learn/unsupervised-learning

Суровая реальность:

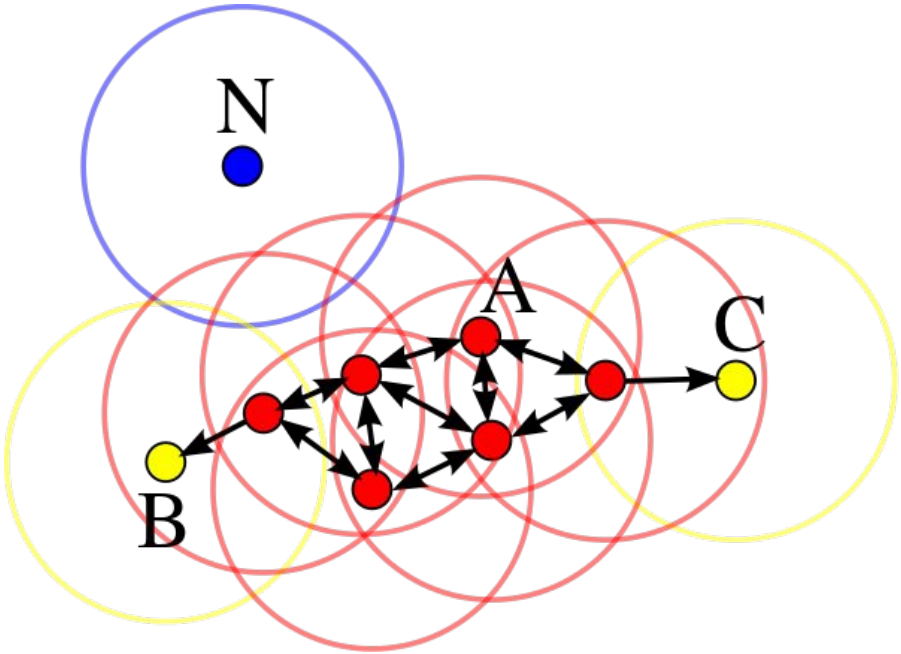
Универсального алгоритма кластеризации нет, но можно подбирать алгоритм под тип данных.

Кластеризация часто подразумевает предположение о количестве классов.

DBSCAN

Основанная на плотности пространственная кластеризация для приложений с шумами (англ. Density-based spatial clustering of applications with noise, DBSCAN).

DBSCAN требует задания двух параметров: радиуса окружности *epsilon* и минимального числа точек, которые должны образовывать плотную область

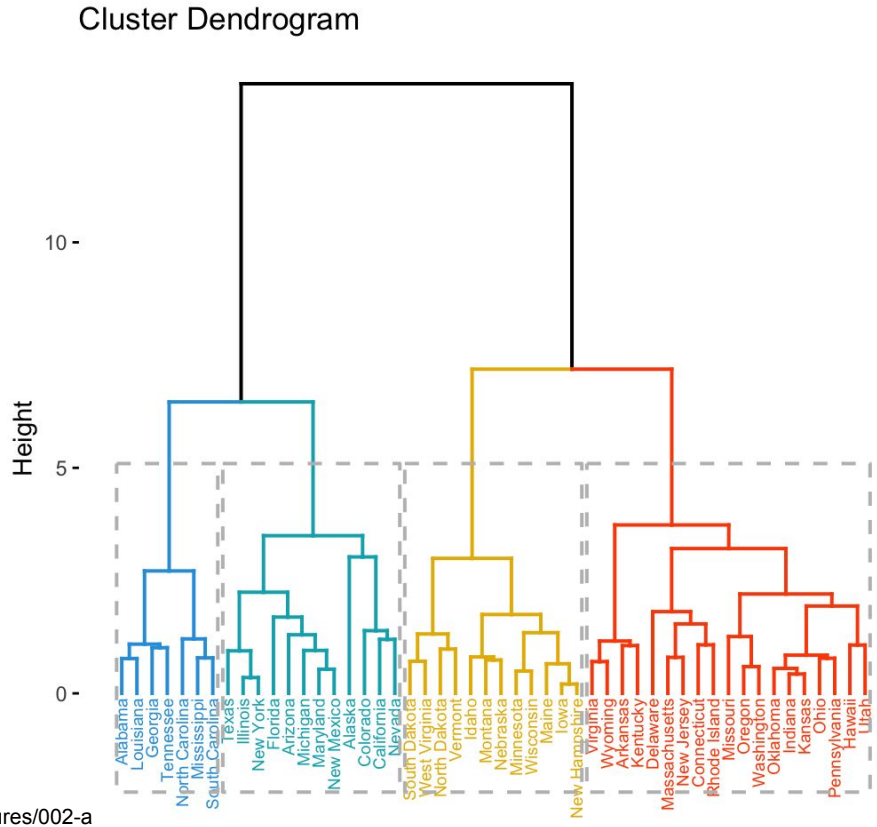


https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/a/af/DBSCAN-Illustration.svg/600px-DBSCAN-Illustration.svg.png

Agglomerative clustering

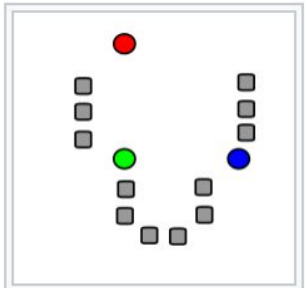
Итеративно соединяет пары классов (изначальной каждый элемент это отдельный класс) в соответствии с расстоянием на выбранной метрикой.

```
sklearn.cluster.AgglomerativeCluster
ing(n_clusters=2,
affinity='euclidean',
memory=None,...)
```

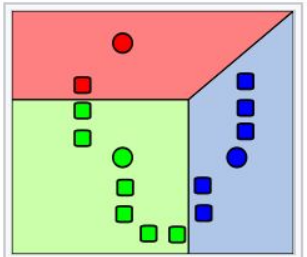


https://www.datanovia.com/en/wp-content/uploads/dn-tutorials/003-hierarchical-clustering-in-r/figures/002-agglomerative-clustering-cutree-cut-dendrogram-1.png

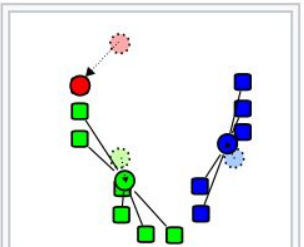
Пример: Метод k- средних



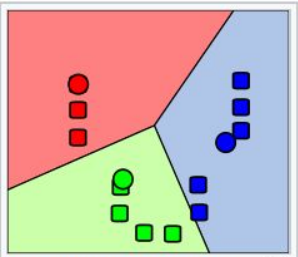
Исходные точки и случайно выбранные начальные точки.



Точки, отнесённые к начальным центрам. Разбиение на плоскости — диаграмма Вороного относительно начальных центров.



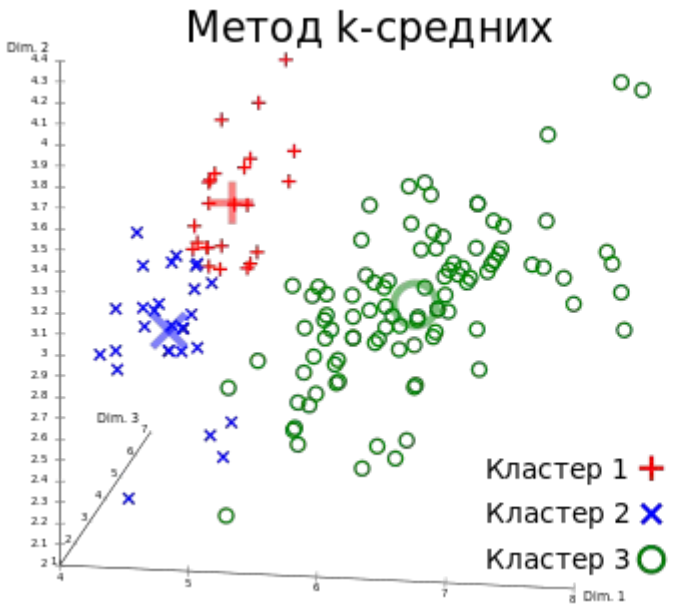
Вычисление новых центров кластеров (Ищется центр масс).

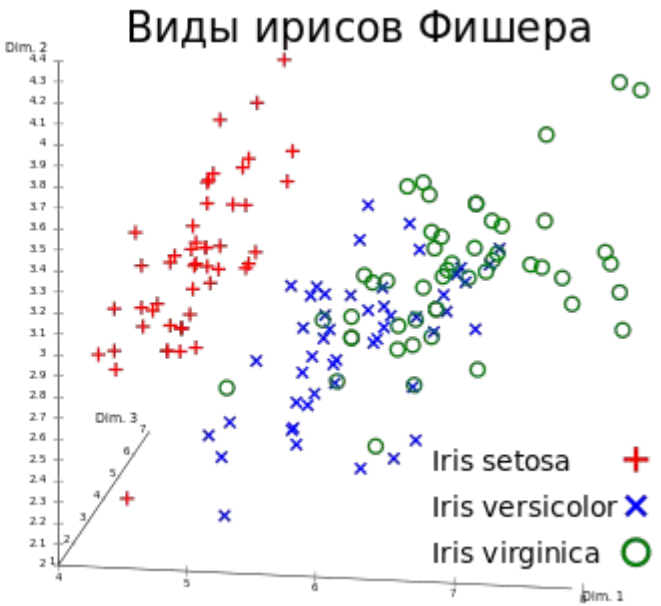


Предыдущие шаги, за исключением первого, повторяются, пока алгоритм не сойдётся.

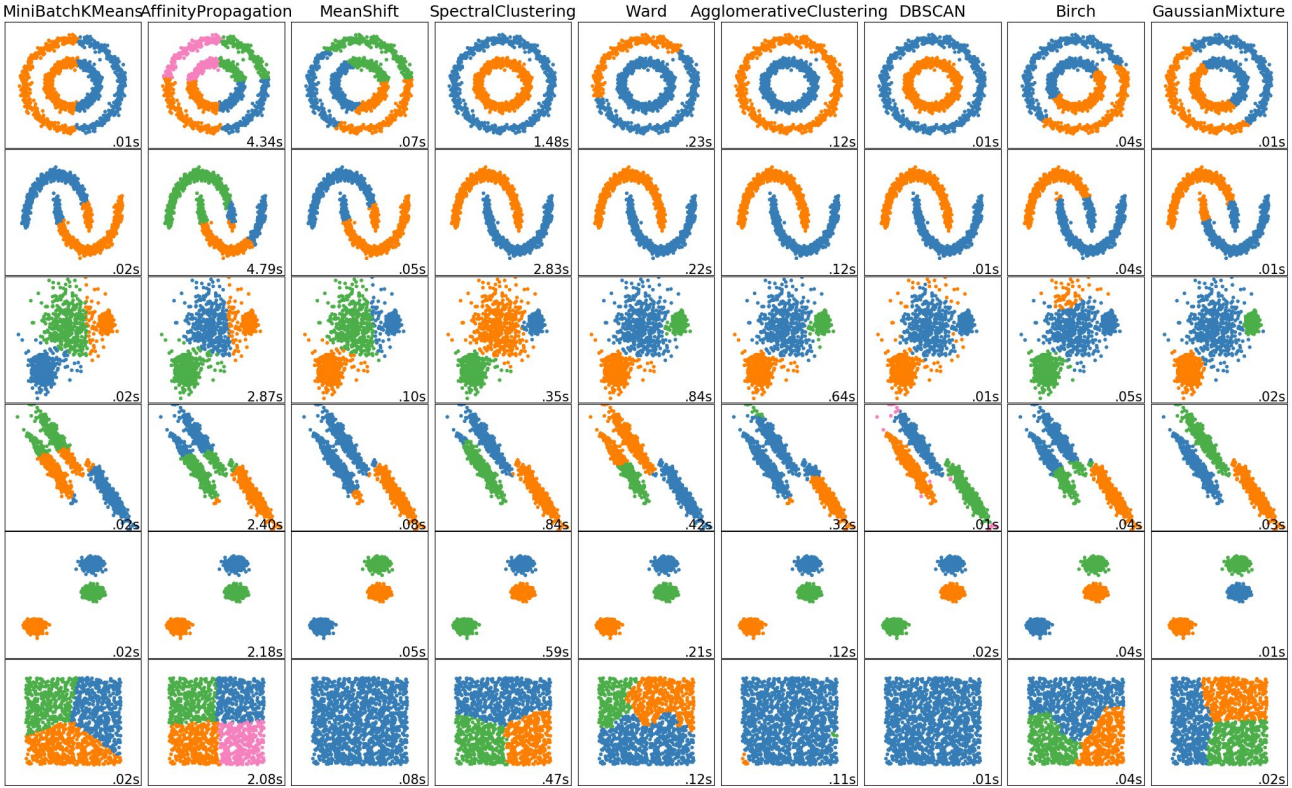
Минусы метода k-средних

- Не гарантируется достижение глобального минимума суммарного квадратичного отклонения *V*, а только одного из локальных минимумов.
- Результат зависит от выбора исходных центров кластеров, их оптимальный выбор неизвестен.





Кластерный анализ



https://scikit-learn.org/0.18/auto_examples/cluster/plot_cluster_comparison.html

Разделение на “жесткий” и “мягкий” кластеринг:

K-Means

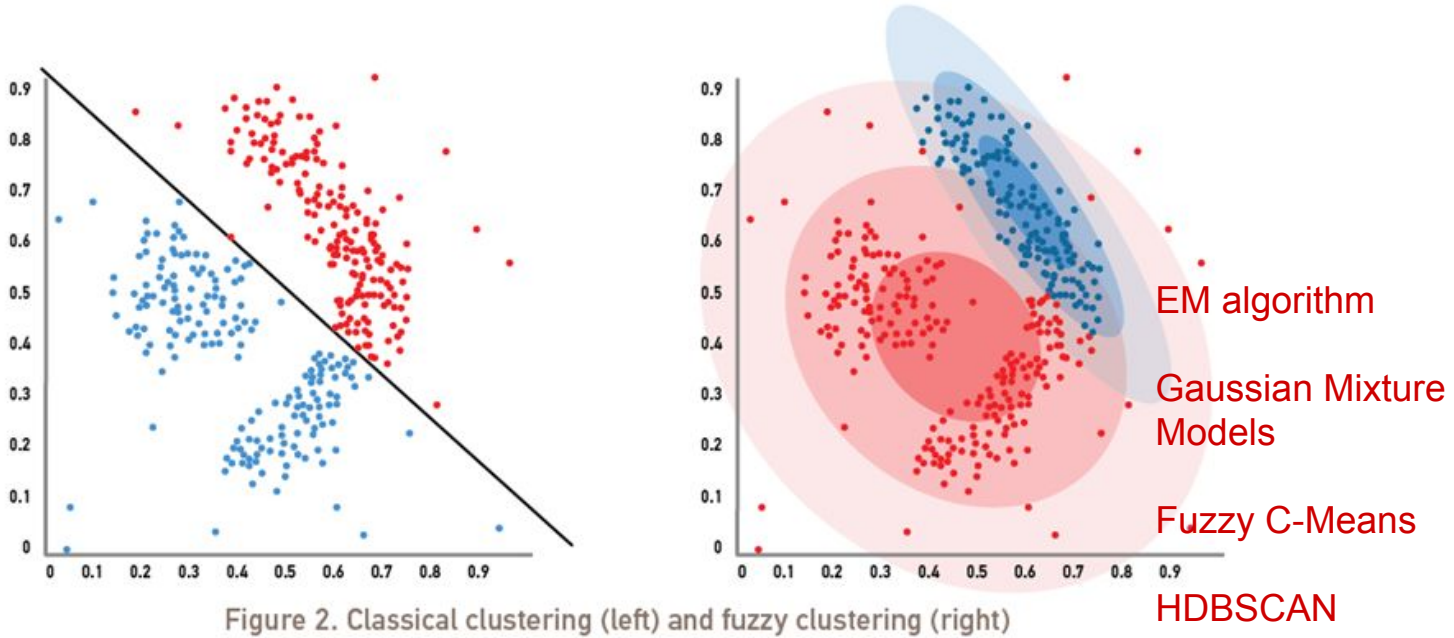


Figure 2. Classical clustering (left) and fuzzy clustering (right)

EM algorithm

Gaussian Mixture Models

Fuzzy C-Means

HDBSCAN

https://en.wikipedia.org/wiki/Fuzzy_clustering

https://www.weareworldquant.com/media/1615/fig-2-web-01.png?mode=pad&width=1000&upscale=false&rnd=131680266910000000

Метрики оценивания алгоритмов кластеризации

- Полнота (completeness)

all members of a given class are assigned to the same cluster.

- Гомогенность (homogeneity)

each cluster contains only members of a single class

- v_ score, silhouette score

v = 2 * (homogeneity * completeness) / (homogeneity + completeness)

https://scikit-learn.org/0.18/modules/generated/sklearn.metrics.completeness_score.html#sklearn.metrics.completeness_score

Метрики оценивания алгоритмов кластеризации

```
>>> from sklearn import metrics
>>> labels true = [0, 0, 0, 1, 1, 1]
>>> labels_pred = [0, 0, 1, 1, 2, 2]

>>> metrics.homogeneity_score(labels_true, labels_pred)
0.66...

>>> metrics.completeness_score(labels_true, labels_pred)
  0.42...
```

https://esigma6.wordpress.com/2018/11/03/2-3-9-3-homogeneity-completeness-and-v-measure/

2. Методы снижения размерности

Зачем нужно снижать размерность выборки?

Как уменьшить размерность выборки?

Методы снижения размерности

Как уменьшить размерность выборки?

- удалить неинформативные характеристики объектов (т.е. те, которые вносят наименьший вклад в формирование решающего правила)
- преобразовать имеющиеся характеристики новые, количество которых уменьшит размерность выборки, без потери информации.

Как это сделать?

Методы снижения размерности

Как уменьшить размерность выборки?

- удалить неинформативные характеристики объектов (т.е. те, которые вносят наименьший вклад в формирование решающего правила)
- преобразовать имеющиеся характеристики новые, количество которых уменьшит размерность выборки, без потери информации.

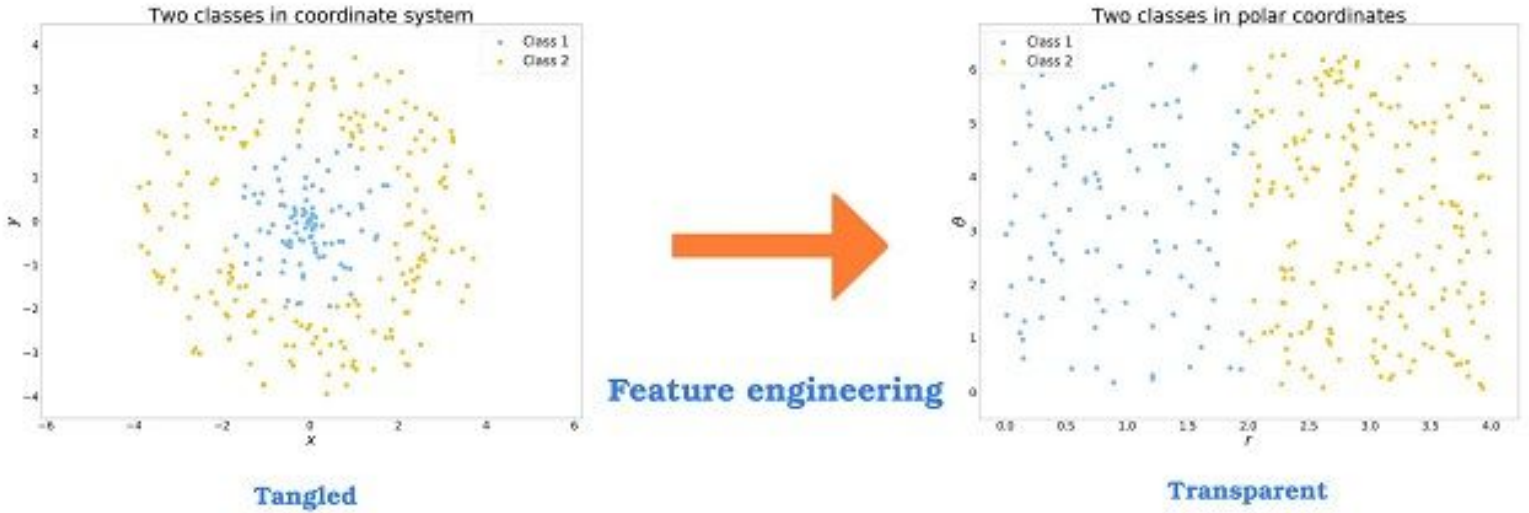
Как это сделать?

- **feature engineering, dimensionality reduction methods** (часто подразумевается manifold learning, или геометрические методы снижения размерности)

Генерация признаков (Feature engineering):

В контексте методов снижения размерности данных и анализа компонент (component analysis), можно говорить о генерации новых признаков, признаков пониженной размерности на многообразии данных.

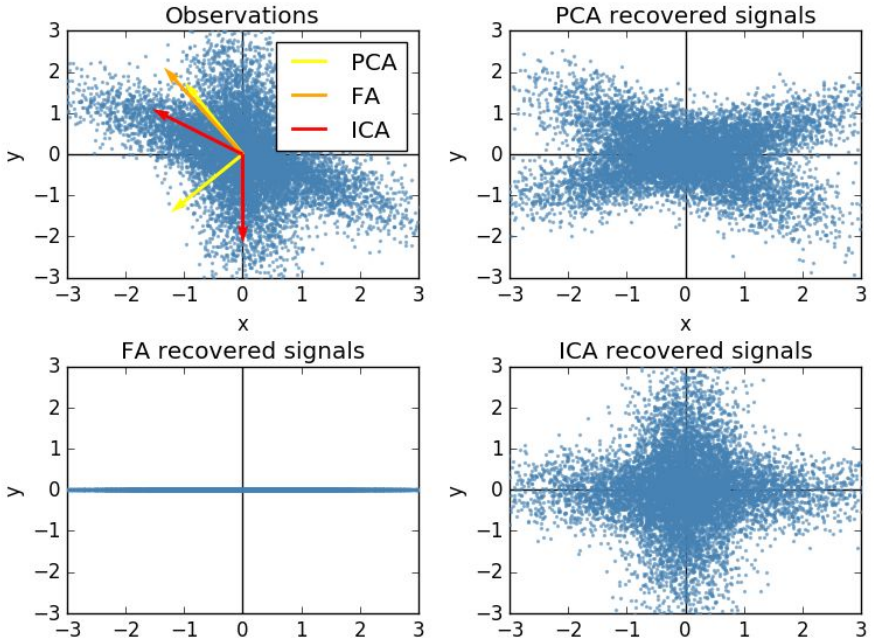
Feature engineering



feature engineering - генерация новых признаков, разделяющих данные

Снижение размерности

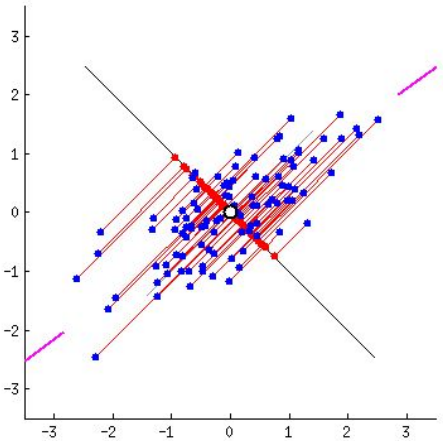
- Линейные (PCA, SVD, ICA и др.)
- Нелинейные (Isomap, tSNE (часто используют как бейзлайн для deep learning) и др.)



https://i.stack.imgur.com/Q0tvQ.png

Снижение размерности данных. PCA

PCA aims to find linearly uncorrelated orthogonal axes, which are also known as principal components (PCs) in the *m* dimensional space to project the data points onto those PCs.



https://towardsdatascience.com/pca-and-svd-explained-with-numpy-5d13b0d2a4d8

Снижение размерности данных. PCA

The PCs can be determined via eigen decomposition of the covariance matrix ***C***. After all, the geometrical meaning of eigen decomposition is to find a new coordinate system of the eigenvectors for ***C*** through rotations.

$$\mathbf{C} = \frac{\mathbf{X}^\top \mathbf{X}}{n-1}$$

Covariance matrix of a 0-centered matrix **X**

$$\mathbf{C} = \mathbf{W}\mathbf{\Lambda}\mathbf{W}^{-1}$$

Eigendecomposition of the covariance matrix **C**

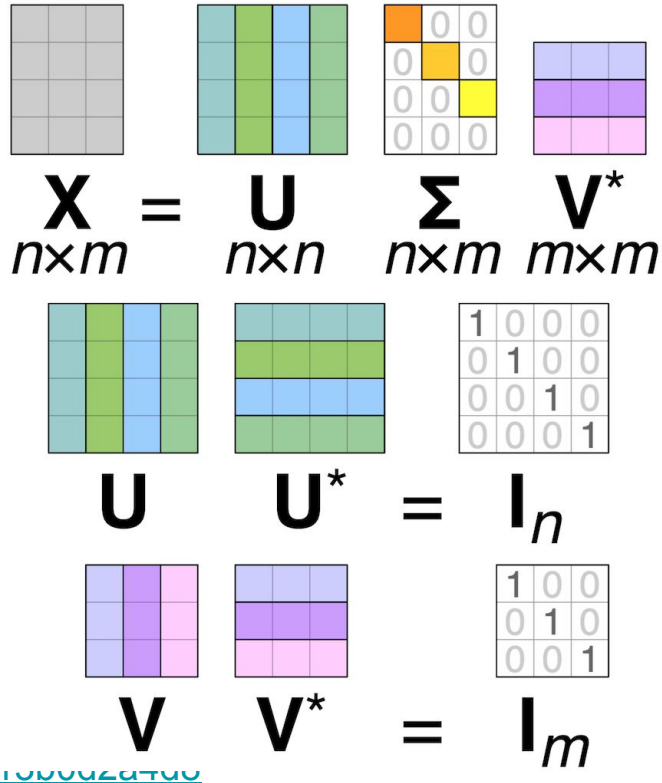
$$\mathbf{X}_k = \mathbf{X}\mathbf{W}_k$$

Project data onto the first k PCs

https://towardsdatascience.com/pca-and-svd-explained-with-numpy-5d13b0d2a4d8

Снижение размерности данных. SVD

SVD is another decomposition method for both real and complex matrices. It decomposes a matrix into the product of two unitary matrices ($\boldsymbol{U}$, $\boldsymbol{V}^*$) and a rectangular diagonal matrix of singular values ($\boldsymbol{\Sigma}$):

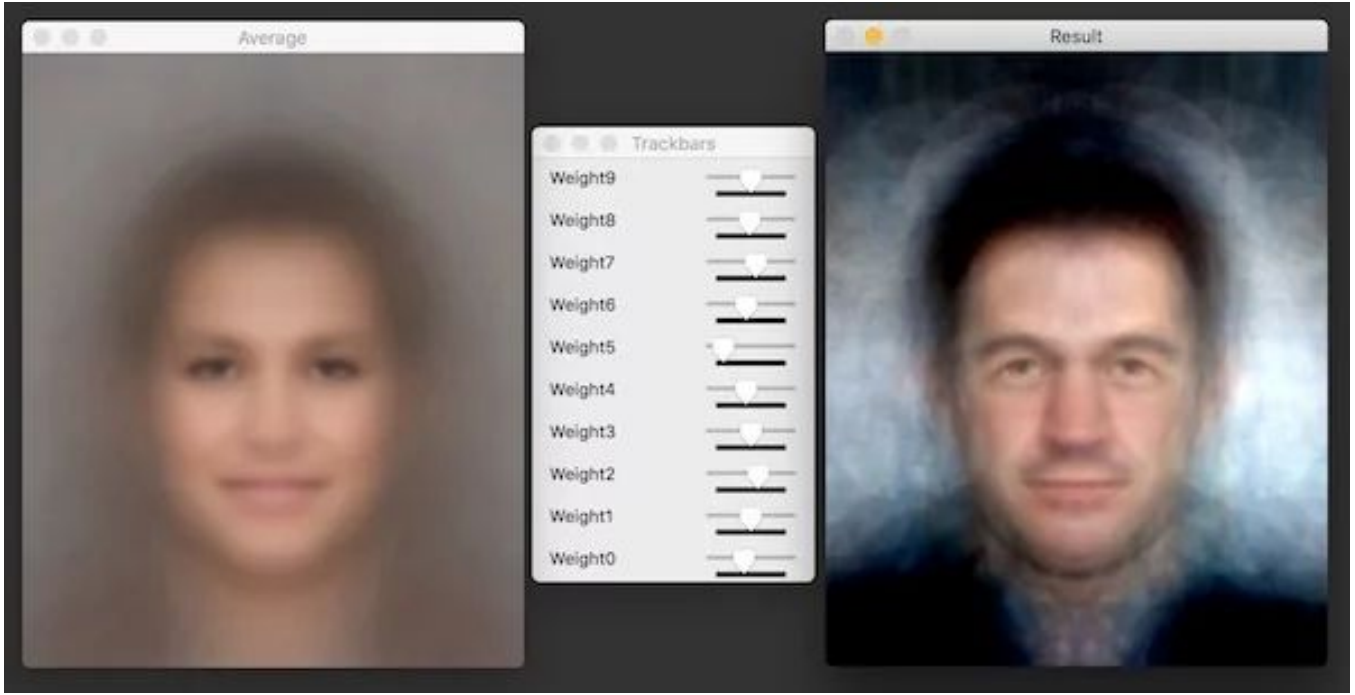


$$\Lambda = \frac{\Sigma^2}{n-1}$$

Relationship between eigenvalue and singular values

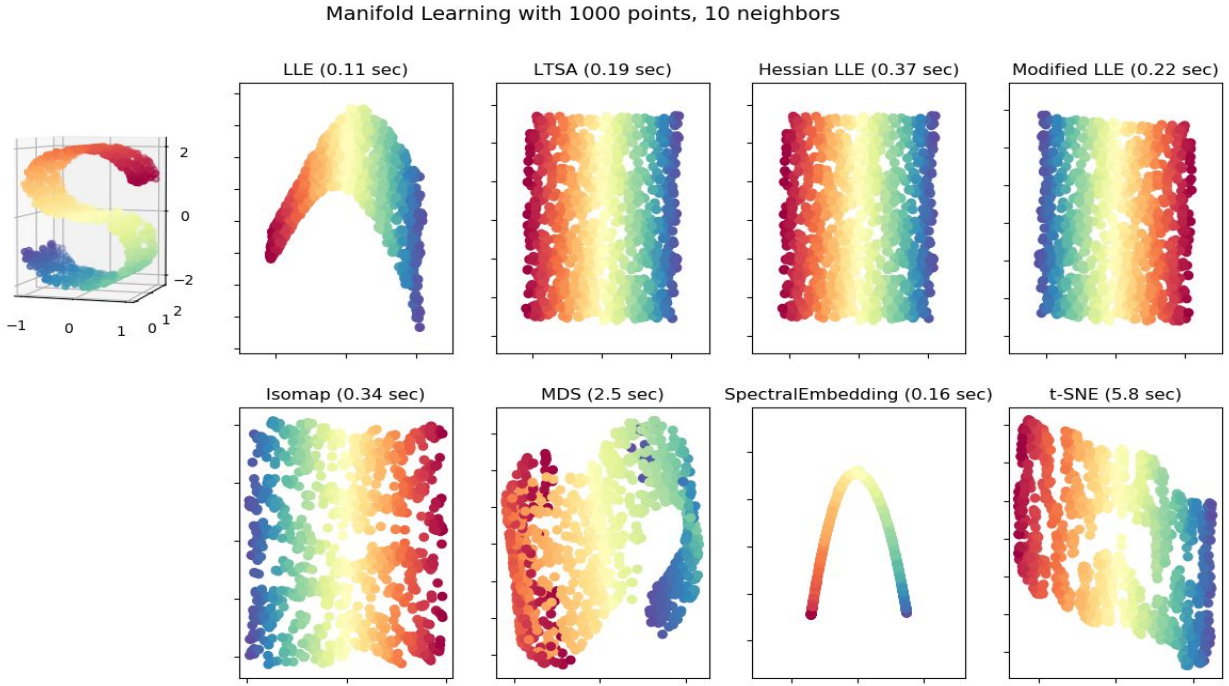
https://towardsdatascience.com/pca-and-svd-explained-with-numpy-5d

Eigenfaces



https://www.learnopencv.com/eigenface-using-opencv-c-python/

Нелинейные методы снижения размерности



https://scikit-learn.org/stable/modules/manifold.html

Источники:

Реализации алгоритмов: https://scikit-learn.org/0.18/auto_examples/cluster/plot_cluster_comparison.html, https://scikit-learn.org/stable/modules/clustering.html#k-means

Кластерный анализ сравнение: https://proglib.io/p/unsupervised-ml-with-python/

Лекция: https://ru.coursera.org/lecture/unsupervised-learning/vybor-mietoda-klastierizatsii-RZSVo

Методы снижения размерности:

Линейные https://ru.coursera.org/lecture/unsupervised-learning/mietod-ghlavnykh-komponient-rieshieniie-e72bH
https://ru.coursera.org/lecture/python-for-data-science/mietod-glavnykh-komponient-principal-component-analysis-X8bem

Нелинейные
https://ru.coursera.org/lecture/vvedenie-mashinnoe-obuchenie/nielinieinyie-mietody-ponizhieniia-razmiernosti-QloeT

*Unsupervised learning: https://ru.coursera.org/learn/unsupervised-learning