unüberwachtes Lernen

Autor und Herausgeber

Alexander Jung*, Department of Computer Science, Aalto University, Espoo, Finland (ORCID 0000-0001-7538-0990)
Editors: Konstantina Olioumtsevits (ORCID 0000-0003-2697-8659), Ekkehard Schnoor (ORCID 0000-0001-8252-1499), Aalto University, Espoo, Finland
*Corresponding author: alex.jung@aalto.fi

Zusammenfassung

Unüberwachtes Lernen bezeichnet Methoden des maschinelles Lernen (ML)s, die keine Kenntnis des Labels irgendeines Datenpunkts erfordern. Diese Methoden lernen eine Hypothese mittels Verlustfunktionen, die ausschließlich aus den Merkmalen von Datenpunkteen konstruiert werden. Zwei wichtige Beispiele für unüberwachtes Lernen sind das Clustering und die Dimensionsreduktion. Methoden des Clusterings verwenden ein Maß für den Clusteringfehler, um Modellparameter zu lernen, die eine Cluster-Struktur kodieren. Methoden der Dimensionsreduktion konstruieren einen Verlust aus dem Rekonstruktionsfehler.

Definition

Zwanzig Tage in Krems an der Donau sind jeweils durch zwei Merkmale charakterisiert, die tägliche Tiefst- und die tägliche Höchsttemperatur, und darüber hinaus ist nichts über sie aufgezeichnet (Abb. 1). Methoden des unüberwachten Lernens lernen eine Hypothese-Abbildung, die ein Label vorhersagt, das für keinen dieser Datenpunktee bekannt ist. Zum Beispiel könnte das Label ein Index sein, der einen von zwei Clustern auswählt, zu dem der Datenpunkt gehört. Ein anderes Label könnte die optimale skalare Darstellung eines Datenpunkts sein.

Formal lernt eine unüberwachte Methode des maschinelles Lernen (ML)s eine Hypothese aus einem Hypothesenraum anhand eines ungelabelten Datensatzes $\mathcal{D} = \left\{\mathbf{x}^{(1)}, \ldots, \mathbf{x}^{(m)}\right\}$ von Merkmalsvektoren $\mathbf{x}^{(r)} \in \mathcal{X}$, ohne Labelraum. Die Modellparameter werden typischerweise durch eine Instanz der empirische Risikominimierung (ERM) gelernt, indem der durchschnittliche Verlust über den Datensatz minimiert wird,

$$\widehat{h} \in \arg\min_{h \in \mathcal{H}} \frac{1}{m} \sum_{r=1}^{m} L\left(\mathbf{x}^{(r)}, h\right).$$

Was unüberwachte Methoden von überwachten Methoden, wie der lineare Regression, unterscheidet, ist die Wahl der Verlustfunktion.

Zwei wichtige Familien unüberwachter Methoden ergeben sich durch spezifische Konstruktionen des Verlusts, das Clustering und die Dimensionsreduktion. Die Clustering-Methode k-Means verwendet k Clusterzentren als Modellparameter $\mathbf{w} = \left\{\mathbf{w}^{(1)}, \ldots, \mathbf{w}^{(k)}\right\}$ (Hastie et al., 2009, Sect. 14.3.6). Sie werden gelernt,

indem der durchschnittliche Clusteringfehler minimiert wird, der Verlust

$$L\left(\mathbf{x}, \mathbf{w}\right) = \min_{c=1,\ldots,k} \left\| \mathbf{x} - \mathbf{w}^{(c)} \right\|_2^2.$$

Die Hauptkomponentenanalyse (PCA) ist eine Methode der Dimensionsreduktion, die eine lineare Merkmalstransformation $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{W}\mathbf{x}$ zusammen mit einer Rekonstruktionsabbildung $\mathbf{z} \mapsto \mathbf{R}\mathbf{z}$ lernt, die den Merkmalsvektor daraus wiederherstellt. Beide sind Modellparameter, und für ein gegebenes $\mathbf{R}$ ist der Verlust eines Datenpunkts sein Rekonstruktionsfehler

$$L\left(\mathbf{x}, (\mathbf{W}, \mathbf{R})\right) = \left\| \mathbf{x} - \mathbf{R}\mathbf{W}\mathbf{x} \right\|_2^2.$$

Ein einziges $\mathbf{R}$ wird für den gesamten Datensatz verwendet, und die ERM lernt es zusammen mit $\mathbf{W}$, indem der Durchschnitt dieses Verlusts minimiert wird (Hastie et al., 2009, Sect. 14.5.1). Für das gelernte Paar ist die Rekonstruktion die orthogonale Projektion des Merkmalsvektors auf einen Unterraum der Dimension d'. Abb. 1 zeigt beides anhand der Tage in Krems: die zwei Clusterzentren mit den jeweils zugeordneten Datenpunkteen sowie die gelernte Richtung mit den orthogonale Projektionen, die jedem Tag seine einzelne Zahl zuweisen.

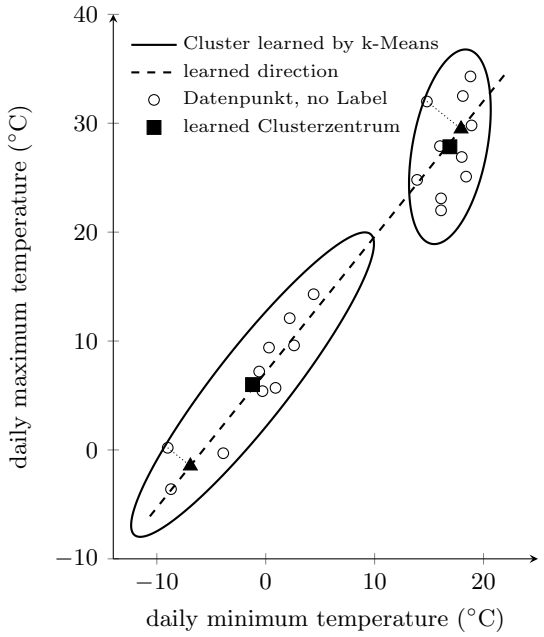


Abbildung 1: Zwanzig Wetteraufzeichnungen in Krems an der Donau, jeweils ein Datenpunkt mit zwei Merkmalen und ohne Label. Die Clustering-Methode k-Means hat die zwei Clusterzentren (ausgefüllte Quadrate) gelernt, und die durchgezogenen Ellipsen umschließen die jeweils zugeordneten Datenpunktee. Die gestrichelte Linie gibt die Richtung an, die durch eine lineare Merkmalstransformation gelernt wurde. Die ausgefüllten Dreiecke markieren die orthogonale Projektionen, die jeden Datenpunkt durch eine einzige Zahl darstellen, die Position des Dreiecks entlang der gestrichelten Linie. In keine der beiden Berechnungen ist ein Label eingegangen. Daten erzeugt mit `pythondemos/unsupervisedlearning.py`

Siehe auch: Clustering, k-Means, Clusterzentrum, Dimensionsreduktion, PCA, Merkmalstransformation, Repräsentationslernen, Label, Datensatz, ERM, Verlust, überwachtes Lernen, selbstüberwachtes Lernen, semiüberwachtes Lernen (SSL), Clusteringfehler.

Querverweise

Literatur

1. Hastie et al. (2009). The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction. 2nd ed., Springer Science+Business Media, New York, NY, USA.