Makine Öğrenmesi

Güdümsüz Öğrenme

İlker Birbil ve Utku Karaca

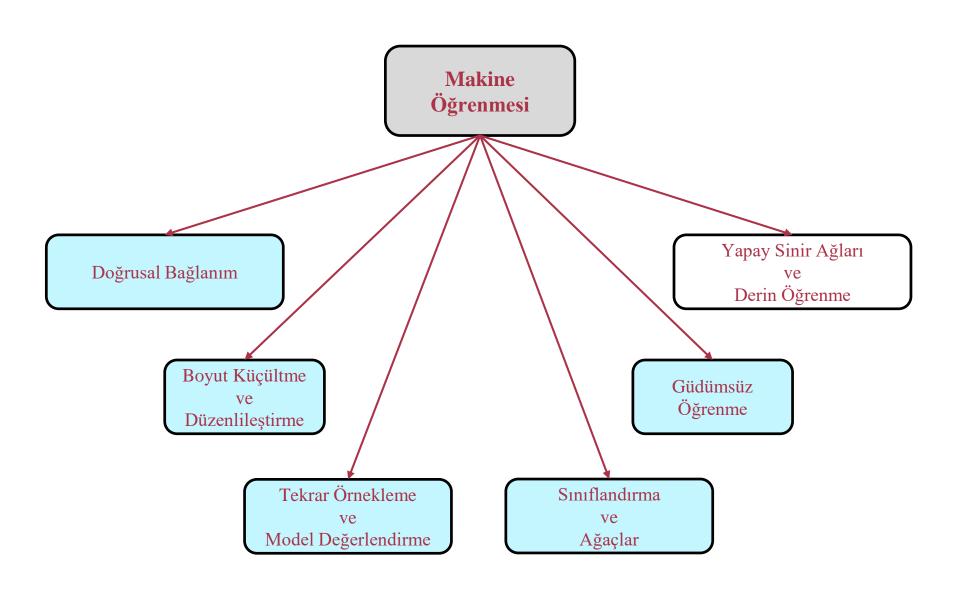
Erasmus Üniversitesi Rotterdam

İstanbul'da Makine Öğrenmesi

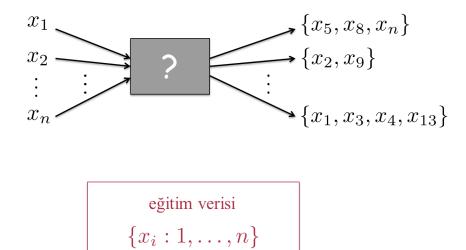
27 Ocak – 2 Şubat, 2020





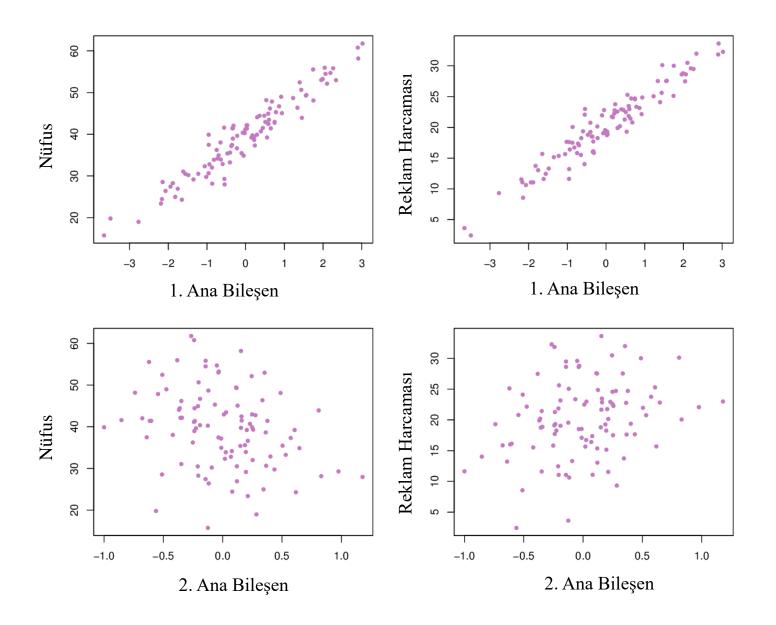


Güdümsüz Öğrenme

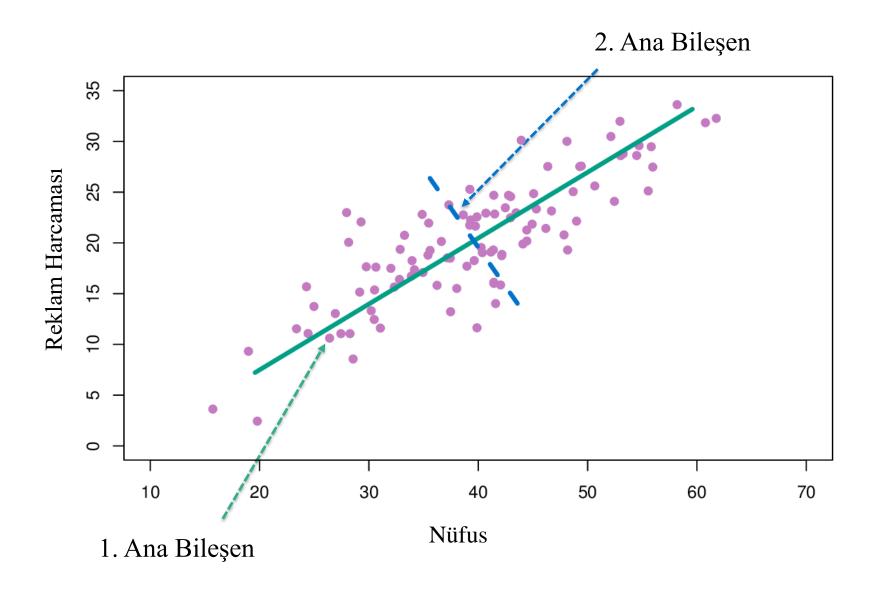


- Ana Bileşenler Analizi (Principal Component Analysis): Varyansın en yüksek olduğu kısımları göz önüne alacak şekilde değişkenleri birleştirme
- Gruplandırma (clustering): Veri kümesi içerisinde benzer alt grupları bulma
 - O K-ortalamalar (K-means) gruplandırma
 - O Hiyerarşik (hierarchical) gruplandırma
 - O Spektral (spectral) gruplandırma
- Matris Ayrıştırma
- Google PageRank Algoritması

Resimlerle Ana Bileşenler Analizi



Resimlerle Ana Bileşenler Analizi



$$Z_1 = \phi_{11}X_1 + \phi_{21}X_2 + \dots + \phi_{p1}X_p$$

Değişkenlerin ortalamalarının sıfır olacağı kabul edilir

birinci ana bileşenin skorları
$$(z_{i1}) = \phi_{11}x_{i1} + \phi_{21}x_{i2} + \cdots + \phi_{p1}x_{ip}$$
Birinci ana bileşenin ağırlıkları (loadings)

Varyansı en fazla yapacak doğrultuyu bulma

enbüyükle
$$\phi_1 \in \mathbb{R}^p$$

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\phi_1^\intercal x_i)^2$$

$$\ddot{z}_{i1}^2$$

$$\ddot{y}$$

$X^{\mathsf{T}} = [x_1, x_2, \dots, x_n]$$

enbüyükle
$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\underbrace{(\phi_{1}^{\intercal}x_{i})^{2}}_{z_{i1}^{2}}$$
 \equiv enbüyükle $\frac{1}{n}\phi_{1}^{\intercal}X^{\intercal}X\phi_{1}$ $\phi_{1}\in\mathbb{R}^{p}$ $\phi_{1}\in\mathbb{R}^{p}$ $\phi_{1}^{\intercal}\phi_{1}=1.$

enbüyükle
$$\frac{1}{n}\phi_1^\intercal X^\intercal X\phi_1$$
 enbüyükle $\phi_1 \in \mathbb{R}^p$ öyle ki $\phi_1^\intercal \phi_1 = 1$. öyle ki

$$\frac{1}{n}\phi_2^\intercal X^\intercal X\phi_2$$

$$\phi_2^\intercal \phi_2 = 1, \ \phi_1^\intercal \phi_2 = 0.$$

Birinci ana bileşenle korelasyona engel olmak için eklenir (diklik kısıtı)

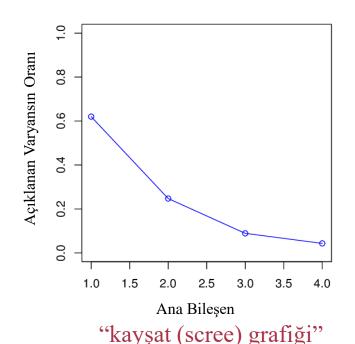
Ana bileşen doğrultuları (ϕ_1, ϕ_2, \dots) , buradaki $X^{\mathsf{T}}X$ matrisinin sıralı özvektörlerine karşılık gelir.

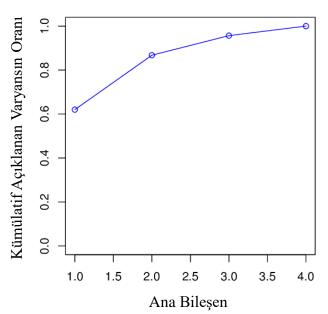
Varyansın Açıklanması

$$\sum_{i=1}^{p} Var(X_j) = \sum_{j=1}^{p} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_{ij}^2$$

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} z_{im}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{p} \phi_{jm} x_{ij} \right)^2$$

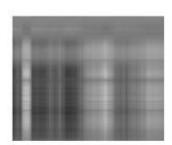
$$\frac{\sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{p} \phi_{jm} x_{ij}\right)^{2}}{\sum_{j=1}^{p} \sum_{i=1}^{n} x_{ij}^{2}}$$





Görüntü Sıkıştırma





(a) 1 principal component



(d) 13 principal component



(b) 5 principal component



(e) 17 principal component



(c) 9 principal component



(f) 21 principal component

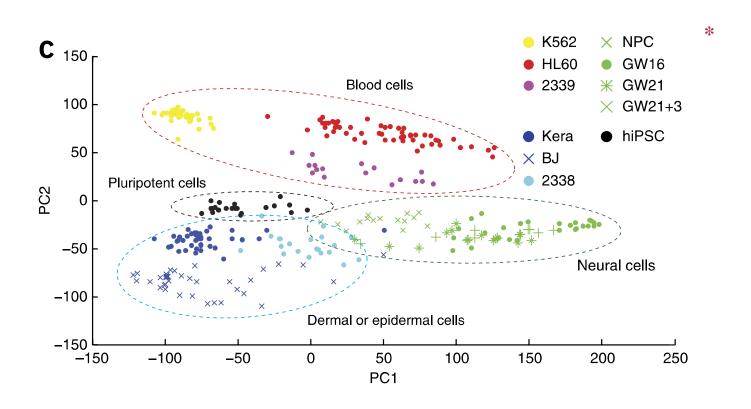


(g) 25 principal component



(h) 29 principal component

Ana Bileşenler Analizi Biyoteknoloji



^{*}Low-coverage single-cell mRNA sequencing reveals cellular heterogeneity and activated signaling pathways in developing cerebral cortex, A. A. Pollen vd., Nature Biotechnology, 32, syf. 1053-1058, 2014.

Benzemezlik Ölçüleri

- Kritik Nokta: İki nokta arasındaki uzaklık veya benzemelik
- İyi bir ölçü (genellikle) algoritmadan daha önemlidir
- Eksik değerler için dikkatlı olunmalı

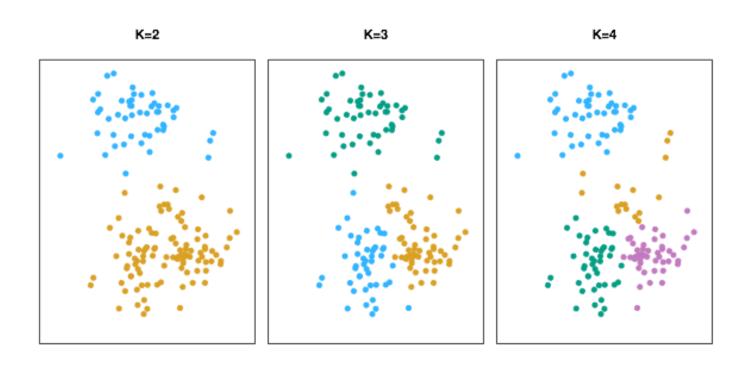
Algoritmaların çoğu K küme arasında toplam benzemezliği enküçükler:

$$W(C) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \sum_{C(i)=k} \sum_{C(j)=k} d(x_i, x_j)$$

$$kodlayıcı$$

$$(veri noktalarını kümelere atar)$$
 iki gözlem noktası arasındaki benzemezlik

Fikir: Birbirine yakın noktaları *K* gruptan birine atamak



Optimizasyon problemi?

Performans: Her noktanın ait olduğu grup merkezine (geometrik merkez) olan mesafesini hesapla ve tüm mesafeleri topla

$$z_{ik} = \begin{cases} 1, & \text{eğer } i \text{ noktası } k \text{ grubunda ise;} \\ 0, & \text{aksi halde.} \end{cases}$$

enküçükle
$$\sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{n} \|x_i - \mu_k\|^2 z_{ik}$$
 öyle ki $\sum_{k=1}^{K} z_{ik} = 1, \quad i = 1, \dots, n;$ ZOR! $z_{ik} \in \{0, 1\}, \quad i = 1, \dots, n; k = 1, \dots, K;$ $\mu_k \in \mathbb{R}^p, \quad k = 1, \dots, K.$

Yaklaşık çözüm?

Her noktayı bir gruba rassal olarak ata

rassal bir
$$\bar{k} \in \{1, \dots, K\}$$
 için $z_{i\bar{k}}^0 = 1$ $k \in \{1, \dots, K\}$ ve $k \neq \bar{k}$ için $z_{ik}^0 = 0$ $t = 1$

Gruplar değiştiği sürece aşağıdaki adımları tekrarla

Çöz
$$\mu^t = \arg\min_{\mu} \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^n \|x_i - \mu_k\|^2 \underbrace{z_{ik}^{t-1}}_{\text{sabit}}$$
Çöz
$$z^t = \arg\min_{z} \quad \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^n \|x_i - \underbrace{\mu_k^t}_{z_{ik}}\|^2 z_{ik}$$
öyle ki
$$\sum_{k=1}^K z_{ik} = 1, \quad i = 1, \dots, n;$$

$$z_{ik} \in \{0, 1\}, \quad i = 1, \dots, n; k = 1, \dots, K.$$

$$t \leftarrow t + 1$$

Amaç fonsiyonu her döngüde azalır ya da değerini korur

$$\sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{n} \|x_i - \mu_k^{t-1}\|^2 z_{ik}^{t-1} \ge \sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{n} \|x_i - \mu_k^{t}\|^2 z_{ik}^{t-1}$$
$$\ge \sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{n} \|x_i - \mu_k^{t}\|^2 z_{ik}^{t}$$

Alt problemler

$$\mu^{t} = \underset{\mu}{\operatorname{arg\,min}} \sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{n} \|x_{i} - \mu_{k}\|^{2} \underbrace{z_{ik}^{t-1}}_{\text{sabit}} \longrightarrow \left[\mu_{k}^{t} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_{i} z_{ik}^{t-1}}{\sum_{i=1}^{n} z_{ik}^{t-1}} \right]$$

 $\mu_k^t : t-1 \text{ adımındaki}$ k grubunun geometrik merkezi (centroid)

i noktasını, en yakınındaki geometrik merkezin grubuna ata

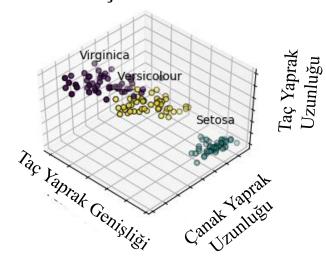
Yerel Çözümler



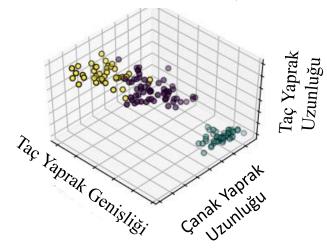
Pratikte

```
# Modified from
     # https://scikit-learn.org/stable/auto examples/clu
     # plot cluster iris.html#sphx-glr-auto-examples-clu
     import numpy as np
     import matplotlib.pyplot as plt
    from mpl toolkits.mplot3d import Axes3D
     from sklearn.cluster import KMeans
10
     from sklearn import datasets
11
12
     iris = datasets.load iris()
13
     X = iris.data
14
    y = iris.target
15
     num of clusters = 3
     k_means_iris = KMeans(n_clusters=num_of_clusters)
17
18
19
     k_means_iris.fit(X)
    labels = k means iris.labels
20
21
```

Gerçek Etiketler



K-Ortalama Etiketleri, K=3



K-Medoit Gruplandırma Algoritması

- K-ortalama gibi adımlar izler fakat herhangi bir benzemezlik ölçüsüyle çalışır
- Grup merkezi gözlem noktalarından birisidir :

$$i_k^t = \underset{\{i:C(i)=k\}}{\operatorname{arg\,min}} \sum_{C(j)=k} d(x_i, x_j)$$

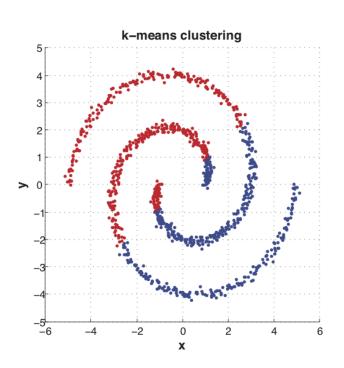
$$\mu_k^t = x_{i_k^t}$$

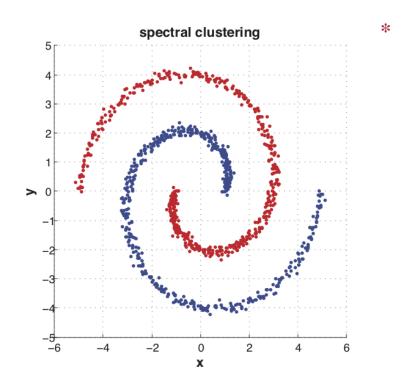
Aynı şekilde, her bir gözlem noktası en yakındaki grup merkezine atanır:

$$C(i) = \underset{k=1,...,K}{\operatorname{arg\,min}} d(x_i, \mu_k^t)$$

Ortalamaları kullanmadığımızdan K-ortalama algoritmasından daha uzun sürer

Fikir: Bir benzerlik matrisi ile veri noktalarından oluşan bir çizge (graph) tanımlamak ve çizge özdeğer (eigenvalue) analizi ile bağlantılı (connected) altçizgeleri (subgraph) belirlemek





^{*}Machine Learning – A Probabilistic Perspective, K. P. Murphy, The MIT Press, 2012, syf. 893.

Benzerlik çizgesi – her veri noktası bir düğüm G=(V,E)

Tamamen veya kısmen bağlı bir çizge olabilir (karşılıklı *K*-en yakın komşu)



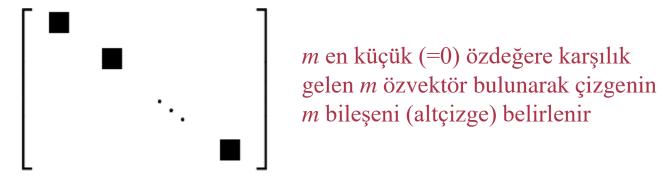
grup **içerisinde** yüksek ağırlıklar

$$w_{ij} = w_{ji} > au \ge 0$$
 $w_{ij} = \exp\left(\frac{-\|x_i - x_j\|^2}{c}\right)$ eşik değer

$$W = [w_{ij}]_{i,j}$$
 $g_i = \sum_{j=1}^{n} w_{ij}$ $G = \text{diag}(g_1, g_2, \dots, g_n)$

Çizge Laplace Matrisi

$$L = G - W$$



$$u \in \mathbb{R}^n$$

$$u^{\mathsf{T}}Lu = u^{\mathsf{T}}Gu - u^{\mathsf{T}}Wu$$

$$= \sum_{i=1}^{n} g_{i}u_{i}^{2} - \sum_{i,j=1}^{n} u_{i}u_{j}w_{ij}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}(u_{i} - u_{j})^{2}$$

$$= u^{\mathsf{T}}Lu \ge 0$$
bütün özdeğerler \ge 0

$$\begin{bmatrix} \sum_{j=1} w_{1j} & -w_{12} & \dots & -w_{1n} \\ -w_{21} & \sum_{j=1} w_{2j} & \dots & -w_{2n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ -w_{n1} & -w_{n2} & \dots & \sum_{j=1} w_{nj} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

K-Ortalamalar Gruplandırma

Fikir: Mevcut iki grup arasındaki benzerliğe (ya da benzemezliğe) bakarak yeni gruplar oluşturma

Sırasıyla m_1 ve m_2 noktadan oluşan C_1 ve C_2 grupları

Tek Bağlamalı (yığınsal kümeleme)

$$d_{SL}(C_1|C_2) = \min_{x_i \in C_1, x_j \in C_2} d(x_i, x_j)$$

Tam Bağlamalı

$$d_{\mathrm{CL}}(C_1|C_2) = \max_{x_i \in C_1, x_j \in C_2} d(x_i, x_j)$$

Grup Ortalaması

$$d_{GA}(C_1|C_2) = \frac{1}{m_1 m_2} \sum_{x_i \in C_1} \sum_{x_j \in C_2} d(x_i, x_j)$$

Gruplar:
$$\{x_1\}$$
, $\{x_2\}$, $\{x_3\}$, $\{x_4\}$, $\{x_5\}$

$$s({x_1}|{x_2}) = 5.0$$

$$s({x_1}|{x_3}) = 0.5$$

$$s({x_1}|{x_4}) = 4.5$$

$$s({x_1}|{x_5}) = 2.0$$

$$s({x_2}|{x_3}) = 4.7$$

$$s({x_2}|{x_4}) = 0.6$$

$$s({x_2}|{x_5}) = 3.0$$

$$s({x_3}|{x_4}) = 4.0$$

$$s({x_3}|{x_5}) = 2.2$$

$$s({x_4}|{x_5}) = 2.5$$

Gruplar: $\{x_1, x_3\}, \{x_2\}, \{x_4\}, \{x_5\}$

$$s({x_1, x_3}|{x_2}) = 5.0$$
 $s({x_1, x_3}|{x_4}) = 4.5$

$$s({x_1, x_3}|{x_4}) = 4.5$$

$$s({x_1, x_3}|{x_5}) = 2.2$$

 X_5

 $\bigcirc x_3$

 \bigcirc^{x_4}

$$s(\{x_2\}|\{x_4\}) = 0.6$$

$$s({x_2}|{x_5}) = 3.0$$

$$s({x_4}|{x_5}) = 2.5$$

 x_1 \bigcirc

Gruplar: $\{x_1, x_3\}, \{x_2, x_4\}, \{x_5\}$

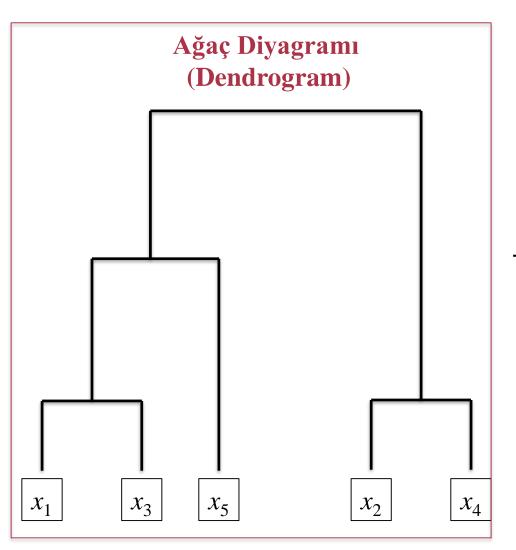
$$s({x_1, x_3}|{x_2, x_4}) = 5.0 \quad s({x_1, x_3}|{x_5}) = 2.2$$

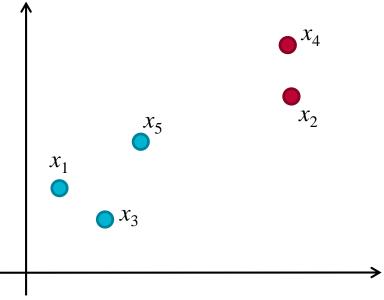
$$s({x_1, x_3}|{x_5}) = 2.2$$

$$s({x_2, x_4}|{x_5}) = 3.0$$

Gruplar: $\{x_1, x_3, x_5\}, \{x_2, x_4\}$

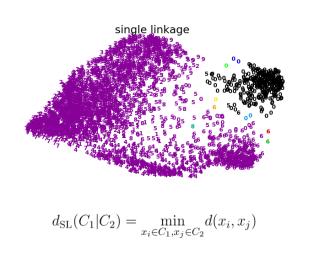
$$s({x_1, x_3, x_5}|{x_2, x_4}) = 5.0$$

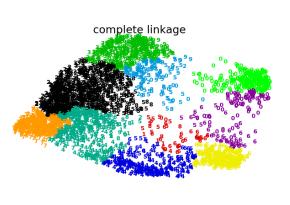




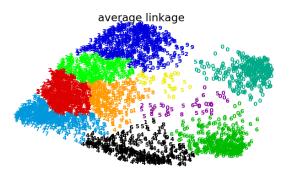
Eğer **üç** grubumuz olmasına karar verirsek, bunlar: $\{x_1, x_3\}, \{x_5\}$ ve $\{x_2, x_4\}$

- Tek bağlamalı gruplandırma, diğer gözlemler epey farklı olmasına rağmen iki grubu birkaç gözlem nedeniyle birleştirebilir
- Tam bağlamalı gruplandırma, bir gözlemi kendisine çok benzeyen gözlemleri içeren gruplar yerine yanlış bir gruba atayabilir
- Grup ortalaması ise tek ve tam bağlamalı gruplandırma arasında sayılır, fakat sayısal ölçeğe bağlıdır (ölçek değişmezliği söz konusu değildir)



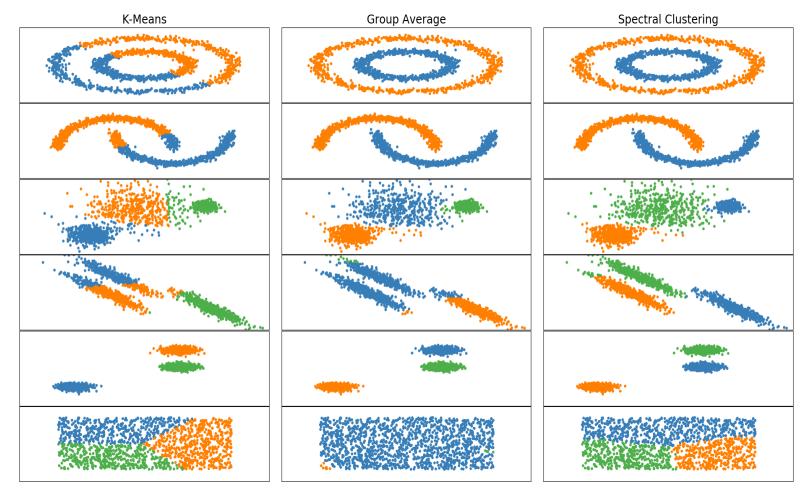






$$d_{GA}(C_1|C_2) = \frac{1}{m_1 m_2} \sum_{x_i \in C_1 x_j \in C_2} d(x_i, x_j)$$

Karşılaştırma



(kaynak)

Matris Ayrıştırma

- Veri ayrık bir matris olarak verilmiş (*Y*)
- Amaç *Y* matrisini iki matris olarak ayrıştırma
- Klasik örnek film tavsiye sistemleri

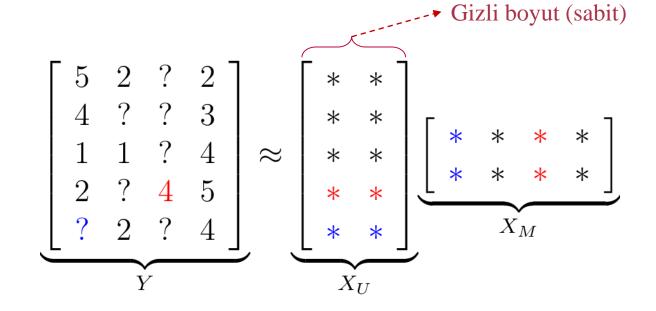
Amy	
Brad	
Carl	
Dan	
Emily	

M1	M2	M3	M4
5	2	?	2
4	?	?	3
1	1	?	4
2	?	4	5
?	2	?	4

Matris Ayrıştırma

Amy
Brad
Carl
Dan
Emily

M1	M2	M3	M4
5	2	?	2
4	?	?	3
1	1	?	4
2	?	4	5
?	2	?	4



Matris Ayrıştırma

$$(X_U^*, X_M^*) = \underset{X_U, X_M}{\operatorname{arg \, min}} \frac{1}{n} ||Y - X_U X_M||_F^2$$

- Toplam değerlendirme (rating) sayısı, *n*
- Birçok düzenlileştirme terimi eklenebilir
- Gizli boyut problemin çözümünden önce sabit alınır
- Ayrıştırılarak elde edilen matrisler bir çeşit kümeleme sayılabilir
- Dışbükey olmayan bir problem
- Bilinmeyen matrislerin birisi sabit tutulduğunda kalan problem içbükey olduğundan, matrisleri sırasıyla sabit yapacak şekilde döngülü (iterative) bir algoritma tasarlanabilir

Pratikte

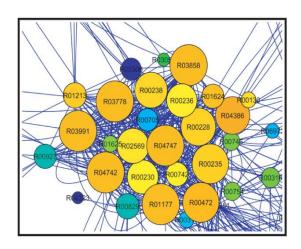
```
import numpy as np
     from sklearn.decomposition import NMF
     Y = np.array([[5, 2, 0, 2],
                   [4, 0, 0, 3],
                   [1, 1, 0, 4],
                   [2, 0, 4, 5],
                   [0, 2, 0, 4]])
     model = NMF(n_components=2, init='random', random_state=0)
10
11
12
     X_U = model.fit_transform(Y)
     X_M = model.components_
13
     Y_pred = np.dot(X_U, X_M)
15
     np.set_printoptions(precision=2)
17
     print(np.hstack((Y, Y_pred)))
18
```

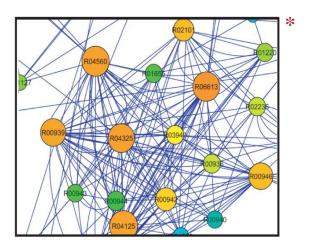
```
\begin{bmatrix}
5 & 2 & ? & 2 \\
4 & ? & ? & 3 \\
1 & 1 & ? & 4 \\
2 & ? & 4 & 5 \\
? & 2 & ? & 4
\end{bmatrix}
\approx
\begin{bmatrix}
* & * \\
* & * \\
* & * \\
* & *
\end{bmatrix}
\underbrace{\begin{bmatrix}
* & * & * & * \\
* & * & * \\
* & * & *
\end{bmatrix}}_{X_{U}}
\underbrace{\begin{bmatrix}
* & * & * & * \\
* & * & * & *
\end{bmatrix}}_{X_{M}}
```

```
[9]▶ print(np.hstack((Y, Y_pred)))...
    [[5.
                     2.
                          5.09 1.18 0.
           2.
                0.
                                         2.23]
     [4.
                     3.
                          3.9 1.02 0.43 2.68]
           0.
     [1.
                     4.
                         1.31 0.66 1.28 3.48]
     [2.
                     5.
                          1.48 0.96 2.22 5.67]
           0.
     [0.
                          0.54 0.53 1.46 3.54]]
```

Sayfa Sıralama (PageRank) Algoritması

- Eğer bir sayfa diğer önemli sayfalarca atfediliyorsa, önemlidir
- Eğer atfedilen sayfa, başka sayfalara az atıfta bulunuyorsa önemi artar
- Google bu algoritma ile başladı (şu anki çok daha karmaşık)
- Başka alanlarda da kullanılıyor





^{*} When the Web meets the cell: using personalized PageRank for analyzing protein interaction networks, G. Iván, V. Grolmusz, Bioinformatics, (27) 3, syf. 405-407, 2011.

Sayfa Sıralama (PageRank) Algoritması

- Sıralanacak *n* sayfa
- $L_{ij} = 1$, eğer sayfa j sayfa i'ye atıfta bulunuyorsa

$$c_j = \sum_{i=1}^n L_{ij}$$

sayfa *i*'nin sıralaması
$$p_i = (1-d) + d\sum_{j=1}^n \left(\frac{L_{ij}}{c_j}\right) p_j \qquad (d \approx 0.85)$$

$$\mathbf{D}_c = \operatorname{diag}(\mathbf{c})$$

$$\mathbf{p} = (1 - d)\mathbf{e} + d\mathbf{L}\mathbf{D}_c^{-1}\mathbf{p}$$

$$\mathbf{e}^{\mathsf{T}}\mathbf{p} = n$$

$$\mathbf{p} = \left(\frac{(1-d)}{n} \mathbf{e} \mathbf{e}^{\mathsf{T}} + d \mathbf{L} \mathbf{D}_c^{-1}\right) \mathbf{p}$$

• Güç Yöntemi:

(Power method)
$$\mathbf{p}_k \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{p}_{k-1}$$
$$\mathbf{p}_k \leftarrow n \frac{\mathbf{p}_k}{\mathbf{e}^{\mathsf{T}}\mathbf{p}_k}$$

Özet

Ana Bileşenler Analizi

- K-Ortalamalar Gruplandırma
- Hiyerarşik Gruplandırma
- Spektral Gruplandırma

- Matris Ayrıştırma
- Sayfa Sıralama (PageRank) Algoritması