Bootcamp Unsupervised learning

Unsupervised learning

Przemysław Spurek

k-means

Jak zobaczymy za chwilę, algorytm k-means jest niezwykle łatwy w implementacji, ale także bardzo wydajnym obliczeniowo algorytmem grupowania, co może wyjaśniać jego popularność.

W rzeczywistych zastosowaniach klastrowania (analizy skupień), nie wykorzystuje żadnej informacji na temat danych (w przeciwnym razie klastrowanie należałoby do kategorii nauczania nadzorowanego). Naszym celem jest grupowanie danych w oparciu o podobieństwo poszczególnych punktów.

https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_learning/D01_Z01_introduction.ipynb

Jednym z przykładów jest algorytm k-means, który można podsumować w czterech następujących krokach:

- Losowo wybierz k centroidów z punktów jako początkowe centroidy grup.
- ullet Przypisz każdą próbkę do najbliższego centroidu $\mu^{(j)}$ dla $j\in 1,\ldots,k.$
- Wylicz nowe środki w nowo powstałych grupach.
- Powtórz kroki 2 i 3, dopóki:
 - przynależność do grup wszytkich punktów się nie zmienia,
 - lub zmiana funkcji kosztu jest mniejsza niż tolerancja zdefiniowana przez użytkownika,
 - lub zostanie osiągnięta maksymalna liczba iteracji.

Aby powyższy algorytm zadziałał musimy odpowiedzieć na następujące pytanie:

jak mierzymy podobieństwo między obiektami?

Możemy zdefiniować podobieństwo jako odległość, a powszechnie używaną odległością dla grupowania próbek o ciągłych cechach jest kwadrat odległość euklidesowej między dwoma punktami x i y w m-wymiarowej przestrzeni:

$$d^{2}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{m} (x_{j} - x_{j})^{2} = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_{2}^{2}$$

Zauważ, że w poprzednim równaniu, indeks j odnosi się do j-tego wymiaru (kolumna cechy) przykładowych punktów x i y. W dalszej części używać będziemy indeksu górnego i oraz j, aby odnieść się odpowiednio do indeksu elementu danych i indeksu klastrów.

 k-means iteracyjnie minimalizuje sum of squared errors (SSE) wewnątrz klastrów:

$$SEE = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{k} w^{(i,j)} \|\mathbf{x}^{(i)} - \mu^{(j)}\|$$

gdzie $\mu^{(j)}$ jest reprezentantem (centroidem) klastra j, a $w^{(i,j)}$ jest indeksem przydziału do klastra:

- $w^{(i,j)} = 1$ gdy element x_i należy do j-tego klastra,
- $w^{(i,j)} = 0$ gdy element x_i nie należy do j-tego klastra.

https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_learning/D01_Z02_sum_of_squared_error.ipynb

k-means ++

- Do tej pory omówiliśmy klasyczny algorytm k-means, który wykorzystuje losowy wybór początkowych centroidów, co może skutkować złym klastrowaniem lub powolną zbieżnością (jeśli początkowe centroidy są źle dobrane).
- Jednym ze sposobów rozwiązania tego problemu jest wielokrotne uruchamianie algorytmu k-means i wybór najlepszego modelu pod względem SSE.
- Inną strategią jest umieszczenie początkowych centroidów z dala od siebie za pomocą algorytmu k-means++, co prowadzi do lepszych i bardziej spójnych wyników niż klasyczne k-means.

k-means++

Inicjalizację w k-means++ można podsumować w następujący sposób:

- Zainicjalizuj pusty zbiór M aby móc w nim zapisać k wybranych centroidów.
- Dla każdej próbki $x^{(j)}$, która nie znajduje się w M, znajdź minimalną odległość

$$d^2(\mathbf{x}^{(i)},M)$$

do dowolnego z centroidów w M.

$$\frac{d^2(\mathbf{x}^{(p)}, M)}{\sum d^2(\mathbf{x}^{(i)}, M)}$$

- Powtarzaj kroki 2 i 3, aż wybrane zostaną wszystkie centroidy.
- Wykonaj klasyczny algorytm k-means z zadaną inicjalizacją



Aby użyć k-means++ w scikit-learn, wystarczy ustawić parametr init na k-means++ (ustawienie domyślne) zamiast losowego.

https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_learning/D01_Z03_initialization.ipynb

UWAGA

Algorytm k-means znajduje sferyczne klastry o podobnym promieniu.

- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D01_Z04_data_whitening.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D01_Z05_imagesegmentation.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D01_Z06_mouse_effect.ipynb

- Ocena wydajności algorytmu grupowania nie jest tak prosta, jak w przypadku uczenia nadzorowanego.
- W szczególności każda metryka oceny nie powinna uwzględniać wartości bezwzględnych etykiet klastra
 - ale raczej podobieństwo do prawdziwych etykiet (w prawdziwych przypadkach ich nie znamy),
 - lub spełnianie pewnych założeń jak podobieństwo elementów w klastrach.

Biorąc pod uwagę wiedzę o prawdziwym przydziałe do klas labels_true i wynik algorytmu klastrowania labels_pred , **Adjusted Rand index** mierzy podobieństwo tych dwóch przydziałów ignorując permutacje. Jeśli $\mathcal C$ to prawdziwy przydział do klastrów, a $\mathcal K$ to wynik naszego algorytmu to:

- niech a będzie liczbą par elementów znajdujących się w tym samym zbiorze w C i tym samym zbiorze w K;
- niech b będzie liczbą par elementów znajdujących się w różnych zestawach w C i w różnych zestawach w K;

Rand index jest zdefiniowany jako:

$$RI = \frac{a+b}{C_2^{n_{samples}}}$$

gdzie $C_2^{n_{samples}}$ jest całkowitą liczbą możliwych par w zbiorze danych.

- Jednak wynik RI nie gwarantuje, że losowe przypisania etykiet będą miały wartość zbliżoną do zera (szczególnie, jeśli liczba klastrów jest jest tego samego rzędu wielkości co liczba próbek).
- Aby przeciwdziałać temu efektowi, możemy znormalizować wzór przez wartość oczekiwaną RI E[RI] dla losowych przydziałów do grup i zdefiniować **Adjusted Rand index**:

$$ARI = \frac{RI - E[RI]}{\max(RI) - E[RI]}$$

https://en.wikipedia.org/wiki/Rand_index#Adjusted_Rand_index

- Losowe przypisania etykiet daje wynik Adjusted Rand index bliski
 0.0 dla dowolnej ilości grup i próbek.
- Adjusted Rand index jest ograniczony do [-1,1]:
 - wartości ujemne są złe (niezależne oznaczenia),
 - podobne grupy mają dodatni Adjusted Rand index,
 - 1.0 oznacza doskonałe dopasowanie.
- Nie ma żadnych założeń na temat struktury klastra.
- Adjusted Rand index wymaga znajomości prawdziwego przydziału do grup.

Biorąc pod uwagę wiedzę o prawdziwym przydziale do klas labels_true i wynik algorytmu klastrowania labels_pred , **Mutual Information based scores** mierzy podobieństwo tych dwóch przydziałów ignorując permutacje. Dostępne są dwie różne wersje:

- Normalized Mutual Information (NMI),
- Adjusted Mutual Information (AMI).

Załóżmy, że mamy dwa przypisania etykiet U i V. Ich entropię definiujemy jako:

$$H(U) = -\sum_{i=1}^{|U|} P(i) \log(P(i)),$$

gdzie $P(i) = |U_i|/N$ jest prawdopodobieństwem losowego przydziału punktów z danych U do klasy U_i .

Podobnie dla V:

$$H(V) = -\sum_{j=1}^{|V|} P'(j) \log(P'(j)),$$

 $gdzie P'(j) = |V_j|/N$.



Wzajemną informację (**Mutual Information** MI) między U i V oblicza się jako:

$$MI(U, V) = \sum_{i=1}^{|U|} \sum_{j=1}^{|V|} P(i, j) \log \left(\frac{P(i, j)}{P(i)P'(j)} \right)$$

gdzie $P(i,j) = |U_i \cap V_j|/N$ jest prawdopodobieństwem, że losowy punkt wpada jednocześnie do klas U_i oraz V_j . Można ją również wyrazić jako:

$$MI(U, V) = \sum_{i=1}^{|U|} \sum_{j=1}^{|V|} \frac{|U_i \cap V_j|}{N} \log \left(\frac{N|U_i \cap V_j|}{|U_i||V_j|} \right)$$

Normalized Mutual Information (NMI) jest zdefiniowana jako

$$NMI(U, V) = \frac{MI(U, V)}{\sqrt{H(U)H(V)}}$$

Wartość **Mutual Information** oraz **Normalized Mutual Information** będzie się zwiększać wraz ze wzrostem liczby różnych etykiet klastrów niezależnie od "wzajemnej informacji" pomiędzy przypisaniami do etykiet.

Korzystając z wartości oczekiwanej możemy wyliczyć **Adjusted Mutual Information** (AMI):

$$AMI = \frac{MI - E[MI]}{\max(H(U), H(V)) - E[MI]}$$

- Losowe przypisania etykiet daje wynik **Adjusted Mutual Information** bliski 0.0 dla dowolnej ilości grup i próbek.
- Adjusted Mutual Information jest ograniczony do [-1,1]:
 - wartości ujemne są złe (niezależne oznaczenia),
 - podobne grupy mają dodatni Adjusted Mutual Information,
 - 1.0 oznacza doskonałe dopasowanie.
- Nie ma żadnych założeń na temat struktury klastra:
- Adjusted Mutual Information wymaga znajomości prawdziwego przydziału do grup.

Inne miary

http://scikit-learn.org/stable/modules/clustering.html#clustering-performance-evaluation.ipynb

- https:
 //github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_
 learning/D01_Z07_clustering_evaluation_iris.ipynb
- https: //github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_ learning/D01_Z08_clustering_evaluation_MNIST.ipynb

Optymalna ilość klastrów

- Jednym z głównych wyzwań grupowanie danych jest fakt, że nie znamy prawdziwych etykiet.
- W naszym zbiorze danych nie ma prawdziwych etykiet, które pozwalają nam zastosować techniki analogiczne do tych używanych w nauczaniu nadzorowanym.
- W celu określenia jakości grupowania danych, musimy użyć charakterystyk wewnętrznych - takich jak SSE, które omówiliśmy wcześniej.

Optymalna ilość klastrów

- W oparciu o SSE i narzędzia graficzne możemy oszacować optymalną ilość klastrów metodą: elbow method.
- Wiemy już, że jeśli k wzrasta, to SSE będzie systematycznie maleć.
 (Dzieje się tak dlatego, że próbki będą bliżej centroidów.)

ldeą **elbow method** jest określenie wartości k jako miejsca, w którym SSE zaczyna wzrastać najszybciej.

- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D01_Z09_elbow_method_iris.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D01_Z10_elbow_method_MNIST.ipynb

Silhouette plots

- Inną wewnętrzną miarą oceny jakości grupowania jest silhouette analysis, którą można również zastosować do algorytmów grupowania innych niż k-means.
- Silhouette analysis może być wykorzystywana jako narzędzie graficzne do określenia, które elementy w grupach są blisko siebie.
- Aby obliczyć **silhouette coefficient** pojedynczej próbki w naszym zbiorze danych, możemy zastosować następujące trzy kroki:
 - Oblicz spójność klastra $a^{(i)}$ jako średnią odległość między punktem x_i , a wszystkimi innymi punktami w tym samym klastrze.
 - Oblicz poziom odseparowania klastra $b^{(i)}$ od najbliższego klastra jako średnią odległość między punktem x_i , a wszystkimi próbkami w najbliższej grupie.
 - Oblicz silhouette s^(j) jako różnicę między spójnością, a separowalnościa:

$$s^{(j)} = \frac{b^{(j)} - a^{(j)}}{\max(b^{(j)}, a^{(j)})}$$

Silhouette plots

- Silhouette coefficient zawiera się w zakresie od -1 do 1.
- Na podstawie powyższego wzoru widać, że silhouette coefficient wynosi 0 jeśli $b^{(j)} = a^{(j)}$.
- Co więcej, zbliżamy się do idealnego współczynnika silhouette coefficient równego 1, jeżeli $(b^{(i)}>>a^{(i)})$, ponieważ $b^{(i)}$ określa jak niepodobna jest próbka do innych klastrów, $a^{(i)}$ mówi nam jak podobna jest do innych próbek we własnym klastrze.

Silhouette plots

- https: //github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_ learning/D01_Z11_silhouettecoefficient.ipynb
- https: //github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_ learning/D01_Z12_silhouettecoefficient_iris.ipynb
- https:
 //github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_
 learning/D01_Z14_silhouettecoefficient_MNIST.ipynb

- https:
 - //github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_ learning/D01_Z15_dimension_reduction_MNIST.ipynb
- https:
 //github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_
 learning/D01_Z16_customer_segmentation.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_learning/D01_Z17_ensamble.ipynb
- https:
 //github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_
 learning/D01_Z18_kmeans_data_representation.ipynb

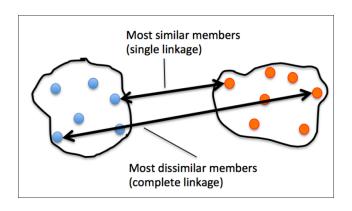
- Teraz przyjrzymy się alternatywnemu podejściu do klastrowania: klastrowanie hierarchiczne.
- Jedną z zalet hierarchicznego grupowania danych jest to, że pozwala nam na narysowanie dendrogramów (wizualizacji binarnej hierarchi), co może pomóc w interpretacji wyników.
- Kolejną przydatną zaletą hierarchicznego podejścia jest to, że nie musimy określać z góry liczby klastrów.

Dwa główne podejścia do hierarchicznego tworzenia klastrów to:

- podejście divisive rozpoczynamy od jednego klastra obejmującego wszystkie nasze próbki, a następnie iteracyjnie dzielimy klaster na mniejsze klastry, aż każdy klaster zawiera tylko jeden punkt.
- podejście agglomerative zaczynamy od każdej próbki jako pojedynczego klastra i łączymy najbliższe pary klastrów, aż pozostanie tylko jeden klaster.

Dwa standardowe algorytmy grupowania hierarchicznego to:

- single linkage obliczamy odległości między najbardziej podobnymi elementami dla każdej pary klastrów i łączymy dwa klastry, dla których odległość między najbardziej podobnymi elementami jest najmniejsza.
- complete linkage zamiast porównywać najbardziej podobne elementy w każdym zbiorze, porównujemy najbardziej odmienne elementy.



Algorytm jest bardzo prosty. Opiszmy jedną z metod np.**complete linkage**. Jest to procedura iteratywna, którą można przedstawić w kilku krokach:

- 1. Oblicz macierz odległości pomiędzy wszystkimi punktami.
- 2. Ustaw każdy punkt jako pojedynczy klaster.
- 3. Połącz dwie najbliższe grupy w oparciu o odległość najbardziej odległych punktów w klastrze.
- 4. Zaktualizuj macierz podobieństwa.
- 5. Powtarzaj kroki od 2 do 4, aż pozostanie jeden pojedynczy klaster.

Hierarchical clustering

- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D02_Z01_hierarchical_clustering_ introduction.ipynb
- https: //github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_ learning/D02_Z02_hierarchical_clustering_linkage.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D02_Z03_hierarchical_clustering_ elbow_method.ipynb

Hierarchical clustering

- https:
 - //github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_ learning/D02_Z04_hierarchical_text_data.ipynb
- https:
 //github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_
 learning/D02_Z04_hierarchical_text_data.ipynb
- https:
 //github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_
 learning/D02_Z05_customer_segmentation.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_learning/D02_Z06_eurowizja_data.ipynb

Density-based Spatial Clustering of Applications with Noise (DBSCAN)

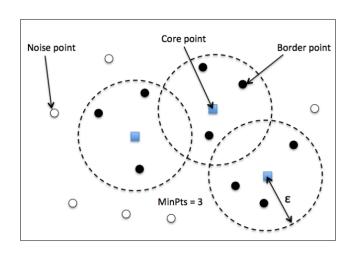
Pojęcie gęstości w DBSCAN definiuje się jako liczbę punktów w określonym otoczeniu.

W DBSCAN dla każdego punktu przypisywana jest etykieta:

- punkt jest uważany za punkt centralny (core point), jeśli przynajmniej MinPts sąsiednich punktów mieści się w otoczeniu o promieniu ε ;
- punkt jest uważany za punkt graniczny (border point), jeśli w jego otoczeniu o promieniu ε jest mniej sąsiadów niż w MinPts, ale w jego otoczeniu znajduje się core point;
- wszystkie inne punkty są uznawane za szum (noise points).

Po oznaczeniu wszytkich punktów jako core point, border point lub noise points algorytm DBSCAN opiera się na:

- Utwórz osobny klaster dla każdego punktu centralnego lub połączonej grupy punktów centralnych (punkty centralne są połączone, jeśli nie są dalej niż ε).
- Przypisz każdy punkt graniczny do klastra odpowiadającego najbliższemu punktowi centralnemu.



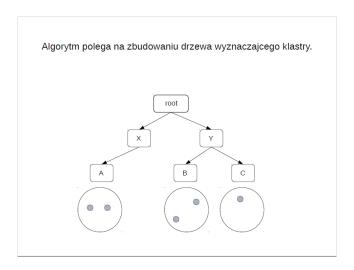
- Jedną z głównych zalet algorytmu DBSCAN jest to, że nie zakłada on, że klastry mają sferyczny kształ jak w k-means.
- Co więcej, DBSCAN różni się od k-means i hierarchicznego klastrowania tym, że niekoniecznie przypisuje każdy punkt do klastra, ale jest zdolny do usuwania punktów należących do szumu.

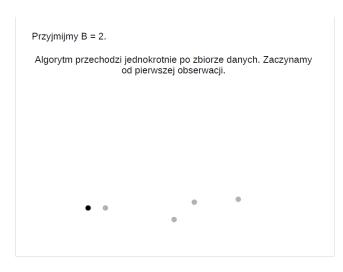
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D03_Z01_DBSCAN_introduction.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D03_Z02_DBSCAN_params.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D03_Z03_DBSCAN_map.ipynb.ipynb

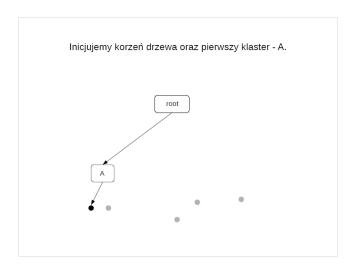
balanced iterative and clustering using hierarchies

- Algorytm ma na celu wstępne pogrupowanie danych na dużo małych i bardzo jednorodnych skupień.
- Następnie otrzymane klastry poddaje się grupowaniu (dowolnym algorytmem), gdzie nowymi obserwacjami są środki skupień.
- Algorytm jest bardzo wydajny wymaga tylko jednego przejścia po danych.







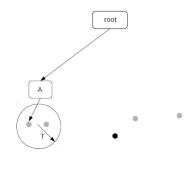


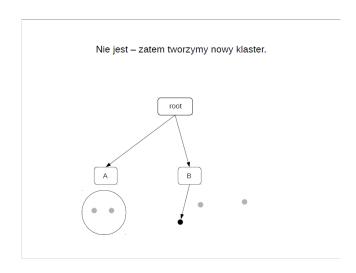


Jest to A (bo jest jedyny). Sprawdzamy czy promień klastra powstałego z połączenia A i nowej obserwacji nie przekroczy T. root

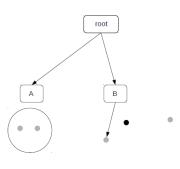


Rozpatrujemy kolejny punkt. Szukamy najbliższego klastra i sprawdzamy czy jest wystarczająco blisko (czy promień po dołączeniu nie przekroczy T).

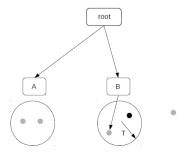




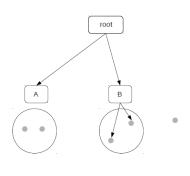
Rozpatrujemy kolejny punkt. Szukamy najbliższego klastra – jest to B.



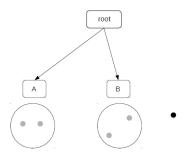
Sprawdzamy czy jest wystarczająco blisko.



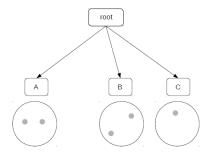
Tak – zatem dołączmy obserwację do B.

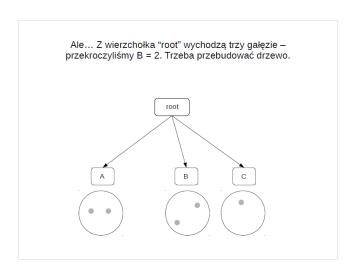


Rozpatrujemy kolejny punkt.

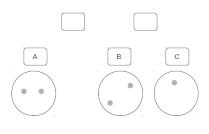


Najbliższy klaster (B) jest za daleko – tworzymy nowy klaster.

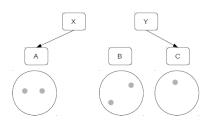




Rozbijamy wierzchołek, z którego wychodzi za dużo gałęzi na dwa i odbudowujemy drzewo od dołu.



Bierzemy dwa najbardziej oddalone od siebie klastry (tutaj A i C) I przyporządkowujemy je do osobnych węzłów (subklastrów).



I odbudowujemy drzewo do korzenia (aktualizujemy strukturę nad miejscem rozpadu). root Υ В

Każdy subklaster (węzeł w drzewie) jest opisany trzema wielkościami:

- N liczba punktów w subklastrze,
- LS suma punktów wektor sum po współrzędnych,
- SS suma kwadratów punktów wektor sum kwadratów po współrzędnych.

Na podstawie tych wartości wyliczamy wielkości potrzebne do przydzielenia nowego punktu do klastra i aktualizacji struktury drzewa.

To decyduje o niskiej złożoności algorytmu.

Mini Batch K-means

- Algorytm pobiera małe partie zbioru danych (losowo wybrane) dla każdej iteracji.
- Następnie przypisuje klaster do każdego punktu danych w grupie, w zależności od poprzednich lokalizacji centroidów klastra.
- Następnie aktualizuje położenie centroidów klastra na podstawie nowych punktów z partii.
- Aktualizacja wykonywana jest za pomocą metody gradientowej, która jest znacznie szybsza niż zwykła aktualizacja Batch K-Means.

Mini Batch K-means

Formalnie algorytm wygląda następująco:

```
Given: k, mini-batch size b, iterations t, data set X
Initialize each c \in C with an x picked randomly from X
v \leftarrow 0
for i = 1 to t do
     M ← b examples picked randomly from X
     for x \in M do
           d[x] \leftarrow f(C, x) // Cache the center nearest to x
     end for
     for x \in M do
           c \leftarrow d[x]
                                      // Get cached center for this x
           v[c] \leftarrow v[c] + 1 // Update per-center counts
           \eta \leftarrow 1/v[c] // Get per-center learning rate
           c \leftarrow (1 - \eta)c + \eta x // Take gradient step
     end for
end for
```

http://www.eecs.tufts.edu/~dsculley/papers/fastkmeans.pdf

- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D04_Z01_BIRICH.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D04_Z02_mini_batch_k_means.ipynb
- https:
 //github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_
 learning/D04_Z03_mini_batch_k_means_vs_k_means.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D04_Z04_mini_batch_BIRICH.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D04_Z05_mini_batch_BIRICH.ipynb

Zadania

• https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D05_Z01_faces_dataset.ipynb

Zadania

- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D05_Z02.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D05_Z03.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D05_Z04.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D05_Z05.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D05_Z06.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/unsupervised_learning/D05_Z07.ipynb
- https://github.com/przem85/bootcamp/blob/master/ unsupervised_learning/D05_Z08.ipynb