Сравнение kmeans и EM алгоритма

докладчик: Касерес Гутьеррес Леонард

08.04.2024, поступление

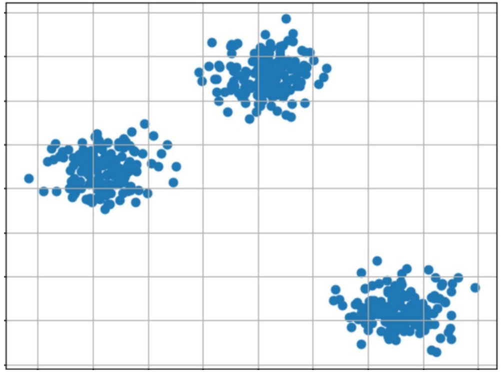
Содержание

1. Описание задачи(введение)
    a. Введение в задачу кластеризации
    b. Примеры применения, актуальность
    c. Алгоритмы кластеризации
    d. Проблема?
2. Два решения задачи кластеризации
    a. Kmeans
        i. Описание
        ii. Тестирование на 1-ом датасете
    b. EM-алгоритм
        i. Описание
        ii. Реализация
        iii. Тестирование на 1-ом датасете
3. Сравнение Kmeans и EM-алгоритма
4. Модификация EM-алгоритма
5. Анализ
    a. Сильные и слабые стороны работы
    b. Недостатки обоих методов и границы применимости
    c. Повторяемость результатов(git = qr)

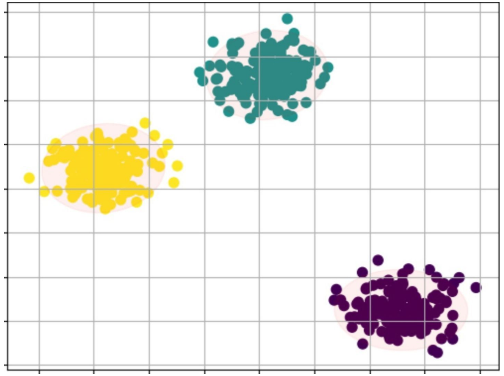
jupyter ноутбук

Задача кластеризации

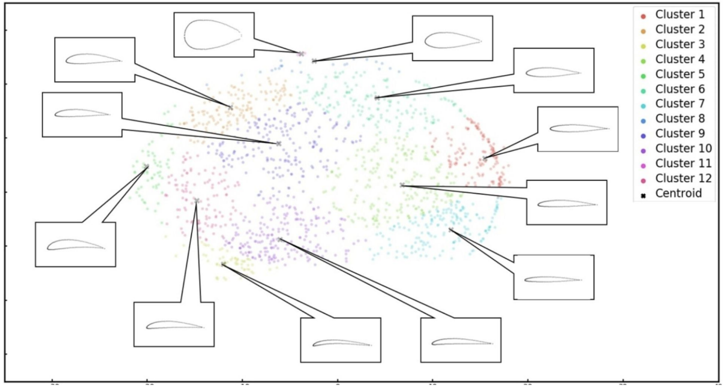
Кластеризация — это **задача разбиения множества объектов на похожие группы, называемые кластерами**.



Пример данных



Результат работы KMeans

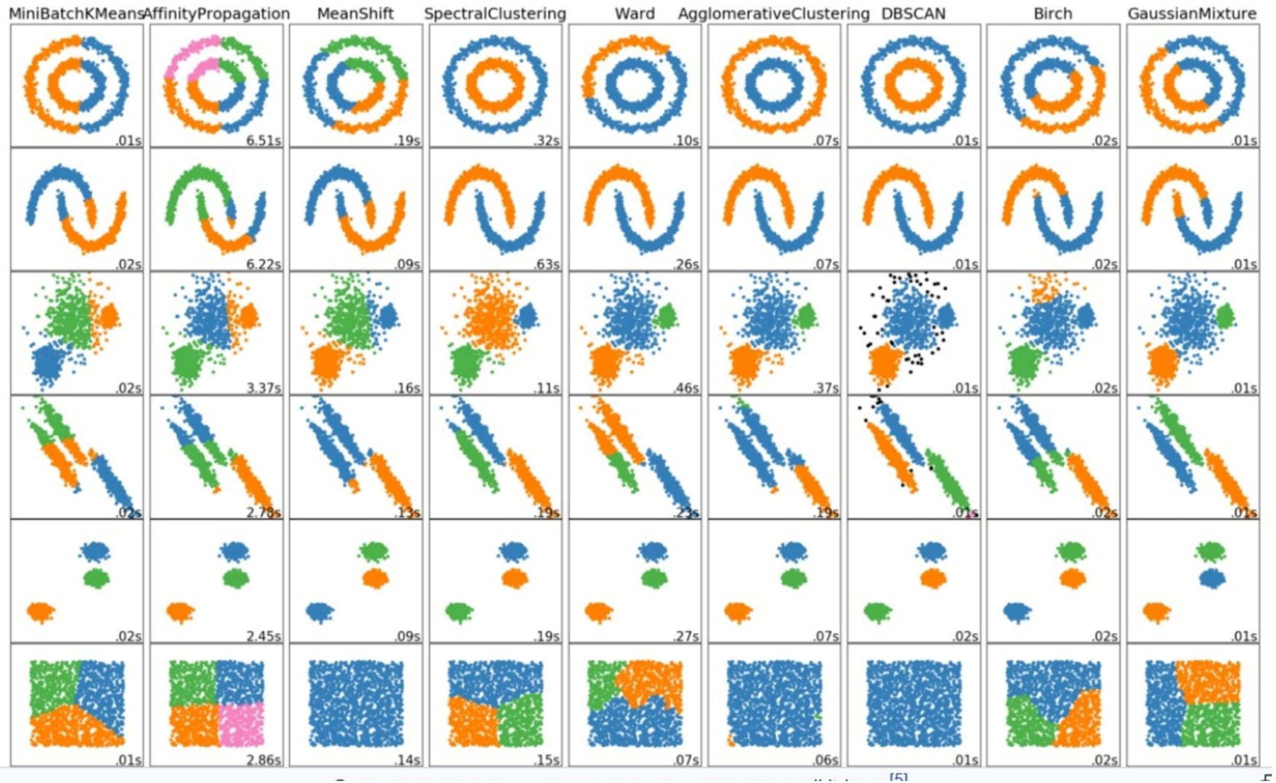


Нетривиальный пример кластеризации

Алгоритмы кластеризации используются в следующих задачах:

1. Информатика
2. Медицина
3. Социальные науки
4. Бизнес
5. и т.д.

Алгоритмы кластеризации

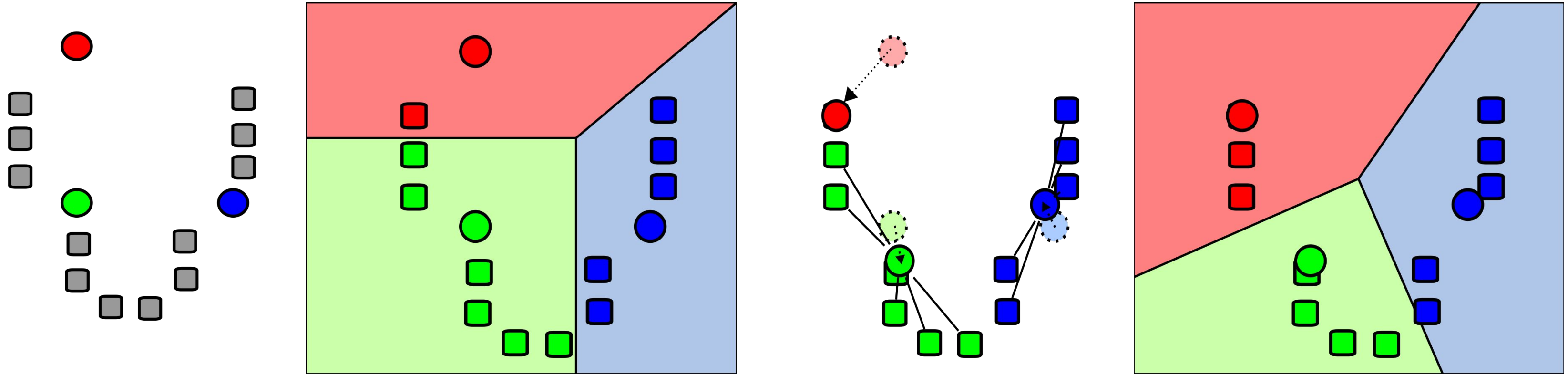


Разные алгоритмы кластеризации на разных данных

Проблемы:

1. Универсальность
2. Не существует правильного ответа

KMeans



Инициализация центров

Диаграмма вороного относительно центров

Вычисление новых центров(центр масс)

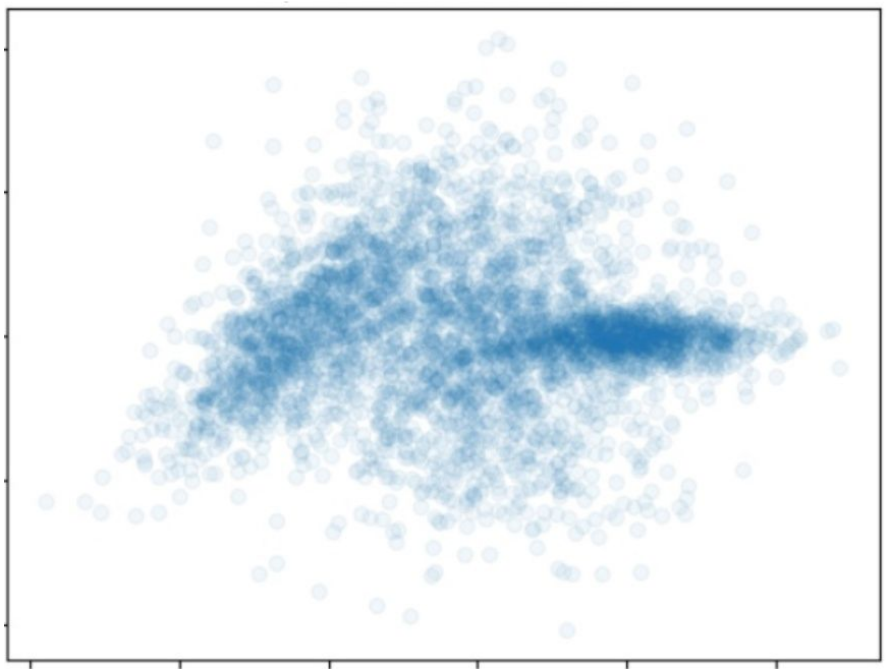
Повторяем 2 и 3 шаг до остановки

Наиболее популярный алгоритм кластеризации

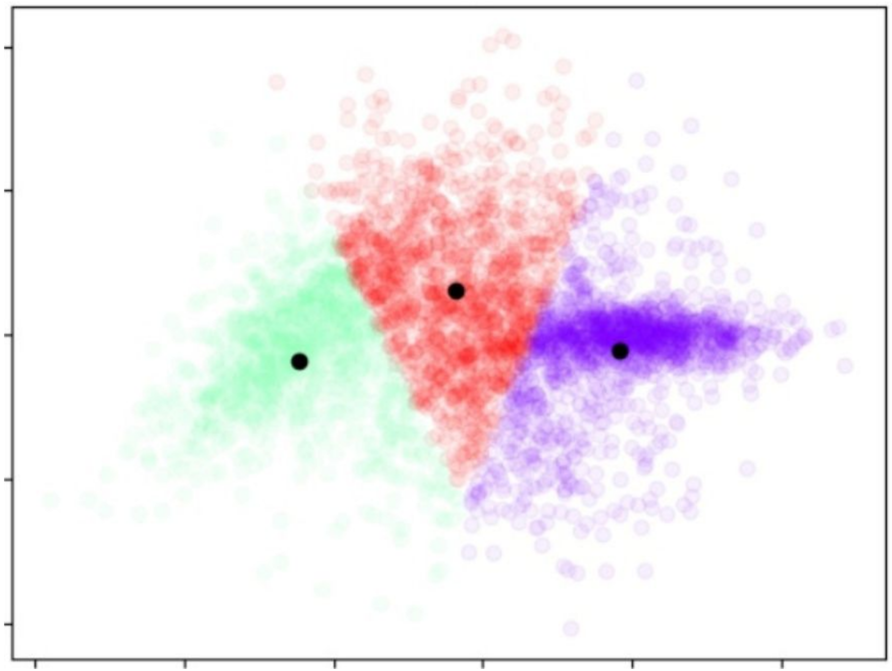
минимизирующий следующую функцию:

$$V = \sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in S_i} (x - \mu_i)^2$$

Предложенный первый датасет

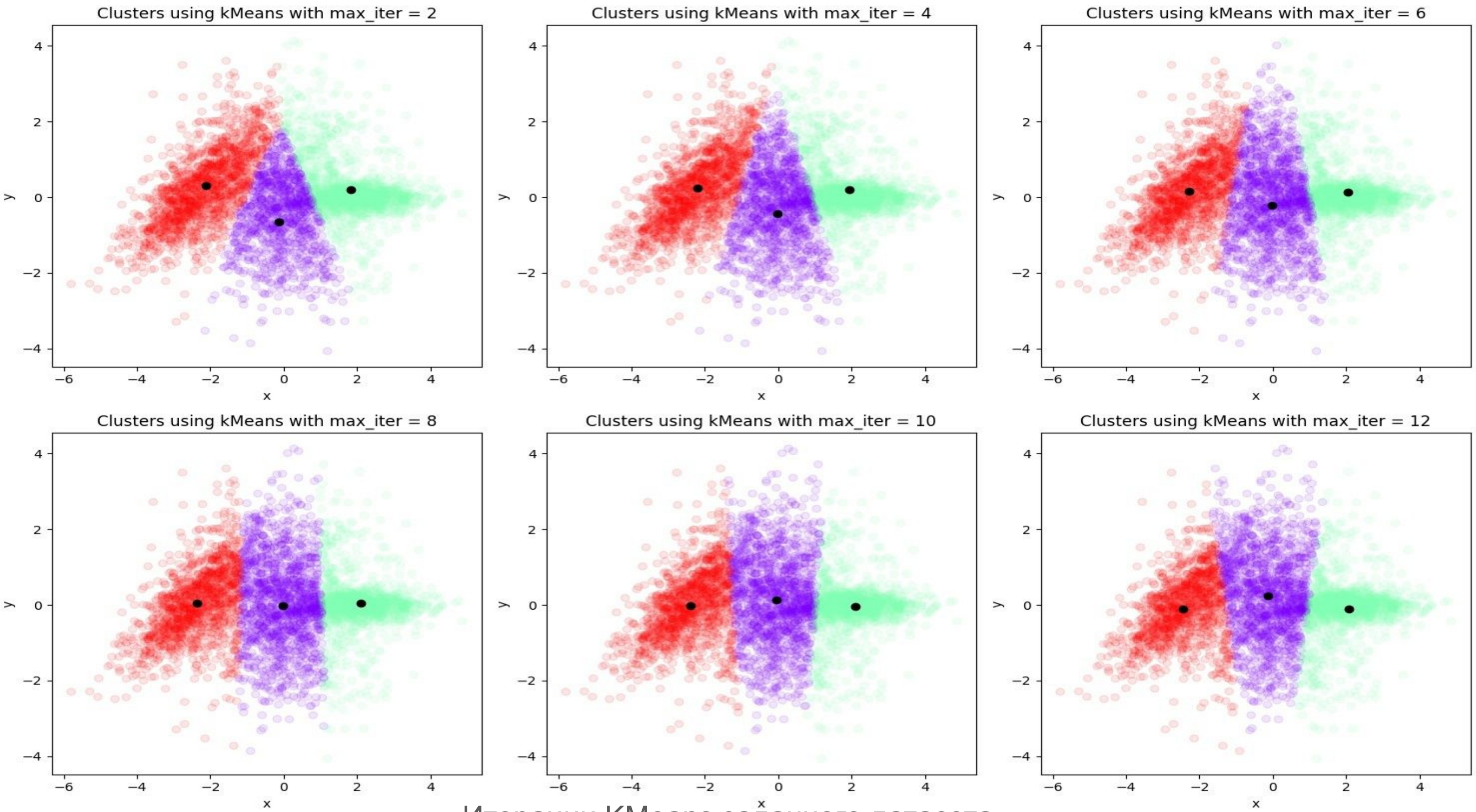


первый датасет



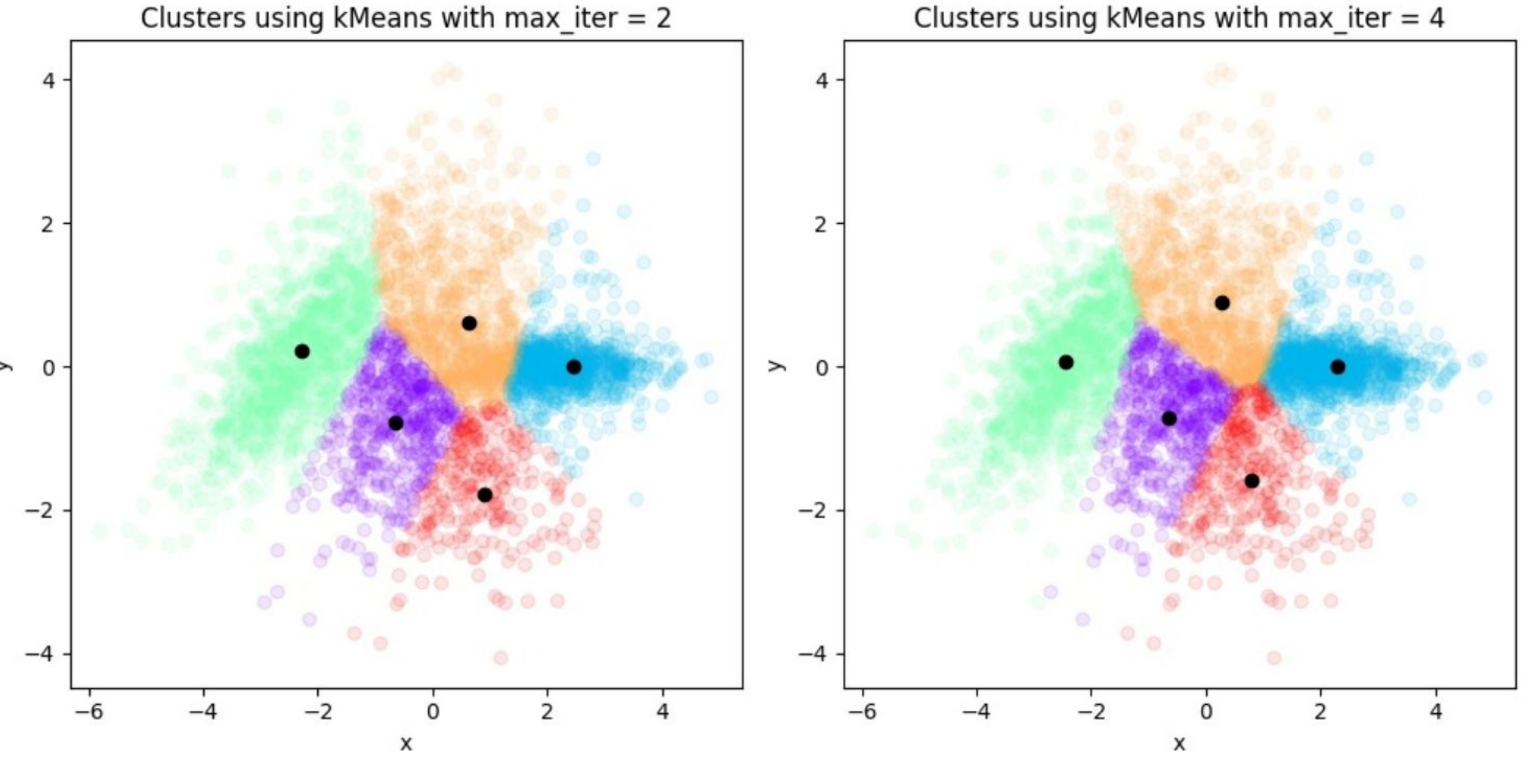
KMeans кластеризация данных

Динамика KMeans



Итерации KMeans заданного датасета

Границы KMeans



Ярко выраженная граница

ЕМ-алгоритм

ЕМ-алгоритм заключается в повторении двух шагов:

- Е-шага (expectation-step), шага выведения функции $l(x, z|\theta)$.
- М-шага (maximization-step), шага ее максимизации.

$$l(x|\theta) \quad >>> \quad l(x, z|\theta)$$

z - некая латентная, ненаблюдаемая переменная.

Expectation-step

Инициализация: задать начальные условия на θ_{old}.

E.1-шаг: найти условное распределение латентных переменных $p(Z|X, \theta_{old})$.

E.2-шаг: построить функцию $Q(\theta, \theta_{old}) = E_{Z|X,\theta}(\ell(x, z|\theta)|x, \theta_{old})$.

$$p(z|x, \theta_{old}) = \frac{p(z, x|\theta_{old})}{p(x|\theta_{old})} \qquad p(z_i = 1, x_i|\theta_{old}) = p_1 \cdot p(x_i|z_i = 1, \theta_{old}),$$

$$P(z_i = 1|x_i, \theta_{old}) = \frac{f(x_i|z_i = 1, \theta_{old})p_1}{p_1 f(x_i|z_i = 1, \theta_{old}) + p_2 f(x_i|z_i = 2, \theta_{old}) + (1 - p_1 - p_2) f(x_i|z_i = 3, \theta_{old})}$$

Expectation-step

$$Q(\theta, \theta_{old}) = \mathbb{E}\left[\ln p(x, z|\theta)|x, \theta_{old}\right]$$

$$Q(\theta|\theta_{old}) = \sum_i P(z_i = 1|x, \theta_{old})[\ln f(x_i|\theta) + \ln p_1] + P(z_i = 2|x, \theta_{old})[\ln f(x_i|\theta) + \ln(p_2)]$$
$$+ (1 - P(z_i = 1|x, \theta_{old}) - P(z_i = 2|x, \theta_{old}))[\ln f(x_i|\theta) + \ln(1 - p_1 - p_2)]$$

$$\ln f(x) = -\frac{1}{2}\ln(2\pi\sigma^2) - \frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}$$

Maximization-step

$$Q'_{\mu_1} = \sum_i P(z_i = 1|x, \theta_{old}) \frac{(x_i - \mu_1)}{\sigma_1^2}$$

$$\mu_1^{new} = \frac{\sum_i P(z_i = 1|x, \theta_{old}) x_i}{\sum_i P(z_i = 1|x, \theta_{old})}$$

Maximization-step - все параметры

$$
\begin{aligned}
\mu_{j,new} &= \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i P(Y_i = j \mid x_i, \theta_{old})}{\sum_{i=1}^{n} P(Y_i = j \mid x_i, \theta_{old})} \\
\sigma^2_{j,new} &= \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu_j)^2 P(Y_i = j \mid x_i, \theta_{old})}{\sum_{i=1}^{n} P(Y_i = j \mid x_i, \theta_{old})} \\
p_{j,new} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} P(Y_i = j \mid x_i, \theta_{old}).
\end{aligned}
$$

Реализация EM-алгоритма(без модификации)

```
def em_clustering(data, n_clusters = 3, max_iter=100, tol=1e-4):
    np.random.seed(42)
    n_samples, n_features = data.shape

    means = np.random.rand(n_clusters, n_features)
    covariances = np.array([np.eye(n_features) for _ in range(n_clusters)])
    weights = np.ones(n_clusters) / n_clusters
    for _ in range(max_iter):
        # E-step
        likelihoods = np.array([multivariate_normal_pdf(data, mean=means[i],
                                                        cov=covariances[i]) for i in range(n_clusters)]).T
        weighted_likelihoods = likelihoods * weights
        cluster_probs = weighted_likelihoods / weighted_likelihoods.sum(axis=1)[:, np.newaxis]

        # M-step
        new_means = np.dot(cluster_probs.T, data) / cluster_probs.sum(axis=0)[:, np.newaxis]
        new_covariances = np.array([np.dot((data - new_means[i]).T,
                                    np.dot(np.diag(cluster_probs[:, i]),
                                           (data - new_means[i]))) / cluster_probs[:, i].sum() for i in range(n_clusters)])
        new_weights = cluster_probs.sum(axis=0) / n_samples

        if np.linalg.norm(new_means - means) < tol:
            break

        means = new_means
        covariances = new_covariances
        weights = new_weights

    return means, covariances, weights, np.array([multivariate_normal.pdf(data, mean=means[i], cov=covariances[i]) for i in range(n_clusters)]).T
```

Обоснование ЕМ-алгоритма

$$\ell(x|\theta) = \sum_i \ln f(x_i|\theta) = \sum_i \sum_j P(Z=j) \ln f(x_i|\theta) = \sum_i \sum_j P(Z=j) \ln \frac{f(x_i, Z=j|\theta)}{P(Z=j|x_i,\theta)} =$$

$$= \sum_i \sum_j P(Z=j) \ln \frac{f(x_i, Z=j|\theta) P(Z=j)}{P(Z=j|x_i,\theta) P(Z=j)} =$$

$$= \sum_i \sum_j P(Z=j) \ln \frac{f(x_i, Z=j|\theta)}{P(Z=j)} + \sum_i \sum_j P(Z=j) \ln \frac{P(Z=j)}{P(Z=j|x_i,\theta)} =$$

$$M(P(Z=j),\theta) + D_{KL}[P(Z=j)||P(Z=j|x_i,\theta)].$$

Обоснование ЕМ-алгоритма

Е-шаг.

Максимизируем $M(P(Z=j),\theta)$ по $P(Z=j)$.

Так как $\ell(x|\theta)$ не зависит от $P(Z=j)$, то максимум $M(P(Z=j),\theta)$ по $P(Z=j)$ будет достигнут, когда D_{KL} минимальна.

Минимальная $D_{KL}(A||B)$ равна 0, и это достигается, когда $A||B$. Из этого делаем вывод, что на Е-шаге мы устанавливаем

$$P(Z=j) := P(Z=j|x_i,\theta^{old}).$$

Обоснование ЕМ-алгоритма

М-шаг.

Максимизируем $M(P(Z=j),\theta)$ по θ. Распишем M ещё раз:

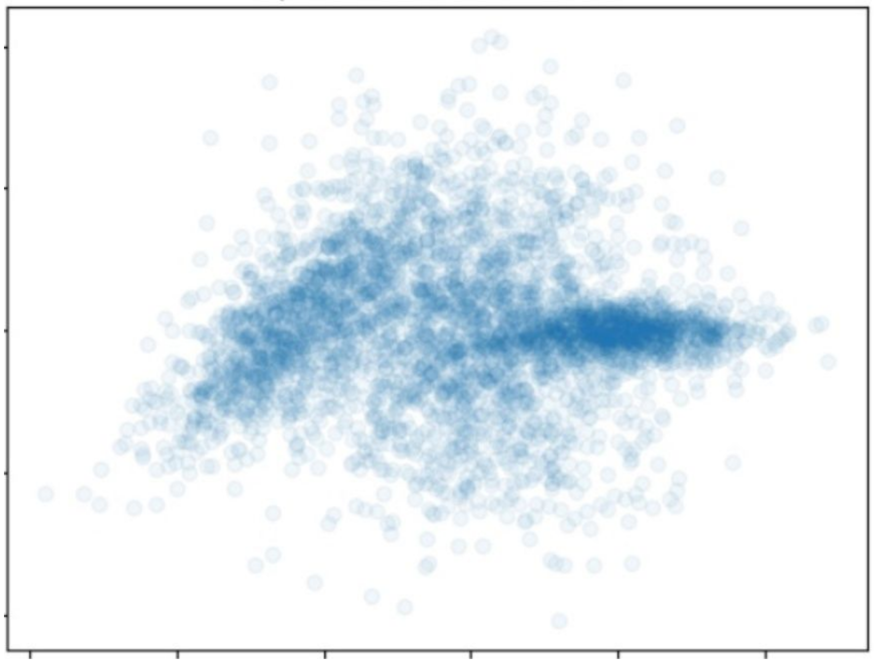
$$M=\sum_i\sum_j P(Z=j)\ln\frac{f(x_i,Z=j|\theta)}{P(Z=j)}$$

Заметим, что знаменатель подлогарифмического выражения не зависит от θ. Выбросим его и заменим $P(Z=j)$ на результат, полученный нами на Е-шаге:

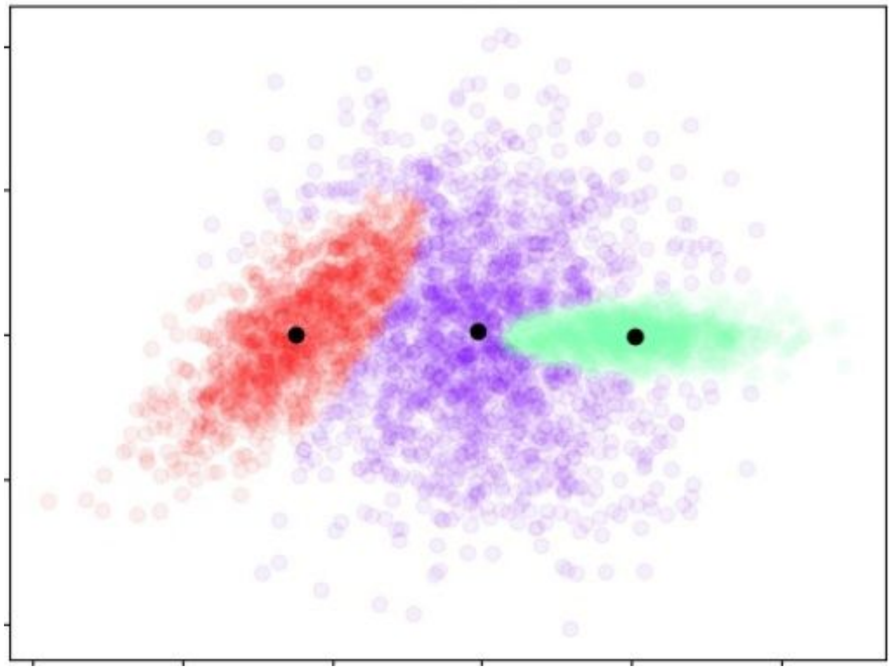
$$M=\sum_i\sum_j P(Z=j|x_i,\theta^{old})\ln f(x_i,Z=j|\theta)=\sum_i E_{Z|x_i,\theta_{old}}(\ln f(x_i,Z=j|\theta)):=Q(\theta|\theta^{old}).$$

Далее мы максимизируем Q по по θ, обновляем θ на аргмаксимум Q, и возвращаемся к Е-шагу.

Предложенный первый датасет

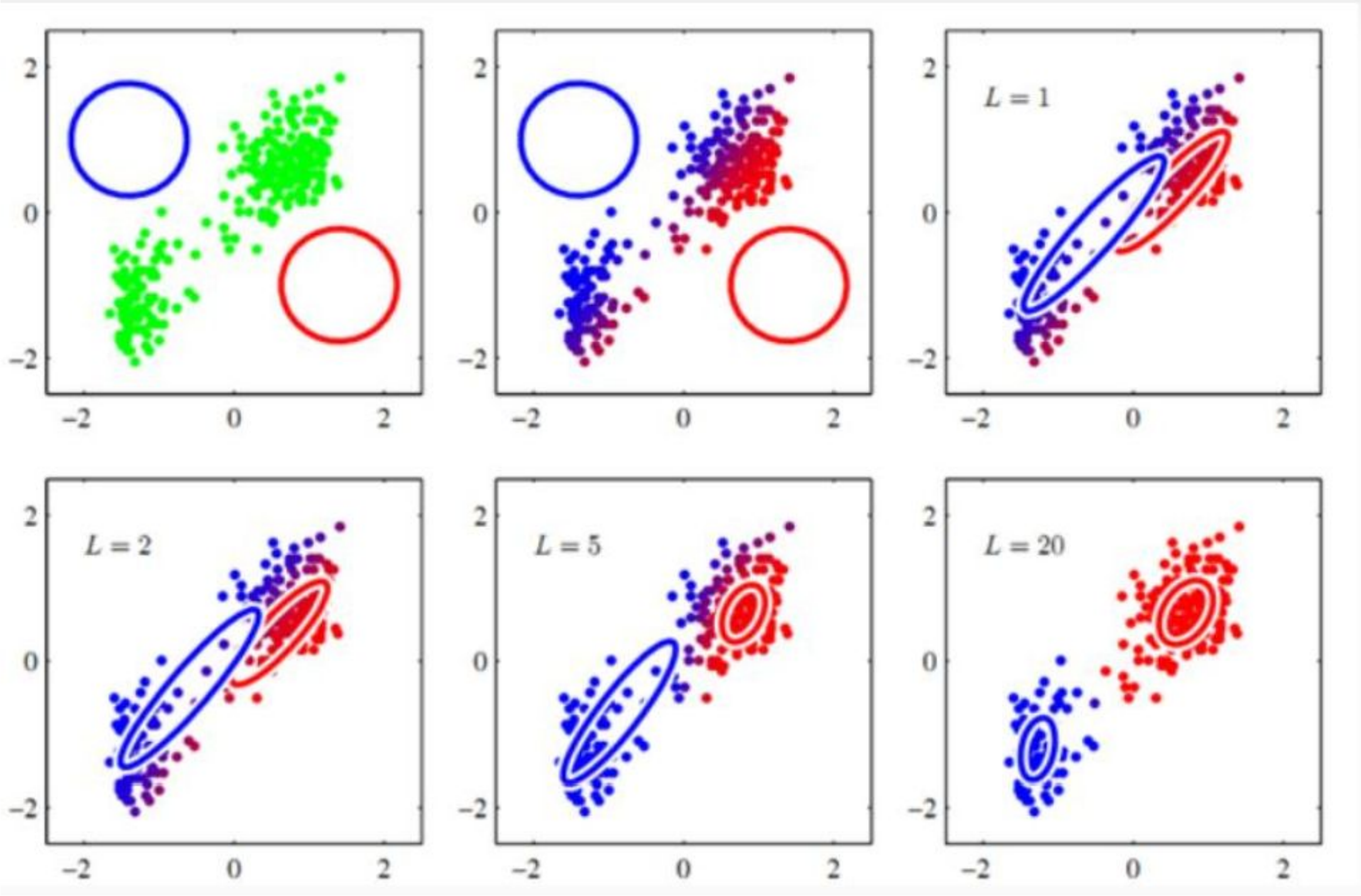


первый датасет



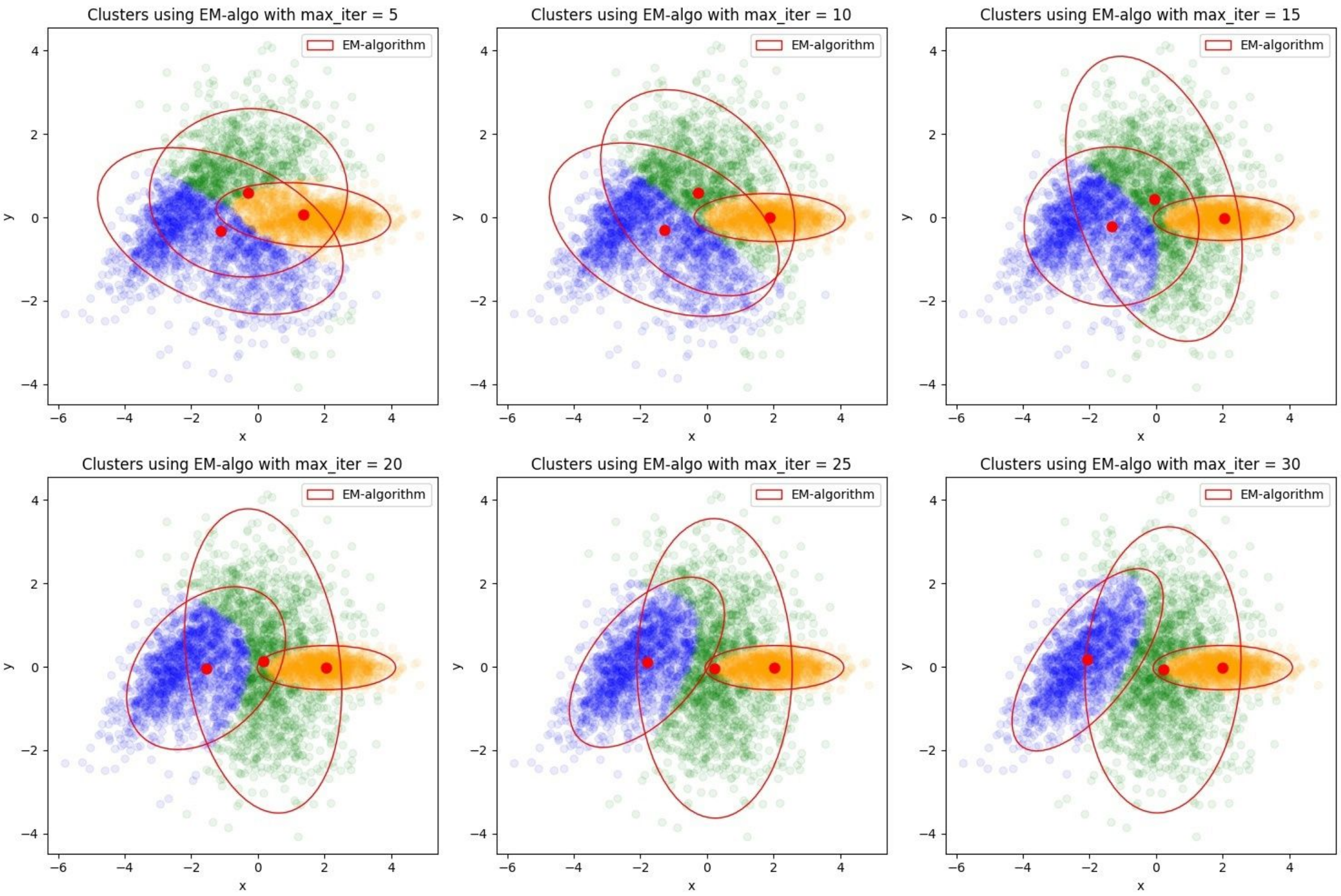
EM-алгоритм кластеризация данных

Динамика ЕМ-алгоритма



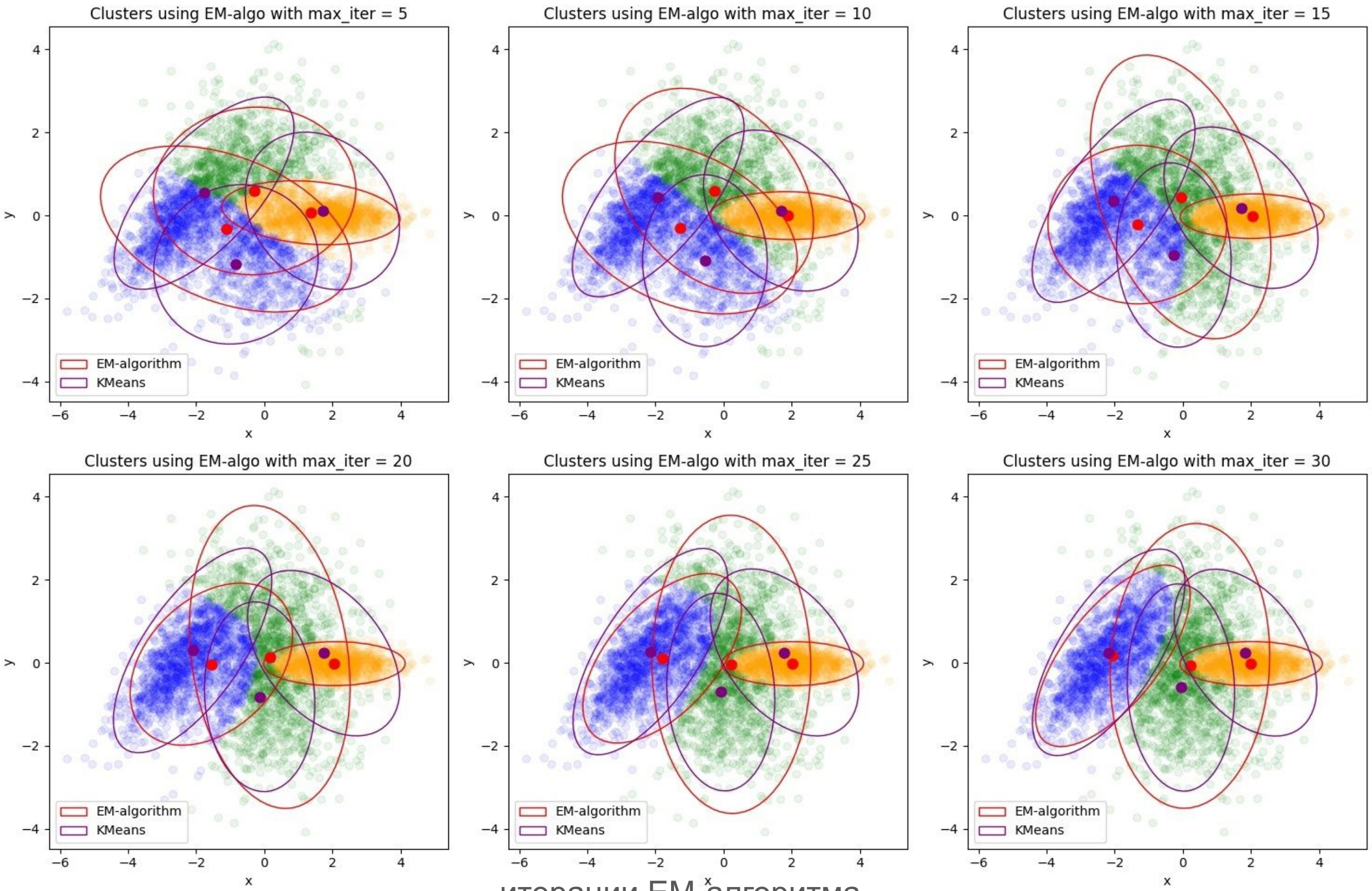
Итерации алгоритма

Динамика EM-алгоритма



Итерации EM-алгоритма

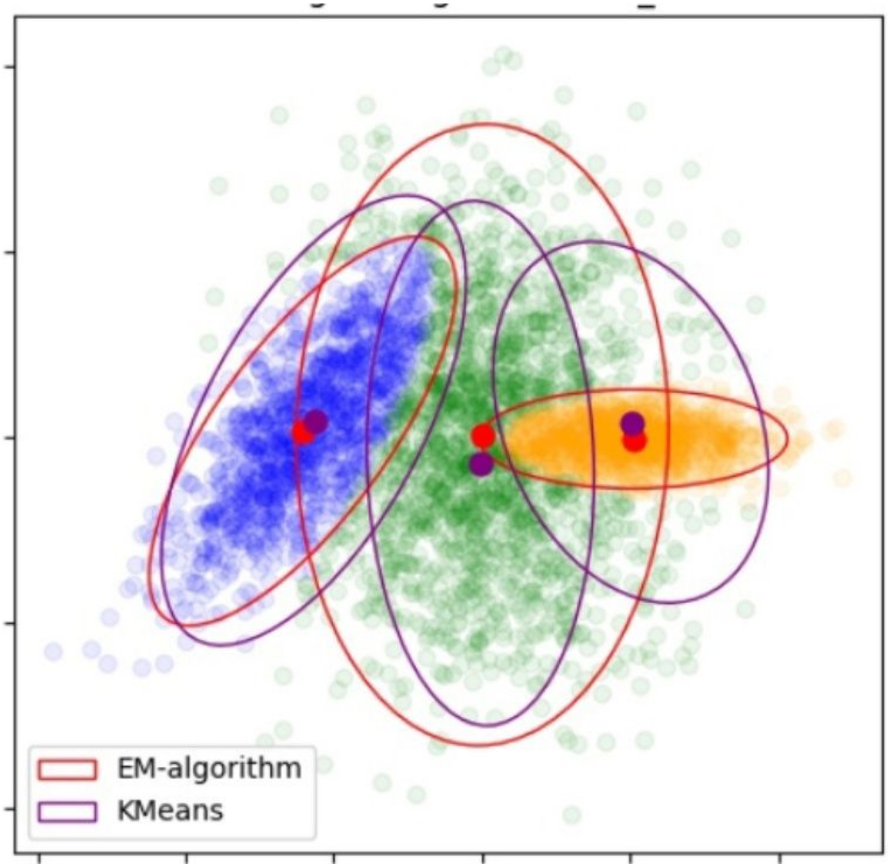
Сравнение Kmeans и EM-алгоритма



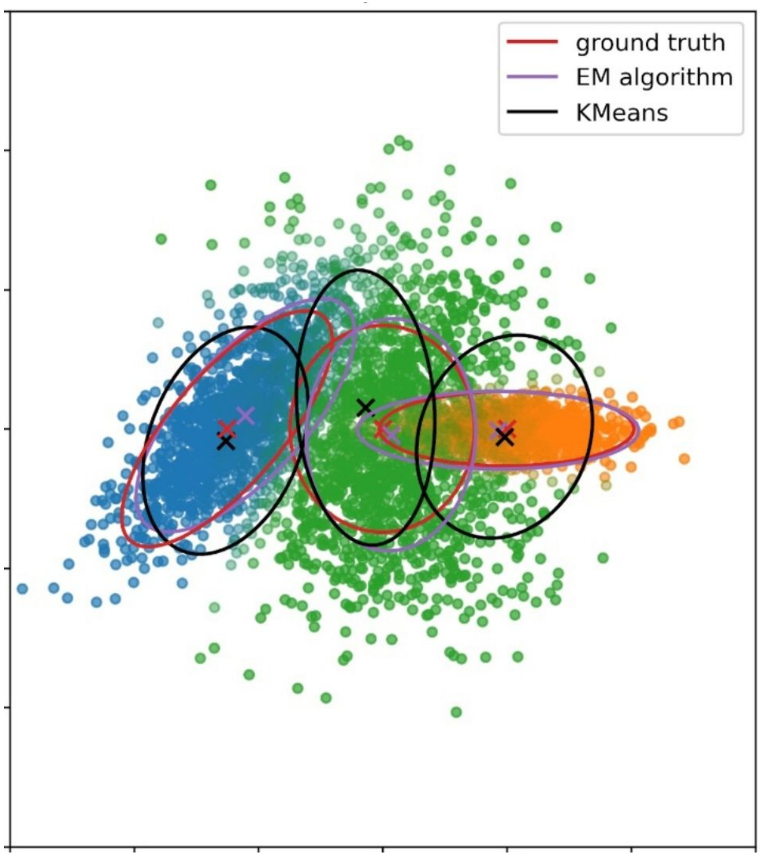
итерации EM-алгоритма

Kmeans плохо определяет распредления

Сравнение Kmeans и EM-алгоритма



Реализация и сравнение двух алгоритмов



Верная кластеризация

Модификация алгоритма - распределение Лапласа

Expectation-step:

$$f(x) = \frac{\alpha}{2} e^{-\alpha|x-\beta|}$$

Плотность вероятности

$$Q(\theta|\theta_{old}) = \sum_i P(z_i = 1|x, \theta_{old})[\ln f(x_i|\theta) + \ln p_1] + P(z_i = 2|x, \theta_{old})[\ln f(x_i|\theta) + \ln(p_2)]$$
$$+ (1 - P(z_i = 1|x, \theta_{old}) - P(z_i = 2|x, \theta_{old}))[\ln f_L(x_i|\theta) + \ln(1 - p_1 - p_2)]$$

Q практически не меняется

Maximization-step - все параметры

$$\frac{1}{a^{new}} = \frac{\sum_i P(z_i = 1|x, \theta_{old})|x_i - b|}{\sum_i P(z_i = 1|x, \theta_{old})}$$

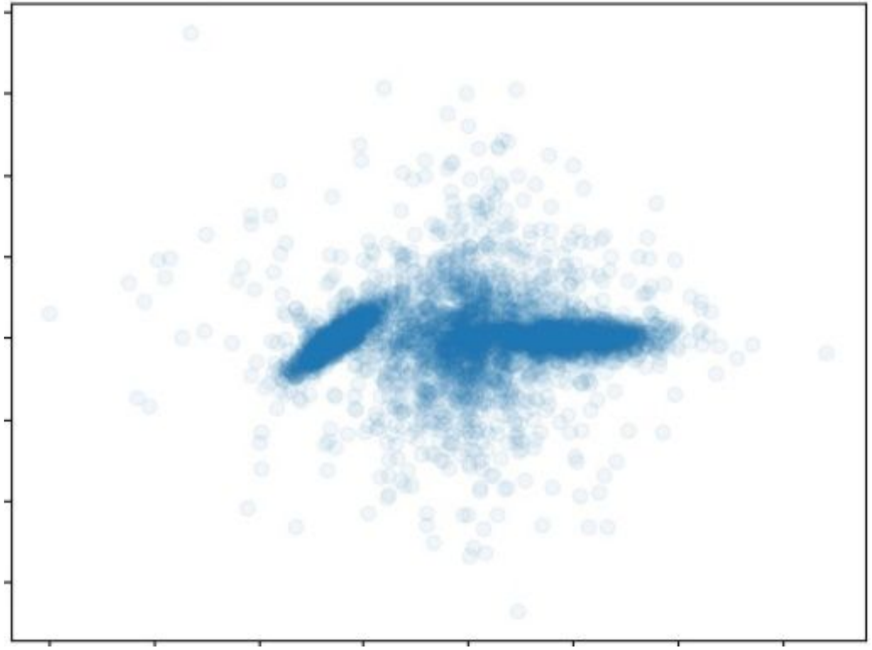
$$b^{new} = \frac{\sum_i P(z_i = 1|x, \theta_{old})x_i}{\sum_i P(z_i = 1|x, \theta_{old})}$$

Формулы получаются простым дифференцированием Функции Q с 2 нормальными и 1 лапласовским распределением

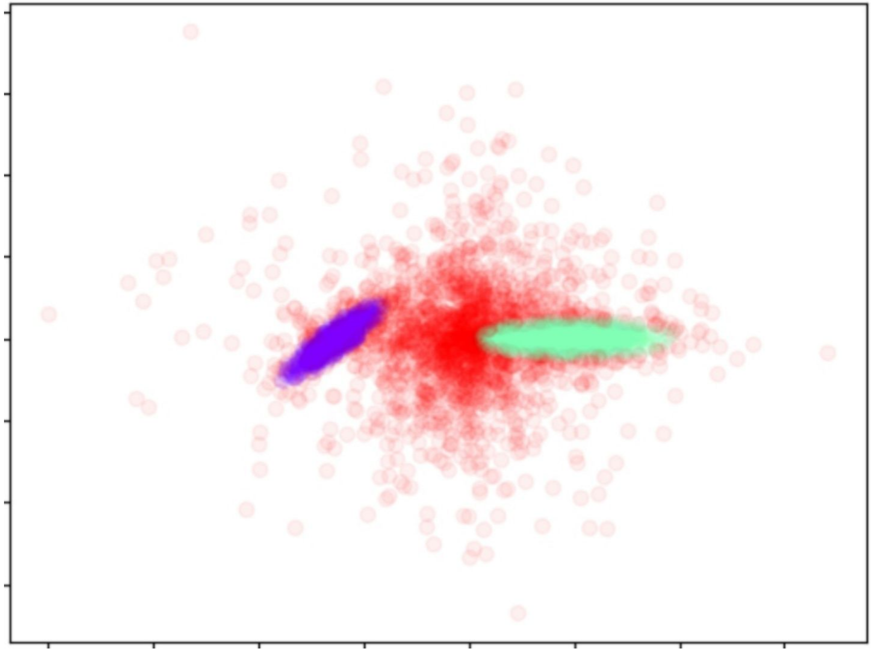
Реализация EM-алгоритма(с модификацией)

```
def em_algorithm_mody(X, num_components, num_iterations):
    n, d = X.shape
    # Initialize parameters
    np.random.seed(42)
    means = np.random.rand(num_components, d)
    covariances = [np.eye(d) for _ in range(num_components)]
    weights = np.ones(num_components) / num_components
    scales = np.ones(num_components)  # Initialize scales

    for _ in range(num_iterations):
        # E-step
        probs = np.zeros((n, num_components))
        for i in range(num_components):
            if i < num_components - 1:
                probs[:, i] = weights[i] * (
                    multivariate_normal.pdf(X, mean=means[i], cov=covariances[i])
                )
            else:
                probs[:, i] = weights[i] * laplace_pdf(X[:, 0], X[:, 1], means[i][0], means[i][1], scales[i])
        probs_2 = probs / probs.sum(axis=1)[:, np.newaxis]
        probs = probs_2

        # M-step
        for i in range(num_components):
            weights[i] = np.sum(probs[:, i]) / n
            means[i] = np.sum(X * probs[:, i][:, np.newaxis], axis=0) / np.sum(probs[:, i])
            diff = X - means[i]
            covariances[i] = np.dot(diff.T, diff * probs[:, i][:, np.newaxis]) / np.sum(probs[:, i])
            if i == num_components - 1:
                scales[i] = np.sum(np.abs((X - means[i])) * probs[:, i][:, np.newaxis]) / np.sum(probs[:, i])

    return means, covariances, weights, scales, probs
```

Em-алгоритм с модификацией

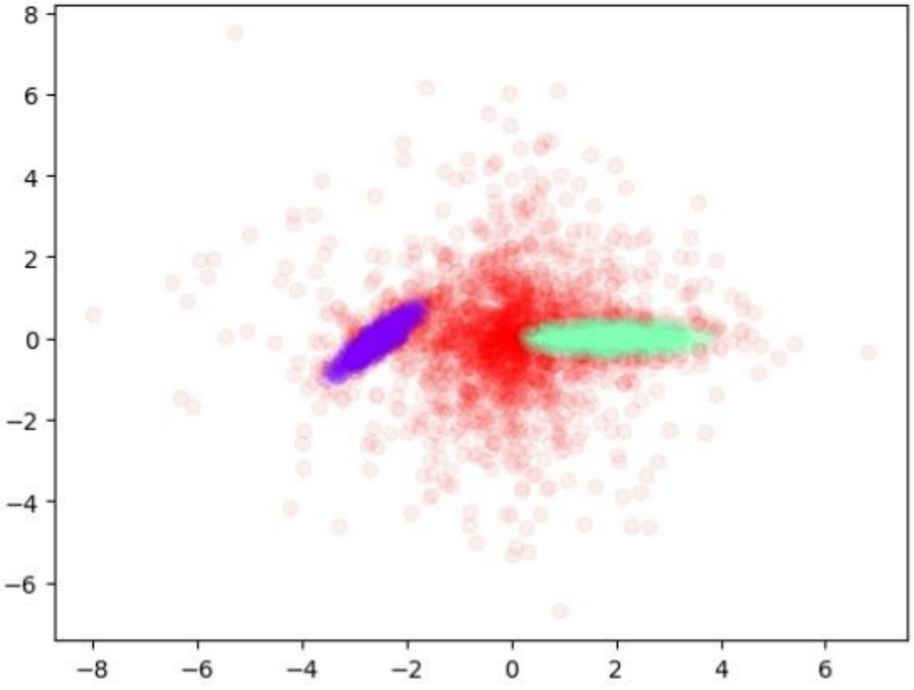


второй датасет

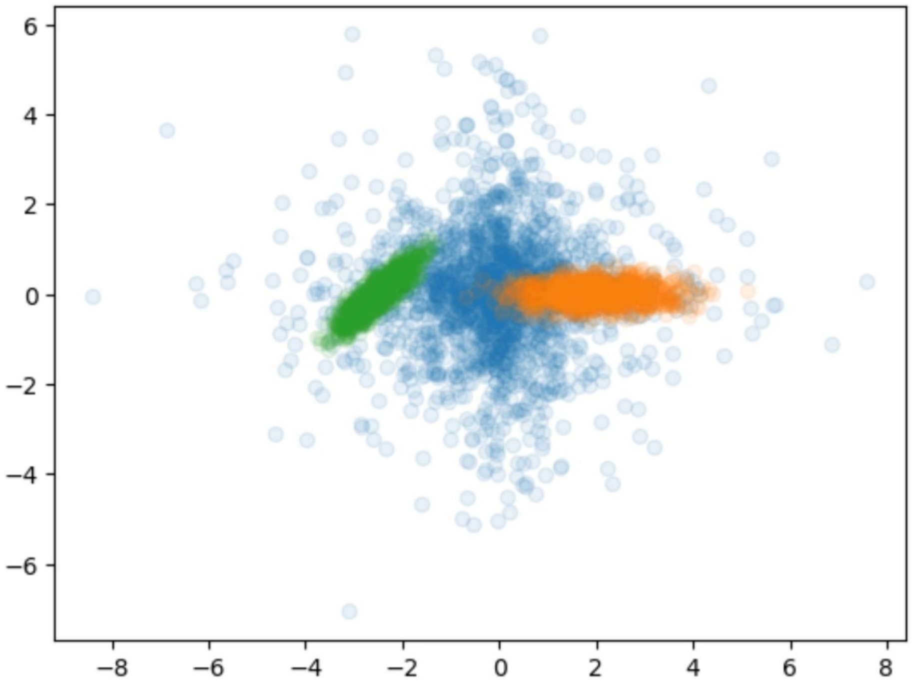


EM-алгоритм с модификацией

Em-алгоритм с модификацией

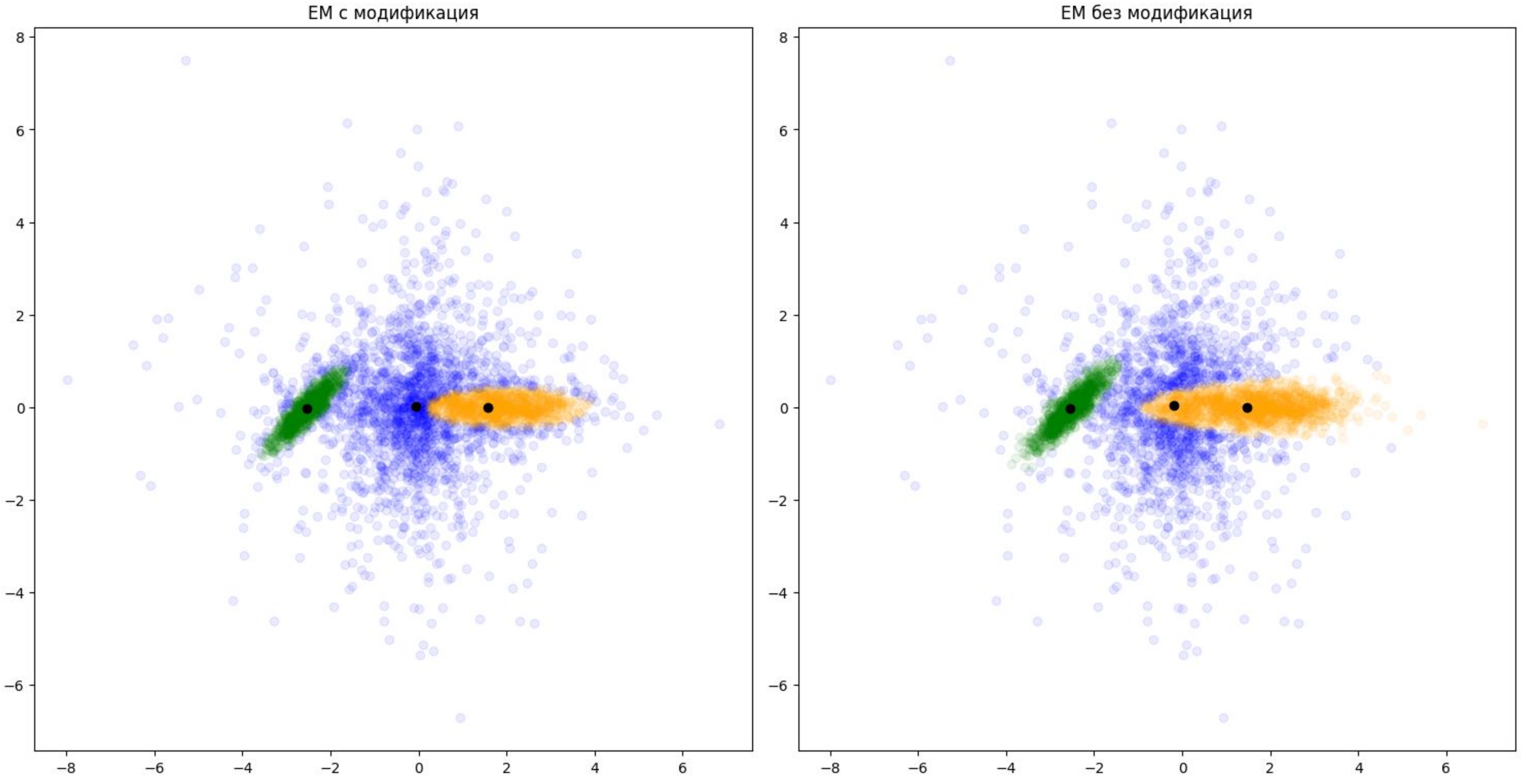


Реализация модификации

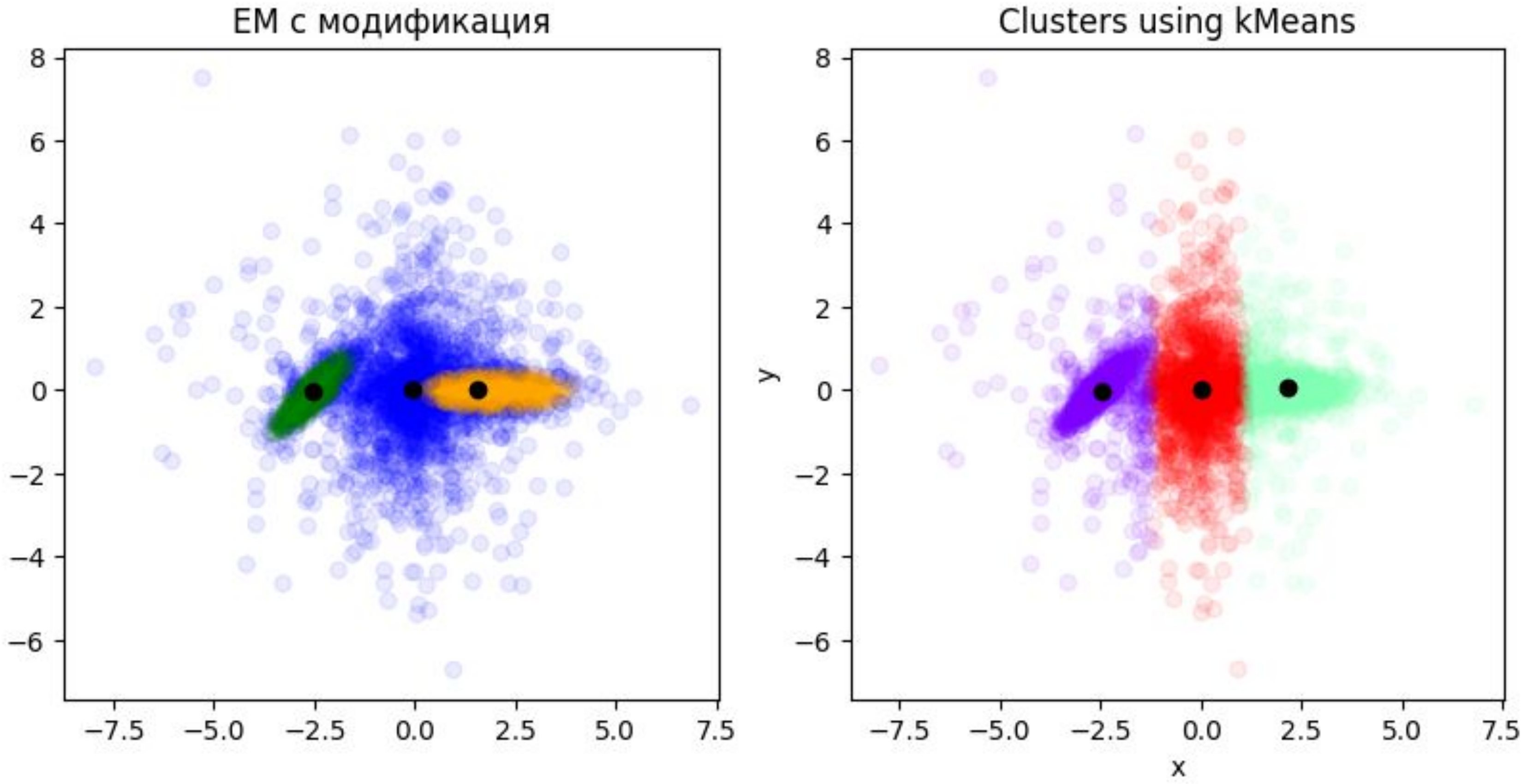


Верная кластеризация

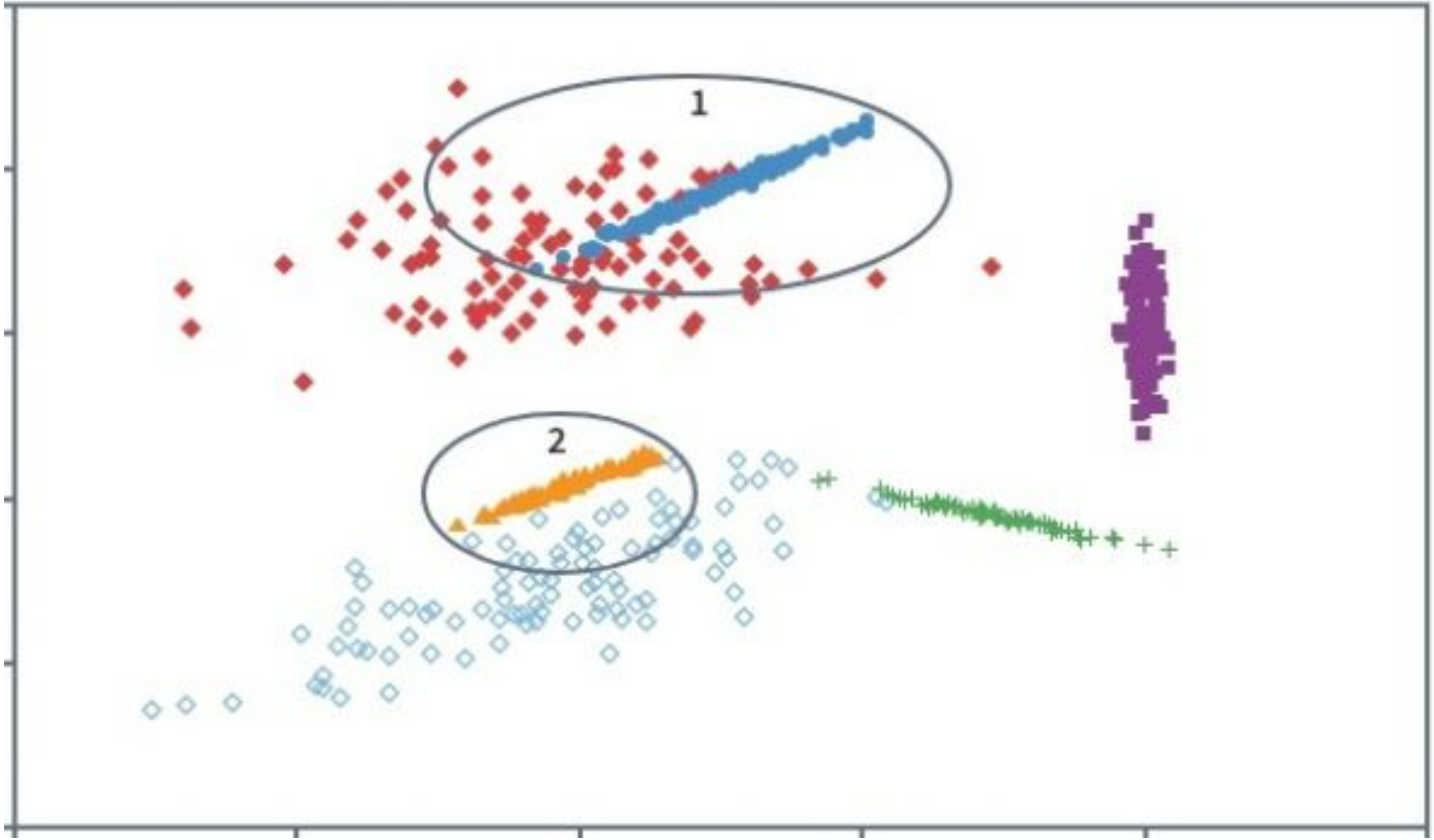
Em-алгоритм с модификацией и без



Сравнение EM-алгоритма с модификацией и KMeans

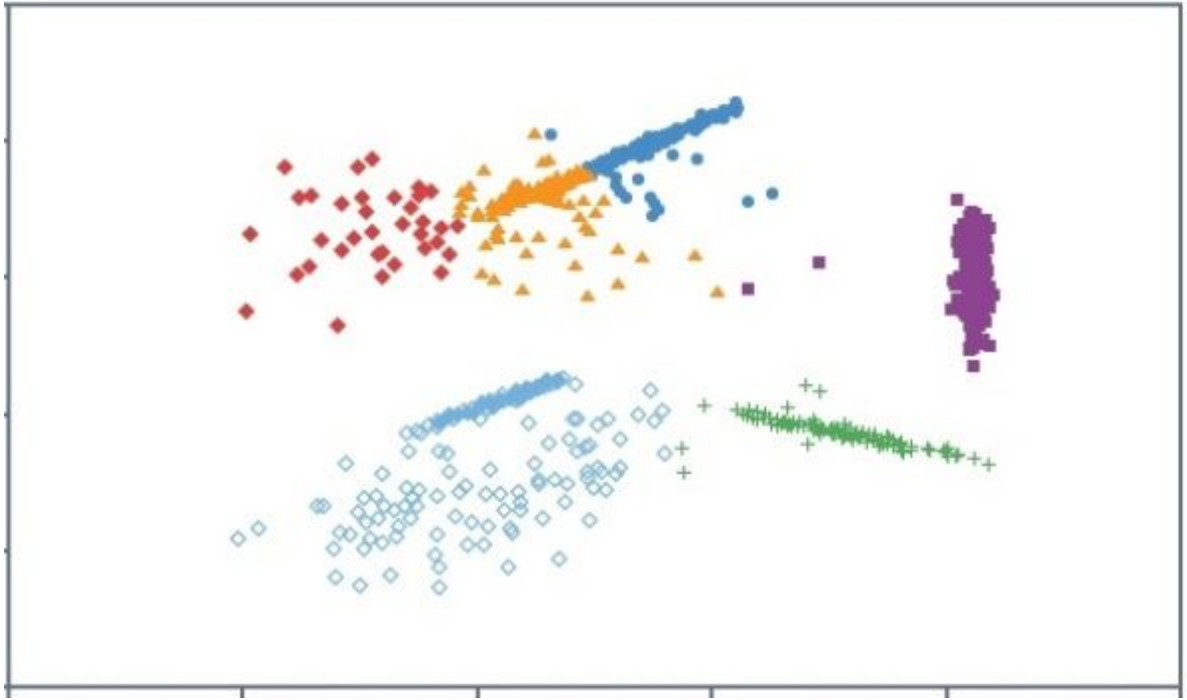


Сильные и слабые стороны алгоритмов



Правильная кластеризация

Сильные и слабые стороны алгоритмов

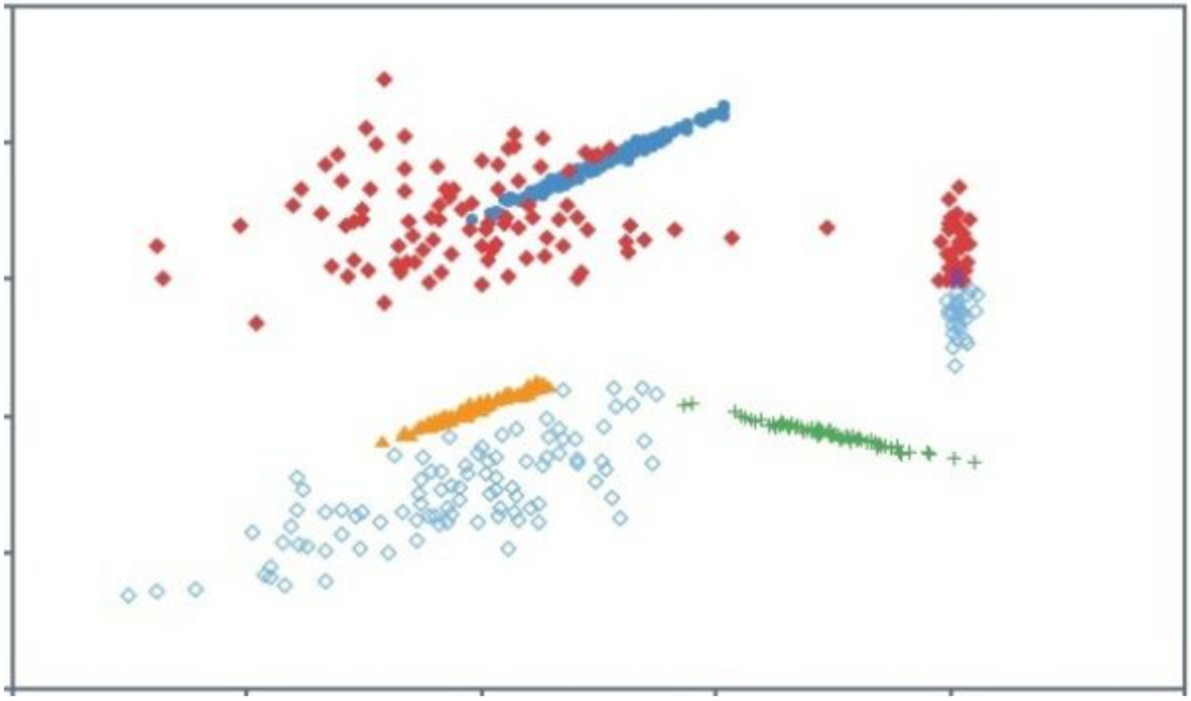


Результат работы KMeans

KMeans:

1. Хорошо работает с обособленными кластерами(фиол, зел)
2. Плохо работает с перекрывающимися кластерами

Сильные и слабые стороны алгоритмов

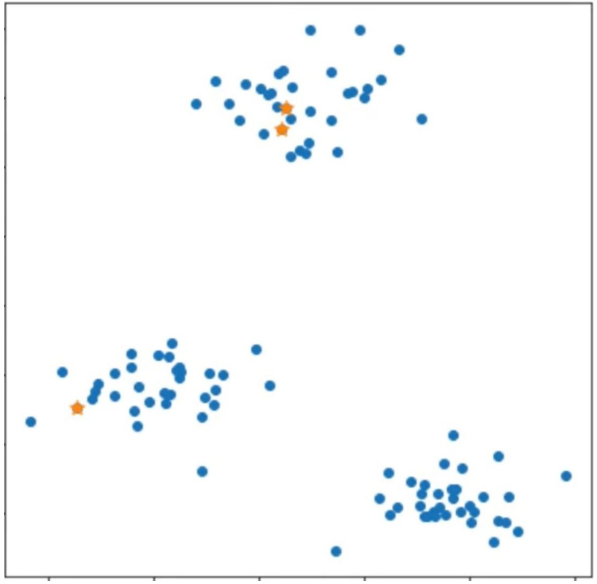


Результат работы EM-алгоритма

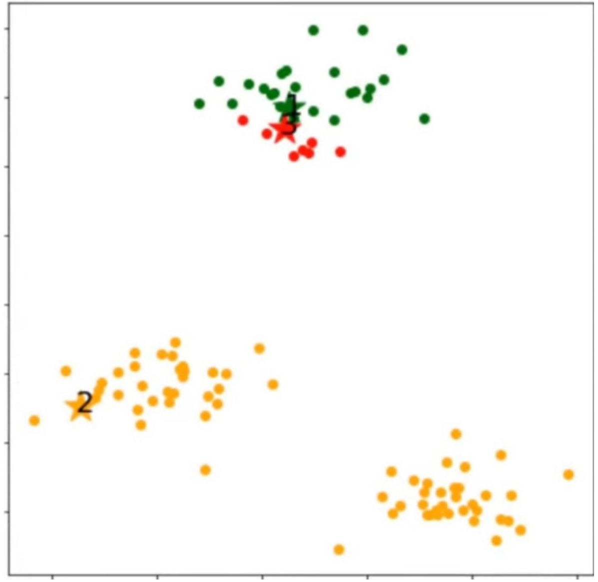
EM-алгоритм:

1. Хорошо работает с распределениями и перекрывающимися кластерами
2. Иногда плохо распознает обособленный кластер

Недостатки обоих методов



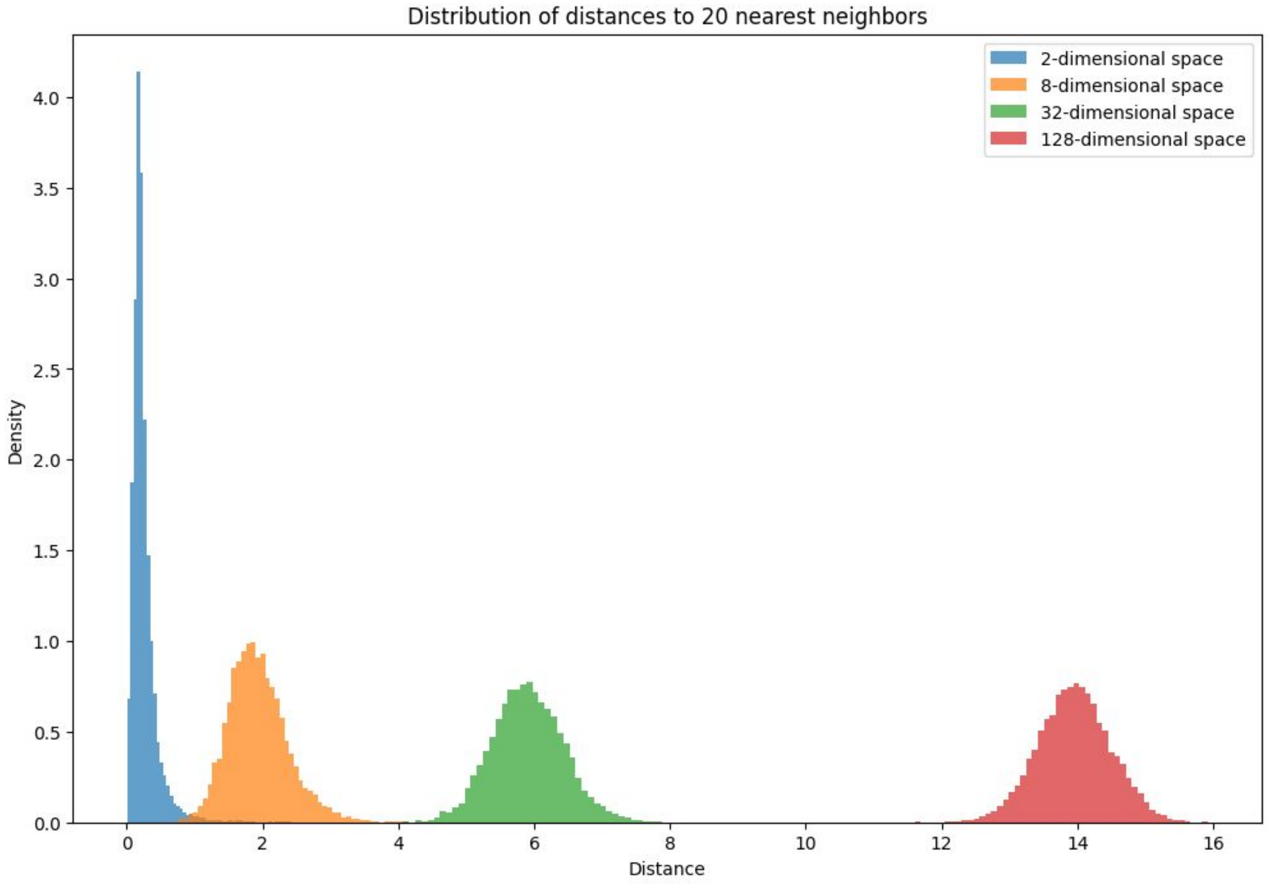
Неудачная инициализация центров



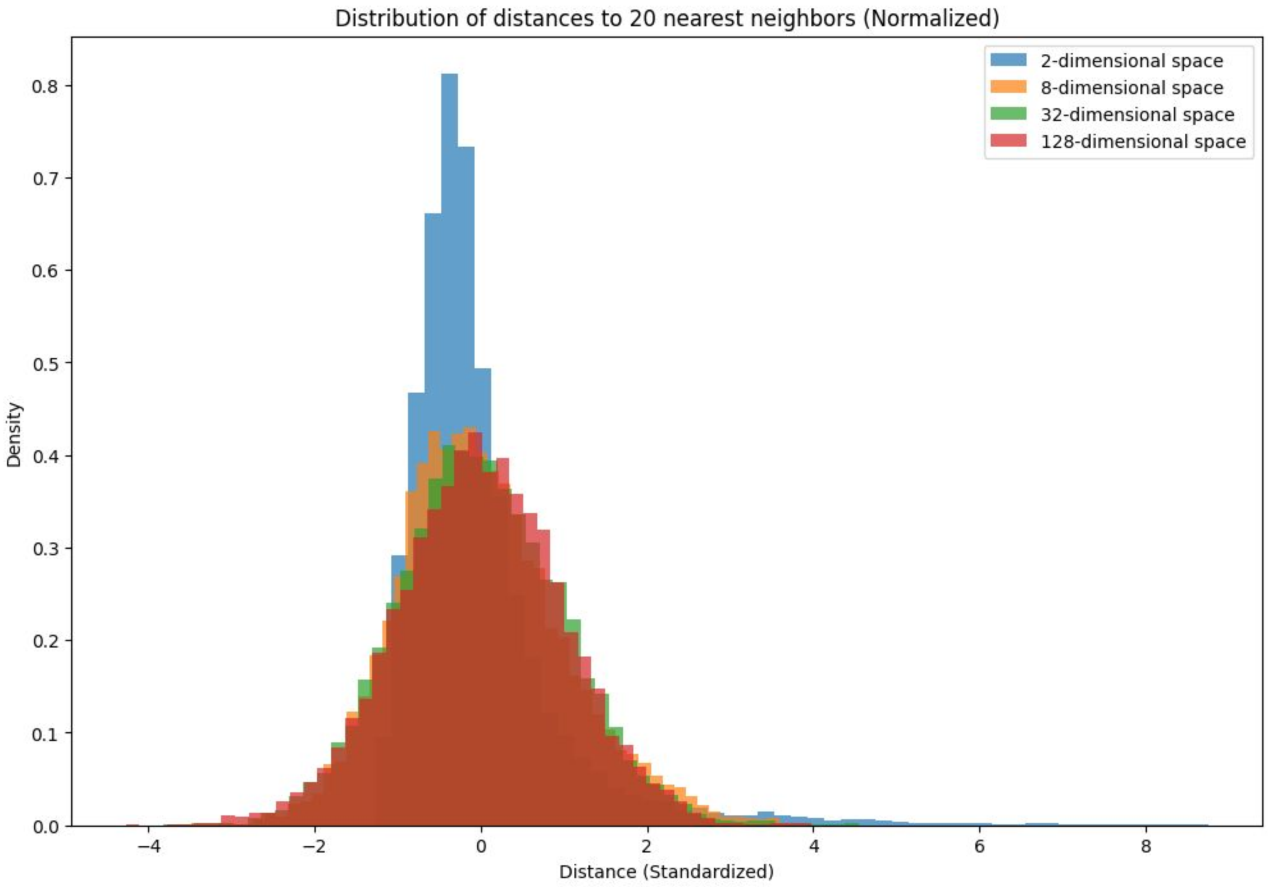
результат неудачной кластеризации

1. Инициализация центров
2. Гиперпараметр - кол-во кластеров
3. Предположение о распределении
4. Скорость работы не постоянна

Недостатки обоих методов - проклятие размерности



Проклятие размерности - решение



Повторяемость результатов

https://github.com/LeonardCaceres/IITP/blob/main/IPPI_enter.ipynb

Вывод

Ссылки

1. Лекция — Прикладная статистика в машинном обучении (v-marco.github.io)
2. Семинар — Прикладная статистика в машинном обучении (v-marco.github.io)
3. EM_Algorithm.pdf (columbia.edu)
4. Учебник по машинному обучению (yandex.ru)
5. Википедия — свободная энциклопедия (wikipedia.org)
6. Mathematics for Machine Learning | Companion webpage to the book "Mathematics for Machine Learning". Copyright 2020 by Marc Peter Deisenroth, A. Aldo Faisal, and Cheng Soon Ong. Published by Cambridge University Press. (mml-book.github.io)
7. EM-алгоритм — Викиконспекты (ifmo.ru)
8. EM — масштабируемый алгоритм кластеризации | Loginom

https://disk.yandex.ru/i/2jE5GbNsMhkPzQ - ссылка на резюме(через неделю пропадет)