МГТУ им. Н. Э. Баумана
ТЕХНОПАРК
Mail.Ru Group

ПРОГРАММИРОВАНИЕ CUDA C/C++, АНАЛИЗ ИЗОБРАЖЕНИЙ И DEEP LEARNING

Лекция №5

Спасёнов Алексей

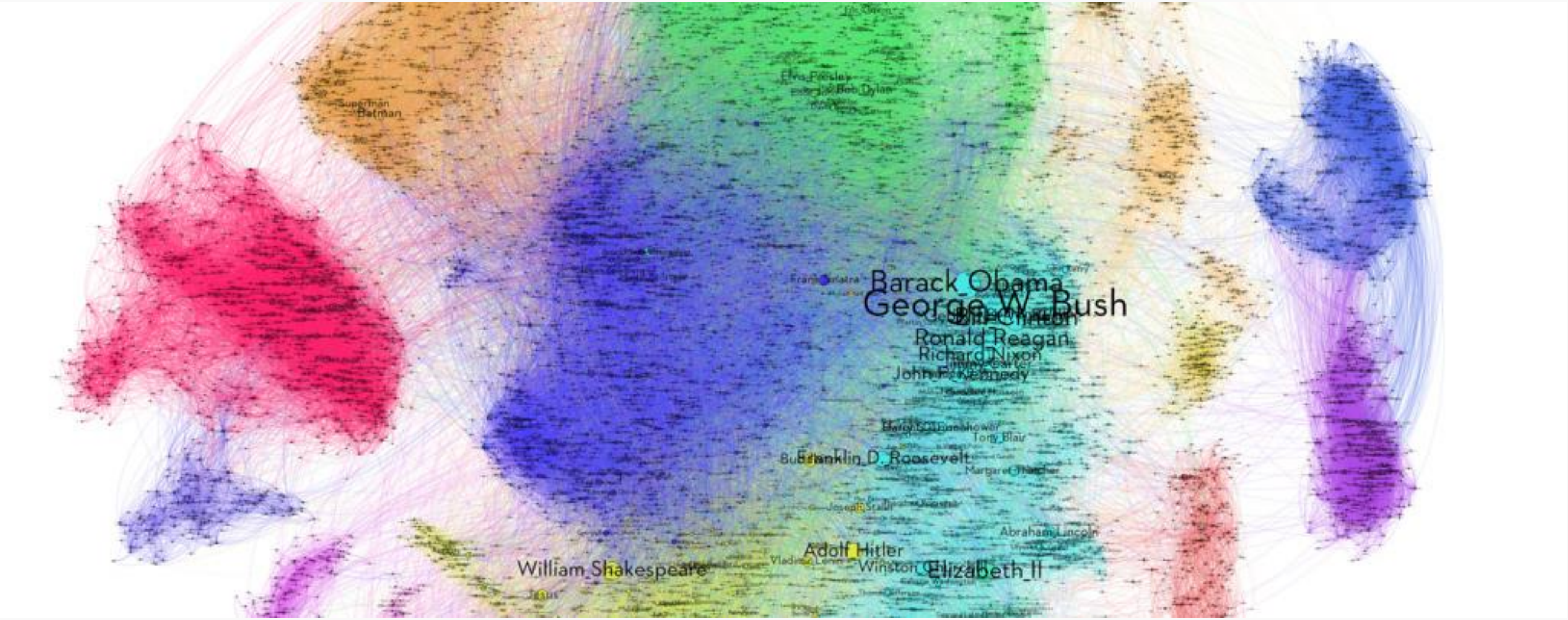
Введение в Машинное обучение

Кластеризация (обучение без учителя)

1. Задача кластеризации
2. Алгоритм K-Means
3. EM-алгоритм
4. Иерархическая кластеризация
5. Алгоритм DBSCAN
6. Оценка качества

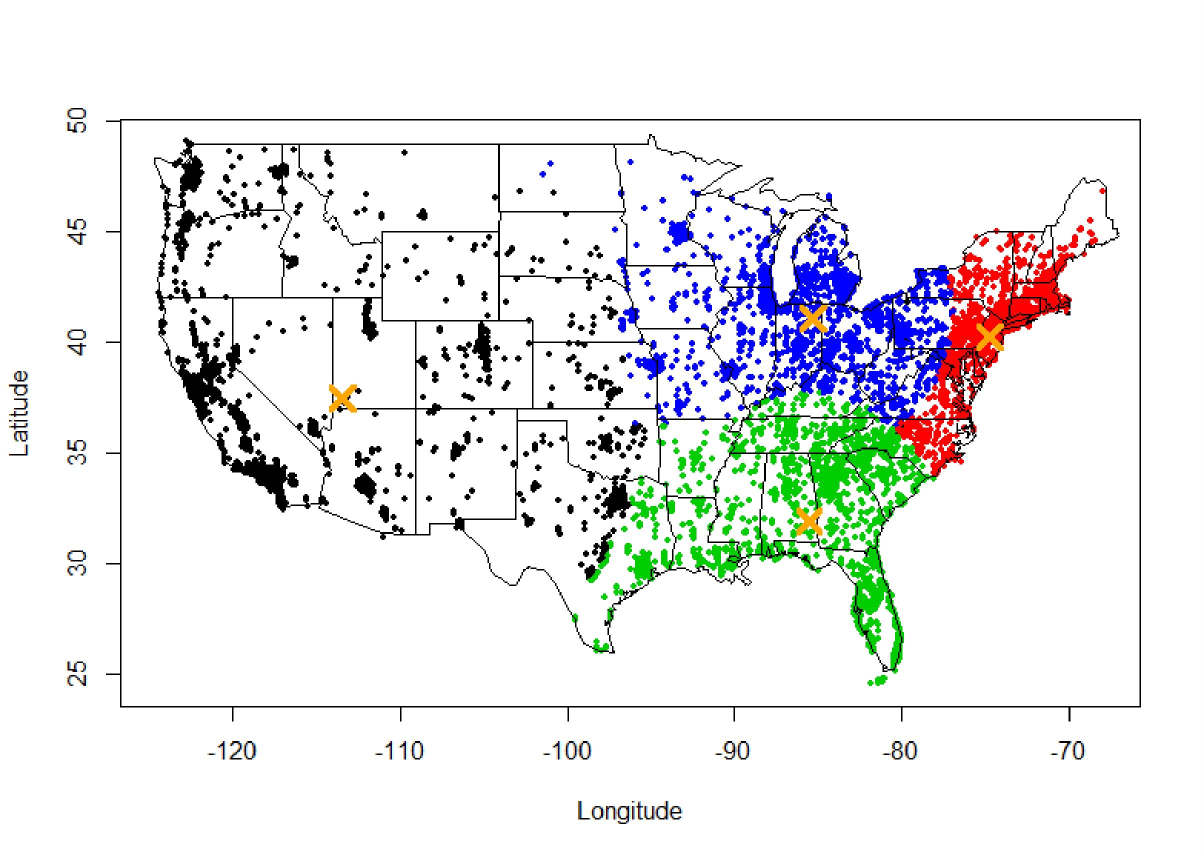
Примеры задачи кластеризации (1/3)

Анализ текста



Примеры задачи кластеризации (2/3)

Анализ геоданных



Задача кластеризации (1/3)

Дано:

$x_i, \dots, x_l$ –объекты обучающей выборки X

ρ – функция расстояния между объектами

Задача:

Поиск меток $y_i, \dots, y_l$, таких, чтобы объекты с одинаковыми метками были близки по ρ , а с разными метками существенно различались

Задача кластеризации (2/3)

Цели:

1) Упрощение обработки данных за счёт разбиения исходного набора данных на схожие подгруппы

2) Уменьшение объёма хранимых данных

3) Поиск объектов, не относящихся ни к одному из исследуемых классов

4) Построение иерархии множества объектов

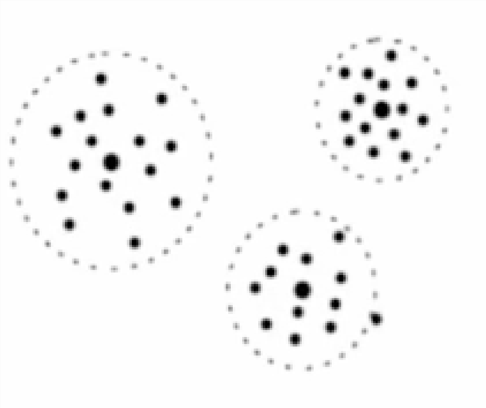
Задача кластеризации (3/3)

Проблемы:

1) Выбор критерия качества кластеризации
2) Выбор метода кластеризации
3) Выбор числа кластеров, на которые требуется разбить исходное множество объектов
4) Выбор функции расстояния ρ (метрики)

Конфигурации кластеров (1/4)

Кластеры с центром



Расстояние между объектами внутри кластера меньше межкластерного

Конфигурации кластеров (2/4)

Ленточные кластеры

Кластеры с перемычками

Конфигурации кластеров (3/4)

Присутствие фона

Кластеры с перекрытием

Конфигурации кластеров (4/4)

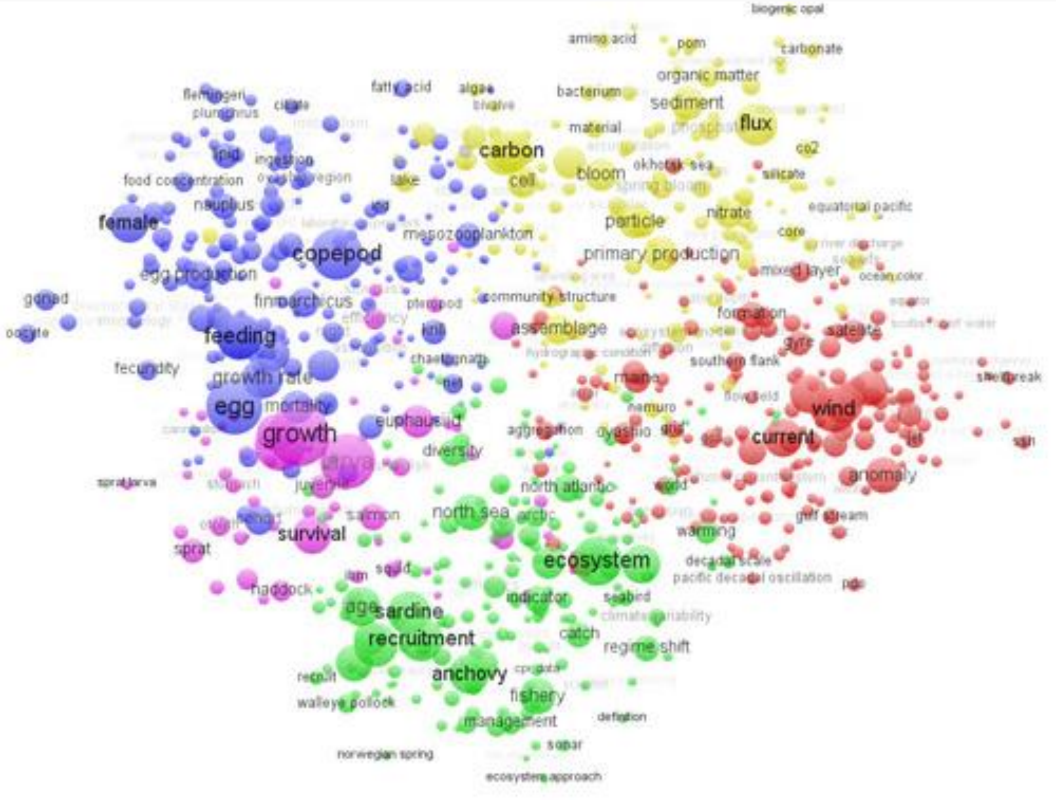
Внутренние особенности

Отсутствие кластеров

Типы кластеризации

МГТУ им. Н.Э. Баумана
ТЕХНОПАРК
Mail.Ru Group

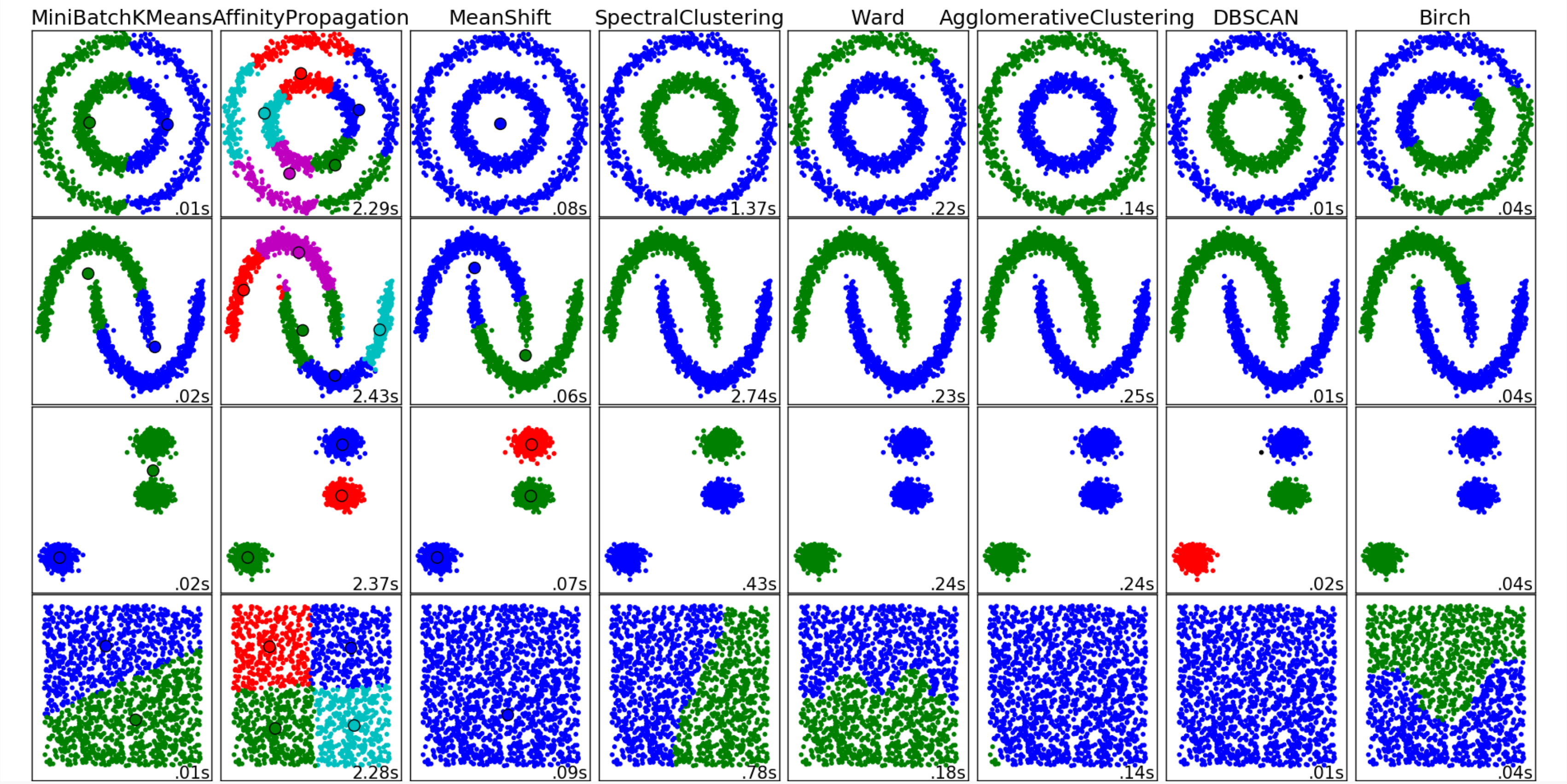
Жёсткая и мягкая кластеризация



В «мягкой» кластеризации объект можно отнести к нескольким кластерам с разным весом

Типы кластеризации

Алгоритмы кластеризации



Алгоритмы кластеризации

EM-алгоритм

Имеется выборка X^l, состоящая из смеси распределений

$$p(x) = \sum_{y=1}^{M} w_y p_y(x), \sum_{y=1}^{M} w_y = 1$$

$p_y(x)$ - плотность

w_y - априорная вероятность кластера y

Алгоритмы кластеризации

EM-алгоритм

$X = R^n$,

Кластеры n-мерные гауссовские:

$$p_y = (2\pi)^{-\frac{n}{2}}(\sigma_{y1} \dots \sigma_{yn})^{-1}\exp\left(-\frac{1}{2}\rho_y^2(x, \mu_y)\right)$$

$\mu_y = (\mu_{y1} \dots \mu_{yn})$ - центр кластера y,

$\Sigma_y = diag(\sigma_{y1}^2, \dots, \sigma_{yn}^2)$ - диагональная матрица ковариаций,

$\rho_y^2(x, x') = \sum_{j=1}^{n} \sigma_{yj}^{-1} |f_j(x) - f_j(x')|^2$

Алгоритмы кластеризации

EM-алгоритм

Шаг 1: Выбираем начальные приближения для w_y, μ_y, Σ_y

Шаг 2: do

Шаг 2.1: E-шаг (expectation)

$$g_{iy} = P(y|x_i) = \frac{w_y p_y(x_i)}{\sum_{j=1}^{M} w_z p_z(x_i)}, y \in Y, i = 1, \dots, l$$

Шаг 2.2: M-шаг (maximization)

$$w_y = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} g_{iy}, y \in Y$$

$$\mu_{yj} = \frac{1}{l w_y} \sum_{i=1}^{l} g_{iy} f_j(x_i), y \in Y, j = 1, \dots, n$$

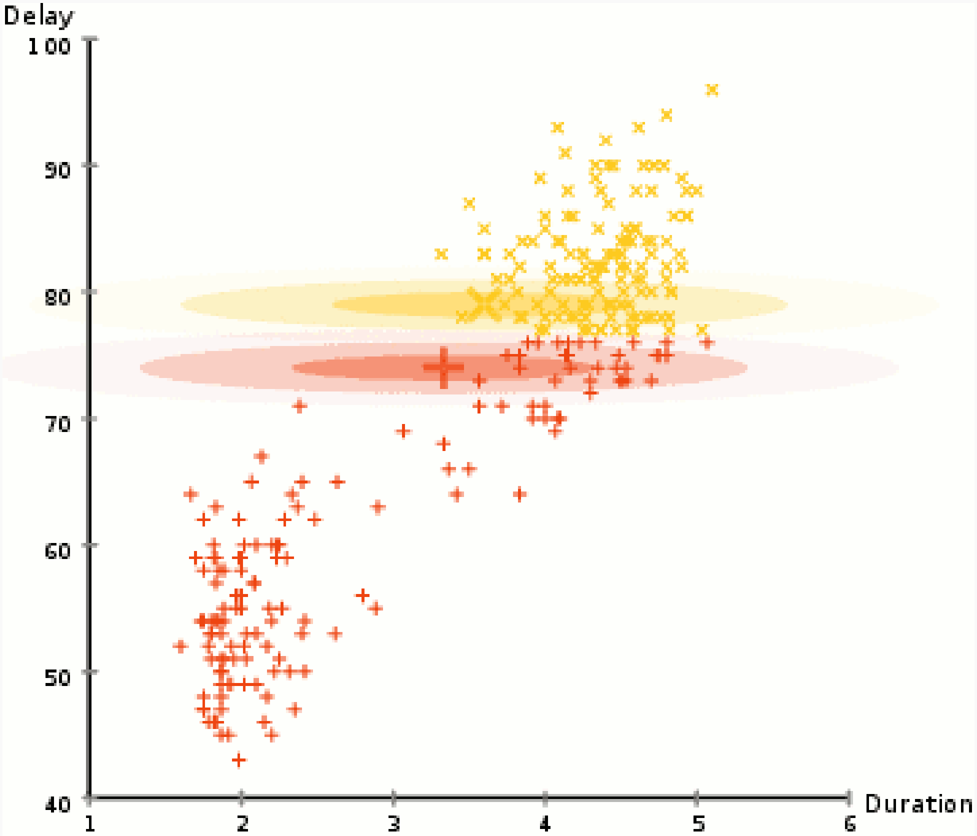
$$\sigma_{yj}^2 = \frac{1}{l w_y} \sum_{i=1}^{l} g_{iy} (f_j(x_i) - \mu_{yj})^2, y \in Y \quad, j = 1, \dots, n$$

$$y_i = \arg\max_{y \in Y} g_{iy}, i = 1, \dots, l$$

while Не будут изменяться y_i

Алгоритмы кластеризации

EM-алгоритм



Алгоритмы кластеризации

Алгоритм K-Means

Шаг 1: Выбираем начальные приближения для μ_y (положения центров)

Шаг 2: do

Шаг 2.1: Аналог E-шага

Относим каждый объект x_i к ближайшему центру:

$$y_i = \arg\min \rho\left(x_i, \mu_y\right), y \in Y, i = 1, \dots, l$$

Шаг 2.2: Аналог M-шага

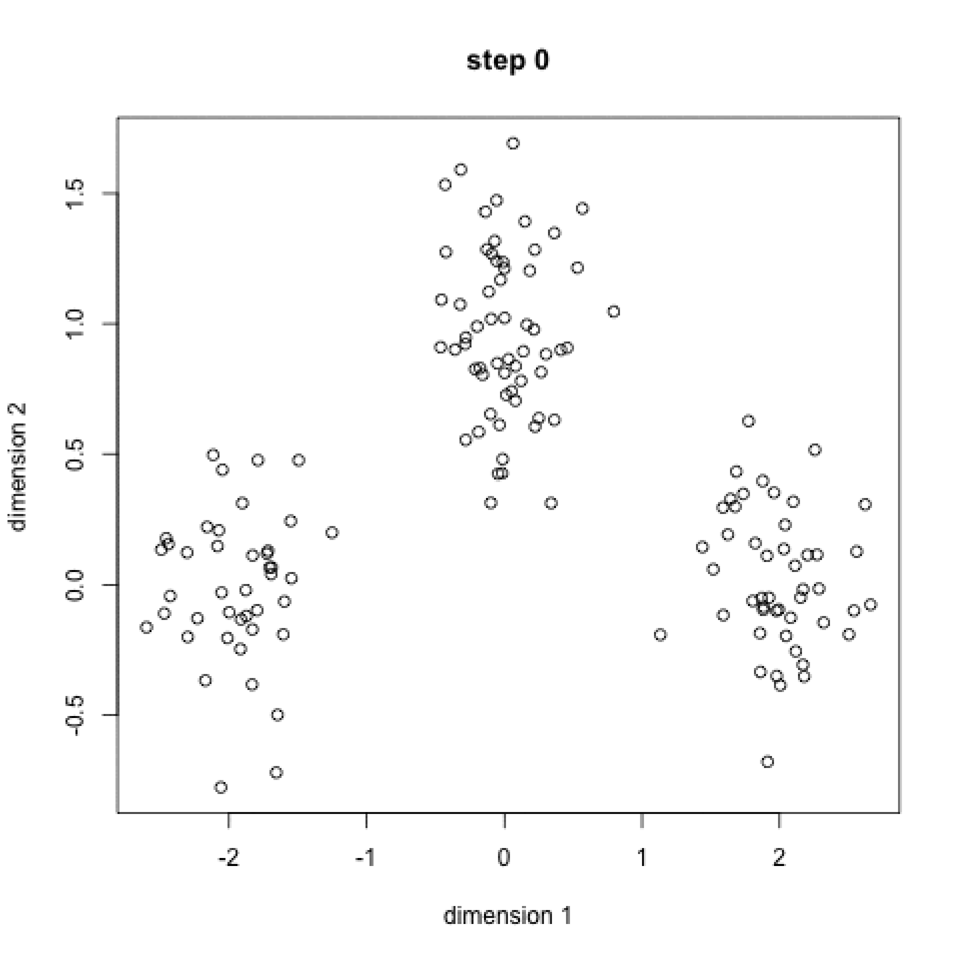
Вычисляем новые положения центров

$$\mu_y = \frac{\sum_{i=1}^{l}[y_i = y] f_j(x_i)}{\sum_{i=1}^{l}[y_i = y]}, y \in Y, j = 1, \dots, n$$

while Не будут изменяться y_i

Алгоритмы кластеризации

Алгоритм K-Means



Алгоритмы кластеризации

Алгоритм K-Means

Оптимизируем среднее внутриклассовое расстояние:

$$F = \frac{\sum_{i<j}[y_i = y_j]\rho(x_i, x_j)}{\sum_{i<j}[y_i = y_j]} \to min$$

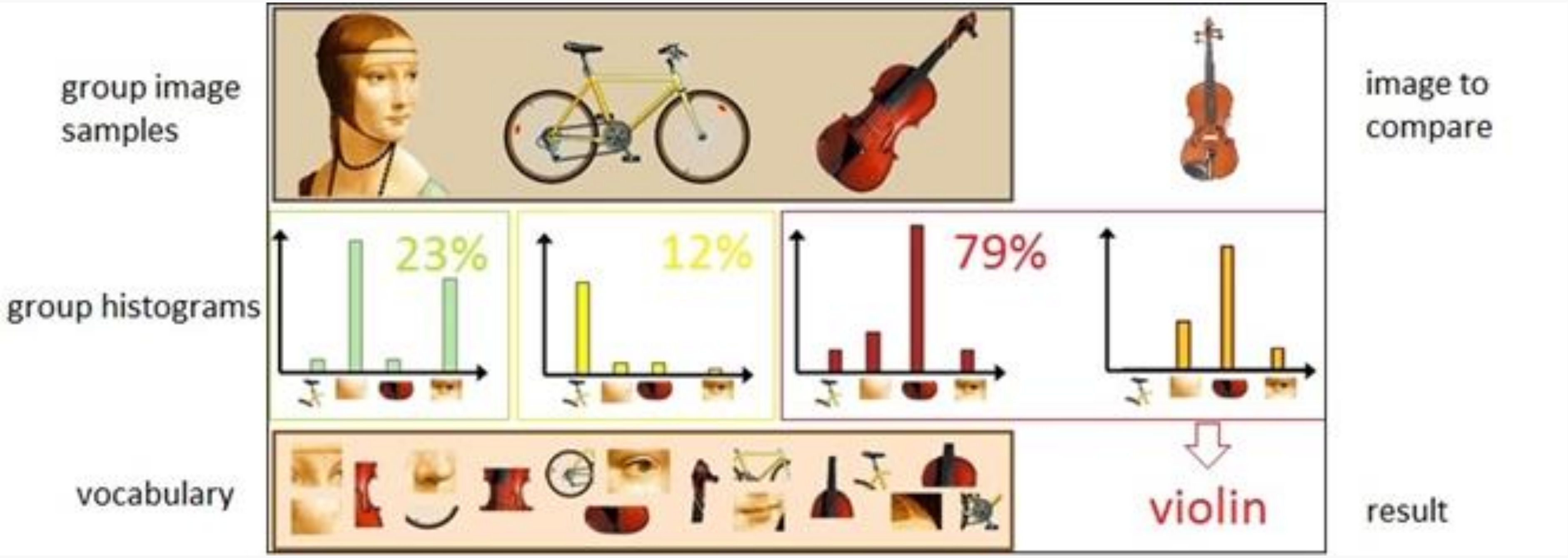
Алгоритмы кластеризации

Алгоритм K-Means

64 цвета
(кластера)

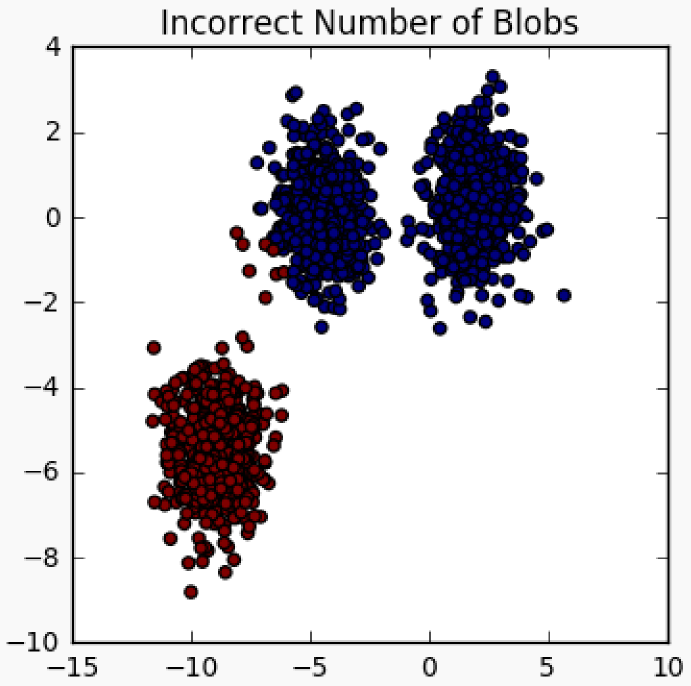
Алгоритмы кластеризации

Bag of visual words



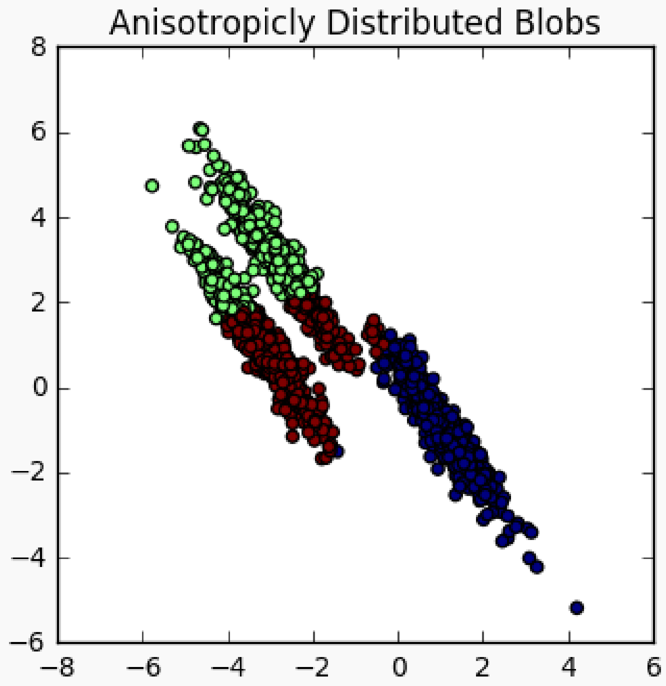
Алгоритмы кластеризации

Алгоритм K-Means



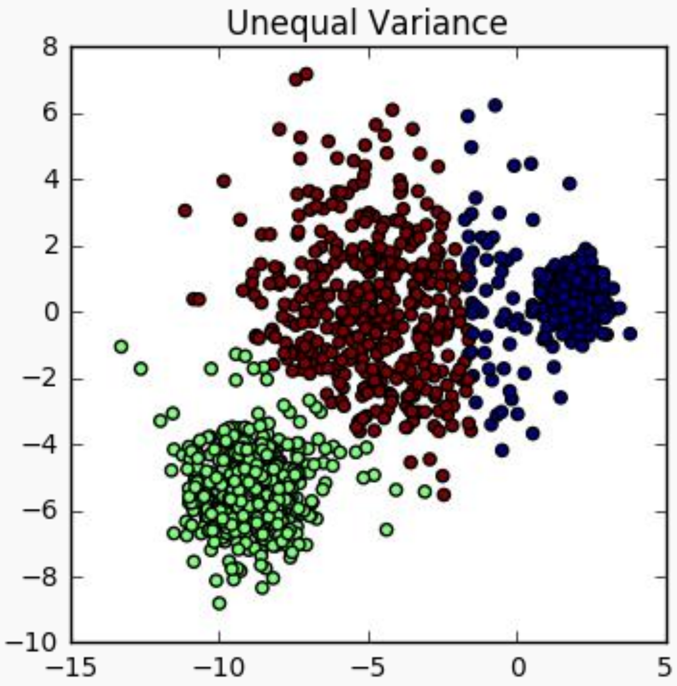
Алгоритмы кластеризации

Алгоритм K-Means



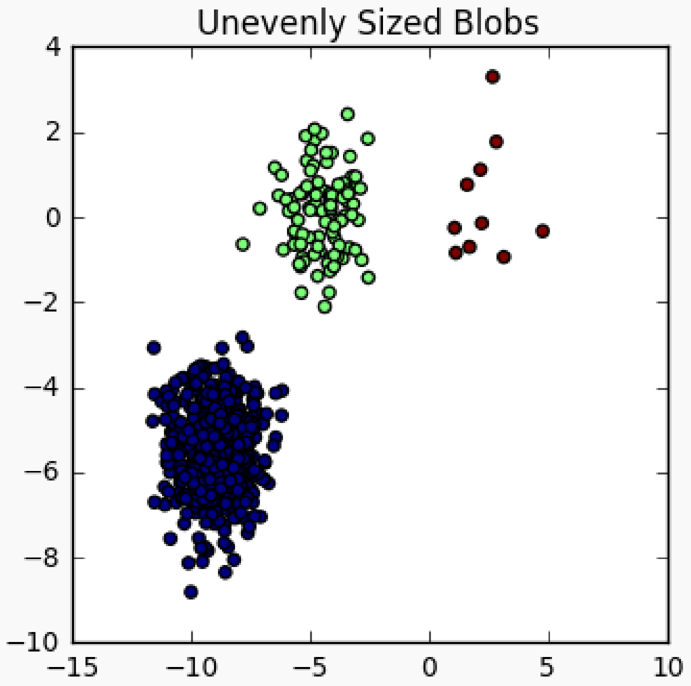
Алгоритмы кластеризации

Алгоритм K-Means



Алгоритмы кластеризации

Алгоритм K-Means



Алгоритмы кластеризации

Модификации K-Means

Mini-Batch K-Means

1) Если данных достаточно много, то вычисление расстояний от всех объектов до центов кластеров может занять достаточно много времени
2) Решение: На каждом шаге выбирать из набора данных случайную подвыборку

Алгоритмы кластеризации

Модификации K-Means

K-Means++

1) Выбор начального приближения центров кластеров значительно влияет на скорость сходимости алгоритма
2) Выбираем начальные положения центров на максимальном расстоянии друг от друга
3) Решение:
    1) Выбираем начальные центры из равномерного распределения на выборке
    2) Каждый следующий центр выбираем случайно из оставшихся точек так, чтобы вероятность выбора точки была пропорциональна квадрату расстояний от неё до ближайшего центра

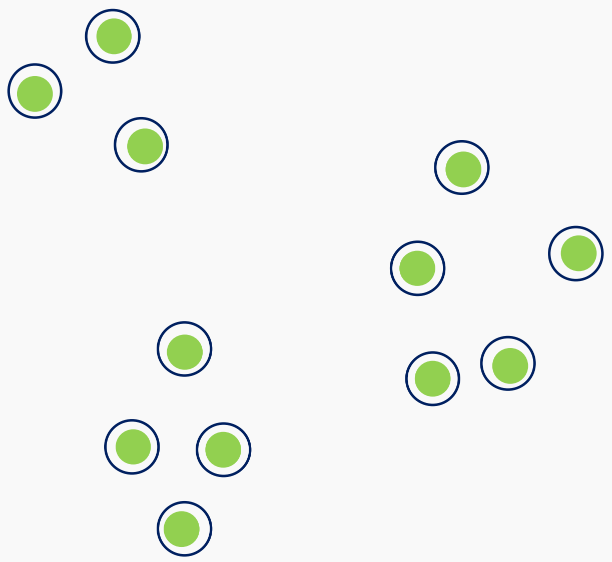
Алгоритмы кластеризации

Иерархическая кластеризация

1) Агломеративная
2) Дивизионная

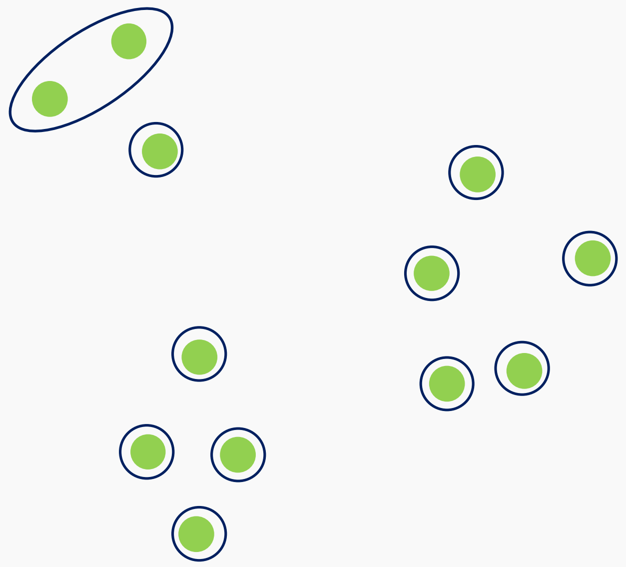
Алгоритмы кластеризации

Агломеративная кластеризация



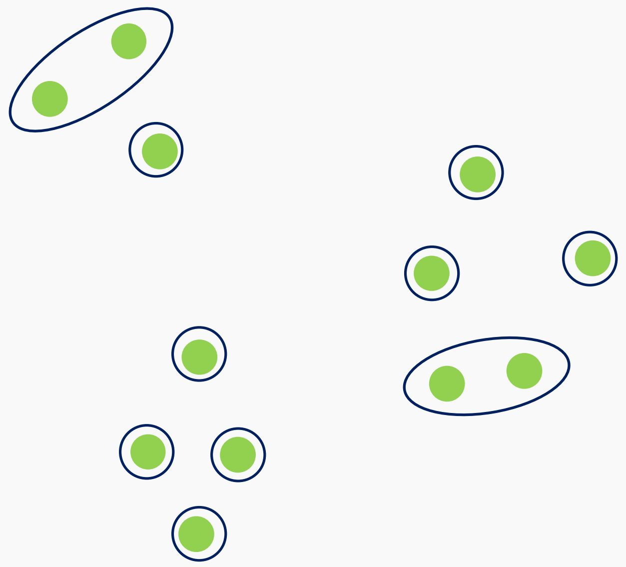
Алгоритмы кластеризации

Агломеративная кластеризация



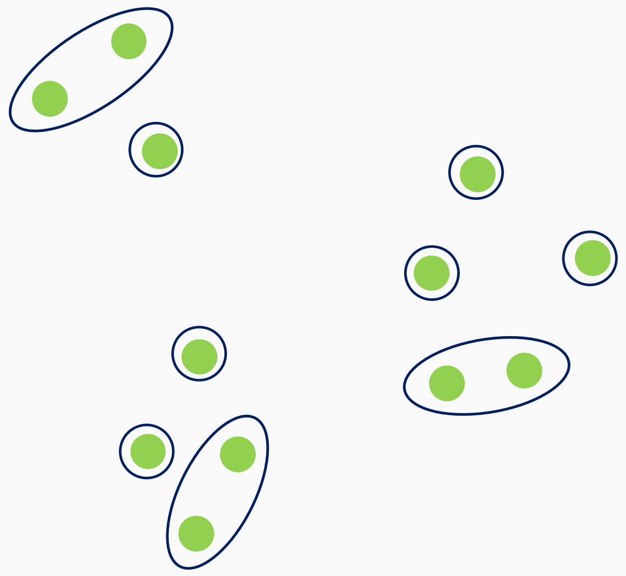
Алгоритмы кластеризации

Агломеративная кластеризация



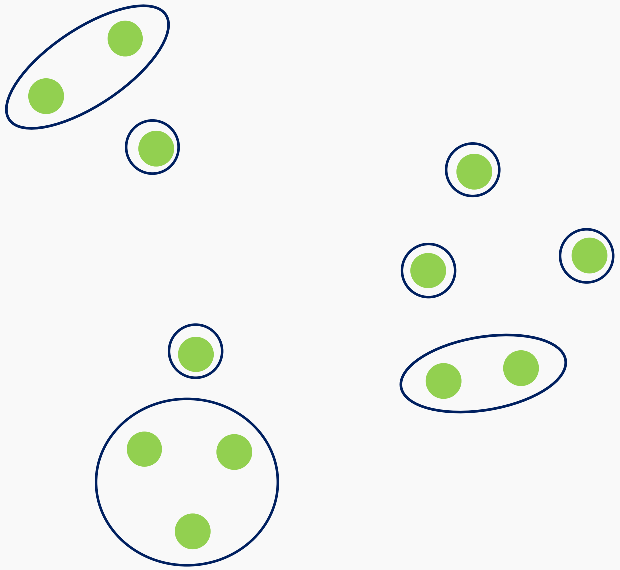
Алгоритмы кластеризации

Агломеративная кластеризация



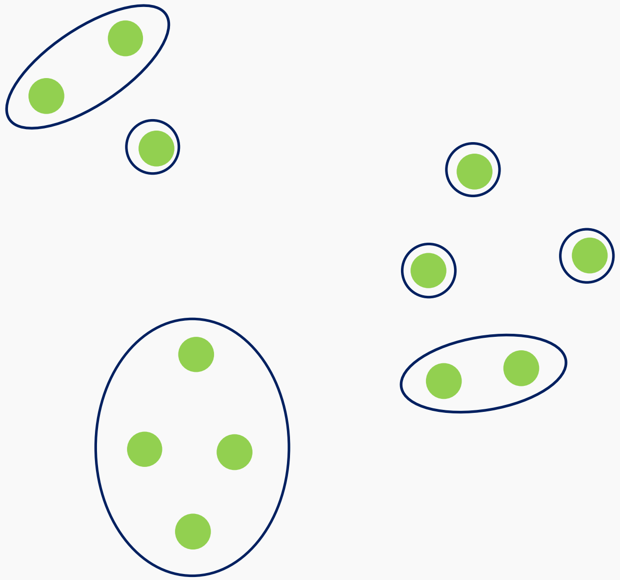
Алгоритмы кластеризации

Агломеративная кластеризация



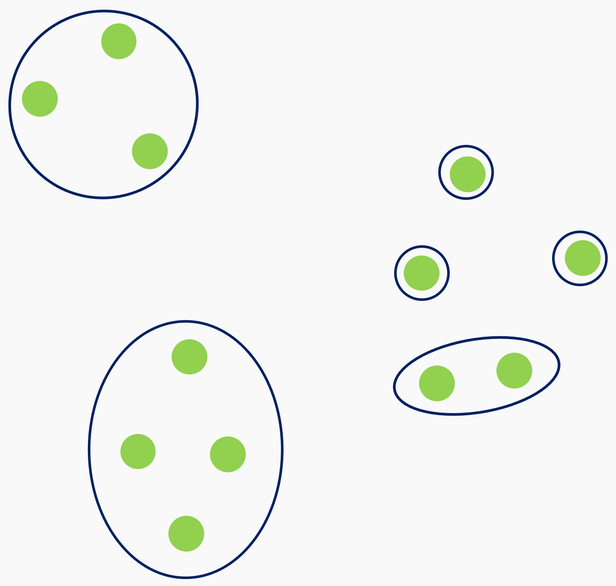
Алгоритмы кластеризации

Агломеративная кластеризация



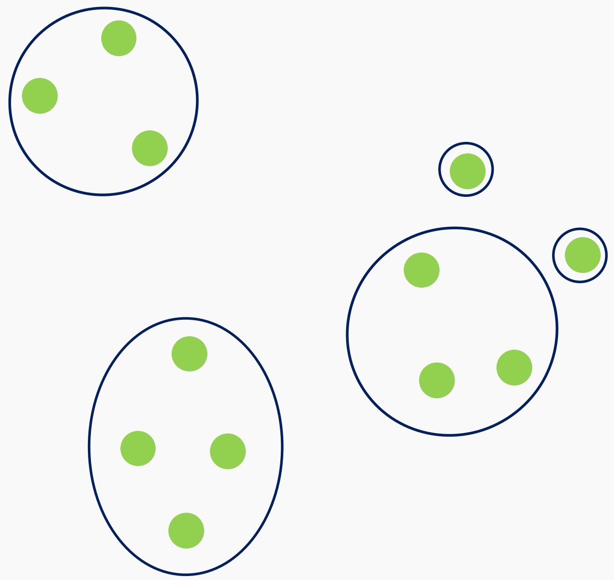
Алгоритмы кластеризации

Агломеративная кластеризация



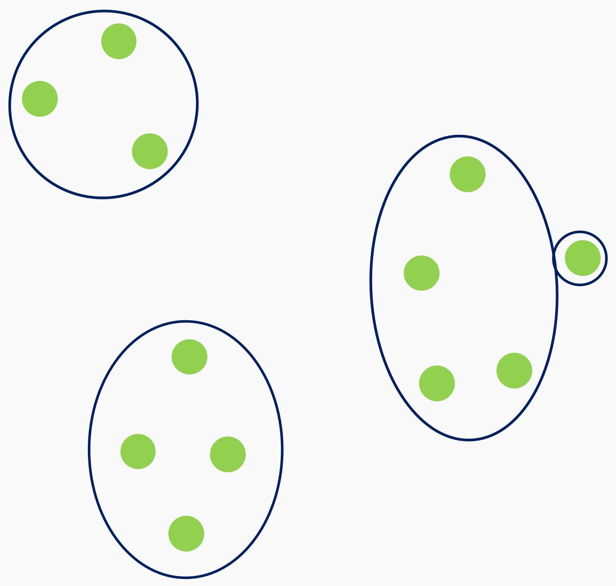
Алгоритмы кластеризации

Агломеративная кластеризация



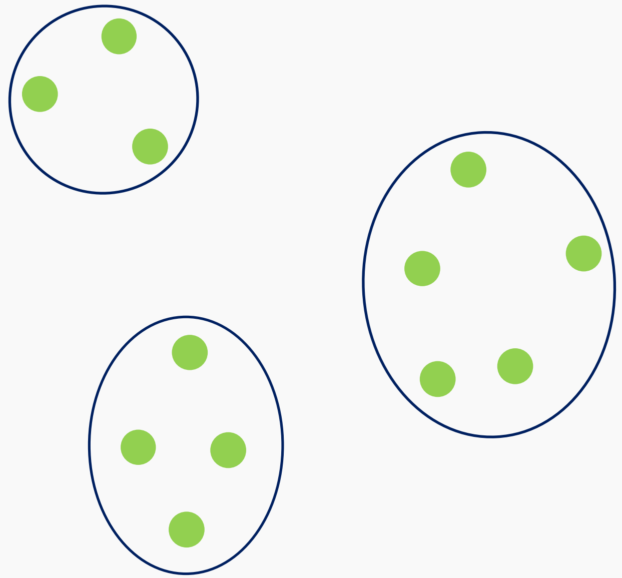
Алгоритмы кластеризации

Агломеративная кластеризация



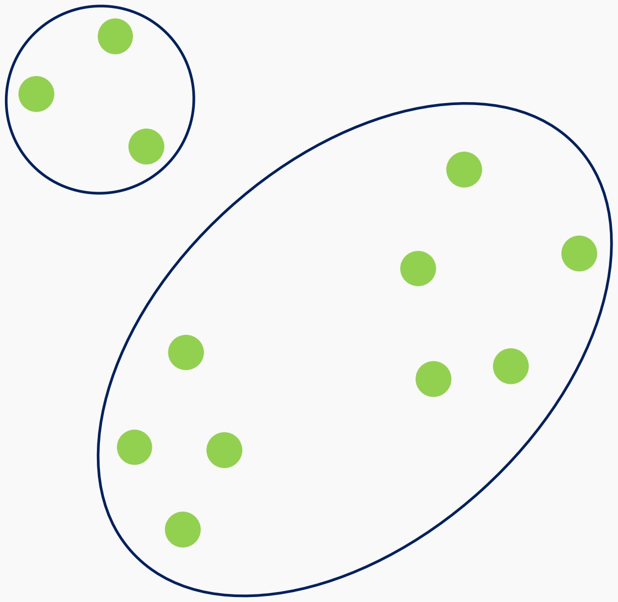
Алгоритмы кластеризации

Агломеративная кластеризация



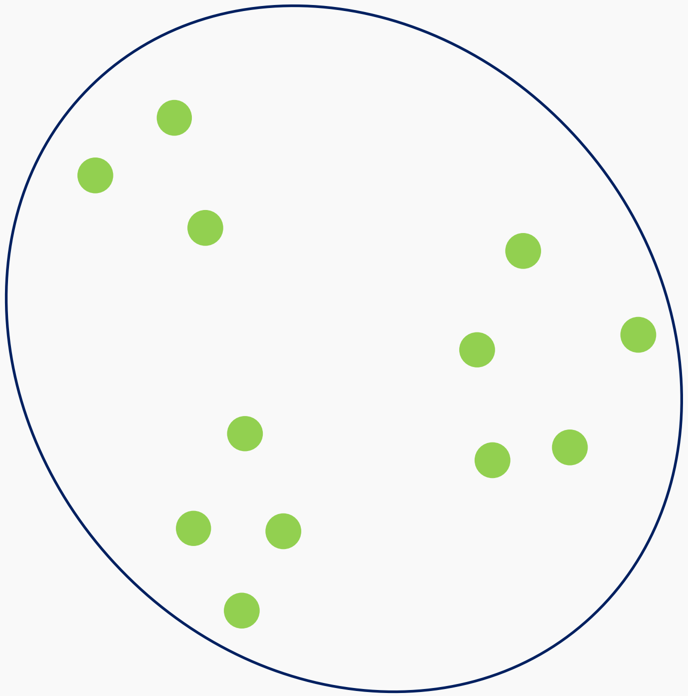
Алгоритмы кластеризации

Агломеративная кластеризация



Алгоритмы кластеризации

Агломеративная кластеризация



Алгоритмы кластеризации

Формула Ланса-Уильямса

$$
\begin{aligned}
R(U \cup V, S) = \alpha_U \cdot R(U, S) &+ \\
+ \alpha_V \cdot R(V, S) &+ \\
+ \beta \cdot R(U, V) &+ \\
+ \gamma \cdot \big| R(U, S) - R(V, S) \big|&,
\end{aligned}
$$

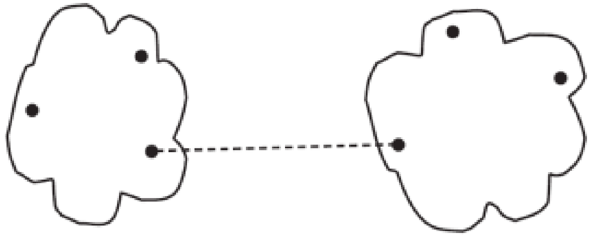
где α_U, α_V, β, γ — числовые параметры.

Алгоритмы кластеризации

Расстояние ближайшего соседа

$$R^{б}(W,S) = \min_{w\in W, s\in S} \rho(w,s);$$

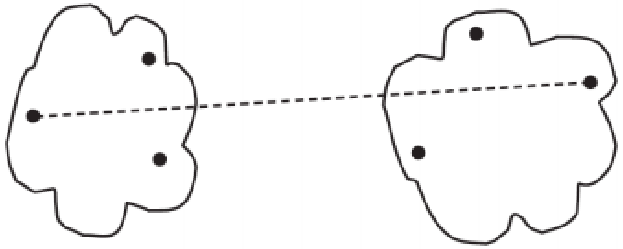
$$\alpha_U = \alpha_V = \tfrac{1}{2},\ \ \beta = 0,\ \ \gamma = -\tfrac{1}{2}.$$



Расстояние дальнего соседа

$$R^{д}(W,S) = \max_{w\in W, s\in S} \rho(w,s);$$

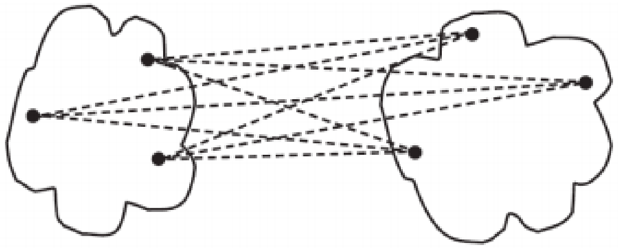
$$\alpha_U = \alpha_V = \tfrac{1}{2},\ \ \beta = 0,\ \ \gamma = \tfrac{1}{2}.$$



Групповое среднее расстояние

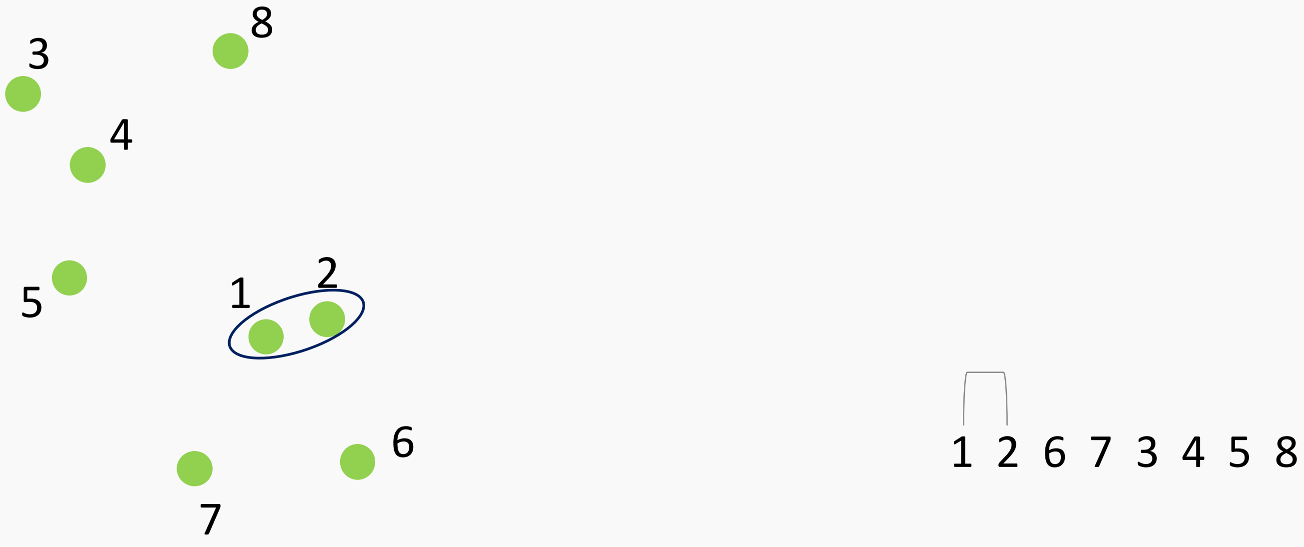
$$R^{г}(W,S) = \frac{1}{|W||S|} \sum_{w\in W} \sum_{s\in S} \rho(w,s);$$

$$\alpha_U = \frac{|U|}{|W|},\ \ \alpha_V = \frac{|V|}{|W|},\ \ \beta = \gamma = 0.$$



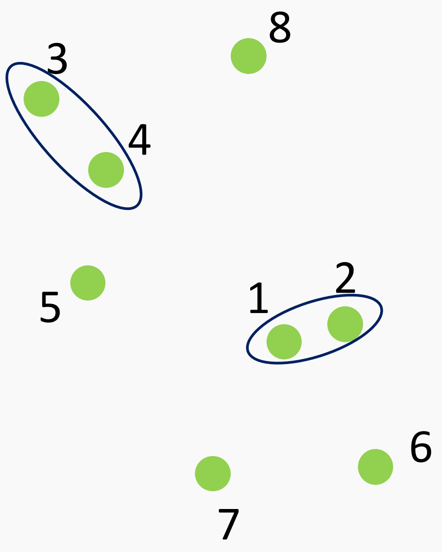
Алгоритмы кластеризации

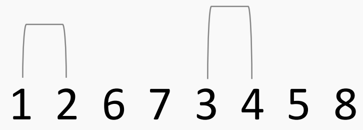
Дендограмма



Алгоритмы кластеризации

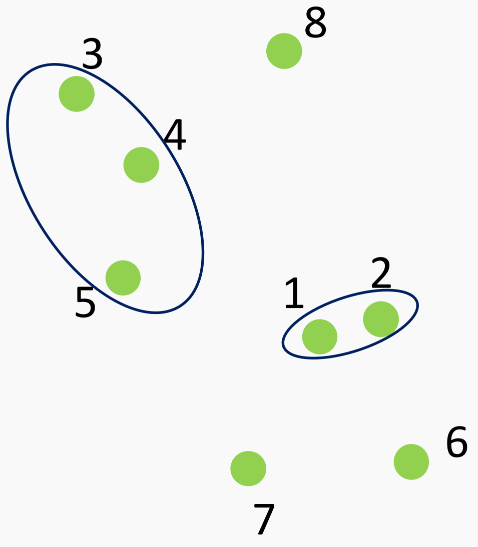
Дендограмма

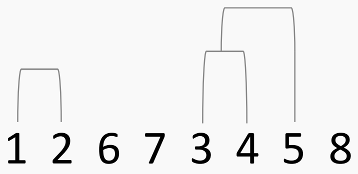




Алгоритмы кластеризации

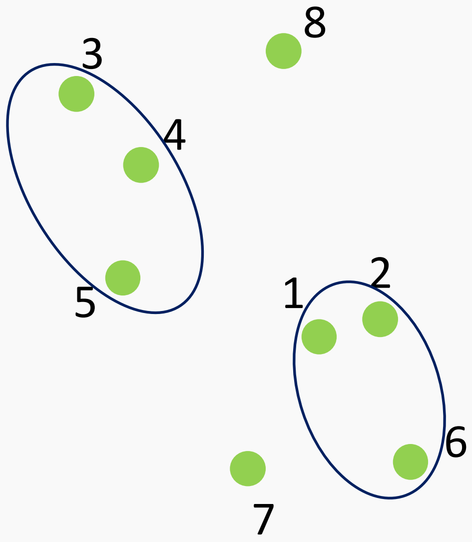
Дендограмма

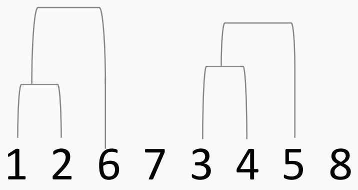




Алгоритмы кластеризации

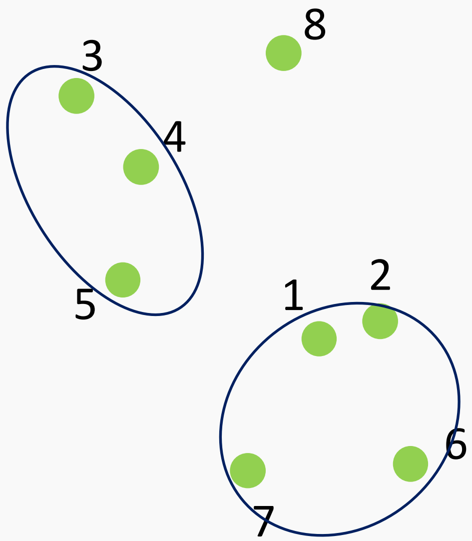
Дендограмма

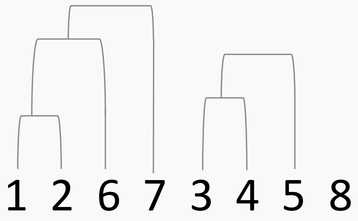




Алгоритмы кластеризации

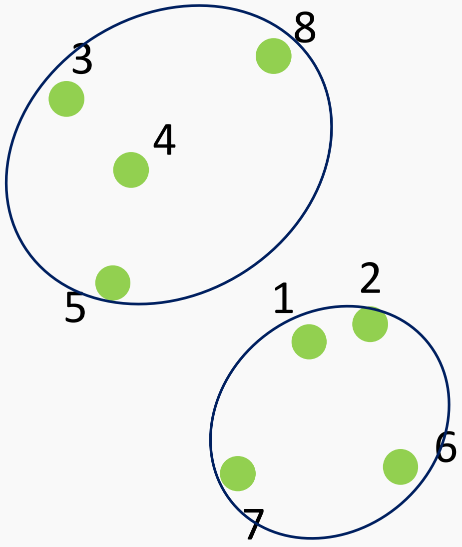
Дендограмма

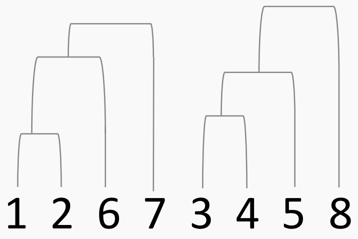




Алгоритмы кластеризации

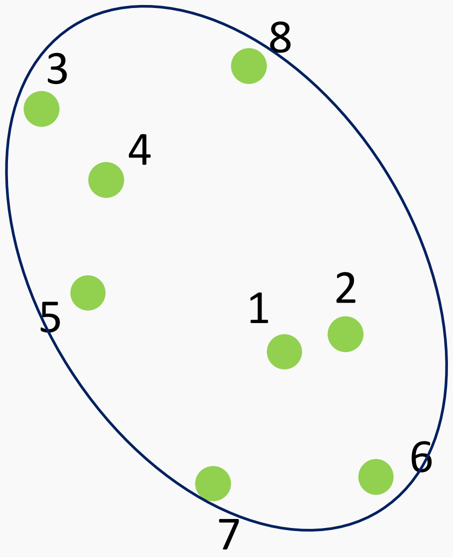
Дендограмма

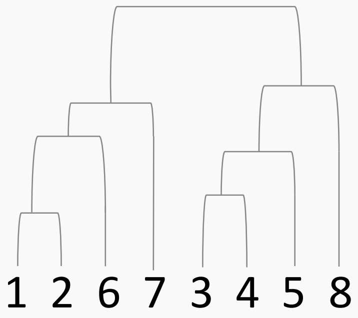




Алгоритмы кластеризации

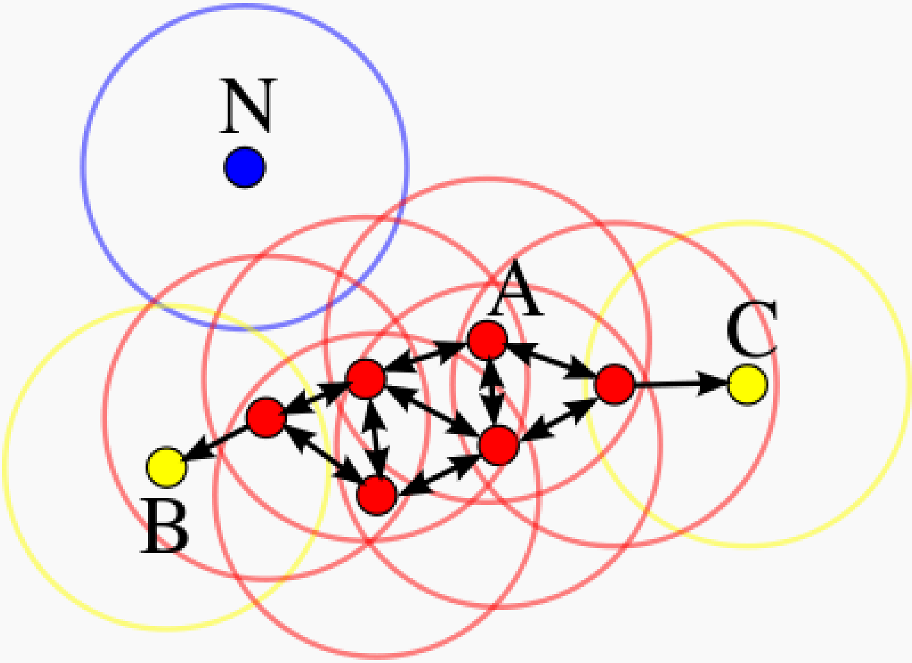
Дендограмма





Алгоритмы кластеризации

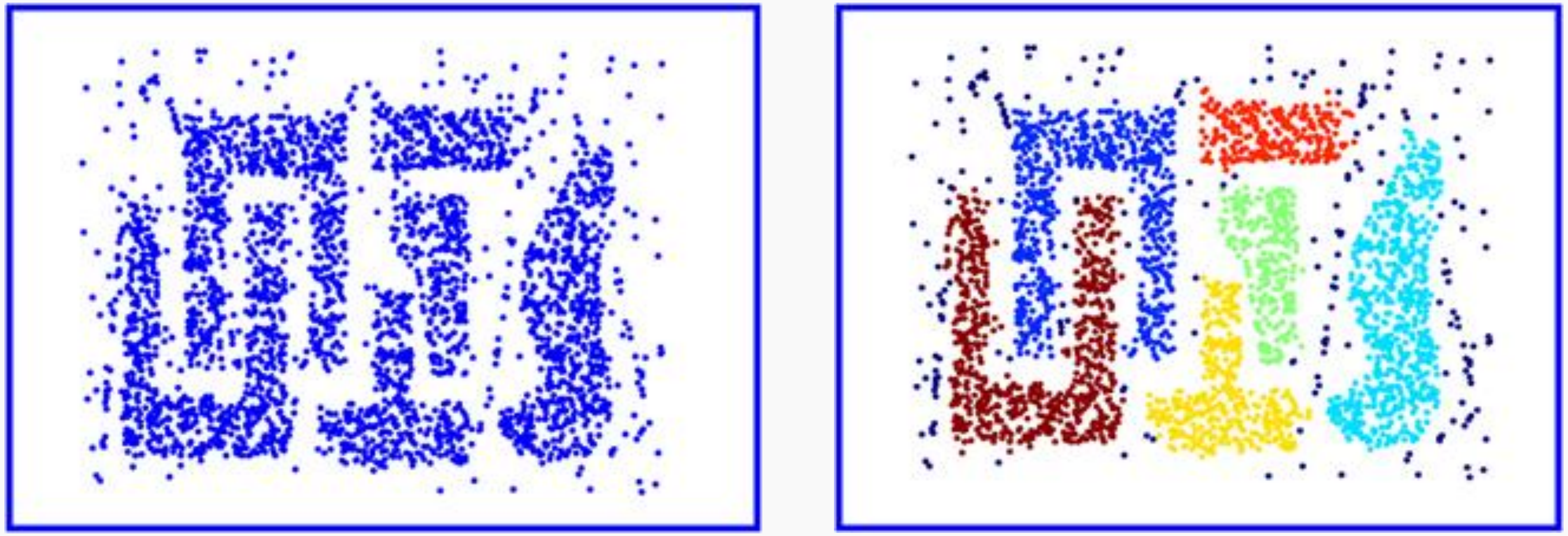
Алгоритм DBSCAN



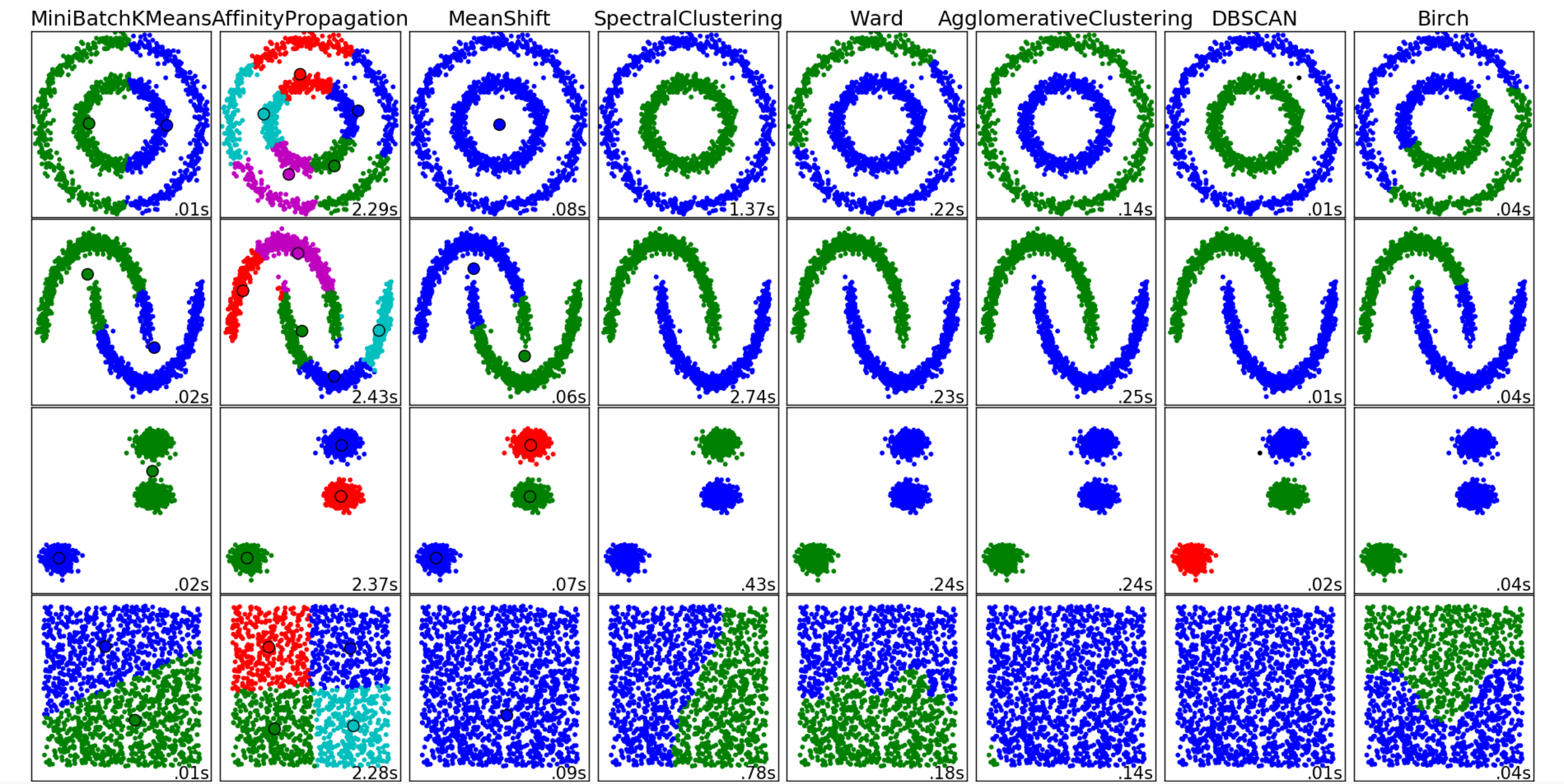
Шаг 1: Помечаем все точки как основные, пограничные или шумовые
Шаг 2: Отбрасываем точки шума
Шаг 3: Соединяем все основные точки, находящиеся на расстоянии Eps друг от друга
Шаг 4: Соединяем каждую группу объединённых точек в отдельный кластер

Алгоритмы кластеризации

Алгоритм DBSCAN



Алгоритмы кластеризации



Оценка качества кластеризации

Внутриклассовое расстояние:

$$F = \frac{\sum_{i<j}[y_i = y_j]\rho(x_i, x_j)}{\sum_{i<j}[y_i = y_j]} \rightarrow min$$

Межкластерное расстояние:

$$F = \frac{\sum_{i<j}[y_i \neq y_j]\rho(x_i, x_j)}{\sum_{i<j}[y_i \neq y_j]} \rightarrow min$$

Алгоритмы кластеризации

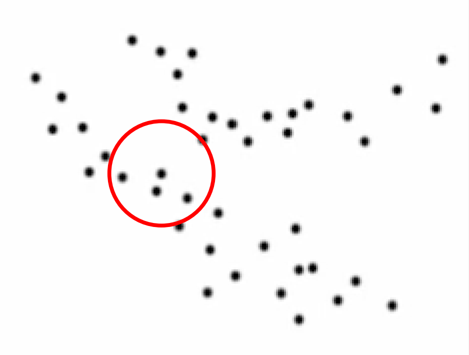
Оценка качества кластеризации

Коэффициент силуэта (Silhouette Coefficient)

D_{1i} - среднее расстояние от объекта i до всех остальных объектов внутри кластера, в котором находится объект i

D_{2i} - среднее расстояние от объекта i до всех остальных объектов внутри ближайшего кластера, в котором не находится объект i

$$S = \frac{D_{2i} - D_{1i}}{\max(D_{1i}, D_{2i})}$$



Алгоритмы кластеризации

Оценка качества кластеризации

Однородность (Homogeneity)

Кластеры состоят из объектов одного класса

labels_true, labels_pred

homogeneity_score([0, 0, 1, 1], [0, 0, 1, 2])	1.0
homogeneity_score([0, 0, 1, 1], [0, 1, 2, 3])	1.0
homogeneity_score([0, 0, 1, 1], [0, 1, 0, 1])	0.0
homogeneity_score([0, 0, 1, 1], [0, 0, 0, 0])	0.0

Полнота (Completeness)

Объекты из одного класса принадлежат одному кластеру

completeness_score([0, 0, 1, 1], [0, 0, 0, 0])	1.0
completeness_score([0, 1, 2, 3], [0, 0, 1, 1])	1.0
completeness_score([0, 0, 1, 1], [0, 1, 0, 1])	0.0
completeness_score([0, 0, 0, 0], [0, 1, 2, 3])	0.0

V-мера: $V = 2 * \frac{H*C}{H+C}$

Разметка используется для проверки результата кластеризации

МГТУ
им. Н.Э. Баумана
ТЕХНОПАРК
Mail.Ru Group

Контакты:
a.spasenov@corp.mail.ru
alex_spasenov (Skype)

Спасибо за внимание!