Karisimlar ve Idare Edilmeyen Kumeleme (Unsupervised Clustering)

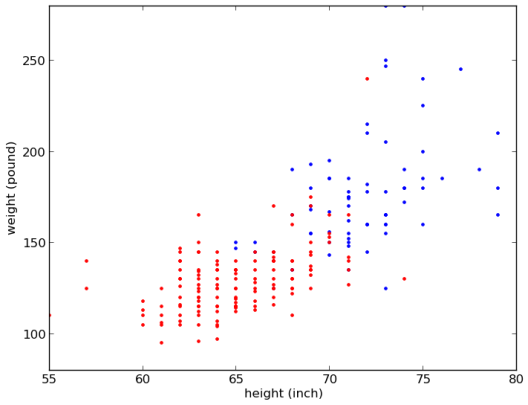
Gaussian (normal) dagilimi tek tepesi olan (unimodal) bir dagilimdir. Bu demektir ki eger birden fazla tepe noktasi olan bir veriyi modellemek istiyorsak, degisik yaklasimlar kullanmamiz gerekecektir.

Birden fazla Gaussian'i "karistirmak (mixing)" bu tur bir yaklasim olabilir. Karistirmak, karisim icindeki her Gaussian'dan gelen sonuclari toplamaktir, yani kelimenin tam anlamiyla her veri noktasini teker teker karisimdaki tum dagilimlara gecip sonuclari toplamaktir. Eger cok boyutlu normal dagilimlari topluyorsak, formul:

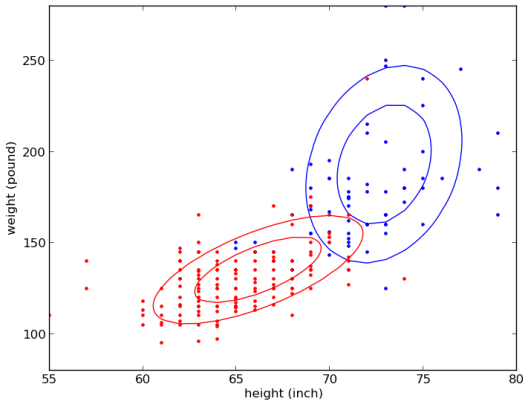
$$p(x) = \sum_z \pi_z N(x|\mu_z, \Sigma_z)$$

π_z karistirma oranlaridir (mixing proportions). Iki Gaussian oldugunu dusunelim, π_1, π_2 oranlari 0.2, 0.8 olabilir mesela (toplam her zaman 1 olmalidir), her nokta her Gaussian'a verildikten sonra tekabul eden agirlikla mesela sirayla $0.2, 0.8$ ile carpilip toplanir.

Ornek olarak alttaki veriye bakalim.



Bu grafik kadinlar ve erkeklerin boy (height) ve kilolarini (weight) iceren bir veri setinden geliyor, veri setinde erkekler ve kadinlara ait olan olcumler onceden isaretlenmis / etiketlenmis (labeled), biz de bu isaretleri kullanarak kadinlari kirmizi erkekleri mavi ile grafikledik. Ama bu isaretler / etiketler verilmis olsun ya da olmasin, kavramsal olarak dusunursek eger bu veriye bir dagilim uydurmak (fit) istersek bir karisim kullanilmasi gerekli, cunku iki tepe noktasiyle daha rahat temsil edilecegini dusundugumuz bir durum var ortada.



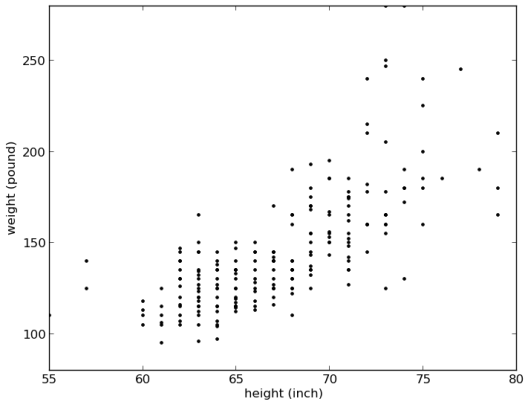
Bu karisim icindeki Gaussian'lari usttteki gibi cizebilirdik (gerci usttteki aslinda ileride yapacagimiz net bir hesaptan bir geliyor, ona birazdan geliyoruz, ama ciplak gozle de bu sekil uydurulabilirdi). Modeli kontrol edelim, elimizde bir karisim var, nihai olasilik degeri $p(x)$'i nasil kullaniriz? Belli bir noktanin olasiligini hesaplamak icin bu noktayi her iki Gaussian'a teker teker geceriz (ornekte iki tane), ve gelen olasilik sonuclarini karisim oranlari ile carparak toplariz.

Agirliklar sayesinde iki sey elde ediyoruz 1) karisim entegre edilince hala 1 degeri cikiyor zaten bir dagilimin uymasi gereken sartlardan biri bu 2) kesisim olan bolgelerde her iki Gaussian buyuk bir deger verebilir, o zaman agirliklar devreye girer, ve nihai olasilik, agirliklara gore carpilip toplanan bir sonuc olur. Bu bolgelerde bir Gaussian'in agirliginin digerinden fazla olmasinin da ozel bir anlami var, demek ki o bolgede agirligi fazla olan Gaussian daha fazla noktaya sahip (verisel olarak), ki o zaman o bolgedeki bir noktanin olasiligi sorulunca, agirligi fazla olan Gaussian daha yuksek bir olasilik degeri geri dondurmeli.

Kesisme olmayan bolgeler zaten pek onemli degil, o noktalarin olasilik degeri zaten agirlikla tek bir Gaussian'dan geliyor olacak, cunku diger Gaussian o bolge icin sifira yakin bir deger verir, ve bu sifira yakin deger toplamda zaten bir fark yaratmayacak.

Etiketler Bilin**mi**yorsa

Simdi veriyi modellemenin otesinde, biraz daha analitik, daha makine ogrenimi ile alakali ihtiyaclara gelelim. Eger etiketler bize onceden verilmemis olsaydi, hangi veri noktalarinin kadinlara, hangilerinin erkeklere ait oldugunu bilmeseydik o zaman ne yapardik? Bu veriyi grafiklerken etiketleri renkleyemezdik tabii ki, soyle bir resim cizebilirdik ancak,



Fakat yine de sekil olarak iki kumeyi gorebiliyoruz.

Acaba oyle bir makine ogrenimi algoritmasi olsa da, biz bir karisim oldugunu tahmin edip, sonra o karisimi veriye uydururken, etiket degerlerini de kendiliginden tahmin etse? Bu tam bir veri madenciligi denemesi olurdu.

Bu ise baslamadan once etiketler ile karisimlarin arasindaki baglantiyi gorelim. Her nokta icin bilinen / bilinmeyen etiket kavramindan, matematiksel olarak direk karisimlara gecis yapabilmemiz lazim.

Diyelim ki her nokta icin 0/1 degerini tasiyabilecek "gizli" bir z rasgele degiskeni var, o zaman $p(x)$'i su sekilde acabiliriz

$$p(x) = \sum_z p(x, z)$$

Bu mantikli degil mi? Ortak dagilim $p(x, z)$ icinden $p(x)$'i cekip cikarmak, $p(x, z)$ icin bir bilesen (marginal) hesabi yapmak demektir, o zaman ortak dagilimin icindeki tum z degerlerini toplamak gerekir. Devam edelim, Bayes Teorisi'ni kullanarak

$$= \sum_z p(x, z) = \sum_z p(z)p(x|z)$$

elde ederiz. Burada $p(z)$, yani z'nin 0/1 degerine "sahip olup olmadiginin olasiligi" bizi π_z'ye goturur, yani

$$\sum_z p(z)p(x|z) = \sum_z \pi_z N_z(x|\mu_z, \sigma_z)$$

Unutmayalim, z bir rasgele degisken, ve sahip oldugu olasiliga gore, her veri noktasi icin, 0 ya da 1 uretiyor. $p(z)$ dedigimiz zaman z tek basina, baska hicbir parametre ona gecilmiyor, o zaman zaten tanim itibariyle "ta en bastan belirli" bir olasiliktan baska bir seye sahip olamaz, bu da karisim orani π_z'den baskasi degildir.

Notasyon

Simdi notasyonu biraz daha berraklastiralim. Oncelikle, ozellikle Bayes modelleri iceren formulasyonlarda, $p(x)$, $p(z)$ gibi kullanimlar gorulur, fakat aslinda orada iki

tane farkli yogunluk fonksiyonu (density function) kastedilir, $p_x(x)$ ve $p_z(z)$. Surekli p kullanilan turden kullanimin biraz ustunkoru (sloppy) oldugu dogrudur, kimisi icin bu daha kisa yoldan formulasyondur, literaturu takip eden herkes bunun nereden geldigini bilir, sadece konuya ilk baslayanlar icin biraz kafa karistirici olabiliyor.

Ayrica $p(z)$ derken $p(z = k)$ demek istiyoruz, yani

$$p(x) = \sum_{k=1}^{K} p(z = k)p(x|z = k)$$

ki K karisimdaki Gaussian sayisidir. Aynen ustte oldugu gibi etiketin bilindigi, "verili" oldugu durumda kosullu olasilik $p(x|z = k)$, karisimdaki Gaussian'lardan bir tanesidir, ki o da ustte $N_z(x|\mu_z, \sigma_z)$ olarak gosterilmisti, simdi k kullanirsak $N(x|\mu_k, \sigma_k)$ olacaktir.

Iki Gaussian oldugu durumda z'nin 0/1 degerine sahip olup olmadigindan bahsettik, ya da K ikiden daha buyuk oldugu durumlarda, $z = k$ olup olmama durumu. Aslinda bir temsili yontem daha var, z rasgele degiskenini sadece bir hucresinde 1 ya da 0 tasiyan bir katlı terimli (multinomial) dagilim, yani bir vektor olarak gostermek. Yani $z = [0\ 0\ 1\ ..\ 0]^T$ seklinde. Bu temsili yonteme K-icinde-1 (1-of-K) temsili yontemi deniyor. O zaman

$$p(z) = \prod_{k=1}^{K} \pi_k^{z_k} \quad (1)$$

ve

$$p(x|z) = \prod_{k=1}^{K} N(x|\mu_k, \Sigma_k)^{z_k} \quad (2)$$

Peki verinin log olabilirligi (log likelihood) nedir?

Bilindigi gibi olabilirlik hesap veri noktalarinin teker teker yogunluk fonksiyonuna gecilmesi, ve sonuclarin birbiri ile carpilmasidir, log olabilirlik ise onun log alinmis halidir (cunku log alininca carpimlar toplam haline donusur, boylece gittikce buyuyen bir sayi ile islem yapilabilir, oteki turlu olasilik degeri oldugu icin 1'den kucuk sayilarin surekli birbiri ile carpimi, nihai carpimi asiri kucultur, bu da bilgisayarin numerik hesap sinirlarini zorlayabilir. X'i tum x'leri iceren bir matrix olarak kabul edelim

$$\ln p(X|\pi, \mu, \Sigma) = \sum_{n=1}^{N} \ln \left\{ \sum_{k=1}^{K} \pi_k p(x_n|\mu_k, \Sigma_k) \right\}$$

Genellikle olabilirlik fonksiyonu maksimize edilerek icindeki parametrelerin bu maksimum noktada tasidigi degerler bulunmaya ugrasilir. Fakat bizim esas ilgilendigimiz "bilinmeyen" etiketler, o yuzden maksimizasyon yapmadan once bu etiketleri de bir

sekilde olabilirligin icine dahil etmemiz lazim. (1) ve (2)'yi kullanirsak,

$$p(X, Z|\mu, \Sigma, \pi) = \prod_{n=1}^{N} \prod_{k=1}^{K} \pi_k^{z_{nk}} N(x_n|\mu_k, \Sigma_k)$$

Bunun log'unu alirsak

$$\ln p(X, Z|\mu, \Sigma, \pi) = \ln \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} z_{nk} \{\ln \pi_k + \ln N(x_n|\mu_k, \Sigma_k)\}$$

EM (Expectation Maximization) metotu, bu olurluk fonksiyonunu baz alarak, μ, Σ, π bilindigi durumda etiketleri, etiketler bilindigi durumda μ, Σ, π degerlerini tahmin eder, bu iki bilinmeyen grup arasinda ozyineli (iteratif) olarak gidip gelir. Tabii konunun cok fazla detayi var, oncelikle EM'in ustteki durumda yakinsak (convergence) bir davranis sergiledigi bilinir, yani bir optimum vardir, va belli uc nokta sartlari haricinde bu degere yaklasilir.

```
import math, random, copy, sys
import numpy as np

def expectation_maximization(t, nbclusters=2, nbiter=3, \
                                 normalize=False,epsilon=0.001, \
                                 monotony=False, datasetinit=True):
    def pnorm(x, m, s):
        """
        Compute the multivariate normal distribution with values
        vector x, mean vector m, sigma (variances/covariances) matrix
        s
        """
        xmt = np.matrix(x-m).transpose()
        for i in xrange(len(s)):
            if s[i,i] <= sys.float_info[3]: # min float
                s[i,i] = sys.float_info[3]
        sinv = np.linalg.inv(s)
        xm = np.matrix(x-m)
        return (2.0*math.pi)**(-len(x)/2.0)*\
            (1.0/math.sqrt(np.linalg.det(s)))\
            *math.exp(-0.5*(xm*sinv*xmt))

    def draw_params():
            if datasetinit:
                tmpmu = np.array([1.0*t[random.uniform(0,nbobs),:]],
                                 np.float64)
            else:
                tmpmu = np.array([random.uniform(min_max[f][0],
                                                 min_max[f][1])\
                            for f in xrange(nbfeatures)], np.float64)
            return {'mu': tmpmu,\
                    'sigma': np.matrix(np.diag(\
                    [(min_max[f][1]-min_max[f][0])/2.0\
                    for f in xrange(nbfeatures)])),\
                    'proba': 1.0/nbclusters}

    nbobs = t.shape[0]
```

```
    nbfeatures = t.shape[1]
    min_max = []
    # find xranges for each features
    for f in xrange(nbfeatures):
        min_max.append((t[:,f].min(), t[:,f].max()))

    ### Normalization
    if normalize:
        for f in xrange(nbfeatures):
            t[:,f] -= min_max[f][0]
            t[:,f] /= (min_max[f][1]-min_max[f][0])
    min_max = []
    for f in xrange(nbfeatures):
        min_max.append((t[:,f].min(), t[:,f].max()))
    ### /Normalization

    result = {}
    quality = 0.0 # sum of the means of the distances to centroids
    random.seed()
    Pclust = np.ndarray([nbobs,nbclusters], np.float64) # P(clust|obs)
    Px = np.ndarray([nbobs,nbclusters], np.float64) # P(obs|clust)
    # iterate nbiter times searching for the best "quality" clustering
    for iteration in xrange(nbiter):
        # Step 1: draw nbclusters sets of parameters #
        params = [draw_params() for c in xrange(nbclusters)]
        old_log_estimate = sys.maxint          # init, not true/real
        log_estimate = sys.maxint/2 + epsilon # init, not true/real
        estimation_round = 0
        # Iterate until convergence (EM is monotone) <=>
        #< epsilon variation
        while (abs(log_estimate - old_log_estimate) > epsilon\
                and (not monotony or log_estimate < old_log_estimate)):
            restart = False
            old_log_estimate = log_estimate
            # Step 2: compute P(Cluster|obs) for each observations #
            for o in xrange(nbobs):
                for c in xrange(nbclusters):
                    # Px[o,c] = P(x|c)
                    Px[o,c] = pnorm(t[o,:],\
                                params[c]['mu'], params[c]['sigma'])
            #for o in xrange(nbobs):
            #    Px[o,:] /= math.fsum(Px[o,:])
            for o in xrange(nbobs):
                for c in xrange(nbclusters):
                    # Pclust[o,c] = P(c|x)
                    Pclust[o,c] = Px[o,c]*params[c]['proba']
            #    assert math.fsum(Px[o,:]) >= 0.99 and\
            #           math.fsum(Px[o,:]) <= 1.01
            for o in xrange(nbobs):
                tmpSum = 0.0
                for c in xrange(nbclusters):
                    tmpSum += params[c]['proba']*Px[o,c]
                Pclust[o,:] /= tmpSum
                #assert math.fsum(Pclust[:,c]) >= 0.99 and\
                #       math.fsum(Pclust[:,c]) <= 1.01
```

```
        # Step 3: update the parameters (sets {mu, sigma, proba}) #
        print "iter:", iteration, "␣estimation#:", estimation_round,\
                "␣params:", params
        for c in xrange(nbclusters):
            tmpSum = math.fsum(Pclust[:,c])
            params[c]['proba'] = tmpSum/nbobs
            # restart if all converges to one cluster
            if params[c]['proba'] <= 1.0/nbobs:
                restart = True
                print "Restarting,␣p:",params[c]['proba']
                break
            m = np.zeros(nbfeatures, np.float64)
            for o in xrange(nbobs):
                m += t[o,:]*Pclust[o,c]
            params[c]['mu'] = m/tmpSum
            s = np.matrix(np.diag(np.zeros(nbfeatures, np.float64)))
            for o in xrange(nbobs):
                s += Pclust[o,c]*\
                (np.matrix(t[o,:]-params[c]['mu']).transpose()*\
                 np.matrix(t[o,:]-params[c]['mu']))
            params[c]['sigma'] = s/tmpSum
            print "————————————————"
            print params[c]['sigma']

        ### Test bound conditions and restart consequently if needed
        if not restart:
            restart = True
            for c in xrange(1,nbclusters):
                if not np.allclose(params[c]['mu'],
                                   params[c-1]['mu'])\
                or not np.allclose(params[c]['sigma'],
                                   params[c-1]['sigma']):
                    restart = False
                    break
        if restart:     # restart if all converges to only
            old_log_estimate = sys.maxint     # init, not true/real
            log_estimate = sys.maxint/2 + epsilon # init, not true/real
            params = [draw_params() for c in xrange(nbclusters)]
            continue
        ### /Test bound conditions and restart

        # Step 4: compute the log estimate #
        log_estimate = math.fsum([math.log(math.fsum(\
                [Px[o,c]*params[c]['proba'] \
                     for c in xrange(nbclusters)]))\
                                  for o in xrange(nbobs)])
        print "(EM)␣old␣and␣new␣log␣estimate:␣",\
                old_log_estimate, log_estimate
        estimation_round += 1

    # Pick/save the best clustering as the final result
    quality = -log_estimate
    if not quality in result or quality > result['quality']:
        result['quality'] = quality
        result['params'] = copy.deepcopy(params)
```

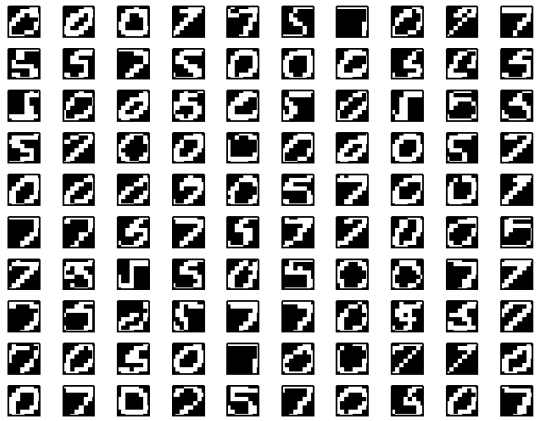
```
            result['clusters'] = [[o for o in xrange(nbobs)\
                    if Px[o,c] == max(Px[o,:])]\
                    for c in xrange(nbclusters)]
    return result
```

```
import gauss
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

data = np.loadtxt('biometric_data_simple.txt',delimiter=',')
data = data[:,1:3]
res = gauss.expectation_maximization(data)
print res
```

Cok Degiskenli Bernoulli Karisimi (Mixture of Multivariate Bernoulli)

Bir karisim Gaussian'lardan olustugu gibi, degisik dagilimlardan da mutesekkil olabilir. Mesela her biri 8x8 boyutlarda ve 64 ogeli duz bir vektor olarak temsil edilen, icinde ikisel (binary) veri tasiyan, yani siyah / beyaz olarak temsil edilen karakterleri gruplama problemini ele alalim.



Bu karakterlerin hepsini `bindigit.py` ile sirayla gorebilirsiniz. Mesela ust soldan saga dogru giderken 3 tane sifira benzer karakter goruyoruz, sonra yediye benzer iki goruntu goruyoruz, vs. Burada temsil etmemiz gereken, demek ki, bu 64 hucreli sadece 1 ve 0 degeri tasiyan degerleri temsil etmek. Boy ve agirlikta iki hucreli vektorde sadece reel sayilar vardi. Simdi 64 hucreli vektorde ikisel degerler var.

Boyle bir veriyi hangi dagilim en iyi temsil eder? Sadece tek 1 ve 0 olsaydi, o zaman Bernoulli dagilimi kullanirdik,

$p(x) = \alpha^x(1-\alpha)^{1-x}$

α bu dagilimi tanimlayan 0 ve 1 arasinda bir degerdir.

Bernoulli'leri cok degiskenli olarak kullanamaz miyiz? Kullaniriz.

$$p(x) = \prod_{d=1}^{D} \alpha_d^{x_d}(1-\alpha_d)^{1-x_d}$$

Bu durumda x cok boyutlu, D boyutlu bir vektor, yani [0 1 1 0 ... 1] seklinde olacak.

Eger cok degiskenli Bernoulli'lerin karisimini elde etmek istiyorsak, $p(x|z)$ Gaussian yerine cok degiskenli Bernoulli olacak, yani

$$p(x|z) = \prod_{d=1}^{D} \alpha_{zd}^{x_d}(1 - \alpha_{zd})^{1-x_d}$$

α_{zd}, karisimdaki z'inci dagilimin d'inci hucresindeki olasilik degerini verecektir. Tum karisimin dagilimi daha once oldugu gibi

$$p(x) = \sum_{z} p(z)p(x|z)$$

Suna dikkat etmek lazim – karisim deyince mesela [0 1 1 ... 1] vektoru ile [1 0 1 ... 1] vektorunu "toplayip" yeni bir vektor elde etmiyoruz. Bu vektorleri tum karisimin yogunlugu $p(x)$'e gecince bize bir olasilik degeri veriliyor. Bunun hesaplanisi, perde arkasinda teker teker karisimdaki tum bilesenlerin yogunluguna teker teker sormak, ve geriye bir cevap vermeden once agirligi kullanarak dengelemek.

Ya da uretimsel (generative) olarak olaya bakarsak, $p(x)$'in temsil ettigi yogunluga "zar attirarak" ile [1 1 1 ... 0], [1 0 0 ... 0] gibi vektorler urettiriyor olabilirdik. Tabii ki bu uretim yogunlugun kontrolunde olarak, daha olasi turden vektorlerin, daha fazla ortaya cikmasi anlamina gelecekti.

Uretimsel derken, her veri noktasi icin bu uretimsel algoritmanin tamami soyle:

```
1 for i = 1 to N do
2     Olasilik vektoru π ye gore zar at
3     Sonuca  gore m ← M modelden bir tanesini sec
4     O modele N(x_i|μ_m,Σ_m) (ya da onun Bernoulli karsiligi) x_i i
5     urettir
6 end
```

Altta yine EM kullanarak gruplama yapan yani etiketleri otomatik olarak bulan kodu sunuyoruz. En sonda `np.argmax(lR.T,axis=0)` ifadesini goreceksiniz. `lR`, `NxD` boyutlu bir matristir, her veri noktasinin D kumenin her birine olan aidiyatini olasilik degeri olarak tasir, `argmax` ifadesi satirsal bazda bu aidiyatlarin en buyugunun "indisini" dondurur, eger 3 tane kume var demissek, o zaman

```
[1 1 1 0 2 0 2 ... ]
```

gibi bir sonuc gorulecektir. Demek ki 1. nokta 1. kumeye, 4. nokta 0. kumeye aittir. Hakikaten de basta paylastigimiz resimlere bakarsaniz, ilk 3 karakterin birbirine benzedigi farkedilecektir.

Sonuc olarak verdigimiz bu algoritmalar idare edilmeyen (unsupervised) algoritmalar olarak bilinir, cunku algoritma "kendi basina" giderek noktalarin hangi kumeye ait oldugunu hesaplamaktadir. Idare edilen (supervised) yontemlerde oldugu gibi bir "egitim" ve "test" veri seti yoktur.

```
import numpy as np
```

```
def loginnerprodexp(t,a):
    eps=1e-15
    t[t>0.] = 1
    tmp = np.dot(t,np.exp(a)) + eps
    b=np.log(tmp)
    return b

def logsumexp(a):
    return np.log(np.sum(np.exp(a), axis=0))

def EMmixtureBernoulli(Y,K,iter,tol):
    N,D=Y.shape
    OMY=1+(-1*Y) #  "One minus Y", (1-Y)
    tmp=np.random.rand(N,K)
    tmp2=np.sum(tmp,axis=1).reshape((N,1))
    tmp3=np.tile(tmp2,(1,K))
    lR=np.log(np.divide(tmp, tmp3))
    L = []
    for i in range(iter):
        # lPi log Mixture params Kx1
        lPi=np.tile(-1 * np.log(N),(K,1))+logsumexp(lR).T.reshape((K,1))
        const=np.tile(logsumexp(lR).T.reshape((K,1)),(1,D))
        # lP log Bernoulli params KxD
        lP=loginnerprodexp(Y.T,lR).T - const
        # lOMP log(1-P), also KxD
        lOMP=loginnerprodexp(OMY.T,lR).T-const

        # *** E-step
        lR=np.tile(lPi.T,(N,1))+np.dot(Y,lP.T) + np.dot(OMY,lOMP.T) # + const
        Z=logsumexp(lR.T)

        lR=lR-np.tile(Z.T.reshape((N,1)),(1,K))
        L.append(np.sum(Z))
        if (i>1):
            if np.abs(L[i]-L[i-1]) < tol: break

    iters = i
    return lR,lPi,lP,L,iters
```

```
import numpy as np
from EMmixtureBernoulli import *
import matplotlib.image as mpimg
import matplotlib.pyplot as plt

K=3
iter=20
Y = np.loadtxt('binarydigits.txt')

attempts=20
Lbest = -np.inf
eps=1e-15
for attempt in range(attempts):
    lRtmp,lPitmp,lPtmp,L,iters = EMmixtureBernoulli(Y,K,iter,eps)
    if L[iters]>Lbest:
        lR=lRtmp
```

```
        lPi=lPitmp
        lP=lPtmp
        Lbest=L[iters]
        itersbest=iters

print lR.shape
print lPi.shape
print lP.shape
print len(L)

# show class labels
print np.argmax(lR.T, axis=0)
```

[1] Aaron A. D'Souza, Using EM To Estimate A Probablity Density With A Mixture Of Gaussians, http://www-clmc.usc.edu/~adsouza/notes/mix_gauss.pdf

[2] Bernoulli mixture models for binary images, Alfons Juan, Enrique Vidal

[3] Jebara, T., Machine Learning Lecture Notes

[4] Iain Murray's code on mixture of multivariate bernoullis