ТЕХНОСФЕРА

Лекция 4
Визуализация результатов кластеризации

Николай Анохин

21 марта 2015 г.

Краткое содержание предыдущих лекций

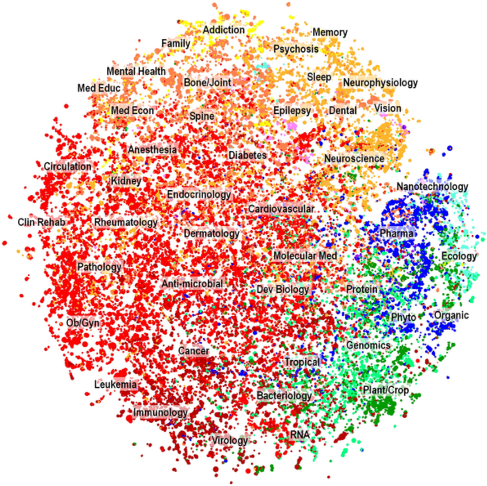
Дано. N обучающих D-мерных объектов $\mathbf{x}_i \in \mathcal{X}$, образующих тренировочный набор данных (training data set) X.

Найти. Модель $h^*(\mathbf{x})$ из семейства параметрических функций $H = \{h(\mathbf{x}, \theta) : \mathcal{X} \times \Theta \to \mathbb{N}\}$, ставящую в соответствие произвольному $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ один из K кластеров так, чтобы объекты внутри одного кластера были похожи, а объекты из разных кластеров различались.

Краткое содержание предыдущих лекций

Рассмотрели классические алгоритмы кластеризации

1. Смесь гауссовских распределений и k-means
2. Hierarchical Clustering
3. DBSCAN



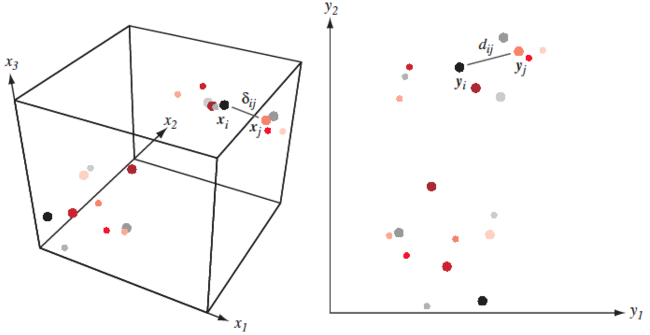
Multidimensional Scaling

Идея метода

Перейти в пространство меньшей размерности так, чтобы расстояния между объектами в новом пространстве были подобны расстояниям в исходном пространстве.

Обозначения

- $\mathbf{x}_i \in \mathcal{X} \subset R^D$ – объекты в исходном многомерном пространстве
- δ_{ij} – расстояние между $\mathbf{x}_i$ и $\mathbf{x}_j$
- $\mathbf{y}_i \in \mathcal{Y} \subset R^E$ – объекты в целевом пространстве ($E = 2$ или $E = 3$)
- d_{ij} – расстояние между $\mathbf{y}_i$ и $\mathbf{y}_j$



Критерии

Выбираем кофигурацию $\mathbf{y}_i$, соответствующую минимуму критерия

$$J_{ee} = \frac{\sum_{i<j}(d_{ij} - \delta_{ij})^2}{\sum_{i<j}\delta_{ij}^2}$$

$$J_{ff} = \sum_{i<j}\frac{(d_{ij} - \delta_{ij})^2}{\delta_{ij}^2}$$

$$J_{ef} = \frac{1}{\sum_{i<j}\delta_{ij}}\sum_{i<j}\frac{(d_{ij} - \delta_{ij})^2}{\delta_{ij}}$$

Градиентный спуск

Требуется найти минимум функции $f(\mathbf{a})$, при этом

1. мы умеем вычислять градиент функции $\nabla f(\mathbf{a})$
2. задана начальная точка $\mathbf{a}_0$
3. выбрана функция learning rate $\eta(k)$

```
function gd(grad, a0, epsilon):
    initialise eta(k)
    k = 0
    a = a0
    do:
        k = k + 1
        a = a - eta(k) grad(a)
    until |eta(k) grad(a)| < epsilon
    return a
```

(демо)

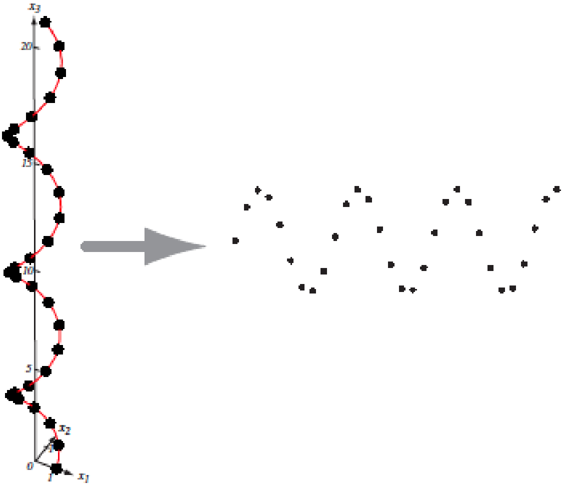
Градиенты критериев

$$\nabla_{\mathbf{y}_k} J_{ee} = \frac{2}{\sum_{i<j} \delta_{ij}^2} \sum_{j \neq k} (d_{kj} - \delta_{kj}) \frac{\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_j}{d_{kj}}$$

$$\nabla_{\mathbf{y}_k} J_{ff} = 2 \sum_{j \neq k} \frac{d_{kj} - \delta_{kj}}{\delta_{kj}^2} \frac{\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_j}{d_{kj}}$$

$$\nabla_{\mathbf{y}_k} J_{ef} = \frac{2}{\sum_{i<j} \delta_{ij}} \sum_{j \neq k} \frac{d_{kj} - \delta_{kj}}{\delta_{kj}} \frac{\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_j}{d_{kj}}$$

Результаты применения



t-SNE

Stochastic Neighbor Embedding

Идея метода

Та же, что в MDS, но определяется необычная (вероятностная) схожесть между объектами в исходном и целевом пространствах, а также критерий оптимизации.


Схожесть между объектами $\mathbf{x}_i$ и $\mathbf{x}_j \sim$ вероятность того, что $\mathbf{x}_i$ "выберет" $\mathbf{x}_j$ из остальных соседей, будучи центром некоторого нормального распределения.

Схожесть между объектами

В исходном пространстве

$$p(j|i) = \frac{\exp(-\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|^2 / 2\sigma_i^2)}{\sum_{k \neq i} \exp(-\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i\|^2 / 2\sigma_i^2)}$$

В целевом пространстве

$$q(j|i) = \frac{\exp(-\|\mathbf{y}_j - \mathbf{y}_i\|^2)}{\sum_{k \neq i} \exp(-\|\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_i\|^2)}$$

Критерий оптимизации

Дивергенция Кульбака-Лейблера

Насколько распределение P отличается от распределения Q?

$$KL(P\|Q) = \sum_z P(z) \log \frac{P(z)}{Q(z)}$$

Критерий

$$J_{SNE} = \sum_i KL(P_i\|Q_i) = \sum_i \sum_j p(j|i) \log \frac{p(j|i)}{q(j|i)} \to \min_{\mathbf{y}_1,\dots,\mathbf{y}_n}$$

Градиент

$$\nabla_{\mathbf{y}_i} J_{SNE} = 2 \sum_j \left(p(j|i) - q(j|i) + p(i|j) - q(i|j)\right)(\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j)$$

Параметры алгоритма

Идея

В областях высокой плотности выбрать σ_i маленьким, а в областях низкой плотности – большим.

$$Perp(P_i) = 2^{H(P_i)}, \quad H(P_i) = -\sum_j p(j|i) \log p(j|i)$$

На практике выбираем фиксированное perplexity в интервале (5, 50).

t-distributed SNE

Недостатки SNE

- Трудно оптимизировать критерий
- "Crowding problem"

Отличия t-SNE от SNE

- Использует симметризованный критерий с более простым градиентом
- В целевом пространстве схожесть основана на t-распределении, а не на распределении Гаусса

Критерий t-SNE

Схожесть между объектами в исходном пространстве

$$p(i,j) = \frac{p(i|j) + p(j|i)}{2n}$$

Схожесть между объектами в целевом пространстве

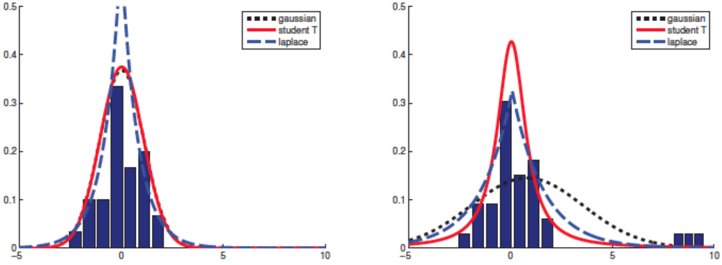
$$q(i,j) = \frac{(1 + \|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|^2)^{-1}}{\sum_{k \neq l}(1 + \|\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_l\|^2)^{-1}}$$

Критерий

$$J_{t-SNE} = KL(P\|Q) = \sum_i \sum_j p(i,j) \log \frac{p(i,j)}{q(i,j)}$$

t-распределение

$$\tau(\mu, \sigma^2, \nu) \propto \left[1 + \frac{1}{\nu}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right]^{-\frac{\nu+1}{2}}$$

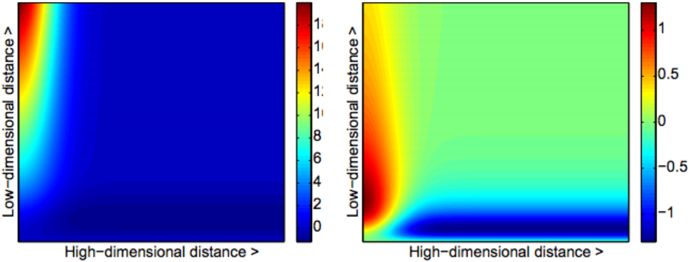


(a) (b)

Уильям Госсет 1908 (Student)

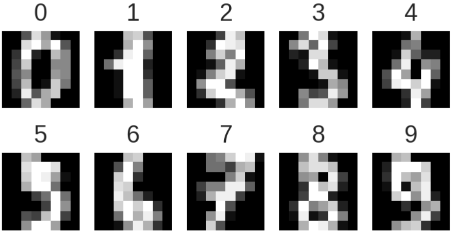
Свойства критерия

$$\nabla_{\mathbf{y}_i} J_{t-SNE} = 4 \sum_j (p(i,j) - q(i,j))(1 + \|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|^2)^{-1}(\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j)$$



Digits Dataset

около 1800 картинок 8x8 с рукописными цифрами



t-SNE

MNIST Dataset

70000 картинок 20x20 с рукописными цифрами

t-SNE

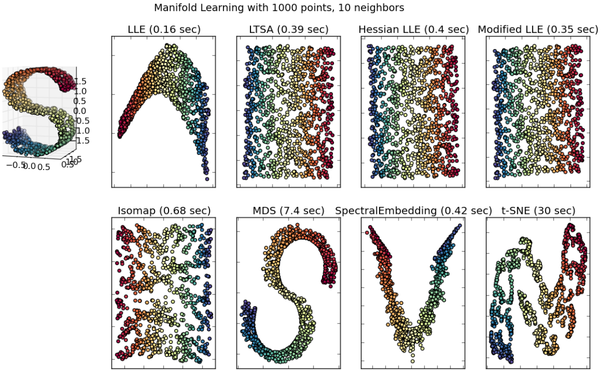
Еще примеры

CalTech

S&P 500

Words

Заключение


Manifold Learning with 1000 points, 10 neighbors
LLE (0.16 sec)
LTSA (0.39 sec)
Hessian LLE (0.4 sec)
Modified LLE (0.35 sec)
Isomap (0.68 sec)
MDS (7.4 sec)
SpectralEmbedding (0.42 sec)
t-SNE (30 sec)

Вопросы