



ТЕХНОСФЕРА

Лекция 2 K-means и EM-алгоритм

Николай Анохин

27 сентября 2015 г.

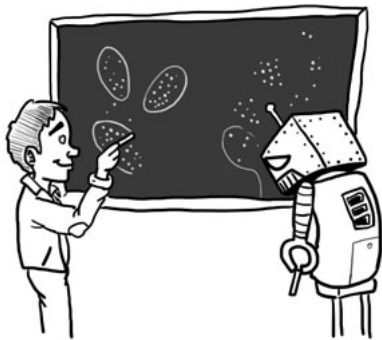
План занятия

Задача кластеризации

Смесь нормальных распределений и EM

K-means и его модификации

Задача кластеризации



Обучение без учителя

В задачах **без учителя** значение целевой функции для объектов из обучающей выборки неизвестно. Решение таких задач подразумевает исследование “скрытой структуры” данных.

Задача **кластеризации** – задача без учителя, подразумевающая разбиение множества объектов на непересекающиеся подмножества (кластеры).

Мотивация

- ▶ Кластеризация позволяет больше узнать о данных (knowledge discovery!)

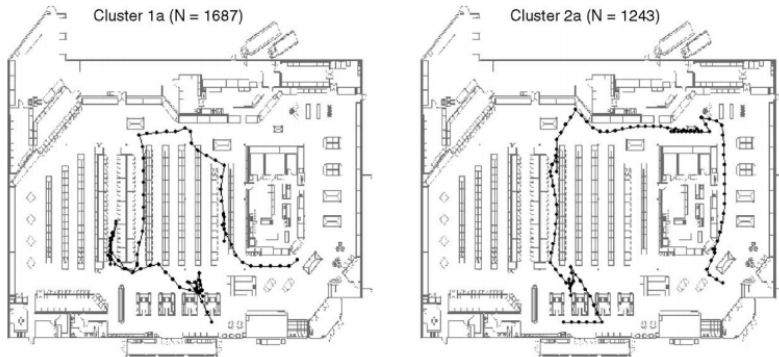


Рис.: Типичные траектории покупателей супермаркета¹

¹An exploratory look at supermarket shopping paths // J.S. Larson et. al.

Мотивация

- ▶ Работать с кластерами удобнее, чем с отдельными объектами

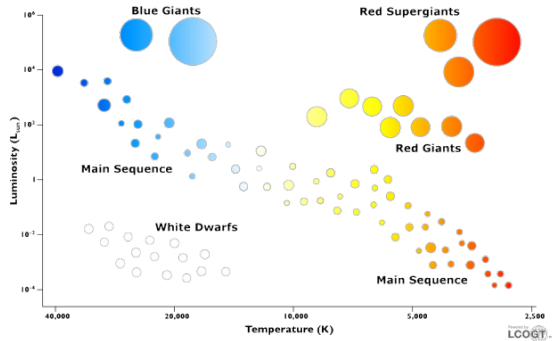


Рис.: Диаграмма Герцшпрунга — Рассела¹

¹<https://lcogt.net/spacebook/h-r-diagram/>

Мотивация

- ▶ Кластеризация позволяет конструировать новые признаки

d1: Банк финансирует строительство футбольного стадиона

d2: Автомобили подорожали из-за финансового кризиса

	банк	финансы	строительство	футбол	стадион	автомобиль	подорожание	кризис	...
d1	1	1	1	1	1	0	0	0	...
d2	0	1	0	0	0	1	1	1	...
					...				

clustering

	экономика	спорт	производство	...
d1	2	2	1	...
d2	3	0	1	...
		...		

Задача кластеризации

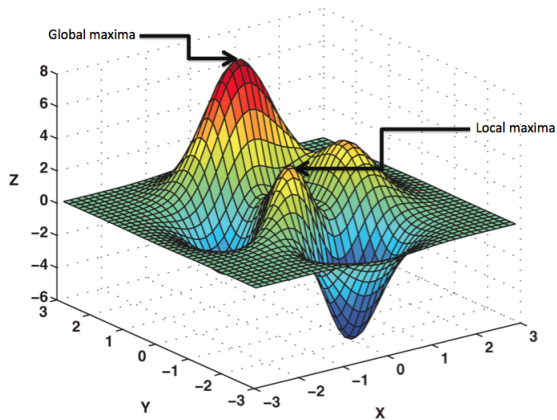
Дано. Признаковые описания N объектов $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_m) \in \mathcal{X}$, образующие тренировочный набор данных X

Найти. Модель из семейства параметрических функций

$$H = \{h(\mathbf{x}, \theta) : \mathcal{X} \times \Theta \rightarrow \mathcal{Y} \mid \mathcal{Y} = \{1, \dots, K\}\},$$

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

Смесь нормальных распределений и EM



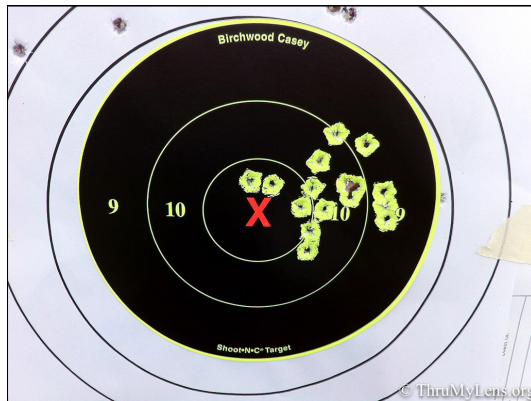
Начнем с простого (с моделируем один кластер)

Данные

Координаты точек попаданий по мишени из гауссовской пушки

Задача

Определить, куда смещен прицел



Гаусс, Карл Фридрих (1777-1855)



- ▶ Не открыл распределение Гаусса
- ▶ Открыл все остальное

Многомерное нормальное распределение

$$\mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu, \Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \frac{1}{|\Sigma|^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mu)^T \Sigma^{-1}(\mathbf{x} - \mu) \right\}$$

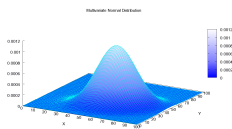
Параметры

D -мерный вектор средних

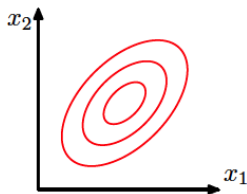
$D \times D$ -мерная матрица ковариации

$$\mu = \int \mathbf{x} p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

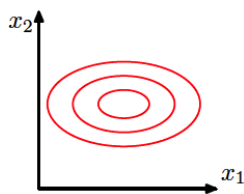
$$\Sigma = E[(\mathbf{x} - \mu)(\mathbf{x} - \mu)^T]$$



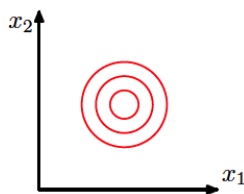
(a) $D = 2$



(b)



(c) $\Sigma = \text{diag}(\sigma_i)$



(d) $\Sigma = \sigma I$

Формализуем задачу

Имеется набор данных

$$X = \{\mathbf{x}_n \in R^2\}$$

Предположение

$$p(\mathbf{x}_n) \sim \mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu, \mathbf{\Sigma}), \quad \mu \in R^2, \quad \mathbf{\Sigma} \in R^{2 \times 2}$$

Требуется найти вектор средних μ и матрицу ковариации $\mathbf{\Sigma}$

Maximum likelihood (!)

Принцип максимального правдоподобия

Пусть дано семейство параметрических моделей $h(\mathbf{x}, \theta)$. Выбираем вектор параметров θ , максимизирующий функцию правдоподобия (likelihood) $p(\mathcal{D}|\theta)$, соответствующую рассматриваемому семейству моделей.

Правдоподобие

$$L(X|\mu, \Sigma) = \prod_{n=1}^N \mathcal{N}(\mathbf{x}_n|\mu, \Sigma) \rightarrow \max_{\mu, \Sigma}$$

Решение

$$\mu_{ML} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbf{x}_n, \quad \Sigma_{ML} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (\mathbf{x}_n - \mu_{ML})(\mathbf{x}_n - \mu_{ML})^T$$

Old Faithful data set

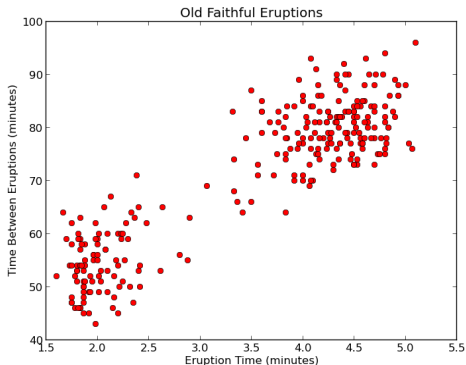
D = date of recordings in month (in August)

X = duration of the current eruption in minutes

Y = waiting time until the next eruption in minutes



(a) Yellowstone Park



(b)

Смесь нормальных распределений

“Скрытая” K -мерная переменная \mathbf{z} – принадлежность объекта к одному из кластеров

$$p(z_k = 1) = \pi_k, \quad z_k \in \{0, 1\}, \quad \sum_k z_k = 1 \quad \rightarrow \quad p(\mathbf{z}) = \prod_k \pi_k^{z_k}$$

Распределение \mathbf{x} для каждого из K кластеров

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{z}_k) = \mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) \quad \rightarrow \quad p(\mathbf{x}|\mathbf{z}) = \prod_k \mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)^{z_k}$$

Смесь нормальных распределений

$$p(\mathbf{x}) = \sum_k \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)$$

Апостериорная вероятность принадлежности к k кластеру (априорная равна π_k)

$$\begin{aligned}\gamma(z_k) = p(z_k = 1|\mathbf{x}) &= \frac{p(z_k = 1)p(\mathbf{x}|z_k = 1)}{\sum_{j=1}^K p(z_j = 1)p(\mathbf{x}|z_j = 1)} = \\ &= \frac{\pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu_k, \mathbf{\Sigma}_k)}{\sum_{j=1}^K \pi_j \mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu_j, \mathbf{\Sigma}_j)}\end{aligned}$$

Maximum Likelihood

Функция правдоподобия

$$\log(\mathbf{X}|\pi, \mu, \Sigma) = \sum_{n=1}^N \log \sum_k \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}_n|\mu_k, \Sigma_k) \rightarrow \max_{\pi, \mu, \Sigma}$$

Сложности

- ▶ схлопывание компонент
- ▶ переименование кластеров
- ▶ невозможно оптимизировать аналитически

Дифференцируем функцию правдоподобия

$$N_k = \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}), \quad \mu_k = \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) \mathbf{x}_n$$

$$\Sigma_k = \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) (\mathbf{x}_n - \mu_k)^T (\mathbf{x}_n - \mu_k)$$

$$\pi_k = \frac{N_k}{N}$$

Expectation Maximization (!)

E Expectation: при фиксированных μ_k, Σ_k, π_k

$$\gamma(z_{nk}) = \frac{\pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \mu_k, \Sigma_k)}{\sum_{j=1}^K \pi_j \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \mu_j, \Sigma_j)}$$

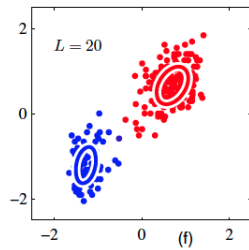
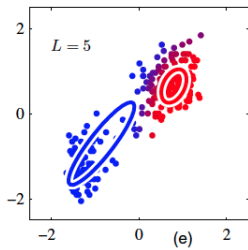
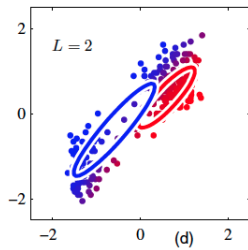
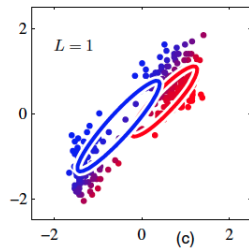
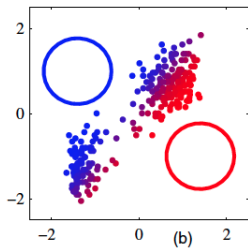
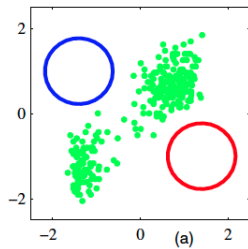
M Maximization: при фиксированных $\gamma(z_{nk})$

$$N_k = \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}), \quad \mu_k = \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) \mathbf{x}_n$$

$$\Sigma_k = \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) (\mathbf{x}_n - \mu_k)(\mathbf{x}_n - \mu_k)^T$$

$$\pi_k = \frac{N_k}{N}$$

S Остановиться при достижении сходимости



ЕМ-алгоритм¹

Дано.

Известно распределение $P(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\theta)$, где \mathbf{x} – наблюдаемые переменные, а \mathbf{z} – скрытые.

Найти.

θ , максимизирующее $P(\mathbf{X}|\theta)$.

Е вычислить $P(\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \theta^{old})$ при фиксированном θ^{old}

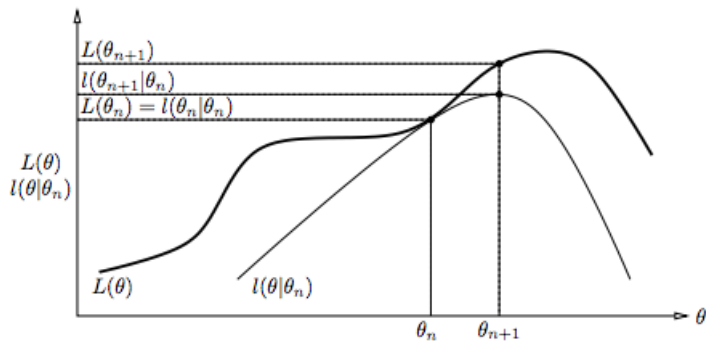
М вычислить $\theta^{new} = \arg \max_{\theta} Q(\theta, \theta^{old})$, где

$$Q(\theta, \theta^{old}) = E_{\mathbf{Z}}[\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\theta)] = \sum_{\mathbf{Z}} p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}, \theta^{old}) \ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\theta)$$

Улучшение: ввести априорное распределение $p(\theta)$

¹Maximum Likelihood from Incomplete Data via the EM Algorithm

Сходимость²

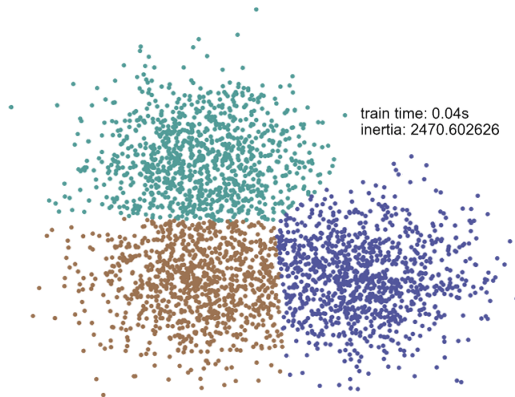


²The Expectation Maximization Algorithm: A short tutorial

Различные смеси

$p(\mathbf{x}_i \mathbf{z}_i)$	$p(\mathbf{z}_i)$	Name
MVN	Discrete	Mixture of Gaussians
Prod. Discrete	Discrete	Mixture of multinomials
Prod. Gaussian	Prod. Gaussian	Factor analysis/ probabilistic PCA
Prod. Gaussian	Prod. Laplace	Probabilistic ICA/ sparse coding
Prod. Discrete	Prod. Gaussian	Multinomial PCA
Prod. Discrete	Dirichlet	Latent Dirichlet allocation
Prod. Noisy-OR	Prod. Bernoulli	BN20/ QMR
Prod. Bernoulli	Prod. Bernoulli	Sigmoid belief net

K-means и его модификации



K-means

Пусть $\Sigma_k = \epsilon I$, тогда

$$p(\mathbf{x}|\mu_k, \Sigma_k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}} \exp\left(-\frac{1}{2\epsilon} \|\mathbf{x} - \mu_k\|^2\right)$$

Рассмотрим стремление $\epsilon \rightarrow 0$

$$\gamma(z_{nk}) = \frac{\pi_k \exp\left(-\frac{1}{2\epsilon} \|\mathbf{x}_n - \mu_k\|^2\right)}{\sum_j \pi_j \exp\left(-\frac{1}{2\epsilon} \|\mathbf{x}_n - \mu_j\|^2\right)} \rightarrow r_{nk} = \begin{cases} 1, & \text{для } k = \arg \min_j \|\mathbf{x}_n - \mu_j\|^2 \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$$

Функция правдоподобия

$$E_{\mathbf{Z}}[\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}|\mu, \Sigma, \pi)] \rightarrow -\sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K r_{nk} \|\mathbf{x}_n - \mu_k\|^2 + \text{const}$$

Вектор средних

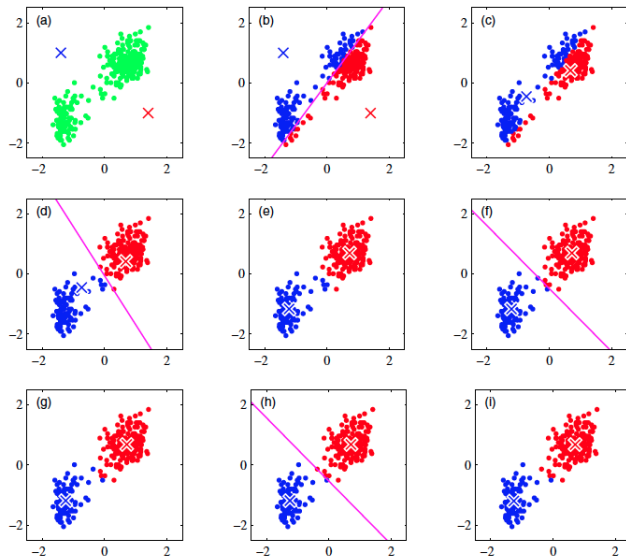
$$\mu_k = \frac{\sum_n r_{nk} \mathbf{x}_n}{\sum_n r_{nk}}$$

K-means

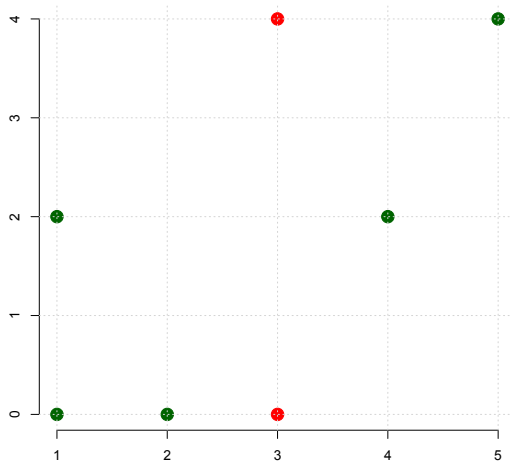
```
1 function kmeans(X, K):
2     initialize N # number of objects
3     initialize Mu = (mu_1 ... mu_K) # random centroids
4     do:
5         # E step
6         for k in 1..K:
7             for x in 1..N:
8                 compute r_nk # Cluster assignment
9         # M step
10        for k in 1..K:
11            recompute mu_k # Update centroids
12    until Mu converged
13    J = loss(X, Mu)
14    return Mu, J
```

Сложность $O(NK)$

Локальная оптимизация (!)

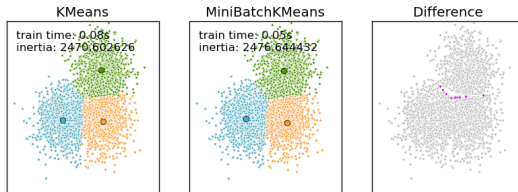


Задача



Модификации k-means (1)

- ▶ На каждом шаге работаем с b случайно выбранными объектами из каждого кластера (mini-batch k-means)



- ▶ Критерий качества (k-medoids)

$$\tilde{J} = \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K r_{nk} d(\mathbf{x}_n, \mu_k)$$

d – функция расстояния, μ_k – один из объектов в кластере

Модификации k-means (2)

- ▶ k-means++ – “умная” инициализация³
- ▶ онлайн k-means

$$\mu_k^{new} = \mu_k^{old} + \eta_n(\mathbf{x}_n - \mu_k^{old})$$

³k-means++: The Advantages of Careful Seeding

Кластеризация

Идея

Выбрать критерий качества кластеризации J и расстояние между объектами $d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ и вычислить разбиение выборки на кластеры, которое соответствует оптимальному значению выбранного критерия.

Альтернативные критерии качества

Критерий

$$\begin{aligned} J &= \sum_{k=1}^K \sum_{\mathbf{x}_i \in C_k} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_k\|^2 = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K n_k \left[\frac{1}{n_k^2} \sum_{\mathbf{x}_i \in C_k} \sum_{\mathbf{x}_j \in C_k} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 \right] = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K n_k \left[\frac{1}{n_k^2} \sum_{\mathbf{x}_i \in C_k} \sum_{\mathbf{x}_j \in C_k} s(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \right] = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K n_k \bar{s}_k \end{aligned}$$

Примеры \bar{s}_i

$$\underline{s}_k = \min_{\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j} s(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j); \quad \bar{s}_k = \max_{\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j} s(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

Задача на дом

Рассмотреть смесь из D -мерных распределений Бернулли. В такой смеси \mathbf{x} – D -мерный бинарный вектор, каждый компонент x_i которого подчиняется распределению бернулли с параметром μ_{ki} при заданном векторе μ_k :

$$p(\mathbf{x}|\mu_k) = \prod_{i=1}^D \mu_{ki}^{x_i} (1 - \mu_{ki})^{(1-x_i)}$$

Вероятность k -го вектора μ_k равна π_k . Выписать выражения для Е и М шагов при использовании ЕМ алгоритма для нахождения неизвестных параметров μ_k и π_k .

Вопросы

