Algorytm **Cross Entropy Clustering** oraz pakiet **CEC**

2014.11.06

J. Tabor, P. Spurek, K. Misztal

Spis treści

Spis treści

Dane ⇒ Zadania

Dane (ang. data, łac. datum) – zbiory liczb i tekstów o różnych formach, np. dane pogodowe (temperatura, ciśnienie, siła wiatru, itd.) z ostatniego miesiąca.

Dane ⇒ Zadania

Dane (ang. data, łac. datum) – zbiory liczb i tekstów o różnych formach, np. dane pogodowe (temperatura, ciśnienie, siła wiatru, itd.) z ostatniego miesiąca.

Typowe zadania analizy danych:

- **klastrowanie**: dzielimy na grupy (uczenie nienadzorowane)
- **klasyfikacja**: znamy przykładowe etykiety, chcemy przewidzieć (uczenie nadzorowane)

Dane ⇒ Zadania

Dane (ang. data, łac. datum) – zbiory liczb i tekstów o różnych formach, np. dane pogodowe (temperatura, ciśnienie, siła wiatru, itd.) z ostatniego miesiąca.

Typowe zadania analizy danych:

- **klastrowanie**: dzielimy na grupy (uczenie nienadzorowane)
  Trudno ocenić jakość.
  Podstawowe metody: k-means, hierarchiczne, na bazie gęstości (EM), subspace clustering, etc.
- **klasyfikacja**: znamy przykładowe etykiety, chcemy przewidzieć (uczenie nadzorowane)

Dane ⇒ Zadania

Dane (ang. data, łac. datum) – zbiory liczb i tekstów o różnych formach, np. dane pogodowe (temperatura, ciśnienie, siła wiatru, itd.) z ostatniego miesiąca.

Typowe zadania analizy danych:

- **klastrowanie**: dzielimy na grupy (uczenie nienadzorowane)
  Trudno ocenić jakość.
  Podstawowe metody: k-means, hierarchiczne, na bazie gęstości (EM), subspace clustering, etc.
- **klasyfikacja**: znamy przykładowe etykiety, chcemy przewidzieć (uczenie nadzorowane)
  Łatwo ocenić jakość.
  Podstawowe metody: SVM, Bayes, sieci neuronowe, regresja, ELM, drzewa decyzyjne i lasy losowe, etc.

Spis treści

Cross-entropy clustering

Celem referatu jest reklama

pakietu CEC

CEC: Połączenie metod stosowanych w metodzie k-means z podejściem EM (expectation maximization) oparte na teorii informacji.

Literatura

- Tabor, Spurek:
  Cross-entropy clustering, Pattern Recognition 2014
- Tabor, Misztal:
  Detection of elliptical shapes via cross-entropy clustering (IbPRIA 2013)
- Spurek, Tabor, Zając:
  Detection of disk-like particles in electron microscopy images (CORES 2013)
- Śmieja, Tabor:
  Image segmentation with use of cross-entropy clustering (CORES 2013)

Dostępne na stronie: `http://www.ii.uj.edu.pl/~tabor`.
Pakiet w R: `http://cran.r-project.org/web/packages/CEC/`.

Spis treści

Metoda k-means

Pierwsza i najstarsza metoda klastrowania (klasteryzacji, analizy skupień). Warto wspomnieć: pierwszych praca została napisana przez H. Steinhausa.
Więcej informacji: [Hans-Hermann Bock *Clustering Methods: A History of k-Means Algorithms*]

Problem (optymalizacyjny)

Szukamy takiego rozbicia zbioru X na k podzbiorów $X_1, \ldots, X_k$, by minimalizować funkcję kosztu $\sum\limits_{i=1}^{k} ss(X_i)$, gdzie ss (within cluster sum of squares)

$$ss(Y) := \sum_{y \in Y} \|y - m_Y\|^2,$$

a $m_Y = \frac{1}{|Y|} \sum_{y \in Y} y$ to średnia („środek ciężkości”) zbioru Y.

Metoda k-means

Plusy: ciągle spotykana, bo szybka (umożliwia podejście Hartigana) i prosta w implementacji. Łatwo skalowalna, dla przykładu można znaleźć implementacje dla "wielkiej" ilości danych na Hadoop-a.
Wady: zależy od układu współrzędnych, nie znajduje ilości klastrów, klastry mniej więcej podobnej wielkości.

Metoda k-means

Plusy: ciągle spotykana, bo szybka (umożliwia podejście Hartigana) i prosta w implementacji. Łatwo skalowalna, dla przykładu można znaleźć implementacje dla "wielkiej" ilości danych na Hadoop-a.
Wady: zależy od układu współrzędnych, nie znajduje ilości klastrów, klastry mniej więcej podobnej wielkości.
Im więcej klastrów tym lepsze dopasowanie!

Podejście Lloyda do szukania optymalnego podziału

1. Wybieramy ze zbioru X w sposób losowy k punktów $m_1, \ldots, m_k$ (początkowe środki klastrów)
2. Kolejnym punktom z X przyporządkowujemy ten numer (indeks) środka dla którego $\|x - m_i\|^2$ jest najmniejsze
3. wyliczamy nowe środki, i o ile nastąpiła zmiana, wracamy do punktu drugiego

Metoda EM

[Geoffrey McLachlan,Thriyambakam Krishnan *The EM Algorithm and Extensions*]
Metoda EM (w najczęściej spotykanej postaci Gaussian Mixture Models). Stara się dopasować (biorąc pod uwagę funkcję największej wiarygodności) do danych X „mieszankę" postaci

$$X \sim p_1 f_1 + \ldots + p_k f_k,$$

gdzie f_i należą do ustalonej wcześniej rodziny gęstości.

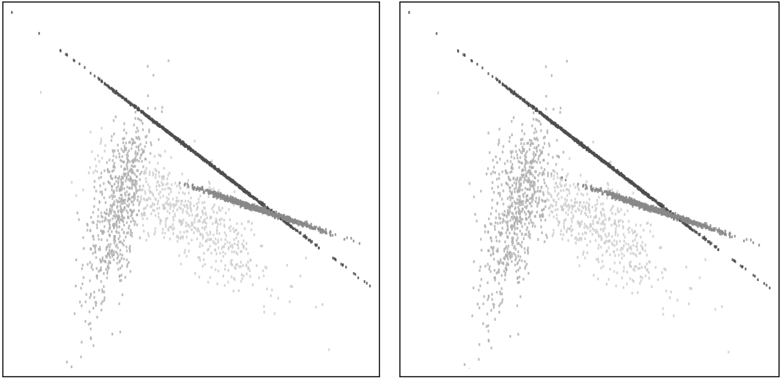
Metoda EM

Plusy: nie zależy od skalowania, umożliwia dosyć dobre dopasowanie do danych, dokonuje estymacji gęstości, umożliwia użycie różnych typów gęstości (modeli Gaussowskich).
Wady: dosyć wolna (nie umożliwia łatwo podejścia Hartigana), nie znajduje automatycznie ilości klastrów, użycie nawet prostych modeli Gaussowskich wymaga skomplikowanej nieliniowej optymalizacji.

Metoda EM

Plusy: nie zależy od skalowania, umożliwia dosyć dobre dopasowanie do danych, dokonuje estymacji gęstości, umożliwia użycie różnych typów gęstości (modeli Gaussowskich).
Wady: dosyć wolna (nie umożliwia łatwo podejścia Hartigana), nie znajduje automatycznie ilości klastrów, użycie nawet prostych modeli Gaussowskich wymaga skomplikowanej nieliniowej optymalizacji.
Im więcej klastrów tym lepsze dopasowanie!

Przykład działania EM



(a) Klastrowanie EM z 4 gaussami.

(b) CEC startujący z początkowo 10 gaussami.

Rysunek: Porównanie klastrowania mieszanki 4 gaussów przy pomocy EM (z $k = 4$) z Gaussowskim CEC-em który zaczyna od $k = 10$ klastrów.

Spis treści

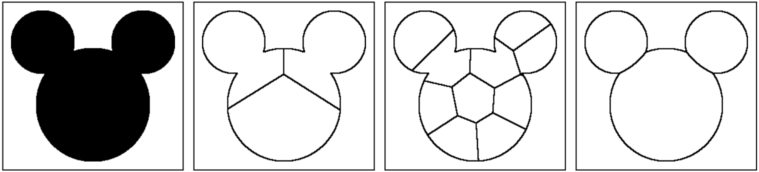
Co to CEC?

Dziedziczy najlepsze cechy k-means (prostota implementacji) z możliwościami EM (łatwość w użyciu różnych modeli Gaussowskich). Co więcej automatycznie redukuje niepotrzebne klastry.
Działa podobnie jak EM, i stara się dopasować (biorąc pod uwagę funkcję największej wiarygodności) do danych X „mieszankę" postaci

$$X \sim \max(p_1 f_1, \ldots, p_k f_k),$$

gdzie f_i należą do ustalonej wcześniej rodziny gęstości.
Motywacja do powyższego wzoru pochodzi z teorii kodowania, entropii i paradygmatu MDLP (minimal description length principle).

Dlaczego CEC?

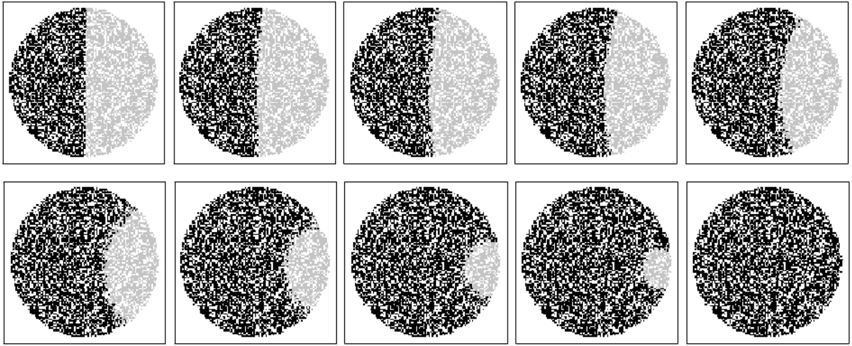


(a) zbiór typu Myszka Miki. (b) k-means z $k = 3$. (c) k-means z $k = 10$. (d) CEC start z 10-ma klastrami.

CEC:

- ładne klastry
- automatyczna redukcja ilości
- niezmiennicze ze względu na wybrane przekształcenia afiniczne
- struktura modułowa
- prostota zbliżona do k-means przy efektach EM

Redukcja klastrów

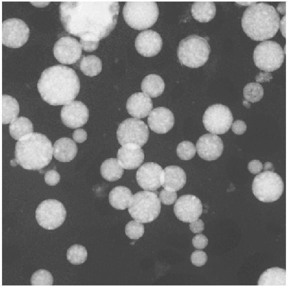


Rysunek: Redukcja klastrów przy sferyczym (radialnym) CEC-u.

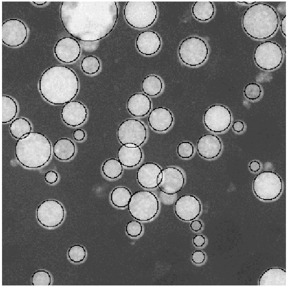
Spis treści

Wykrywanie kształtów kołowych/kulistych

Wyniki z pracy [Spurek,Tabor,Zając]:



(a) Zdjęcie.



(b) Segmentacja uzyskana za pomocą sferycznego CEC.

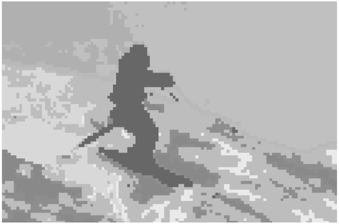
Rysunek: Segmentacja sferyczna CEC cząstek nanopalladu.

Trudno byłoby wykonać przy pomocy EM, gdyż EM nie wykrywa ilości grup.

Segmentacja obrazów

Wyniki z pracy [Śmieja, Tabor]:

(a) Zdjęcie.



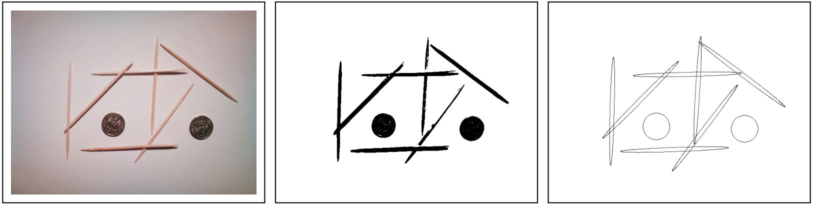
(b) Segmentacja za pomocą CEC.

Rysunek: Segmentacja obrazów bazowana na CEC.

Zasadniczo niezmiennicze ze względu na afiniczne transformacje obrazu (w przeciwieństwie choćby do metody k-means).

Rozpoznawanie różnych kształtów eliptycznych

Wyniki z pracy [Tabor, Misztal]:



(a) wykałaczki i monety. (b) binaryzacja. (c) znalezione obiekty.

Rysunek: Rozpoznawanie obiektów.

Możliwość łatwego wyszukiwania ustalonych typów obiektów eliptycznych. Aby opisać jak to można robić, chciałbym przejść troszkę do teorii.

Spis treści

Entropia i długość kodu

Jakie kody są realizowalne?

Długości kodów: l_i

Entropia i długość kodu

Jakie kody są realizowalne?

Długości kodów: l_i

Nierówność Krafta: Można zbudować kod prefiskowy o długościach $l_1, \ldots, l_n$, wtw. gdy

$$\frac{1}{2^{l_1}} + \ldots + \frac{1}{2^{n}} \leqslant 1.$$

Entropia i długość kodu

Jakie kody są realizowalne?

Długości kodów: l_i

Nierówność Krafta: Można zbudować kod prefiskowy o długościach $l_1, \ldots, l_n$, wtw. gdy

$$\frac{1}{2^{l_1}} + \ldots + \frac{1}{2^n} \leqslant 1.$$

Pytanie: załóżmy, że symbol s_i pojawia się z prawdopodobieństwem p_i. Wtedy średnia oczekiwana długość kodu wynosi

$$p_1 l_1 + \ldots + p_n l_n.$$

Jak dobrać kody (dlugości kodów), by zminimalizować oczekiwaną długość? Czyli inaczej mówiąc zakodować wiadomość za pomocą najmniejszej niezbędnej ilości informacji?

Entropia i długość kodu

Jakie kody są realizowalne?

Długości kodów: l_i

Nierówność Krafta: Można zbudować kod prefiskowy o długościach $l_1, \ldots, l_n$, wtw. gdy

$$\frac{1}{2^{l_1}} + \ldots + \frac{1}{2^n} \leqslant 1.$$

Pytanie: załóżmy, że symbol s_i pojawia się z prawdopodobieństwem p_i. Wtedy średnia oczekiwana długość kodu wynosi

$$p_1 l_1 + \ldots + p_n l_n.$$

Jak dobrać kody (dlugości kodów), by zminimalizować oczekiwaną długość? Czyli inaczej mówiąc zakodować wiadomość za pomocą najmniejszej niezbędnej ilości informacji?

Odpowiedź: $l_i = -\log_2 p_i$. Dostajemy wzór na entropię (minimalna oczekiwana długość kodu):

$$-p_1 \log_2 p_1 - \ldots - p_n \log p_n.$$

Entropia krzyżowa

Każdy rozkład prawdopodobieństwa $p = \{p_1, \ldots, p_n\}$ na $S = \{s_1, \ldots, s_n\}$ zadaje nam długości kodów

$$-\log_2 p_1, \ldots, -\log_2 p_n.$$

Czyli intuicyjnie rzecz biorąc możemy go traktować jako metodę kodowania/kompresji (koder).
Entropia krzyżowa: zakładamy, że mamy dane które pojawiają się z prawdopodobieństwem $q_1, \ldots, q_n$, używamy kodera p, i otrzymujemy długość kodu:

$$q_1 \cdot -\log_2 p_1 + \ldots + q_n \cdot -\log_2 p_n.$$

Entropia krzyżowa

Każdy rozkład prawdopodobieństwa $p = \{p_1, \ldots, p_n\}$ na $S = \{s_1, \ldots, s_n\}$ zadaje nam długości kodów

$$-\log_2 p_1, \ldots, -\log_2 p_n.$$

Czyli intuicyjnie rzecz biorąc możemy go traktować jako metodę kodowania/kompresji (koder).
Entropia krzyżowa: zakładamy, że mamy dane które pojawiają się z prawdopodobieństwem $q_1, \ldots, q_n$, używamy kodera p, i otrzymujemy długość kodu:

$$q_1 \cdot -\log_2 p_1 + \ldots + q_n \cdot -\log_2 p_n.$$

Dlaczego ważne? Bo a) zazwyczaj nie znamy prawdziwego rozkładu; b) chcemy używać koderów (gęstości) tylko z pewnych ustalonych z góry rozkładów (bo budowa kodu zajmuje czas).

Entropia różniczkowa

Przez przejście graniczne uogólnia się z rozkładów dyskretnych na rozkłady ciągłe na $\mathbb{R}^N$.
Jeżeli mamy punkty $x_1, \ldots, x_n$ i gęstość f, to przez koszt zakodowania rozumiemy sumę długości kodów poszczególnych punktów

$$-\log f(x_1) - \ldots - \log f(x_n).$$

Często chcemy dopasować f z danej rodziny by powyższą wartość zminimalizować – metoda największej wiarygodności.

Rozkład normalny wielowymiarowy

CEC bazuje na rozkładach normalnych.
Wzór na $N(m, \Sigma)$ – wielowymiarowy rozkład normalny o wartości średniej m i kowariancji Σ w $\mathbb{R}^d$:

$$N(m, \Sigma) : x \to \frac{1}{(2\pi)^{d/2}(\det \Sigma)^{1/2}} \exp(-\frac{1}{2}\|x - m\|_{\Sigma}^{2}),$$

gdzie $\|x - m\|_{\Sigma}^{2}$ to norma Mahalanobisa:

$$\|v\|_{\Sigma}^{2} = v^T \Sigma^{-1} v.$$

Metoda Największej Wiarygodności

Jeżeli mamy rozkład normalny $N(m, \Sigma)$ i zestaw punktów $x_1, \ldots, x_n \in \mathbb{R}^d$. Wtedy wartość dopasowania tego rozkładu do danych jest dany z MNW (zmieniam znak na przeciwny, więc im miej tym lepsze dopasowanie):

$$-\sum_{i=1}^{n} \log(N(m, \Sigma)(x_i)) = \frac{nd}{2}\log(2\pi) + \frac{n}{2}\det(\Sigma) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} \|x_i - m\|_{\Sigma}^{2}.$$

Kodowanie

Dualne patrzenie na MNW – za pomocą teorii kodowania (entropia różniczkowa).
Mając dany rozkład normalny $N(m, \Sigma)$, „długość kodu" dla punktu x wynosi

$$-\log(N(m, \Sigma))(x).$$

Mamy dane k-metod kodowania identyfikowanych z rozkładami normalnymi $N(m_i, \Sigma_i)$. Dodatkowo potrzebne są identyfikatory używanego algorytmu – $p_i \in (0, 1)$ które sumują się do jedynki.
Wtedy koszt kodowania punktu x za pomocą i-tej metody jest równy

$$-\log p_i - \log(N(m_i, \Sigma_i))(x).$$

CEC-klastrowanie: algorytm w $\mathbb{R}^d$

Algorytm postępowania:

1. ustalamy początkowe rozkłady $N(m_i, \Sigma_i)$ i ich identyfikatory p_i (m_i - losowo wybrane punkty z danych, $\Sigma_i = I$, $p_i = 1/k$)
2. idziemy po wszystkich punktach, i wrzucamy punkt do tej grupy do której mu najbliżej (w sensie długości kodu, patrz poprzednia strona) – powstają grupy $X_1, \ldots, X_k$
3. z każdej grupy wyliczamy średnią m_i, kowariancję Σ_i, $p_i = |X_i|/|X|$
4. tworzymy nowe metody klastrowania $N(m_i, \Sigma_i)$, p_i, i wracamy do punktu 2

Modele Gaussowskie

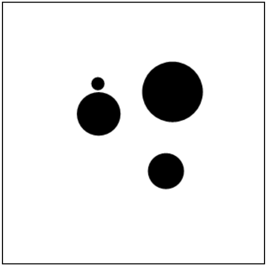
Biorąc odpowiednie podrodziny Gaussowskie możemy w różny sposób dopasowywać się do danych. Opisana wcześniej metoda znajduje najlepsze dopasowanie w klasie wszystkich rozkładów normalnych do zbioru X:

$$m = m_X, \, \Sigma = \Sigma_X.$$

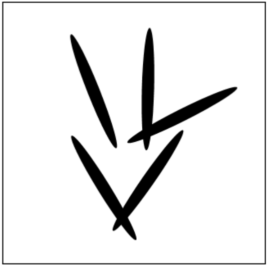
Czasami chcemy szukać najlepszego dopasowania w innych klasach *podrodzin Gaussowskich*. Najczęściej spotykaną jest rodzina rozkładów radialnych (sferycznych). Są to te rozkłady, które mają „symetrię radialną" (wartość gęstości zależy tylko od odległości od środka) – w konsekwencji oznacza to, że kowariancja musi być proporcjonalna do identyczności. Wtedy wzór na optymalne dopasowanie rozkładu radialnego do danych $X \subset \mathbb{R}^d$ to

$$m = m_X, \, \Sigma = \frac{\mathrm{tr}\Sigma_X}{d} I.$$

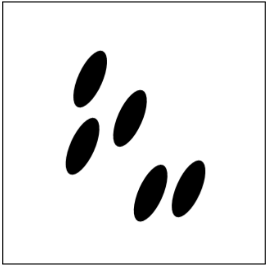
(a) Wszystkie Gaussy (Cov dowolna).



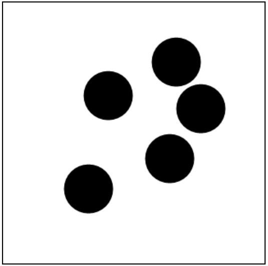
(b) Gaussy radialne (Cov proporcjonalna do I).



(c) Cov o ustalonych wartościach własnych.



(d) Zafiksowana kowariancja.



(e) Cov$= I$.

Spis treści

TFML:
Konferencja z nauczania maszynowego/statystyki/analizy danych.
Będlewo, 16-21 luty 2015
http://tfml.gmum.ii.uj.edu.pl/
Dwie ścieżki: praca w Schedea Informaticae (10pkt) albo tylko referat (spisany wcześniej i zamieszczony w Archiv).

Dziękuję za uwagę.