



# ТЕХНОСФЕРА

## Лекция 2 Задачи кластеризации

Николай Анохин

7 марта 2015 г.

# План занятия

Задача кластеризации

Смесь нормальных распределений и EM

K-means и его модификации

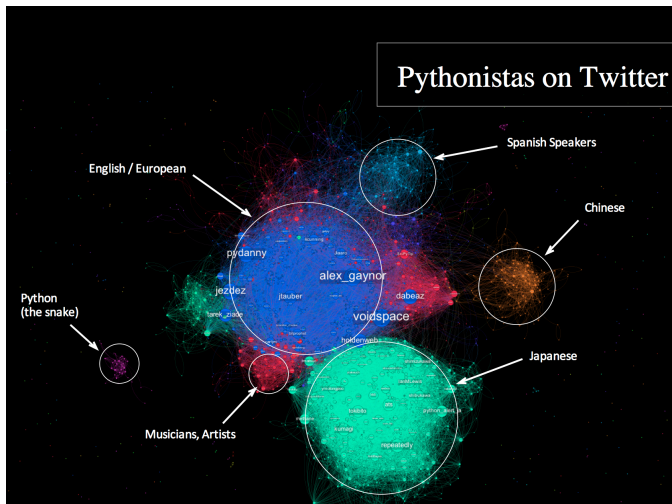
# Задача кластеризации

В задачах кластеризации целевая переменная не задана. Цель – отыскать “скрытую структуру” данных.

Зачем вообще рассматривать задачи без целевой переменной?

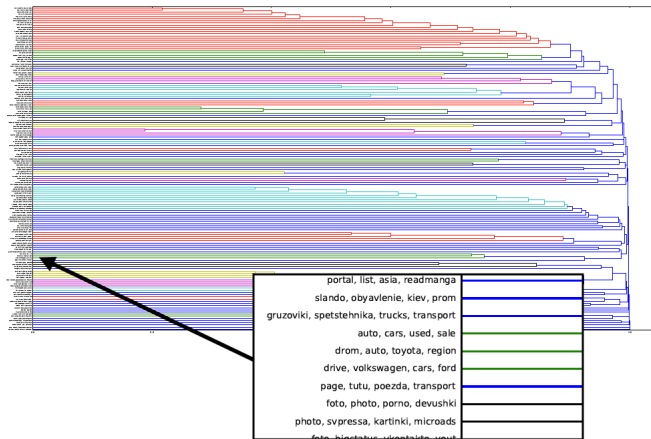
1. разметка данных – дорогое удовольствие
2. можно сначала поделить, а потом разметить
3. возможность отслеживать эволюционные изменения
4. построение признаков
5. exploratory data analysis

# Программисты python в Twitter



## Графо-теоретические методы (источник)

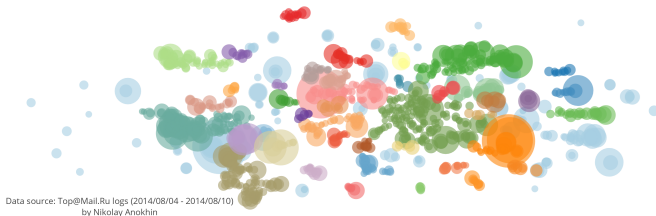
# Похожие тематики



Иерархическая кластеризация

# Топ 1000 самых посещаемых доменов рунета

1000 largest Top@Mail.Ru domains



T-SNE + DBSCAN

# Постановка задачи

**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  $H = \{h(\mathbf{x}, \theta) : \mathcal{X} \times \Theta \rightarrow \mathbb{N}\}$ , 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.

- ▶ Как определить похожесть объектов?
- ▶ Как оценить качество модели?
- ▶ Как выбрать  $K$ ?

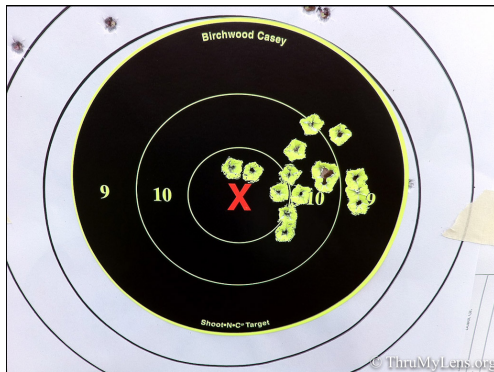
# Начнем с простого

## 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

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

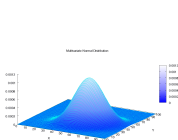
## Параметры

$D$ -мерный вектор средних

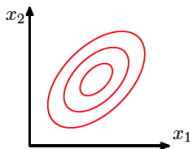
$D \times D$ -мерная матрица ковариации

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

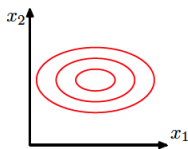
$$\Sigma = E[(\mathbf{x} - \mu)(\mathbf{x} - \mu)^T]$$



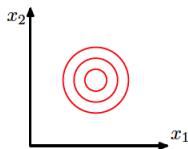
(a)  $D = 2$



(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  $\mu$  и матрицу ковариации  $\mathbf{\Sigma}$

# Maximum likelihood (!)

## Принцип максимального правдоподобия

Пусть дано семейство параметрических моделей  $h(\mathbf{x}, \theta)$ . Выбираем вектор параметров  $\theta$ , 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

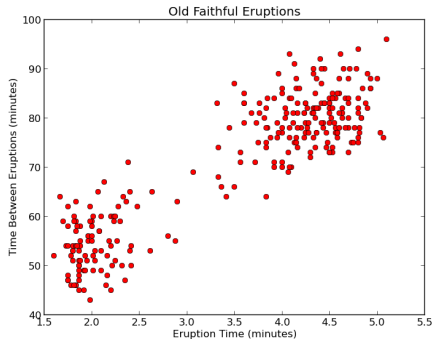
$D$  = date of recordings in month (in August)

$X$  = 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

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

Смесь нормальных распределений

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

Апостериорная вероятность принадлежности к  $k$  кластеру  
(априорная равна  $\pi_k$ )

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

# 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  $\mu_k, \Sigma_k, \pi_k$

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

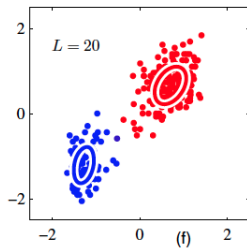
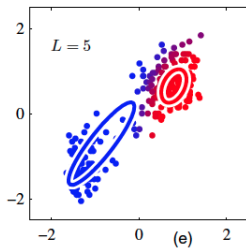
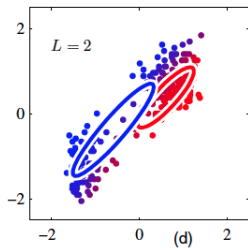
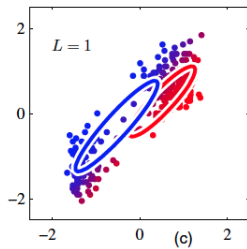
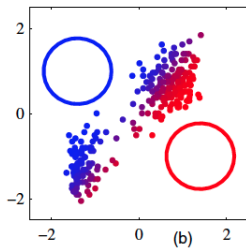
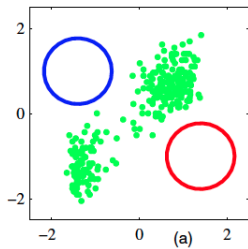
M Maximization: при фиксированных  $\gamma(z_{nk})$

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

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

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

S Остановиться при достижении сходимости



# ЕМ-алгоритм

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

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

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

**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  $p(\theta)$

# 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

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

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

Вектор средних

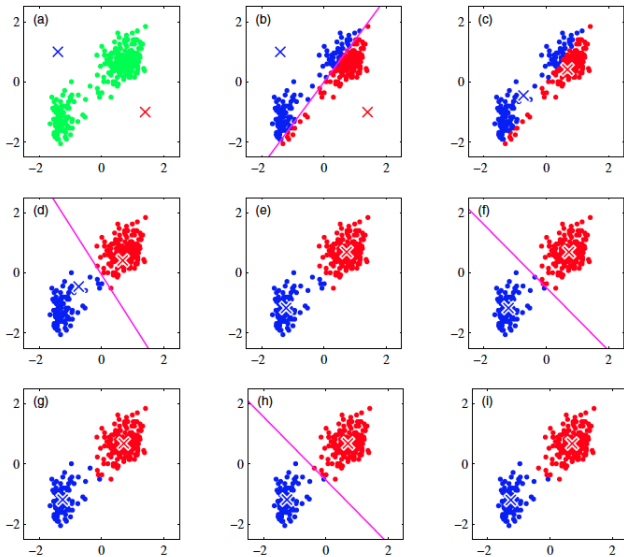
$$\mu_k = \frac{\sum_n r_{nk} \mathbf{x}_n}{\sum_n r_{nk}}$$

# 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
```

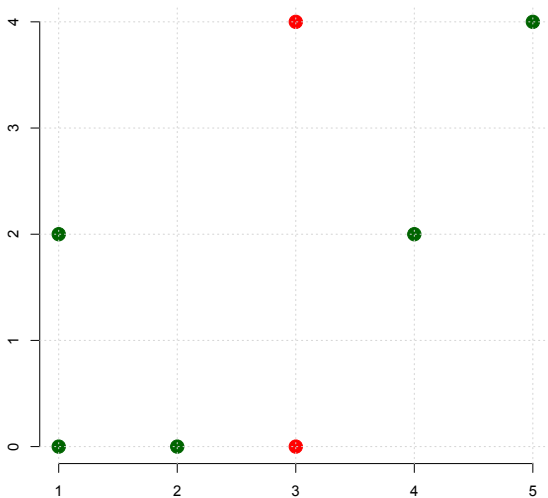
Сложность  $O(NK)$

Локальная оптимизация (!)



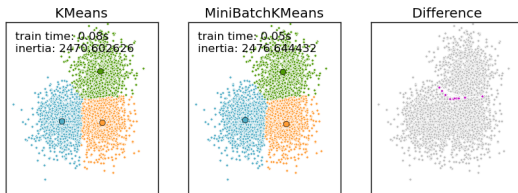


# Задача



# Модификации k-means

- ▶ 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,  $\mu_k$  – один из объектов в кластере

# Альтернативные функции расстояния

## Def

Функция  $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) : \mathbf{X} \times \mathbf{X} \rightarrow R$  является функцией расстояния, определенной на пространстве  $\mathbf{X}$  тогда и только тогда, когда  $\forall \mathbf{x} \in \mathbf{X}, \forall \mathbf{y} \in \mathbf{X}, \forall \mathbf{z} \in \mathbf{X}$  выполнено:

1.  $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \geq 0$
2.  $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{y}$
3.  $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = d(\mathbf{y}, \mathbf{x})$
4.  $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq d(\mathbf{x}, \mathbf{z}) + d(\mathbf{y}, \mathbf{z})$

# Расстояния 1

- Минковского

$$d_r(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \left[ \sum_{j=1}^N |x_j - y_j|^r \right]^{\frac{1}{r}}$$

- Евклидово  $r = 2$

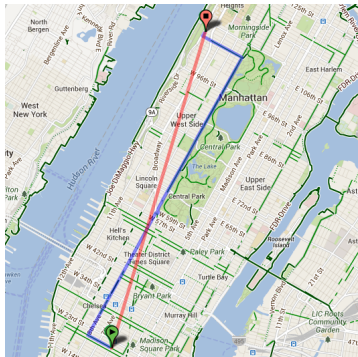
$$d_E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = d_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})$$

- Манхэттэн  $r = 1$

$$d_M(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = d_1(\mathbf{x}, \mathbf{y})$$

- $r = \infty$

$$d_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \max_j |x_j - y_j|$$



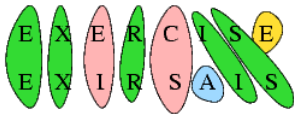
# Проблема

Функции расстояния чувствительны к преобразованиям данных

Решение

- ▶ Преобразовать обучающую выборку так, чтобы признаки имели нулевое среднее и единичную дисперсию – инвариантность к растяжению и сдвигу (standartize)
- ▶ Преобразовать обучающую выборку так, чтобы оси совпадали с главными компонентами матрицы ковариации – инвариантность относительно поворотов (PCA)

## Расстояния 2



- ▶ Жаккар

$$d_J(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 1 - \frac{|\mathbf{x} \cap \mathbf{y}|}{|\mathbf{x} \cup \mathbf{y}|}$$

- ▶ Косинус

$$d_c(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \arccos \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}}{\|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\|}$$

- ▶ Правки

$d_e$  – наименьшее количество удалений и вставок, приводящее  $\mathbf{x}$  к  $\mathbf{y}$ .

- ▶ Хэмминг

$d_H$  – количество различных компонент в  $\mathbf{x}$  и  $\mathbf{y}$ .

# Проклятие размерности

## Задача

Даны два случайных вектора  $\mathbf{x}$  и  $\mathbf{y}$  в пространстве размерности  $D$ . Как зависит математическое ожидание косинус-расстояния между  $\mathbf{x}$  и  $\mathbf{y}$  от размерности  $D$ ?

$$d_c(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \arccos \frac{\sum_{j=1}^D x_j y_j}{\sum_{j=1}^D x_j^2 \sum_{j=1}^D y_j^2}$$

Наблюдения:

- ▶ числитель стремится к нулю
- ▶ знаменатель положительный

Вывод:  $d_c(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rightarrow \frac{\pi}{2}$ .

# 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  $\bar{s}_i$

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



# Кластеризация

## Идея

Выбрать критерий качества кластеризации  $J$  и расстояние между объектами  $d(x_i, x_j)$  и вычислить разбиение выборки на кластеры, которое соответствует оптимальному значению выбранного критерия.

## 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  $\mu_{ki}$  при заданном векторе  $\mu_k$ :

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

Вероятность  $k$ -го вектора  $\mu_k$  равна  $\pi_k$ . Выписать выражения для  $E$  и  $M$  шагов, при использовании ЕМ алгоритма для нахождения неизвестных параметров  $\mu_k$  и  $\pi_k$ .

# Вопросы

