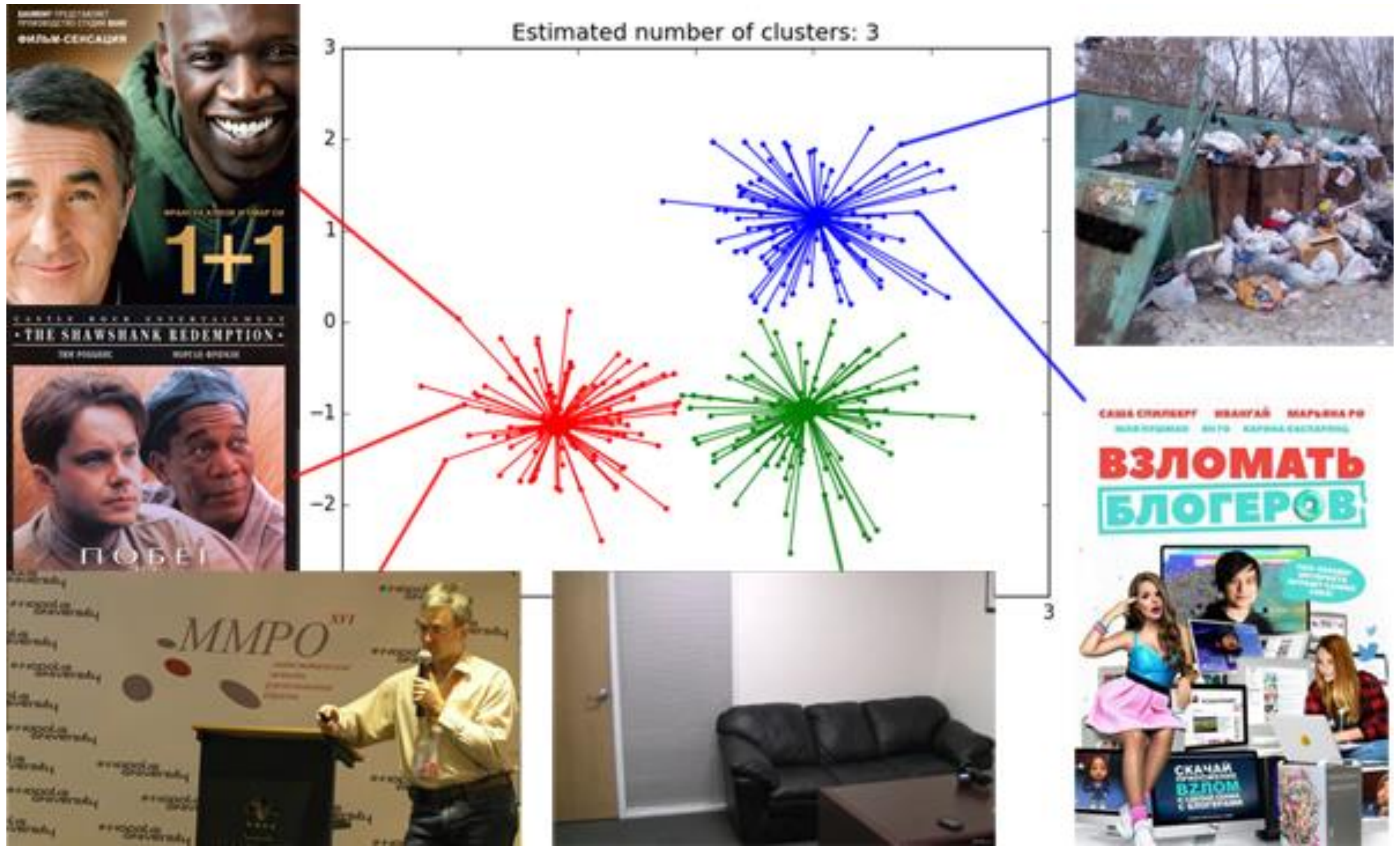
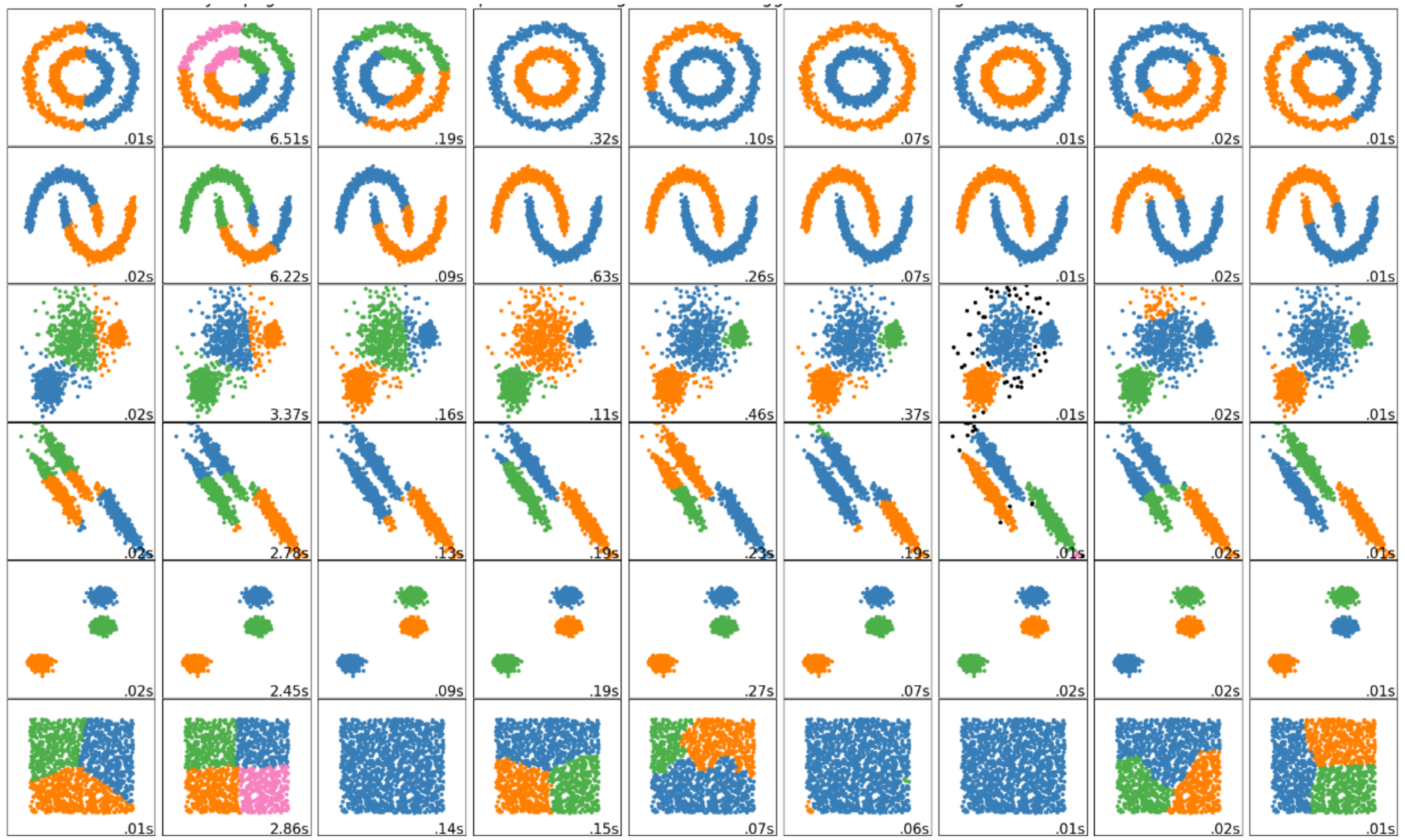
ВВЕДЕНИЕ В МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ

Лекция № 11

Кластеризация массива данных

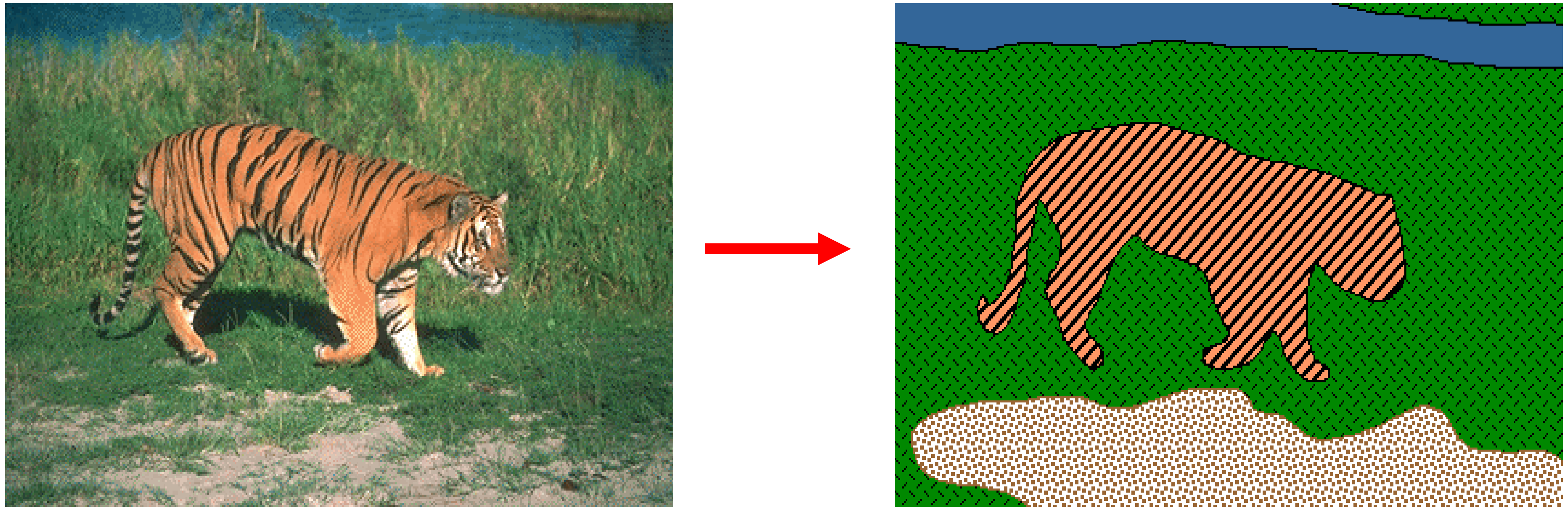
- Цель: определить семантически похожие объекты в группы





Сегментация изображений

- Цель: определить похожие группы пикселей



01

Agglomerative clustering

Кластеризация: измерение расстояния

Кластеризация - это метод обучения без учителя. Цель состоит в том, чтобы сгруппировать $x_1, \ldots, x_n \in \mathbb{R}^D$ по кластерам.

Нам нужна функция парного расстояния/подобия между элементами, а иногда и желаемое количество кластеров.

Когда данные (например, изображения, объекты, документы) представлены характерными векторами, обычно используемой мерой сходства является косинусное сходство.

Пусть будут два вектора данных x, x'. Между двумя векторами есть угол θ.

Определение мер расстояния

Пусть x и x' будут двумя объектами из вселенной возможных объектов. Расстояние (подобие) между x и x' - это вещественное число, обозначаемое sim(x, x').

Евклидова мера:

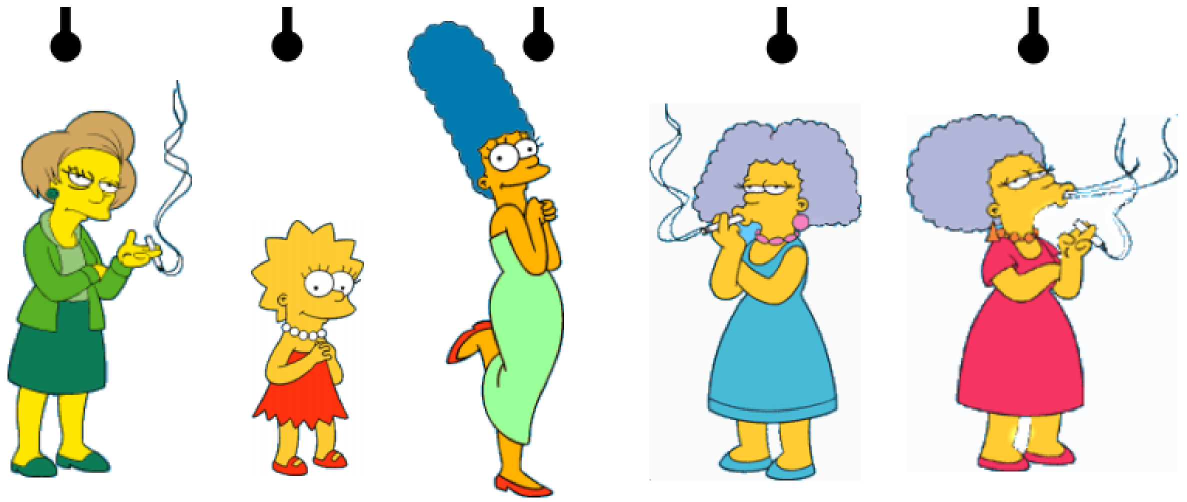
$$sim(x, x') \;=\; x^\top x'$$

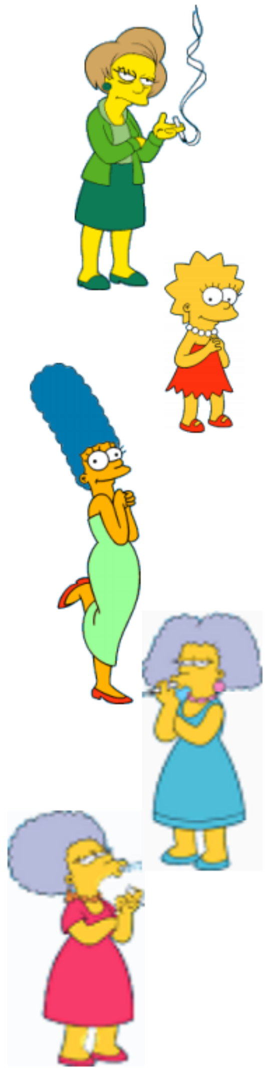
Косинусное расстояние:

$$\begin{aligned} sim(x, x') &= \cos(\theta) \\ &= \frac{x^\top x'}{\|x\| \cdot \|x'\|} \\ &= \frac{x^\top x'}{\sqrt{x^\top x}\sqrt{x'^\top x'}}. \end{aligned}$$

Пример группировки

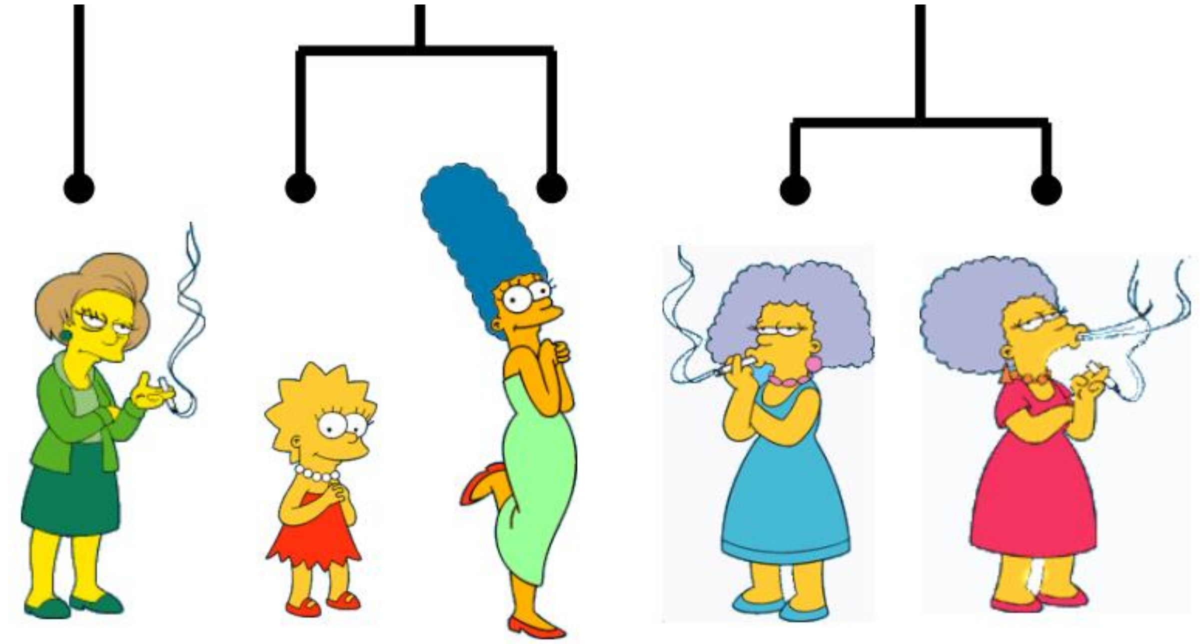
- Матрица попарных расстояний
- Обычно предполагается, что расстояние является обратной величиной сходства
- Низкое расстояние означает большое сходство

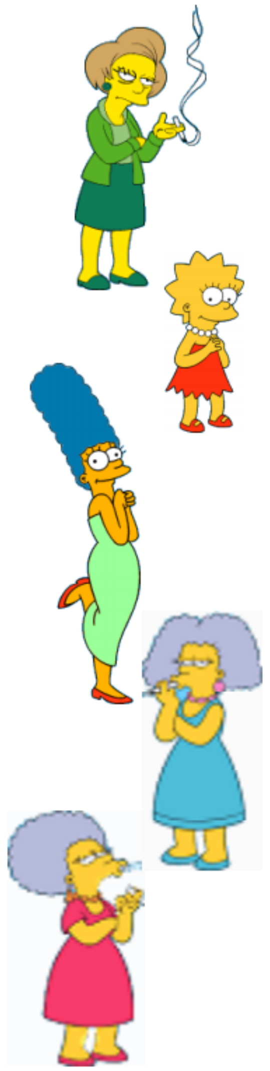




0	8	8	7	7
	0	2	4	4
		0	3	3
			0	1
				0

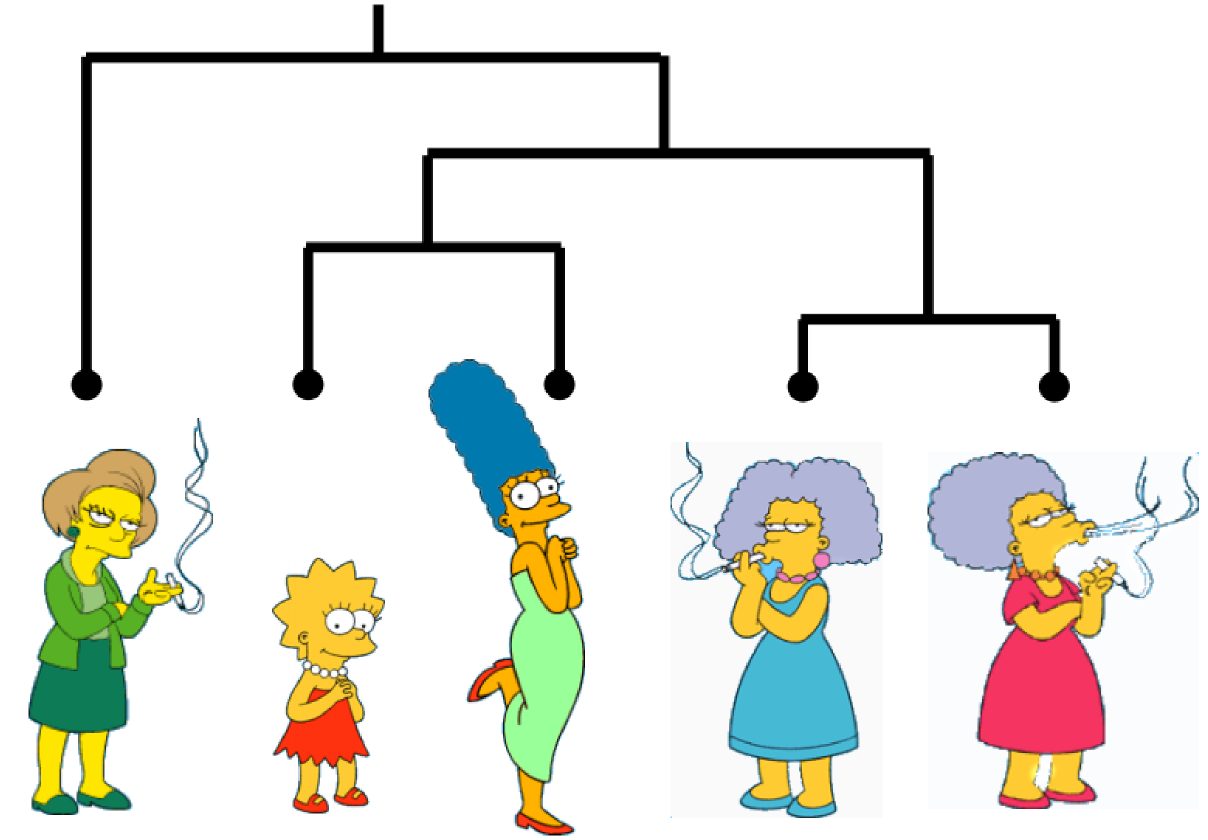
Пример группировки

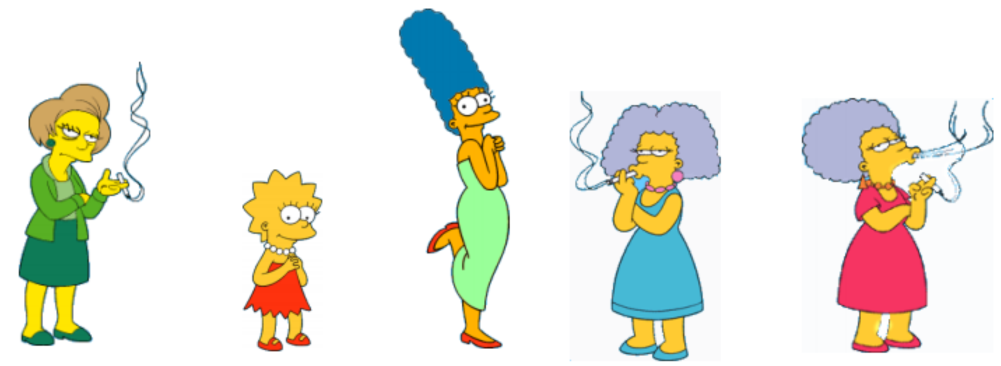




0	8	8	7	7
	0	2	4	4
		0	3	3
			0	1
				0

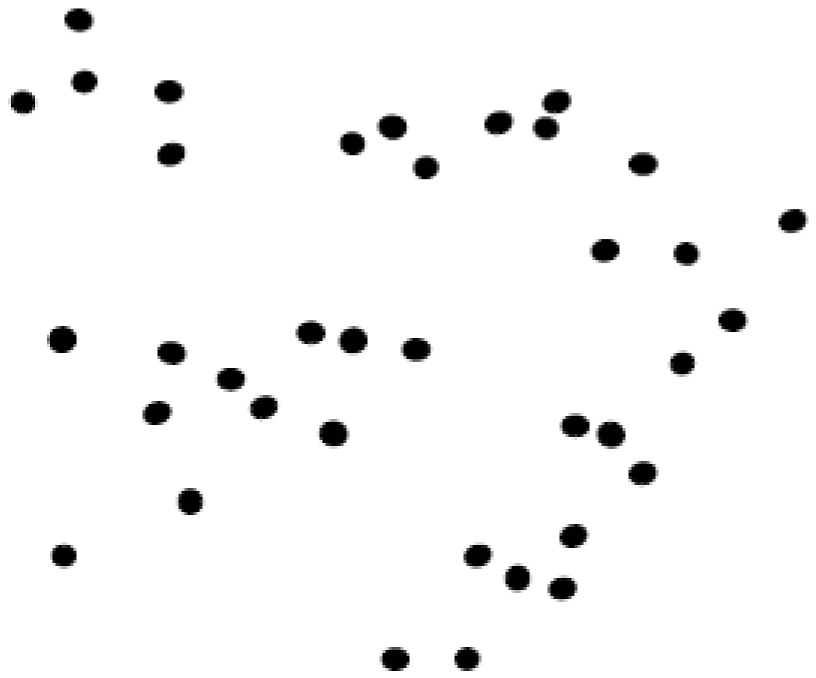
Пример группировки





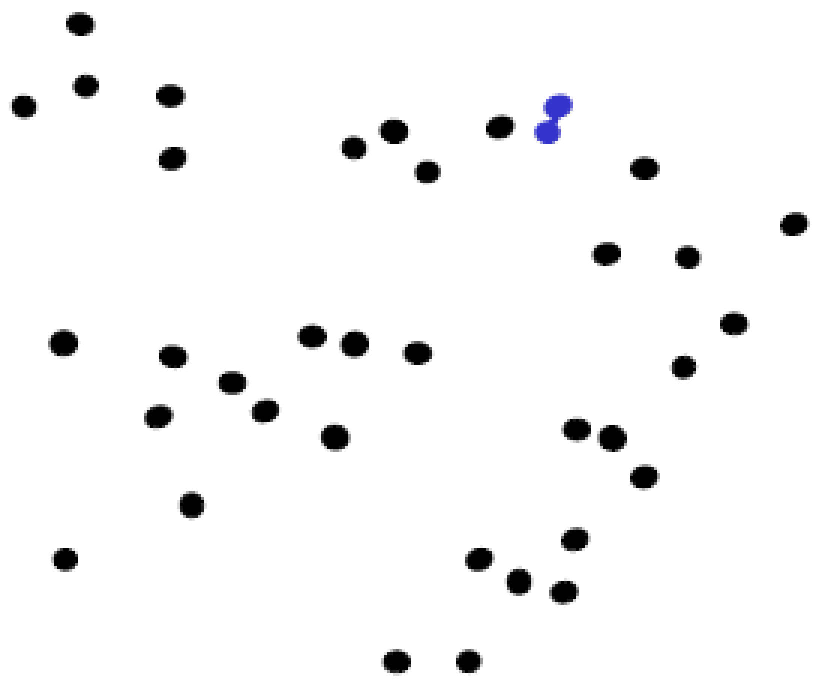
0	8	8	7	7
	0	2	4	4
		0	3	3
			0	1
				0

Agglomerative clustering



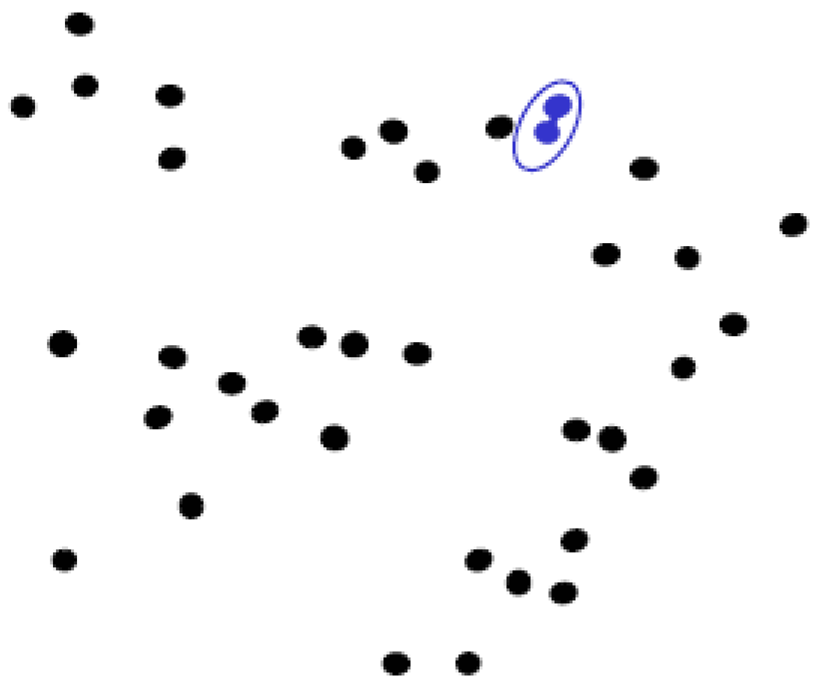
1. Say "Every point is its own cluster"

Agglomerative clustering



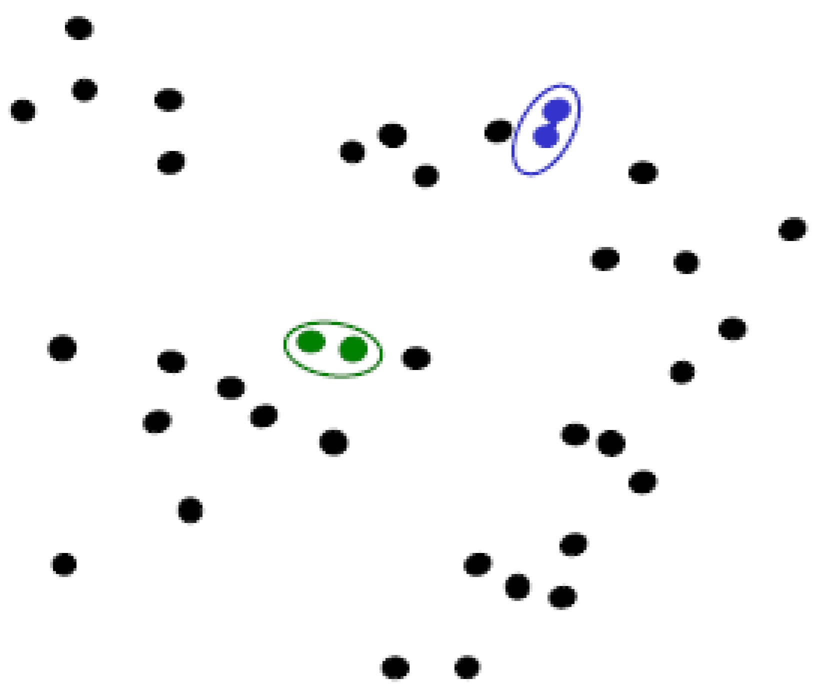
1. Say "Every point is its own cluster"
2. Find "most similar" pair of clusters

Agglomerative clustering

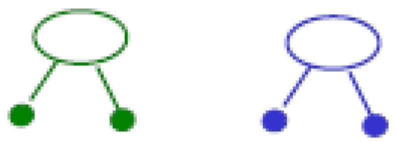


1. Say "Every point is its own cluster"
2. Find "most similar" pair of clusters
3. Merge it into a parent cluster

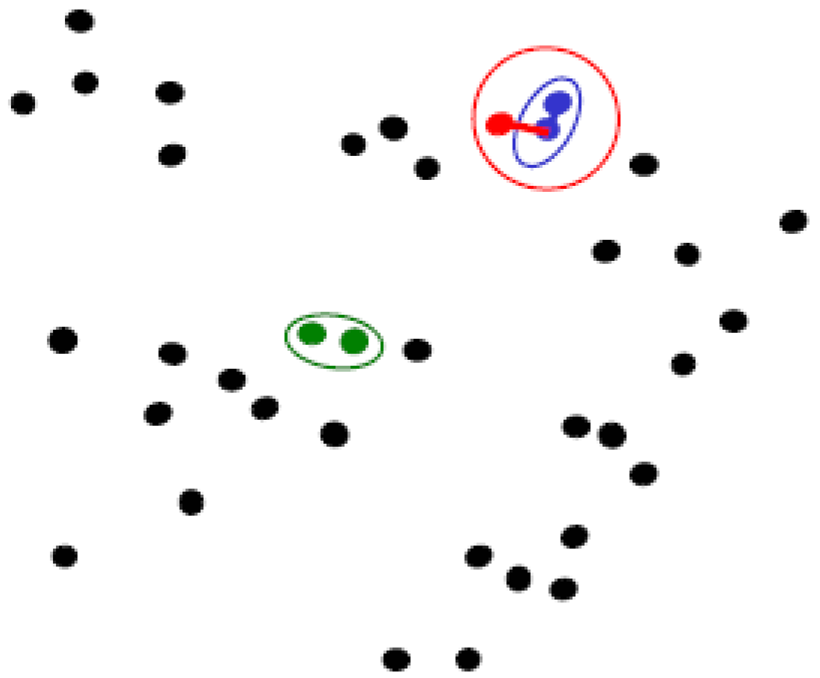
Agglomerative clustering



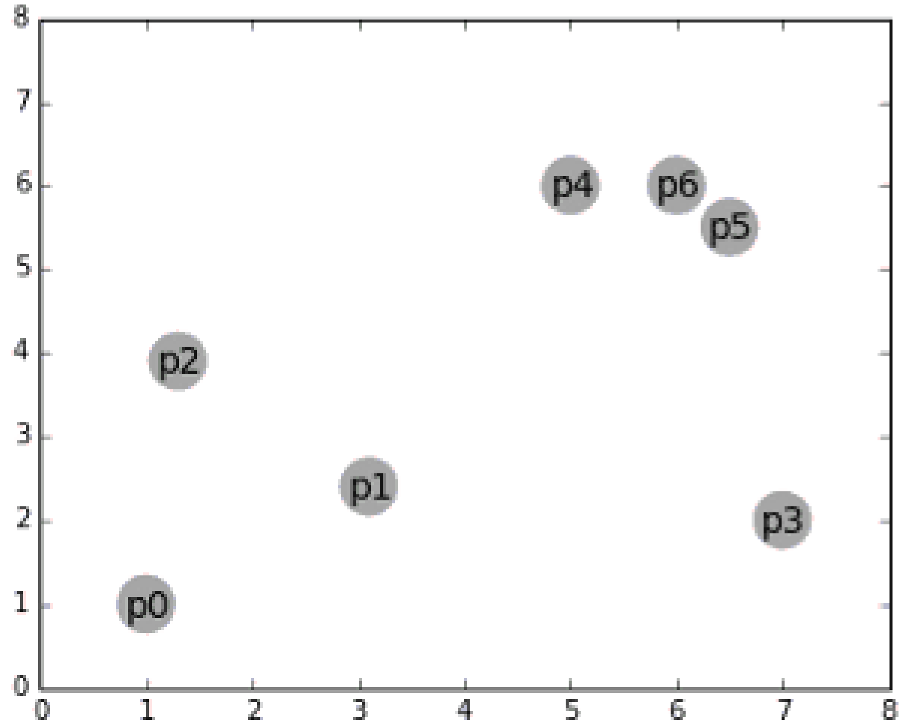
1. Say "Every point is its own cluster"
2. Find "most similar" pair of clusters
3. Merge it into a parent cluster
4. Repeat

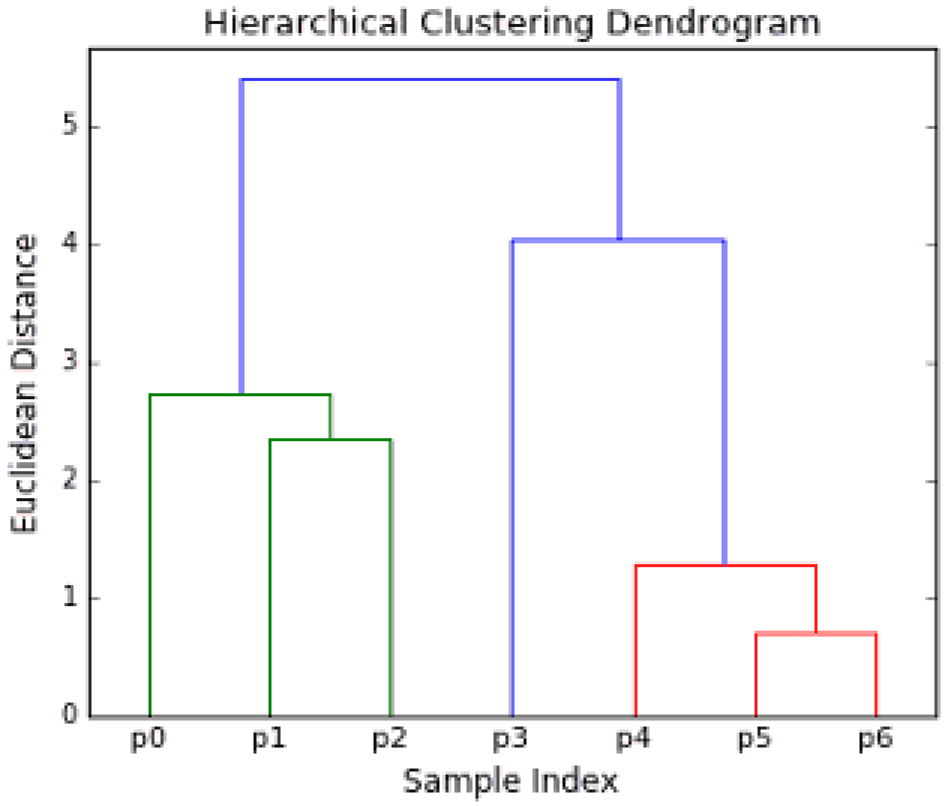


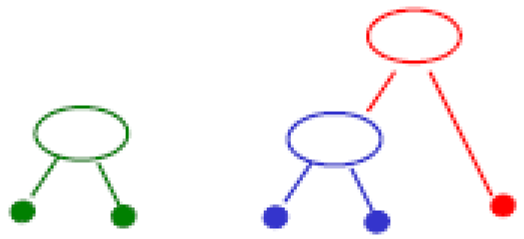
Agglomerative clustering



1. Say "Every point is its own cluster"
2. Find "most similar" pair of clusters
3. Merge it into a parent cluster
4. Repeat





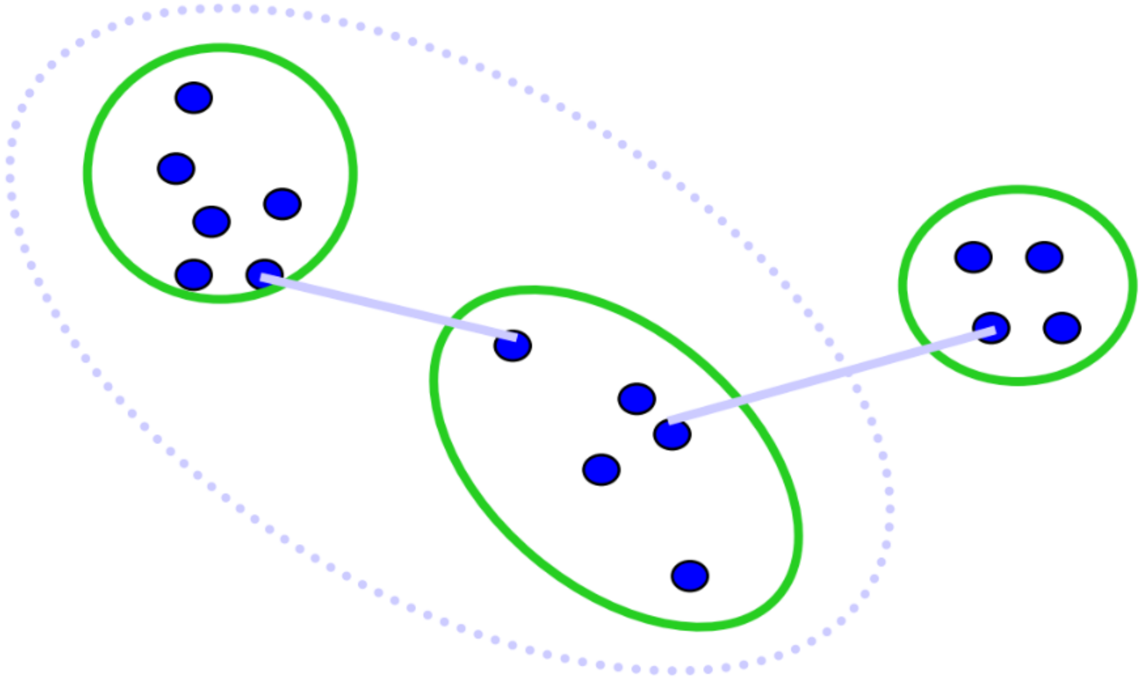


[The 5 Clustering Algorithms Data Scientists Need to Know]

Различные меры ближайших кластеров

Single Link

- $d(C_i, C_j) = \min_{x \in C_i, x' \in C_j} d(x, x')$. This is known as *single-linkage*. It is equivalent to the minimum spanning tree algorithm. One can set a threshold and stop clustering once the distance between clusters is above the threshold. Single-linkage tends to produce long and skinny clusters.

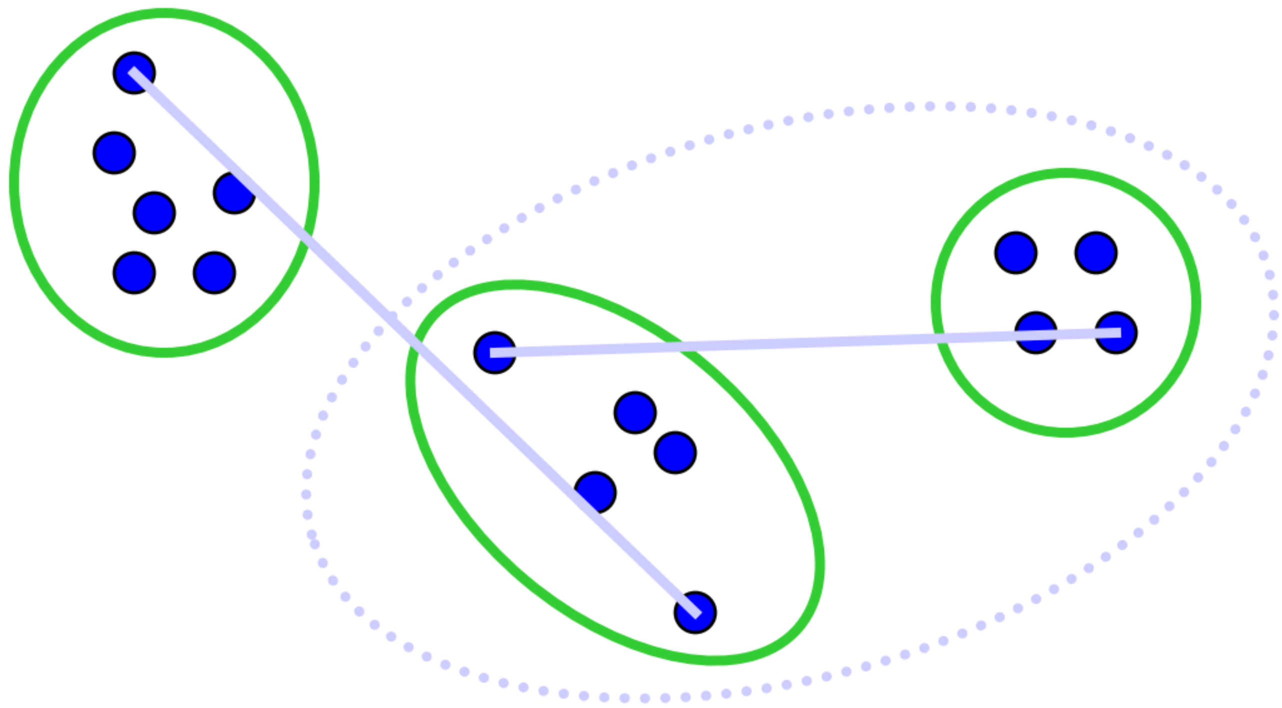


Длинные, тощие кластеры

Различные меры ближайших кластеров

Complete Link

- $d(C_i, C_j) = \max_{x \in C_i, x' \in C_j} d(x, x')$. This is known as *complete-linkage*. Clusters tend to be compact and roughly equal in diameter.

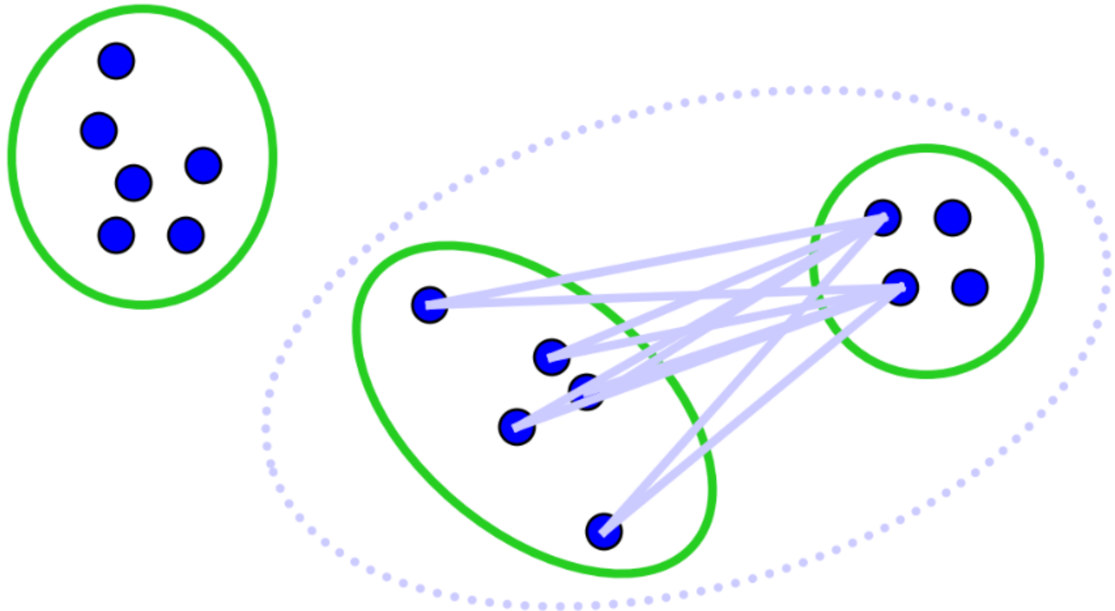


Тесные кластеры

Различные меры ближайших кластеров

Average Link

- $d(C_i, C_j) = \frac{\sum x \in C_i, x' \in C_j \, d(x,x')}{|C_i| \cdot |C_j|}$. This is the average distance between items. Somewhere between single-linkage and complete-linkage.



Устойчивость к шуму

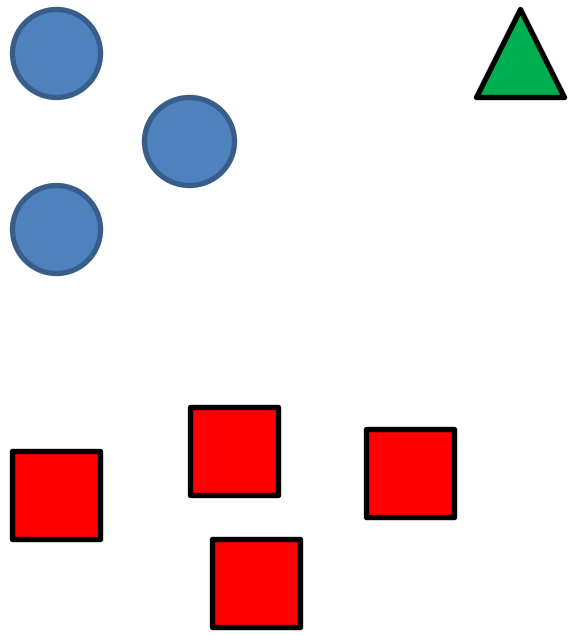
Agglomerative Hierarchical Clustering - Algorithm

1. Initially each item $x_1, \dots, x_n$ is in its own cluster $C_1, \dots, C_n$.
2. Repeat until there is only one cluster left:
3. Merge the nearest clusters, say C_i and C_j.

Agglomerative clustering

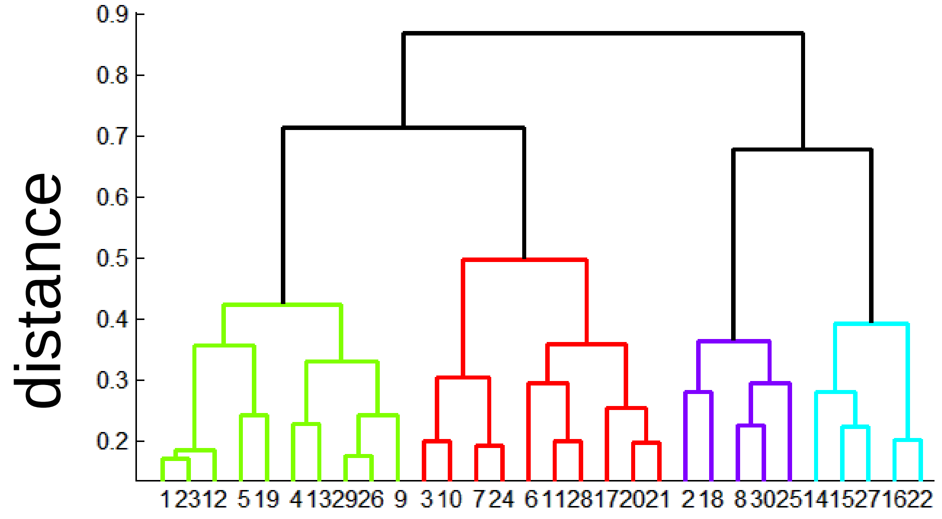
Как определить кластерное сходство?

- Среднее расстояние между точками,
- максимальное расстояние
- минимальная дистанция



Сколько кластеров?

- Кластеризация создает дендрограмму (дерево)
- Порог, основанный на максимальном количестве кластеров или на расстоянии между слияниями



Итоги: Agglomerative Clustering

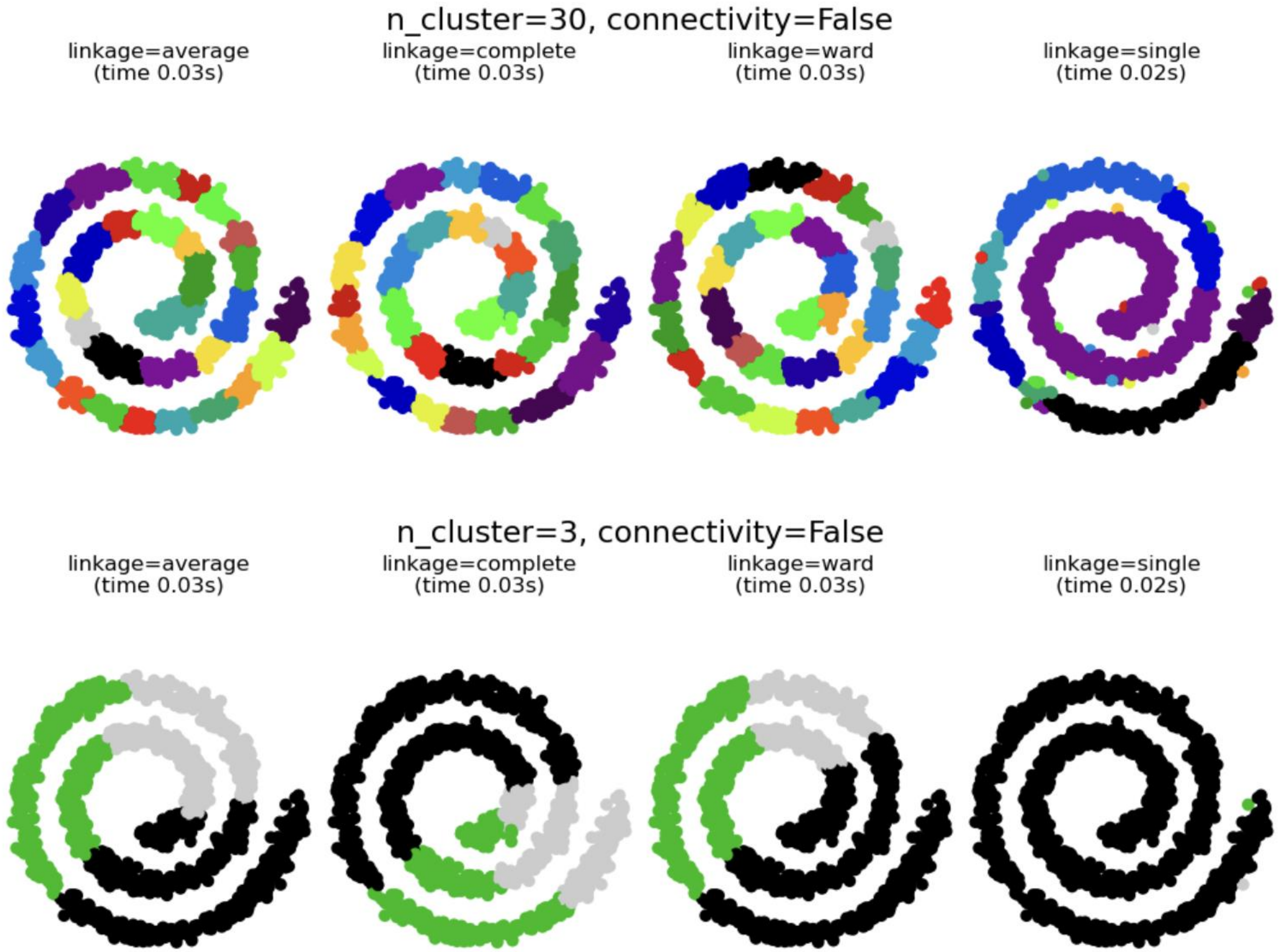
Плюсы:

- Простое в реализации, широкое применение.
- Кластеры имеют адаптивные формы.
- Обеспечивает иерархию кластеров.
- Нет необходимости заранее указывать количество кластеров.

Минусы:

- Могут быть несбалансированные кластеры.
- Все равно придется выбирать количество кластеров или порог.
- Не очень хорошо масштабируется. Время выполнения O(n3).

Результаты кластеризации



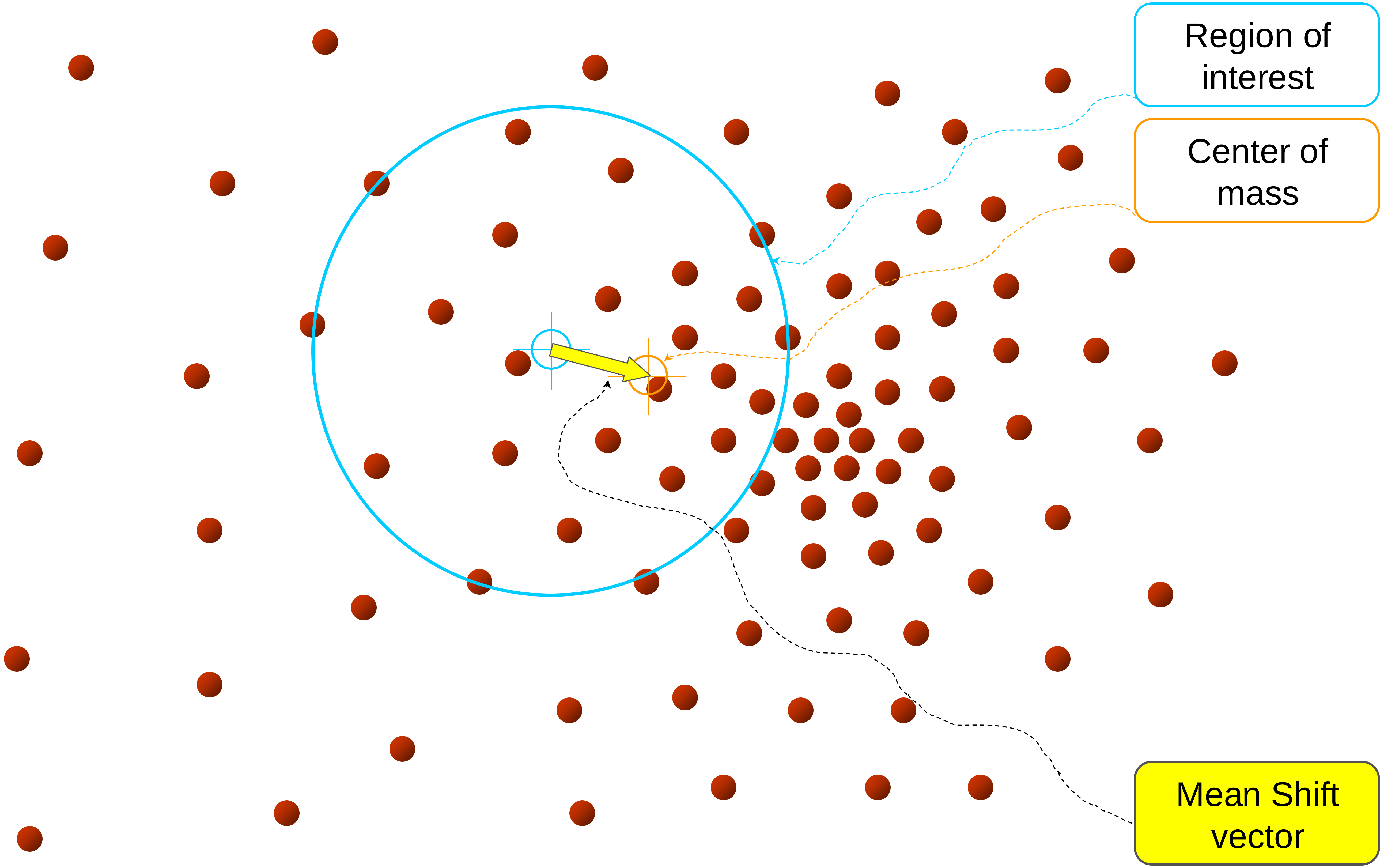
source: scikit-learn

Результаты кластеризации

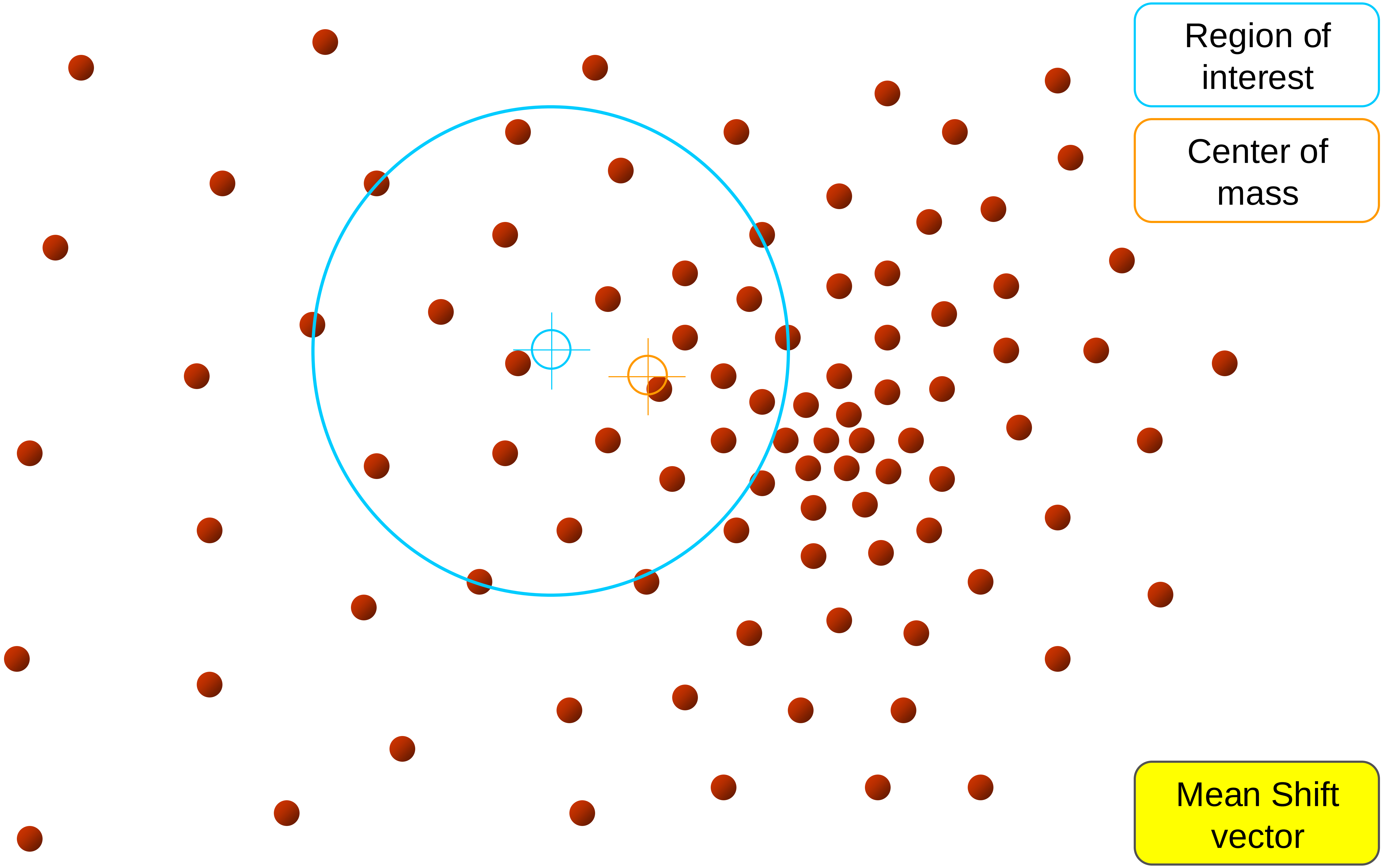
02

Mean-shift clustering

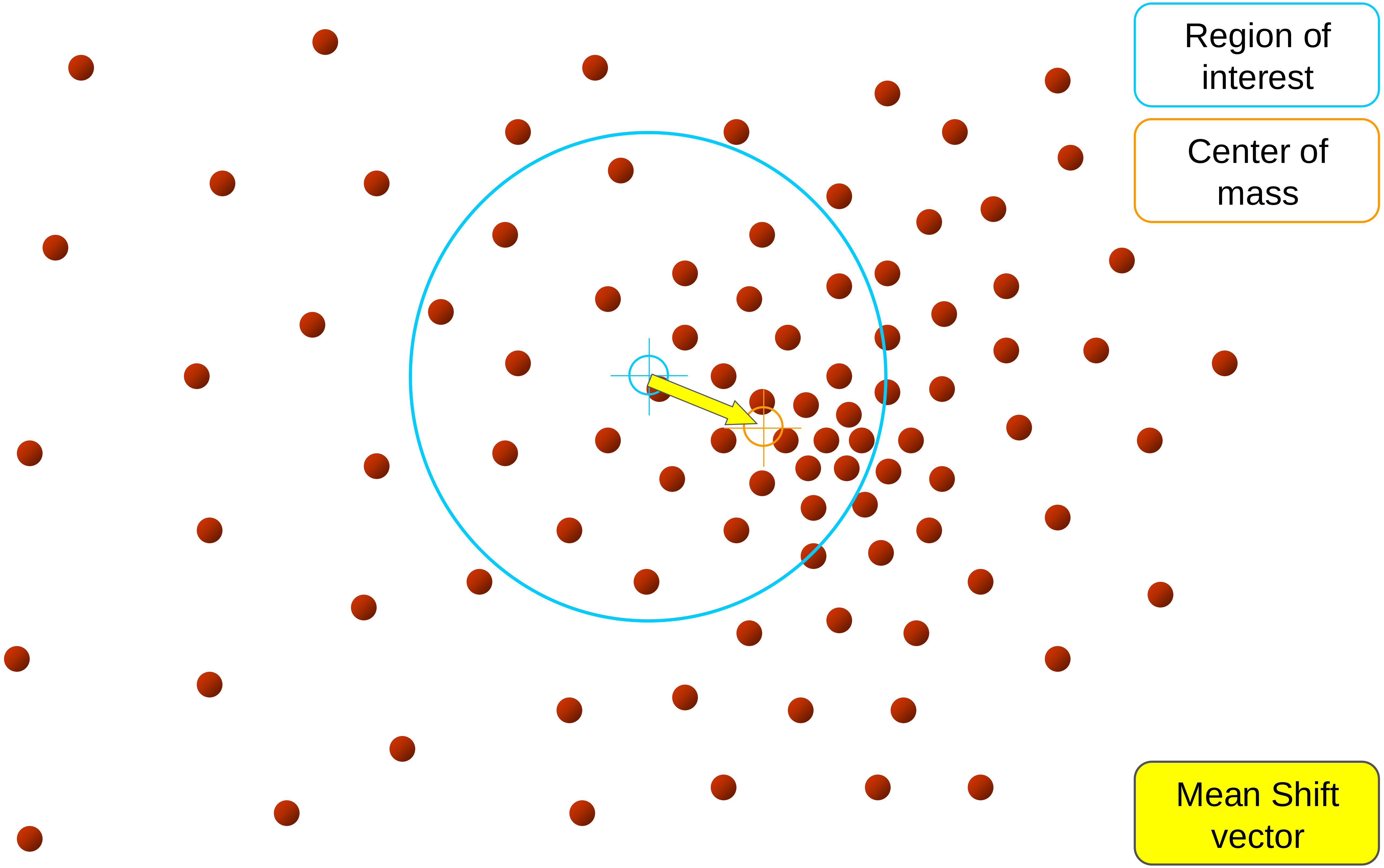
Mean-Shift



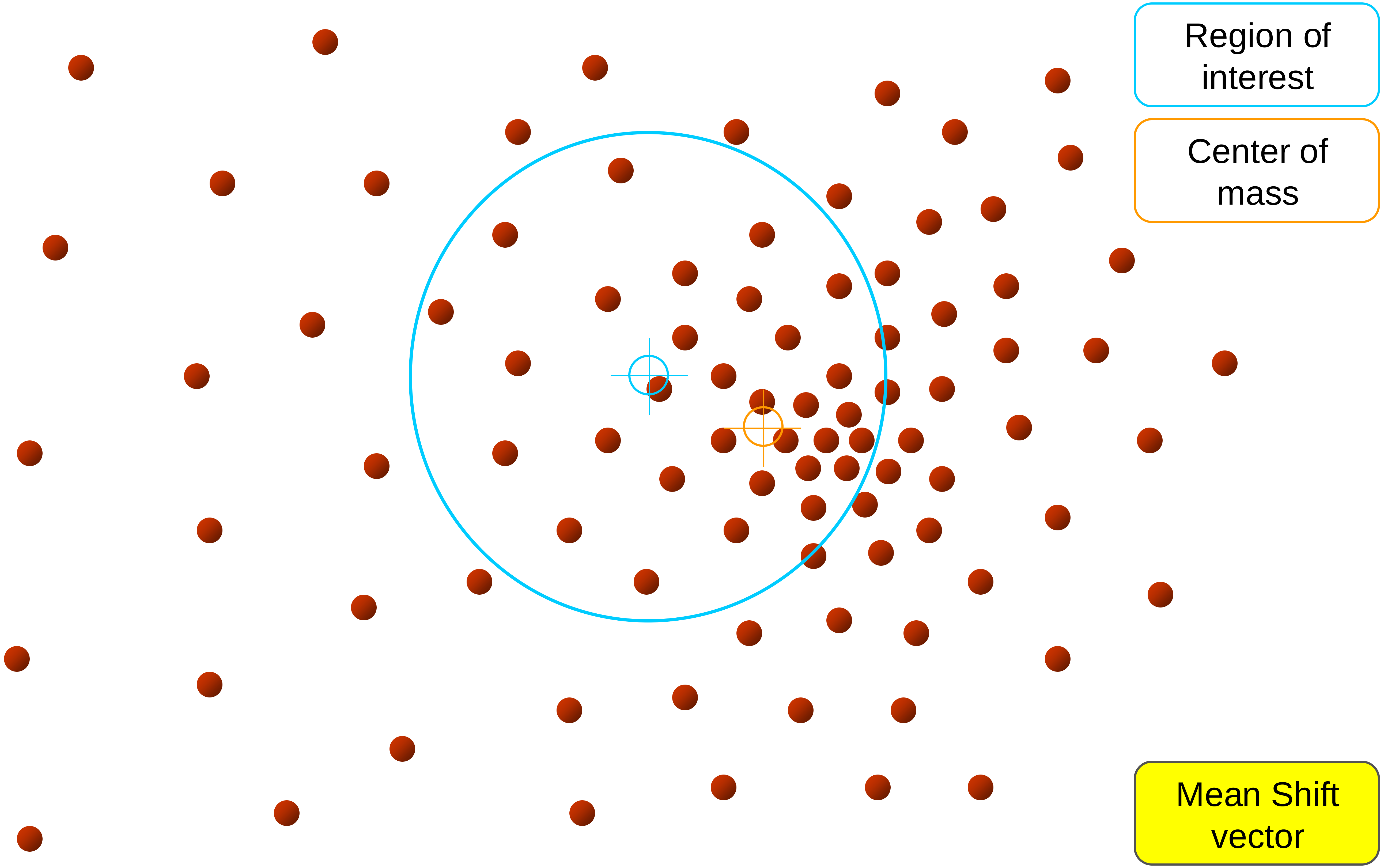
Mean-Shift



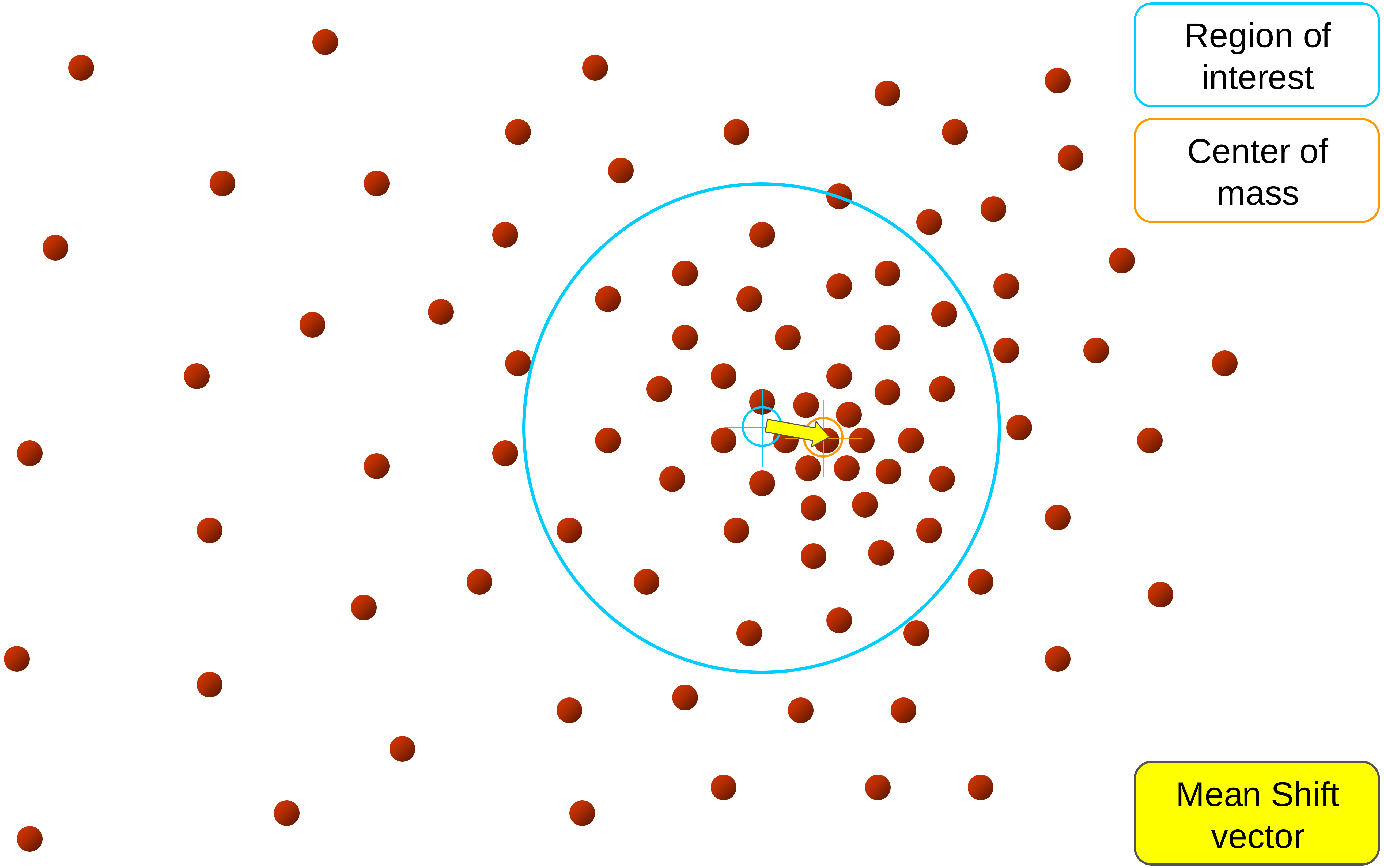
Mean-Shift



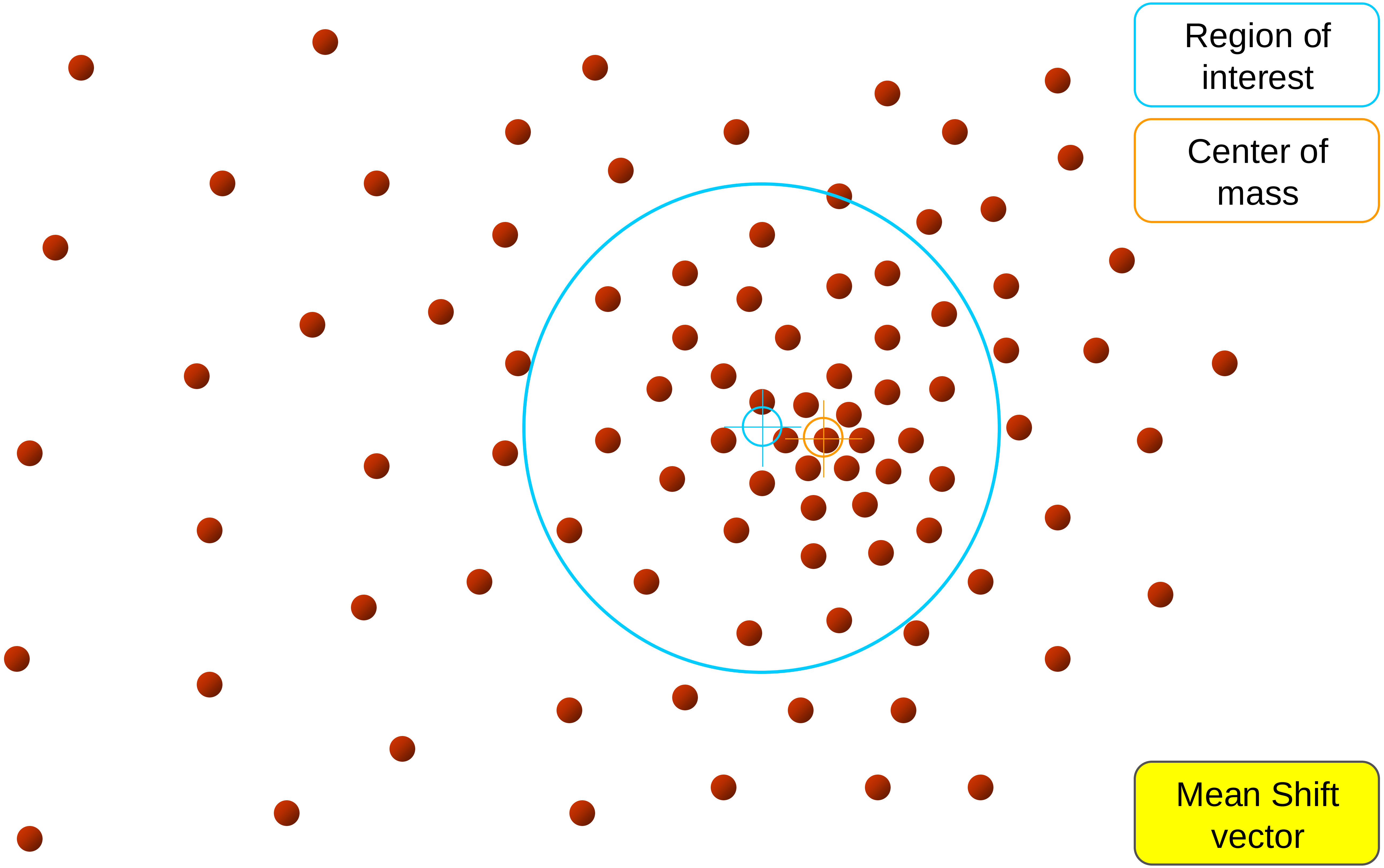
Mean-Shift



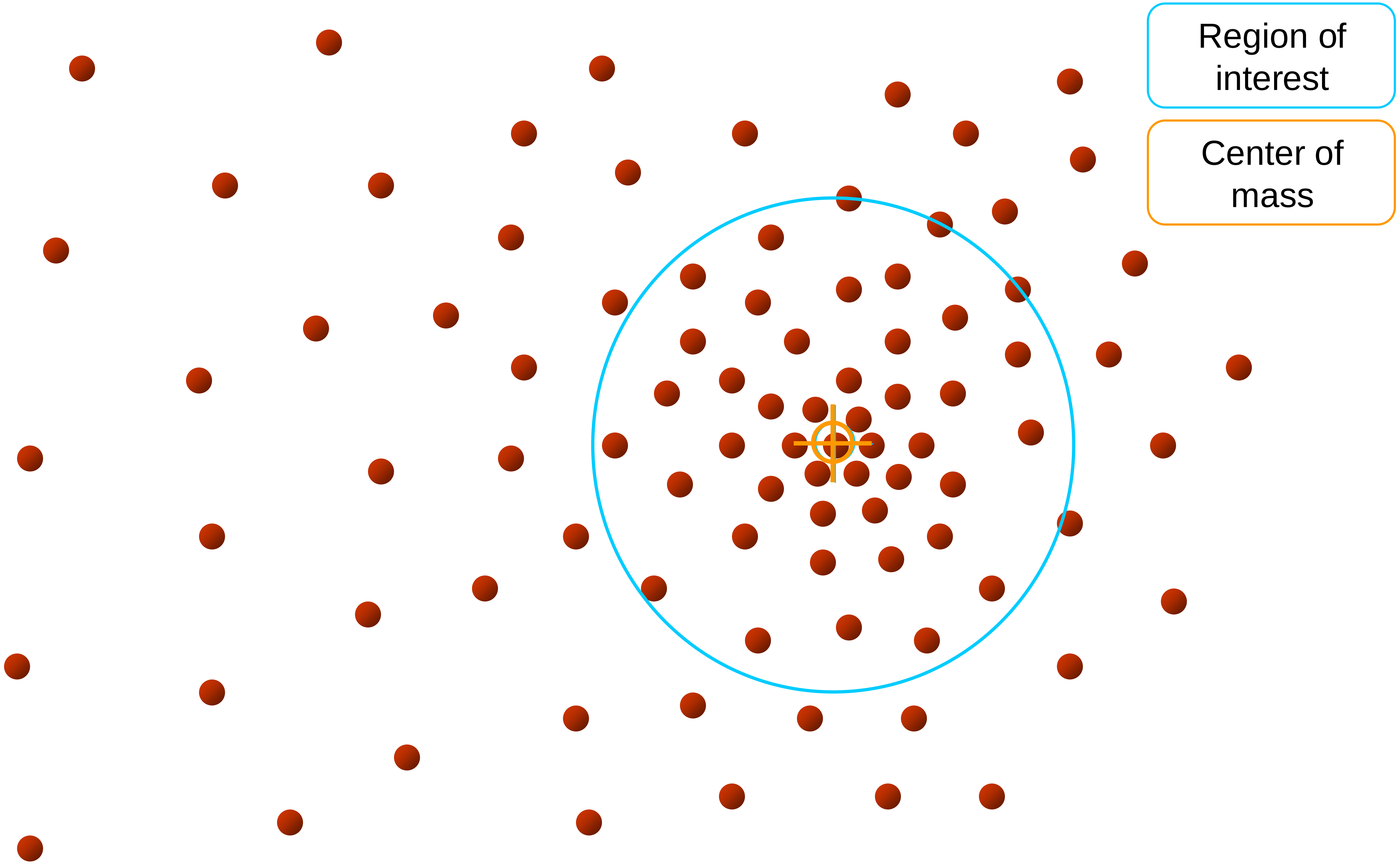
Mean-Shift



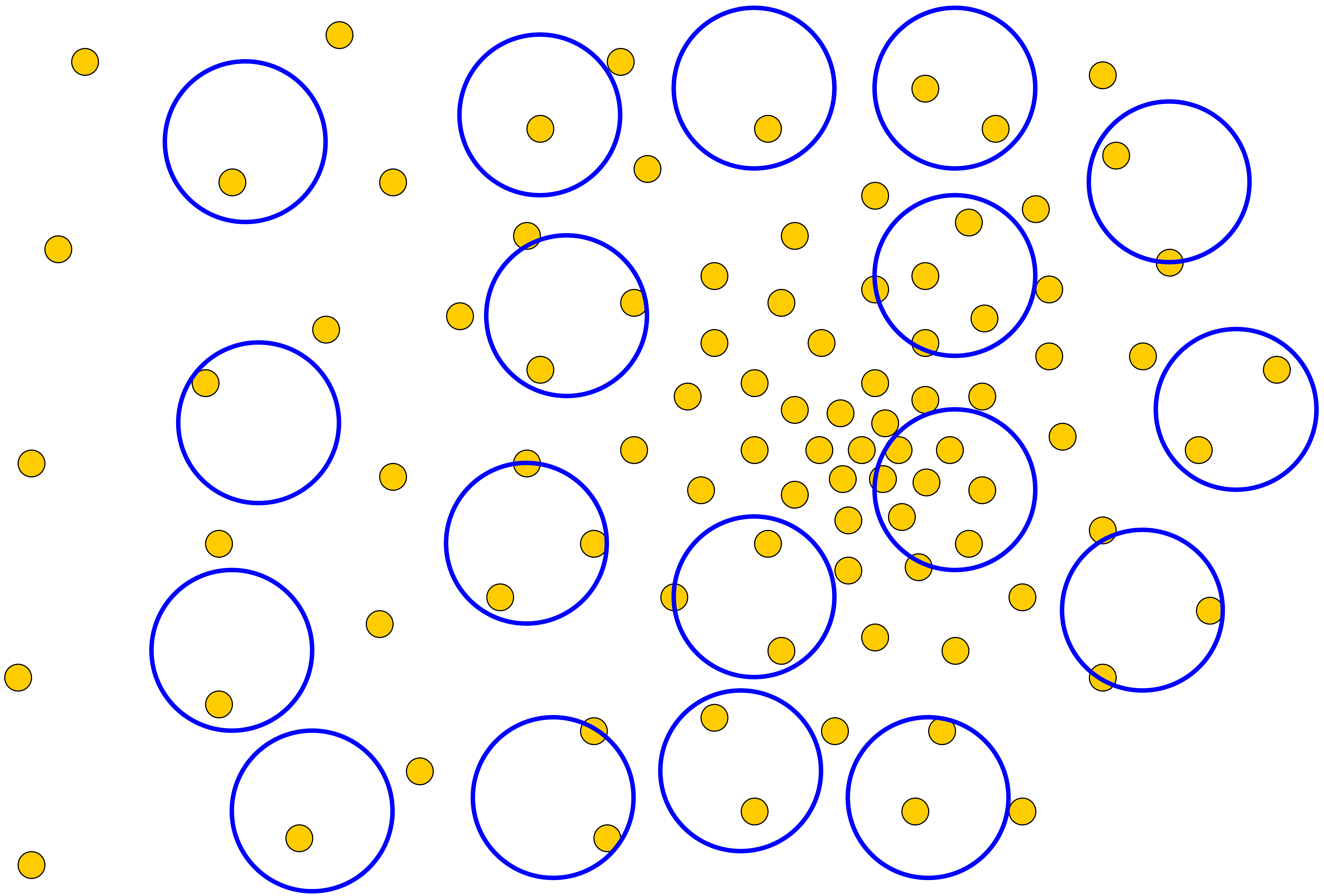
Mean-Shift



Mean-Shift



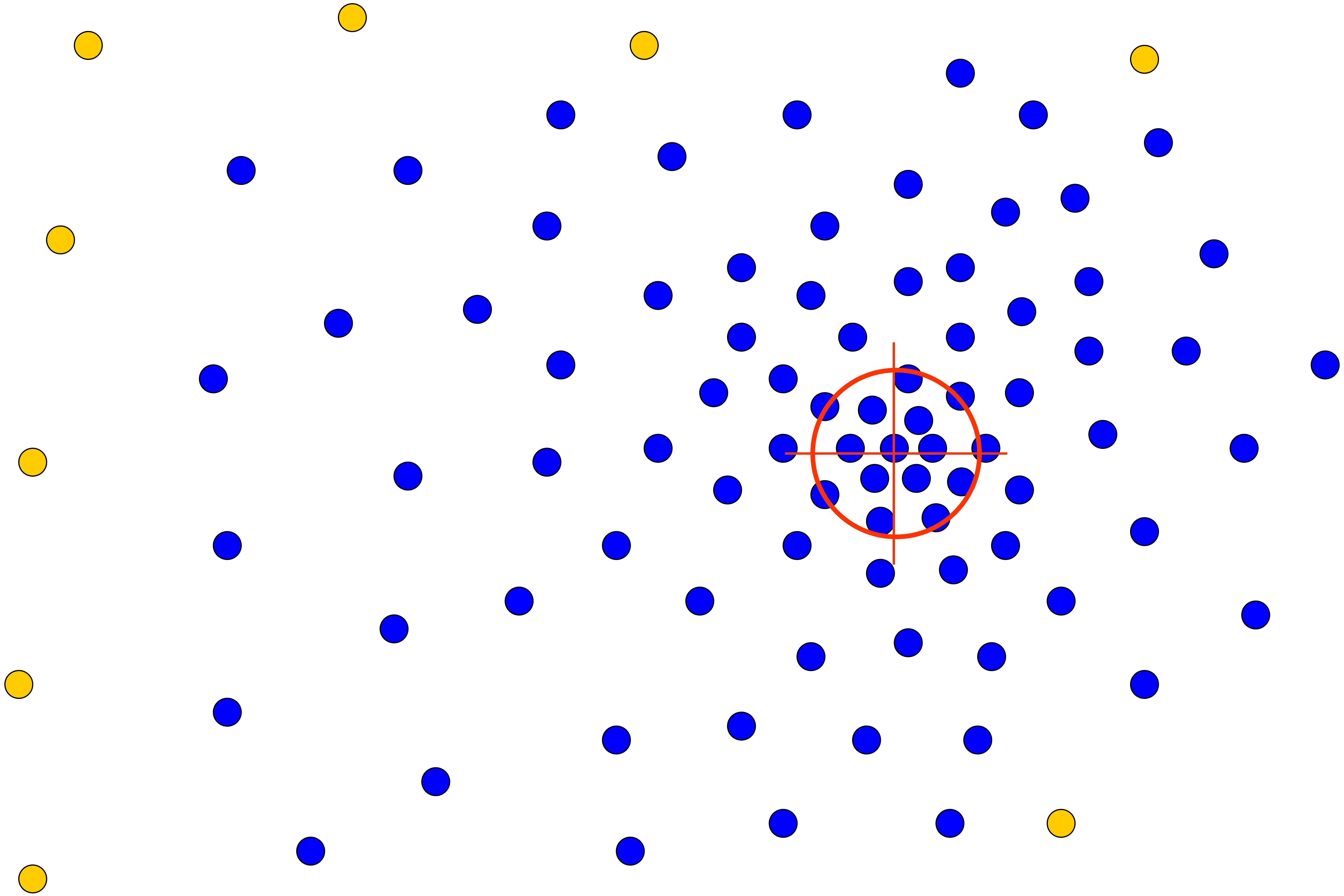
Real Modality Analysis



Tessellate the space with windows

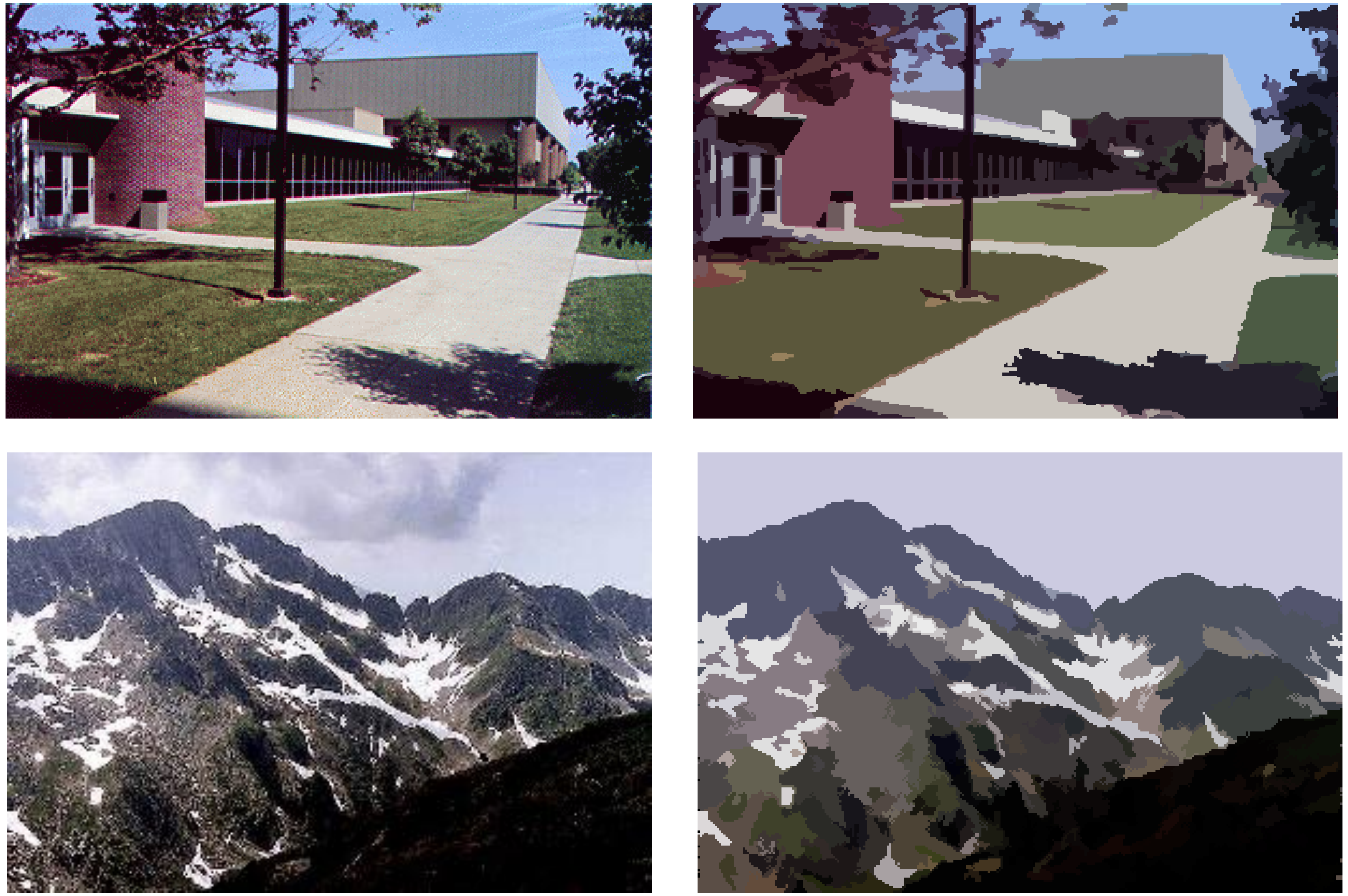
Run the procedure in parallel

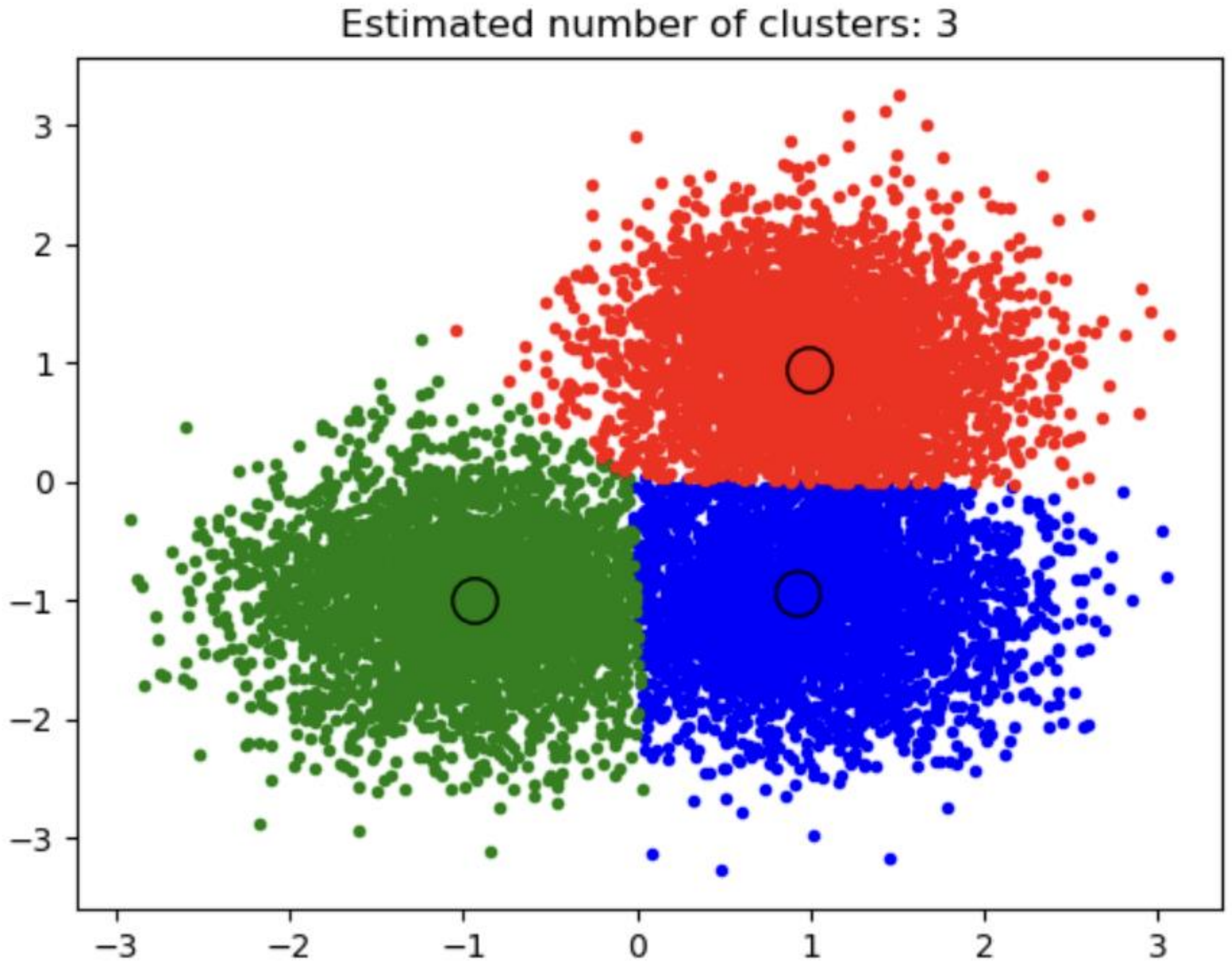
Real Modality Analysis



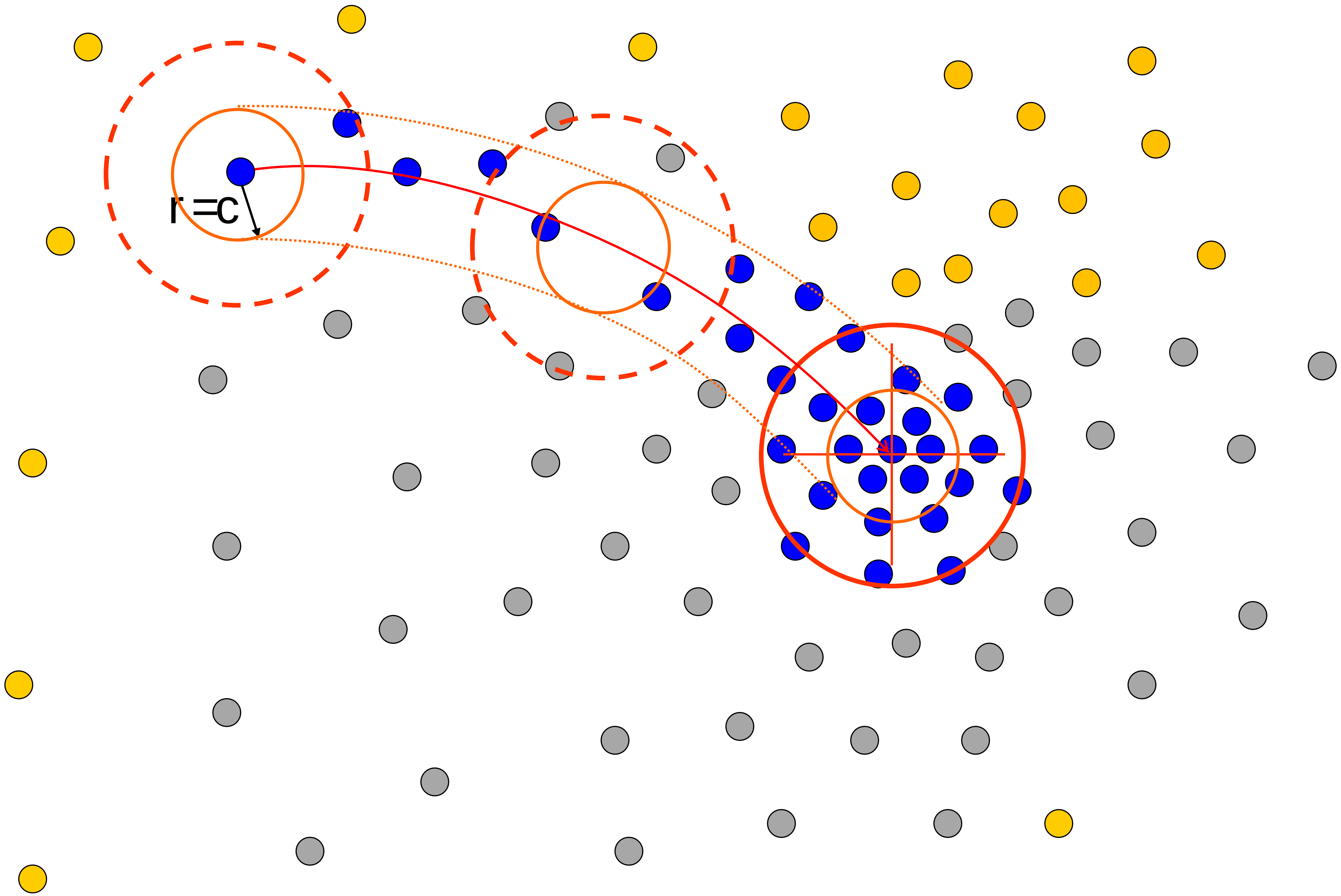
Голубые точки данных перемещались по окнам в одну сторону

Mean-Shift Segmentation Results





Скорость сходимости



2. Присвойте всем точкам в радиусе r/c пути поиска режим -> уменьшить количество точек данных для поиска.

Технические нюансы

Given n data points $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$, the multivariate kernel density estimate using a radially symmetric kernel[1] (e.g., Epanechnikov and Gaussian kernels), $K(\mathbf{x})$, is given by,

$$\hat{f}_K = \frac{1}{nh^d} \sum_{i=1}^{n} K\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_i}{h}\right), \tag{1}$$

where h (termed the *bandwidth* parameter) defines the radius of kernel. The radially symmetric kernel is defined as,

$$K(\mathbf{x}) = c_k k(\|\mathbf{x}\|^2), \tag{2}$$

where c_k represents a normalization constant.

Comaniciu & Meer, 2002

Другие ядра

A kernel is a function that satisfies the following requirements :

1. $\int_{R^d} \phi(x) = 1$

2. $\phi(x) \geq 0$

Some examples of kernels include :

1. Rectangular $\phi(x) = \begin{cases} 1 & a \leq x \leq b \\ 0 & else \end{cases}$

2. Gaussian $\phi(x) = e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$

3. Epanechnikov $\phi(x) = \begin{cases} \frac{3}{4}(1 - x^2) & if\ |x| \leq 1 \\ 0 & else \end{cases}$

Comaniciu & Meer, 2002

Технические нюансы

Взять производную: $\hat{f}_K = \frac{1}{nh^d} \sum_{i=1}^{n} K\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_i}{h}\right)$

$$\nabla \hat{f}(\mathbf{x}) = \underbrace{\frac{2c_{k,d}}{nh^{d+2}} \left[\sum_{i=1}^{n} g\left(\left\|\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_i}{h}\right\|^2\right)\right]}_{\text{term 1}} \underbrace{\left[\frac{\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i g\left(\left\|\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h}\right\|^2\right)}{\sum_{i=1}^{n} g\left(\left\|\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h}\right\|^2\right)} - \mathbf{x}\right]}_{\text{term 2}}, \qquad (3)$$

where $g(x) = -k'(x)$ denotes the derivative of the selected kernel profile.

- Term 1: это пропорционально оценке плотности при x (аналогично уравнению 1 - два слайда назад).
- Term 2: это вектор среднего сдвига, который указывает в направлении максимальной плотности.

Comaniciu & Meer, 2002

Технические нюансы

Наконец, процедура среднего сдвига от заданной точки xt:

1. Компьютер средний вектор сдвига m:

$$\mathbf{m}_{h,G}(\mathbf{x}) = \frac{\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i g\left(\left\|\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h}\right\|^2\right)}{\sum_{i=1}^{n} g\left(\left\|\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h}\right\|^2\right)} - \mathbf{x},$$

2. Переведите окно плотности:

$$\mathbf{x}_i^{t+1} = \mathbf{x}_i^t + \mathbf{m}(\mathbf{x}_i^t).$$

3. Итерируйте шаги 1 и 2 до сходимости.

$$\nabla f(\mathbf{x}_i) = 0.$$

Comaniciu & Meer, 2002

Итоги: Mean-Shift

- **Плюсы:**
  - Общий, независимый от применения инструмент
  - Не содержит моделей, не принимает никакой предшествующей формы (сферической, эллиптической и т.д.) на кластеры данных
  - Только один параметр (размер окна h)
    - h имеет физическое значение (в отличие от k-средних)
  - Находит переменное количество режимов
  - Надежен на прорыв

- **Минусы:**
  - Выход зависит от размера окна
  - Выбор размера окна (полосы пропускания) не тривиален
  - Вычислительно (относительно) дорого (~2 с/изображение)
  - Плохо масштабируется в зависимости от размера художественного пространства

03

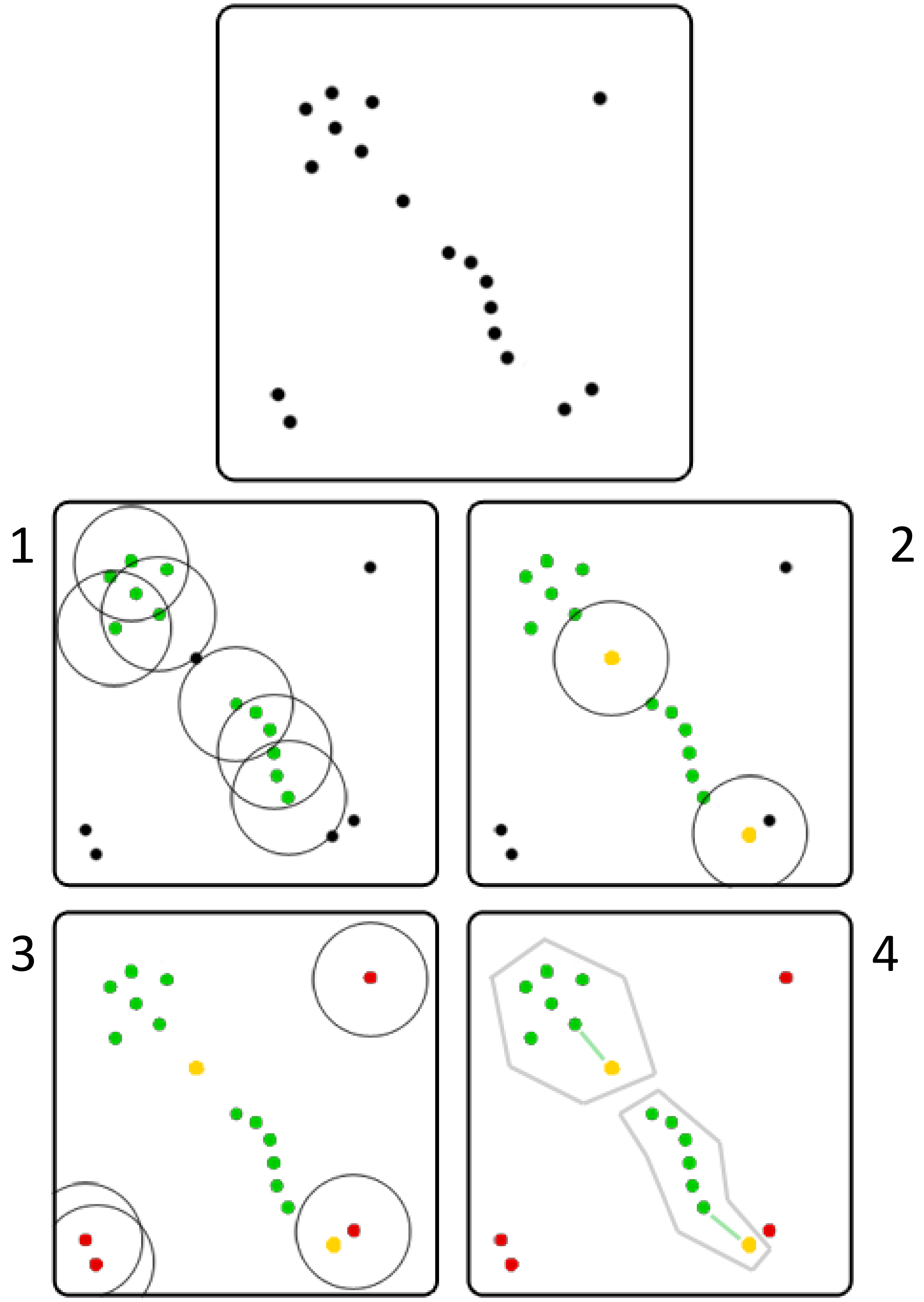
DBSCAN

DBSCAN

Алгоритм на основе оценки плотности объектов

Пусть задана симметричная функция расстояния $\rho(x, y)$, ϵ – радиус окрестности и m – количество соседей.

1. Назовём область $E(x)$: $\forall y: \rho(x, y) \leq \epsilon$
2. Корневой объект степени m – объект в области которого не менее m объектов ($|E(x)| \geq m$)
3. Объект p непосредсвенно плотно-достижим из объекта q, если $p \in E(q)$ и q – корневой объект
4. Объект p плотно-достижим из объекта q, если $\exists p_1, p_2, \dots, p_n, p_1 = q$, $p_n = p: \forall i \in 1 \dots n-1: p_{i+1}$ непосредственно плотно-достижим из p_i

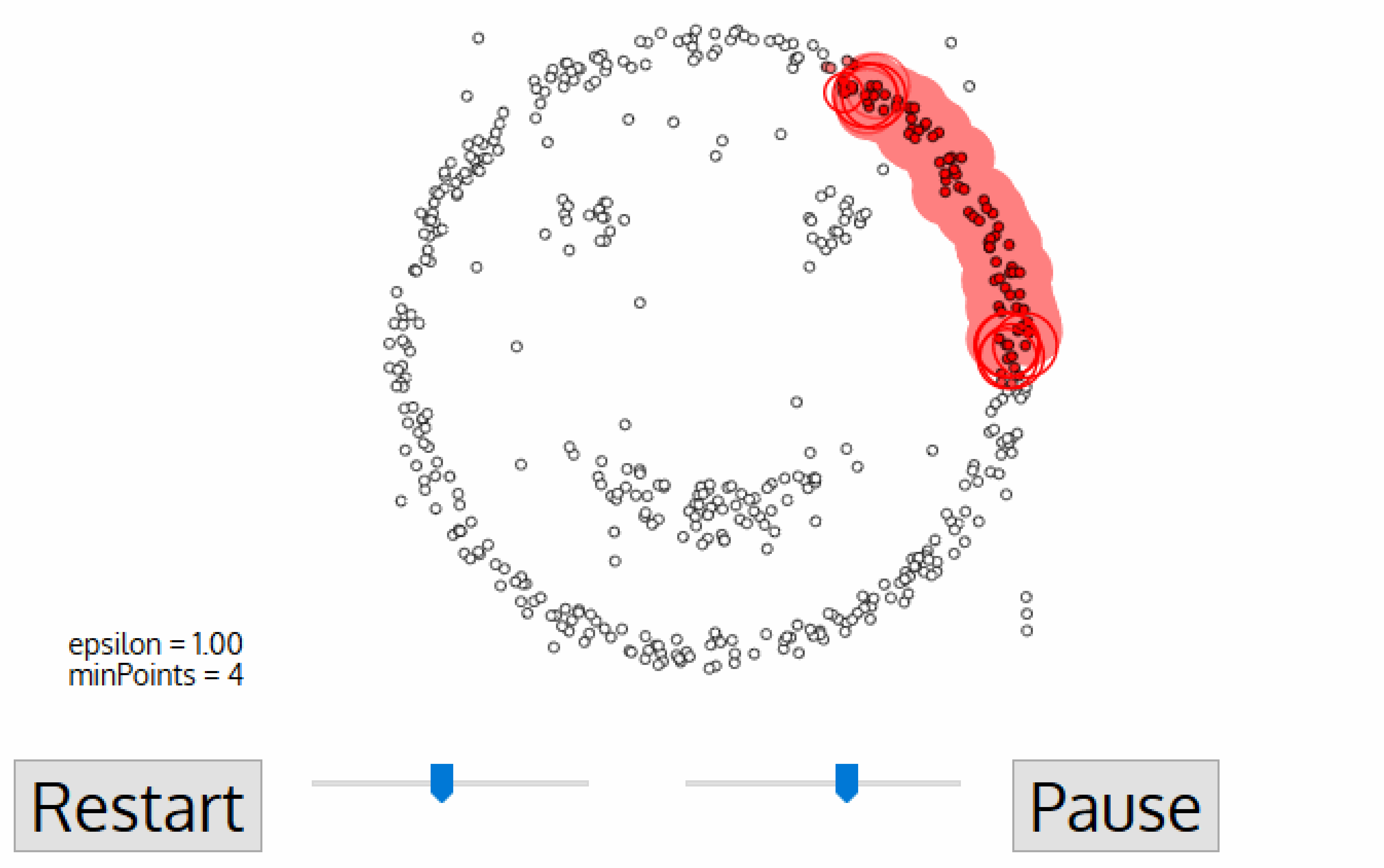


- Core points (зеленые точки)
- Noise points (красные точки)
- Border points (желтые точки)

Выберем какой-нибудь корневой объект p из датасета, пометим его и поместим всех его непосредственно плотно-достижимых соседей в список обхода. Теперь для каждого q из списка: пометим эту точку, и, если она тоже корневая, добавим всех её соседей в список обхода.

DBSCAN

Визуализация сходимости DBSCAN



[The 5 Clustering Algorithms Data Scientists Need to Know]

DBSCAN

Используйте DBSCAN, когда

- Заранее известна функция близости, симметричная, желательно, не очень сложная. KD-Tree оптимизация часто работает только с евклидовым расстоянием.
- Вы ожидаете увидеть сгустки данных экзотической формы: вложенные и аномальные кластеры, складки малой размерности.
- Плотность границ между сгустками меньше плотности наименее плотного кластера. Лучше если кластеры вовсе отделены друг от друга.
- Сложность элементов датасета значения не имеет. Однако их должно быть достаточно, чтобы не возникало сильных разрывов в плотности (см. предыдущий пункт).
- Количество элементов в кластере может варьироваться сколь угодно.
- Количество выбросов значения не имеет (в разумных пределах), если они рассеяны по большому объёму.
- Количество кластеров значения не имеет.

04

t-SNE

t-SNE

Алгоритм снижения размерности и визуализации многомерных данных

Задача построить отображение распределение исходных многомерных данных p в 2D/3D распределение q так, чтобы отображение сохраняло пропорцию расположение объектов в распределении

1. Преобразование многомерной евклидовой дистанции **для исходных данных** в условные вероятности, отражающие сходство точек:

$$p_{j|i} = \frac{exp(- \parallel x_i - x_j \parallel^2 / 2\sigma_i^2)}{\sum_{k \neq i} exp(- \parallel x_i - x_k \parallel^2 / 2\sigma_i^2)}$$

Дисперсия для каждой точки σ_i определяют из минимума дисперсии:

$$Perp(P_i) = 2^{H(P_i)} \quad H(P_i) = - \sum_j p_{j|i} log_2 p_{j|i}$$

2. Преобразование многомерной евклидовой дистанции **для точек отображения** в условные вероятности, отражающие сходство точек:

$$q_{j|i} = \frac{exp(- \parallel y_i - y_j \parallel^2)}{\sum_{k \neq i} exp(- \parallel y_i - y_k \parallel^2)}$$

3. **Оптимизационная задача** – сходство двух распределение по мере Кульбака-Лейбнера:

$$Cost = \sum_i KL(P_i \parallel Q_i) = \sum_i \sum_j p_{j|i} log \frac{p_{j|i}}{q_{j|i}} \qquad \frac{\partial Cost}{\partial y_i} = 2 \sum_j (p_{j|i} - q_{j|i} + p_{i|j} - q_{i|j})(y_i - y_j)$$

4. **Градиентный спуск** с моментом:

$$Y^{(t)} = Y^{(t-1)} + \eta \frac{\partial Cost}{\partial Y} + \alpha(t) \left(Y^{(t-1)} - Y^{(t-2)} \right),$$

Преобразования для улучшение сходимости (t-SNE):

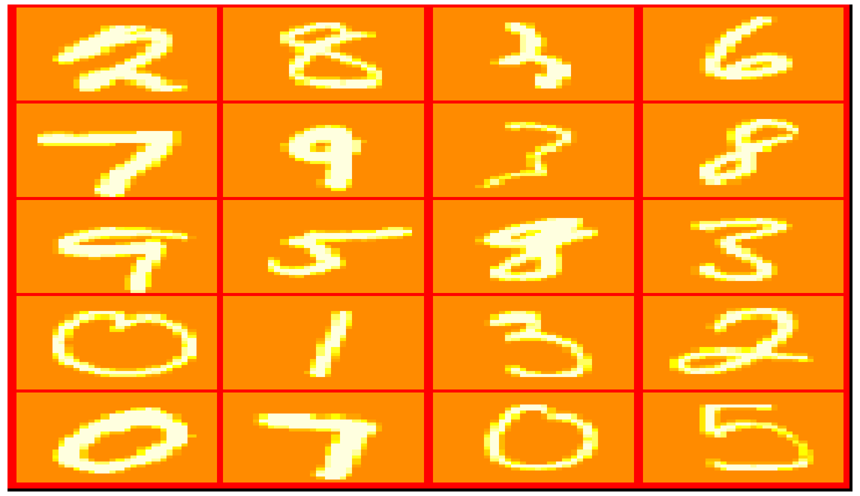
$$q_{ij} = \frac{(1 + \parallel y_i - y_j \parallel^2)^{-1}}{\sum_{k \neq l} (1 + \parallel y_k - y_l \parallel^2)^{-1}} \qquad p_{ij} = \frac{p_{j|i} + p_{i|j}}{2n},$$

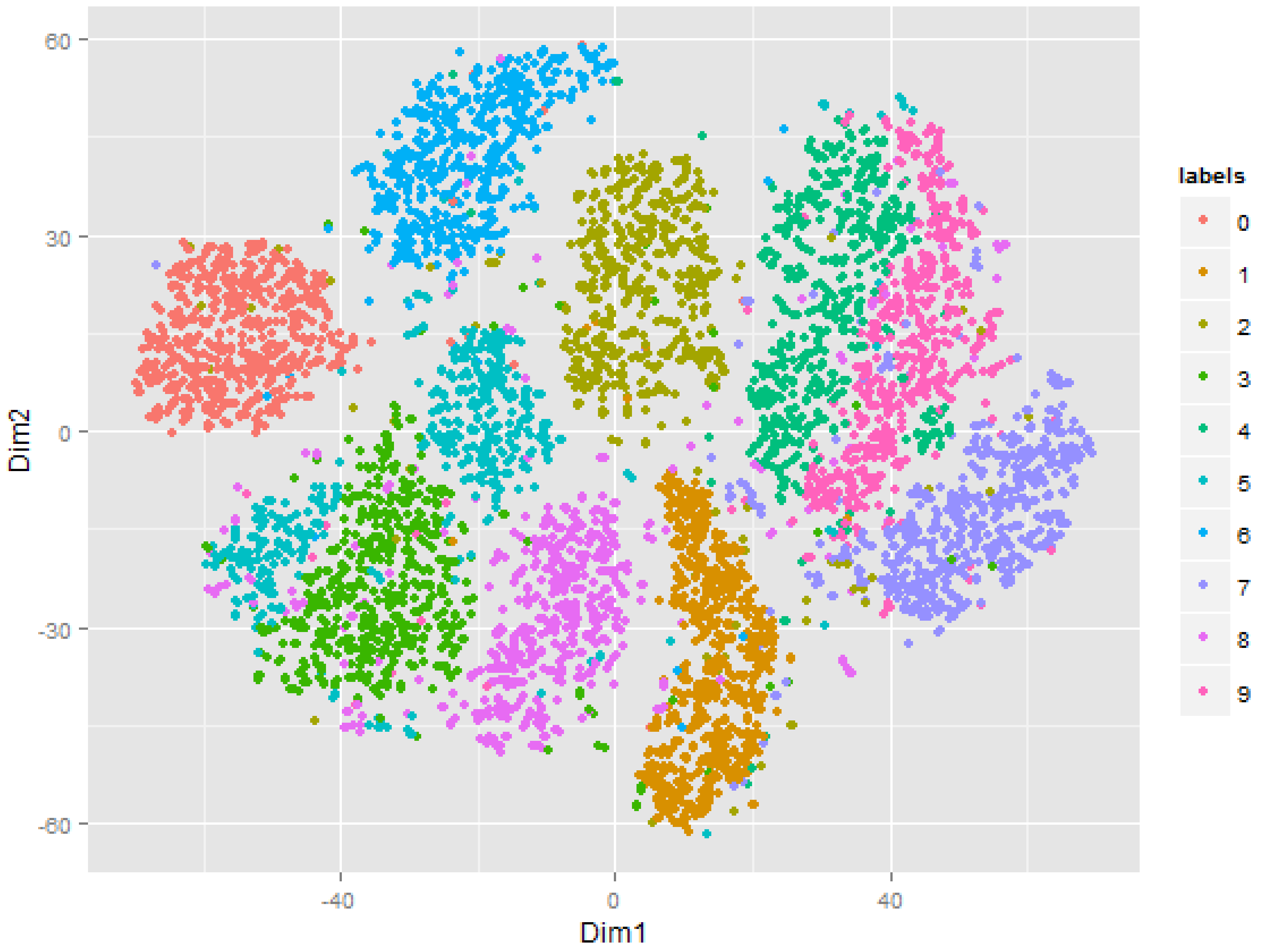
$$Cost = KL(P \parallel Q) = \sum_i \sum_j p_{ij} log \frac{p_{ij}}{q_{ij}},$$

$$\frac{\partial Cost}{\partial y_i} = 4 \sum_j (p_{ij} - q_{ij})(y_i - y_j)(1 + \parallel y_i - y_j \parallel^2)^{-1}$$

t-SNE

Визуализация распределения рукописный цифр (R^{64}) на плоскости (R^2)





Больше примеров в статье: [How to Use t-SNE Effectively]

Место для ваших вопросов