

Spektralno grupiranje

Špela Ognjanović in Žiga Trojer

25. november 2018

1 Navodilo

Implement spectral clustering algorithms that use several types of Laplace matrices. Consider unnormalized spectral clustering, normalized spectral clustering according to Shi and Malik (2000), and normalized spectral clustering according to Ng, Jordan, and Weiss (2002). Generate various data sets or find some examples of real world data and use different types of similarity graphs such as complete graph, the ϵ -neighborhood graph and k-nearest neighbor graph. Compare the results. Use different methods for determining the optimal number of clusters.

2 Kratek opis

Imamo bazo podatkov, naš cilj je te podatke razvrstiti v skupine oz. grupe s podobnimi lastnostmi. Podatke lahko prikažemo z grafi, grafe pa z matrikami. Eden takih primerov je **matrika sosednosti**, njena razsežnost je $n \times n$. Element v j -tem stolpcu i -te vrstice pove številu povezav, ki povezujejo točki i in j .

Predstavili bomo, kako lahko na različne načine pogrupiramo podatke, podane z množico točk x_1, x_2, \dots, x_n z utežmi $w_{i,j} \geq 0$, za $\forall i, j = 1, \dots, n$ ali razdaljami $d_{i,j} \geq 0$, za $\forall i, j = 1, \dots, n$. Če o podatkih nimamo veliko informacij, je najlažje, če jih predstavimo z grafom $G = (V, E)$. Vsako vozlišče v_i predstavlja en podatek x_i . Potrebujem matriko, ki določa, kako blizu skupaj sta vozlišči v_i in v_j . To matriko imenujemo podobna matrika in jo označimo s S . Dva vozlišča povežemo, če zadoščata danemu pogoju in to ponazorimo v podobnem grafu. Želimo, da imajo vozlišča v istih skupinah čim manjšo utežensot, kar pomeni da imajo podatki podobne lastnosti, sicer velja obratno. Spodaj so opisani trije primeri podobnih grafov, s katerimi bomo operirali.

Graf ϵ -ske okolice

Pri ϵ -ski okolici grafa povežemo paroma vse točke, katerih razdalja je manjša od ϵ . Največkrat je obravnavan kot graf brez uteži, saj nam utež predstavlja predpisana razdalja ϵ .

Graf k najbližjih sosedov

Cilj je, da povežemo vozlišče v_i z njegovimi k najbližjimi sosedi. Dobimo, da je v_i med k najbližjimi sosedi od v_j ter v_j med k najbližjimi sosedi od v_i .

Poln graf

Je graf, kjer so vsa vozlišča med seboj povezana.

Vrnimo se na podobno matriko S . Njene elemente izračunamo s pomočjo neke primerne funkcije. Primer take funkcije je Gauss-Karnelova funkcija, ki nam izračuna oddaljenost dveh vozlišč v_i in v_j . Formula za izračun je:

$$s(v_i, v_j) = \exp(-\|v_i - v_j\|^2 / (2\delta^2)),$$

pri čemer parameter δ opiše razdaljo med vozlišči, podobno kot ϵ pri grafu epsilonske okolice. Vrednosti $s_{i,j}$, izračunane po tej meri, so na intervalu $[0, 1]$. Povejo nam, da manjša kot je vrednost, bolj sta točki oddaljeni. Če je vrednost

0, pomeni, da sta vozlišči daleč narazen. Matrika S je simetrična, saj za toliko kot je vozlišče v_i oddaljena od vozlišča v_j , je tudi vozlišče v_j oddaljena od vozlišča v_i . Očitno je, da so diagonalni elementi enaki 1.

Naslednji korak je izračun **Laplaceove matrike**. Privzamemo, da imamo utežen, neusmerjen graf G . Uteži so prikazane v matriki W , $w_{i,j} \geq 0$, za $\forall i, j = 1, \dots, n$. Definirajmo stopnjo vozlišča $v_i \in V$:

$$d_i = \sum_{j=1}^n w_{i,j}.$$

Definiramo matriko stopenj D kot diagonalno matriko s stopnjami vozlišč d_1, \dots, d_n po diagonalni.

Glede na normalizirane in nenormalizirane ločimo dva primera Laplaceovih matrik:

1. Nenormalizirana Laplaceova matrika, ki se izračuna po formuli $L = D - W$, kjer je W matrika uteži in D diagonalna matrika. Njene lastnosti so:
 - i) Je simetrična, pozitivno semi-definitna.
 - ii) Njena najmanjša lastna vrednost je 0, njen pripadajoč lastni vektor je konstanten vektor $\mathbb{1}$.
 - iii) Ima n nenegativnih, realni lastnih vrednosti $0 \leq \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n$.
 - iv) Za vsak $f \in \mathbb{R}^n$ je

$$f'Lf = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n w_{i,j} (f_i - f_j)^2.$$

2. Normalizirana Laplaceova matrika sta v bistvu dve matriki, ki sta med seboj povezani, prva je simetrična (zato oznaka L_{sym}) in se izračuna $L_{sym} = I - D^{-\frac{1}{2}}WD^{-\frac{1}{2}}$, druga pa je povezana z naključnim sprehodom (random walk), izračuna se po formuli $L_{rw} = I - D^{-1}W$. Njene lastnosti so:

- i) Sta pozitivno semi-definitni in imata n nenegativnih, realnih lastnih vrednosti.
- ii) 0 je lastna vrednost matrike L_{rw} , s pripadajočim konstantnim vektorjem $\mathbb{1}$. 0 je tudi lastna vrednost matrike L_{sym} , s pripadajočim lastnim vektorjem $D^{\frac{1}{2}}\mathbb{1}$.
- iii) λ je lastna vrednost matrike L_{rw} z lastnim vektorjem u , natanko tedaj, če u reši sistem $Lu = \lambda Du$.
- iv) λ je lastna vrednost matrike L_{rw} z lastnim vektorjem u , natanko tedaj, če je λ lastna vrednost matrike L_{sym} z lastnim vektorjem $w = D^{\frac{1}{2}}u$.
- v) Za vsak $f \in \mathbb{R}^n$ je

$$f'L_{sym}f = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n w_{i,j} \left(\frac{f_i}{\sqrt{d_i}} - \frac{f_j}{\sqrt{d_j}} \right)^2.$$

Pri normalizirani in nenormalizirani Laplaceovi matriki je večkratnost k lastne vrednosti 0 enaka številu povezanih komponent A_1, \dots, A_k .

3 Načrt za reševanje

Prednost algoritma spectral clustering je, da sestoji na preprosti linearni algebr. Imamo n točk x_1, \dots, x_n , ki lahko ponazarjajo poljubne objekte. Merimo paroma podobne $s_{i,j} = s(x_i, x_j)$, glede na neko simetrično, nenegativno funkcijo (mi uporabimo Gaussian Kernalovo funkcijo). Tako označimo pripadajočo podobno matriko $S = (s_{i,j})_{i,j=1,\dots,n}$. Ločimo:

- a) Nenormaliziran algoritem.
- b) Normaliziran algoritem (Shi in Malik).
- c) Normaliziran algoritem (Ng, Jordan in Weiss).

Pri vseh se reševanja lotimo na enak način. Vhodni podatek je podobna matrika $S \in \mathbb{R}^{n \times n}$, s k označimo število grup, ki jih želimo skonstruirati.

- Skonstruiramo enega od podobnih grafov, opisanega v prejšnjem razdelku. Naj bo W njegova utežena matrika sosednosti.
- Po formulah izračunamo pripadaločo normalizirano/nenormalizirano Laplaceovo matriko L .
- Poračunam prvih k lastnih vektorjev u_1, \dots, u_k matrik L , L_{sym} in L_{rw} ⁱ.
- V matriko $U \in \mathbb{R}^{n \times k}$ zložimo k lastnih vektorjev v stolpce, po padajočem vrstnem redu glede na pripadajočo lastno vrednost.
- Sestavimo matriko $T \in \mathbb{R}^{n \times k}$, kjer so elementi $t_{ij} = u_{ij} / (\sum_k u_{ik}^2)^{1/2}$.ⁱⁱ
- Za $i = 1, \dots, n$ naj bo $y_i \in \mathbb{R}^k$ vektor enak i -ti vrstici matrike U , oziroma matrike T .
- Z algoritmom k -means pogrupiramo točke $(y_i)_{i=1,\dots,n}$ v grupe C_1, \dots, C_k .

Izhod algoritma: grupe (clusters) A_1, \dots, A_k , kjer je $A_i = \{j | y_j \in C_i\}$.

Glavna stvar, ki smo jo naredili je, da smo podatke x_i prevedli na $y_i \in \mathbb{R}^k$ in jih tako lažje pogrupirali. S pomočjo lastnih vrednosti Laplaceove matrike lahko izračunamo tudi optimalen k , oziroma optimalno število grup, ki bi jih naj algoritem skonstruiral glede na dano množico podatkov. To naredimo tako, da lastne vrednosti po naraščajočem vrstnem redu upodobimo s točkastim grafom. Optimalno število grup lahko kar odčitamo z grafa - iščemo prvi največji preskos lastne vrednosti (eigengap).

4 Primeri in uporaba

Uporaba algoritma je zelo razširjena v podatkovni analizi, tudi na vseh naravoslovnih področjih, saj vedno kadar se lotimo nekega problema, kjer so baze podatkov, poskušamo dobiti prvi vtis tako, da pogledamo skupne lastnosti. S pomočjo tega algoritma dobimo podatke dobro posortirane in posledično boljši vtis.

ⁱPo trditvi *iii*) namesto prvih k lastnih vektorjev problema $Lu = \lambda Du$, poračunam prvih k lastnih vektorjev matrike L_{rw} .

ⁱⁱza normaliziran algoritem; Ng, Jordan in Weiss

Podatke smo generirali z uporabo knjižnice *mlbench*: Machine Learning Benchmark Problems. Zgenerirali smo dva tipa podatkov:

1. Spirala: točke so razporejene v dve spirali, dodan je šum oziroma odstopanje. Ta tip podatkov predstavlja enakomerno goste podatke.
2. Smejko: točke so razporejene tako, da tvorijo dvojne oči, nos in usta. Ta tip podatkov predstavlja neenakomerno goste podatke (točke, ki tvorijo oči in nos so zelo blizu skupaj, medtem ko so točke, ki tvorijo usta, bolj narazen).

Za tretji primer smo algoritem izvedli na črno-beli sliki, ki smo jo za hitrejšo delovanje algoritma poenostavili (zmanjšali število pikslov).

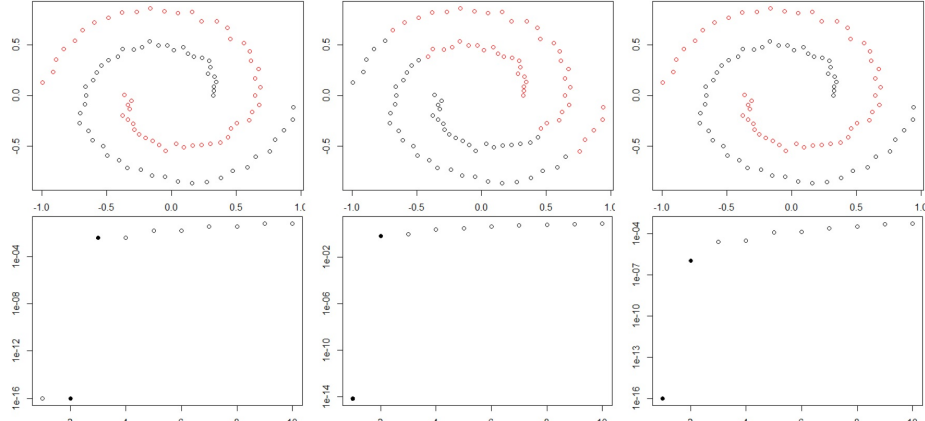
Na Slika 1, Slika 2, Slika 3 so prikazani rezultati algoritma na spirali. Opazimo, da podatke najboljšo pogrupira algoritem, ki uporablja graf k -najbližjih sosedov. Za k smo izbrali 3; povezava do treh najbližjih sosedov. Algoritem poveže celotno komponento, ki se drži skupaj. Graf ϵ -ske okolice poveže točke, ki so za $\epsilon=0.4$ oddaljene. Na tem primeru je očitno, da je ta izbira grafa slaba, saj se povežejo točke, ki so iz različnih komponent - enakomerno razporejeni podatki. Za poln graf smo izbrali $\delta^2 = 0.01$ (poskušanje), algoritem je lepo povezal komponente, saj je za okolico točke gledal bolj lokalno. Čeprav je pri Slika 1 največji razpon med lastnimi vrednostmi pri 1, nam je graf lepo pogrupiral podatke v dve grupi. Opazi se razlika med prvim in drugima dvema algormoma, saj druga dva bolj natančno poračunata število grup oziroma število clustrov. Na Slika 4, Slika 5, Slika 6 so prikazani rezultati algoritma na smejkotu. Najboljše rezultate vrne algoritem, ki uporablja ϵ -sko okolico - ker so podatki neenakomerno razporejeni in je med grupami podatkov dovolj prostora, padejo v ϵ -sko okolico ravno točke iz grup. Tukaj dobro deluje tudi algoritem s polnim grafom - v prvem in zadnjem algoritmu je izbira grup identična.

Iz testnih primerov lahko sklepamo naslednje:

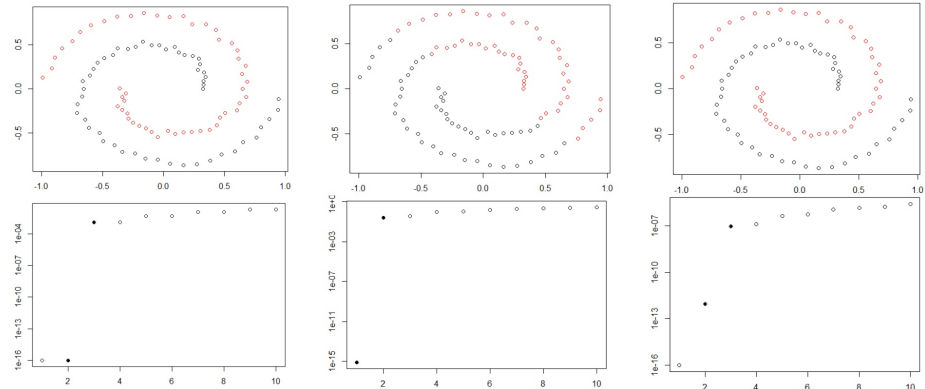
1. Algoritem z grafom k -najbližjih sosedov je dobro uporabiti tam, kjer so podatki enakomerno razporejeni. Težava je pri izbiri števila sosedov, saj nimamo nasvetov, kako v splošnem določiti to število.
2. Algoritem z grafom ϵ -ske okolice je dobro uporabiti tam, kjer so podatki neenakomerno razporejeni. Zelo dobro bo delal, ko bodo podatki že malo pogrupirani. Tu je spet težava, kako določiti optimalen ϵ , saj so rezultati že za majhna odstopanja precej drugačni.
3. Algoritem z polnim grafom pa je dobro uporabiti, ko uporabljamo funkcijo sosednosti, ki modelira lokalno sosednost - npr. Gauss-Kernell. Če imamo tako funkcijo, algoritem deluje dobro v obeh primerih, spet pa je težava izbire prave vrednosti δ .

Za konec pa smo algoritem poskusili na malo bolj zahtevnem primeru. Zanimalo nas je, kako spektralno grupiranje deluje na slikah - prepoznavanje objektov. Izbrali smo črno-belo sliko in jo pretvorili v matriko, na kateri smo izvedli nenormalizirano spektralno grupiranje z $\delta^2 = 0.01$ (v povezavi z varianco podatkov). Da smo prišli do željenega rezultata, smo morali malo eksperimentirati s parametri. Z rezultatom smo zadovoljni, saj je algoritem zelo dobro ločil objekt od ostalega.

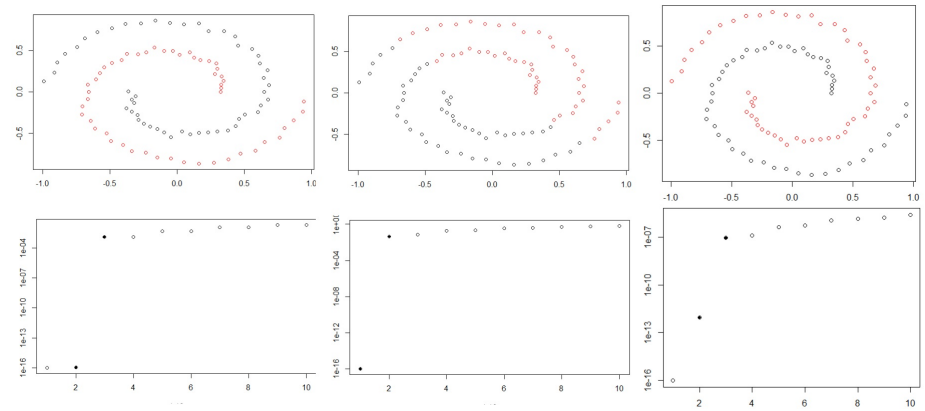
Slika 1: Nenormaliziran algoritem: graf 3-najbližjih sosedov, graf ϵ -ske okolice ($\epsilon = 0.4$), poln graf ($\delta^2=0.01$)



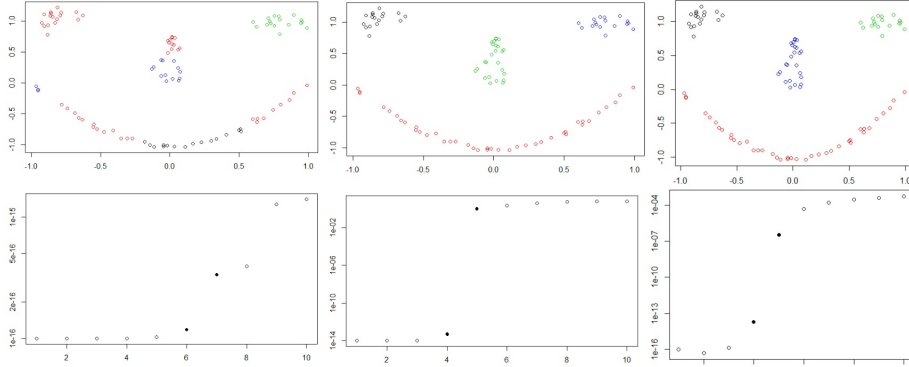
Slika 2: Normaliziran algoritem RW: graf 3-najbližjih sosedov, graf ϵ -ske okolice ($\epsilon = 0.4$), poln graf ($\delta^2=0.01$)



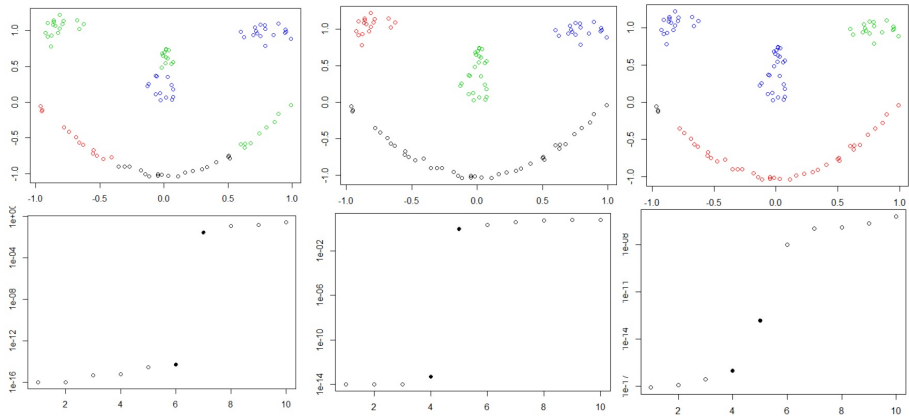
Slika 3: Normaliziran algoritem SYM: graf 3-najbližjih sosedov, graf ϵ -ske okolice ($\epsilon = 0.4$), poln graf ($\delta^2=0.01$)



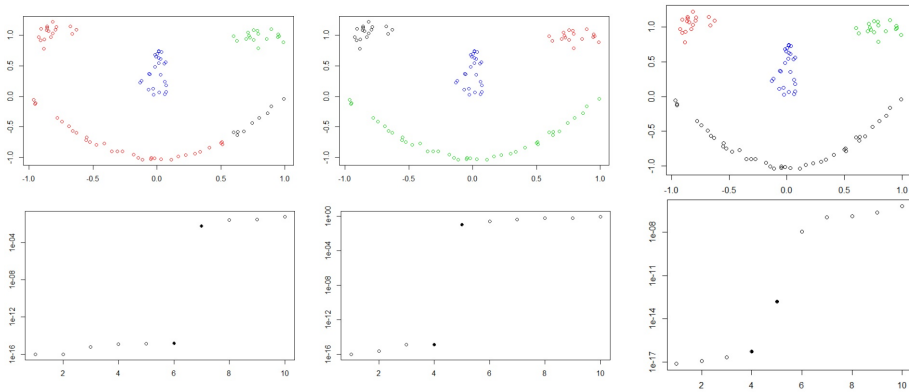
Slika 4: Nenormaliziran algoritem: graf 3-najbližjih sosedov, graf ϵ -ske okolice ($\epsilon = 0.5$), poln graf ($\delta^2=0.01$)



Slika 5: Normaliziran algoritem RW: graf 3-najbližjih sosedov, graf ϵ -ske okolice ($\epsilon = 0.5$), poln graf ($\delta^2=0.01$)



Slika 6: Normaliziran algoritem SYM: graf 3-najbližjih sosedov, graf ϵ -ske okolice ($\epsilon = 0.5$), poln graf ($\delta^2=0.01$)



Slika 7: Nenormaliziran algoritem na črno-beli sliki, $k=3$, $\delta^2 = 0.01$

