Обучение без учителя

Владимир Вежневец, Антон Конушин
Александр Вежневец

Компьютерное зрение
МГУ ВМК, Осень 2006

Пример

- После проведения социологического исследования, как выявить группы людей сходных мнений?
- Есть большая база данных изображений, требуется разделить их на группы
- Сегментация

Обучение без учителя

- Пусть, имеется набор наблюдений:

$$X^l = \{x_1, \ldots, x_l\}, X \in R^d$$

- Требуется некоторым образом сделать суждения о наблюдаемых данных

- Трудно придумать более общую постановку, неправда ли?

Обучение без учителя

- Кластеризация
  - Разбиение наблюдений на некоторые группы, с максимально близкими наблюдениями внутри групп и максимально далекими между
- Понижение размерности
  - Понижение размерности наблюдений с сохранением описательной силы
- Анализ плотности распределения
  - Получить аппроксимацию плотности распределения вероятности наблюдений или поиск их особых точек

Обучение без учителя

- Кластеризация
  - К-средних
  - Смесь нормальных распределений
  - …
- Понижение размерности
  - Метод главных компонент
  - SOM
  - …
- Анализ плотности распределения
  - Аппроксимация плотности распределения через обучение с учителем
  - Сдвиг среднего для поиска экстремумов плотности распределения
  - …

Отличие от классификации

- Множество ответов неизвестно
- Нет четкой меры качества решений
- Задачи поставлены крайне нечетко

Кластеризация
Постановка задачи (1)

- Пусть, имеется набор наблюдений:

$$X^l = \{x_1, \ldots, x_l\}, X \in R^d$$

- Требуется разбить X^l на некоторые непересекающиеся подмножества (группы, кластеры), таким образом, что объекты внутри одной группы соотносились сильнее чем объекты из разных групп

Кластеризация
Постановка задачи (2)

- Пусть, так же, имеется некоторая мера $D : X \times X \to R$, характеризующая «схожесть» между объектами
- Тогда, требуется найти некоторое разбиение:

$$\left\{C^i\right\}_1^k : C^i \subset X^l, \bigcup_{i=1}^{k} C^i = X^l; C^i \cap \bigcap_{i \neq j} C^j = 0$$

- Такое, что минимизируется $D(x_i, x_j); x_i, x_j \in C^p$
- И максимизируется $D(x_i, x_j); x_j \in C^p, x_i \in C^r; r \neq p$

Кластеризация
Модель кластеров

- Под моделью кластеров будем понимать некоторое параметрическое семейство отображений из исходного пространства в множество индексов кластеров

$$C = \{c(x,\gamma) \mid c : X \times \Gamma \to \{1,...,k\}\}$$

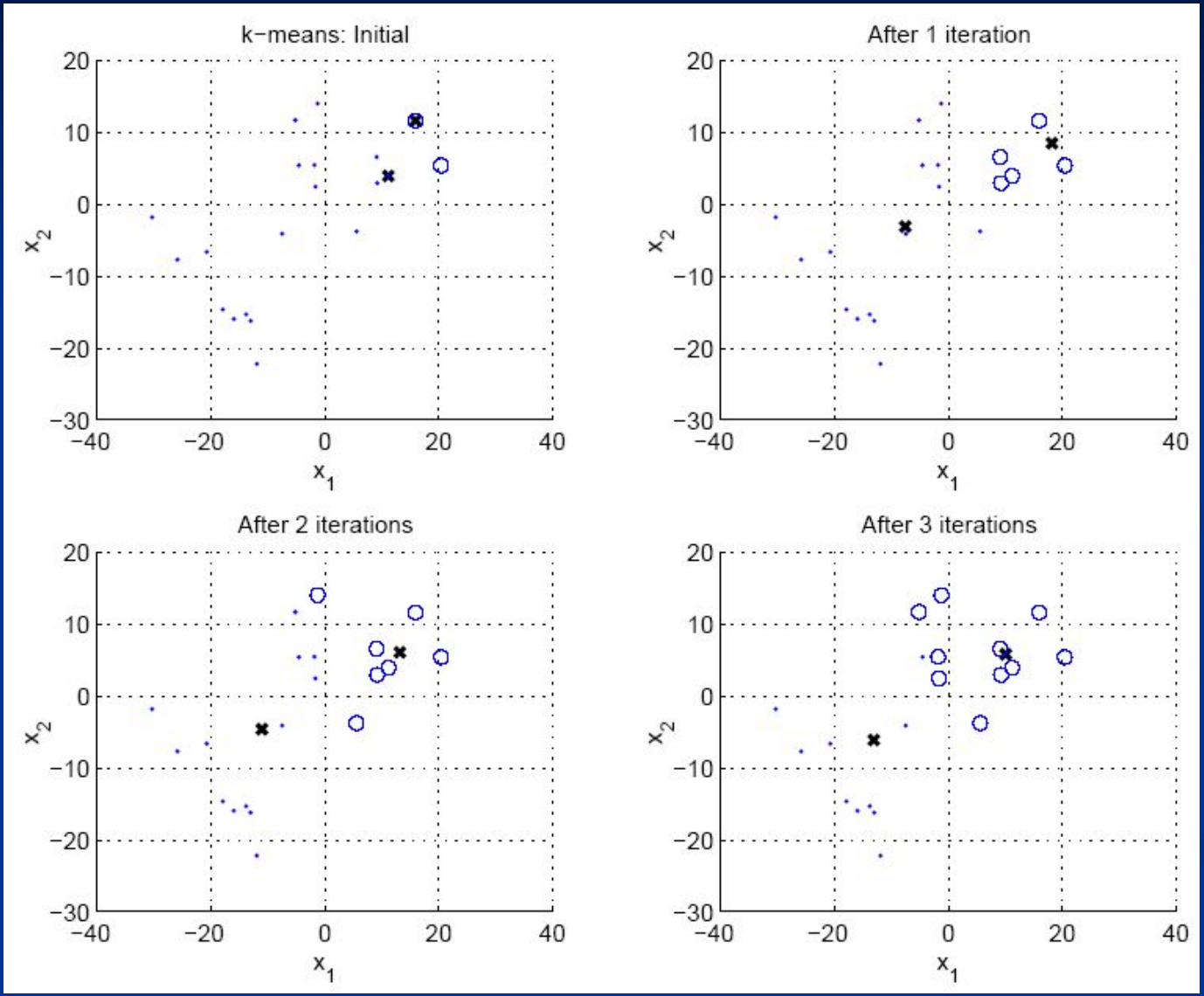
- Множество параметров, пространством поиска
- Нахождения параметров - кластеризацией

Алгоритм К-средних

- Кто хочет рассказать как он работает?

1. Случайным образом выбрать k средних m_j j=1,…,k;
2. Для каждого x_i i=1,…,p подсчитать расстояние до каждого из m_j j=1,…,k,
3. Отнести (приписать) x_i к кластеру j’, расстояние до $m_{j'}$ минимально;
4. Пересчитать средние m_j j=1,…,k по всем кластерам;
5. Повторять шаги 2, 3 пока кластеры не перестанут изменяться;

Иллюстрация

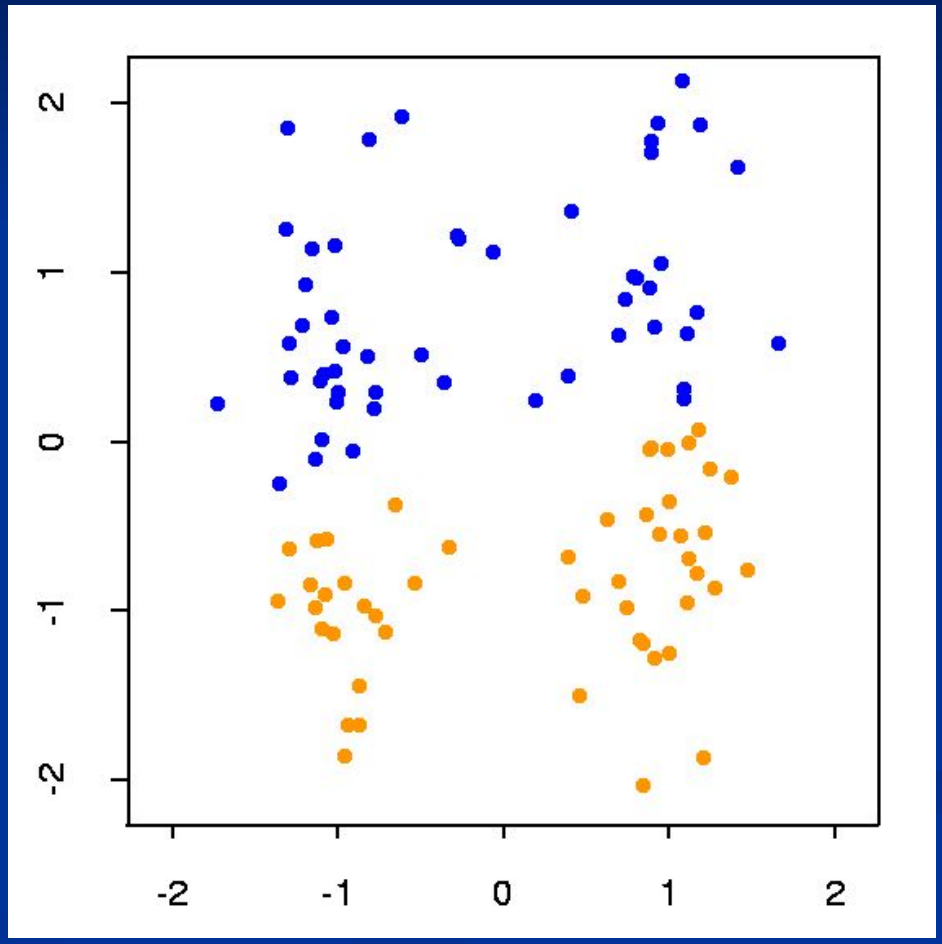


Алгоритм К-средних

- Мера схожести $D : X \times X \to R$
  - Евклидово расстояние в пространстве X
- Модель кластеров
  - Пространство поиска - центры масс

Алгоритм К-средних

- Однопараметрический
  - Требует знания только о количестве кластеров
- Рандомизирован
  - Зависит от начального приближения
- Не учитывает строения самих кластеров



EM алгоритм
Общая идеология

- Пусть есть вектор неизвестных величин

$$\eta = (\eta_1, \ldots, \eta_p)$$

- и параметрическая модель с так же неизвестным параметром(ами) λ

- Пусть возможно рассчитать правдоподобие $P(\eta \mid \lambda)$

- Наша задача подобрать такие λ и η, чтобы правдоподобие было максимальным

EM алгоритм
Общая идеология

- Возьмем некоторые начальные приближения λ^0
- Итеративно $t = 1 \ldots$ делаем два шага:
  - Expect: согласно текущему значению λ^{t-1} высчитываем наиболее вероятные значения

$$\eta^t = \arg\max_{\eta} \left(P(\eta \mid \lambda^{t-1}) \right)$$

  - Maximize: согласно текущем значениям η^t высчитываем новое значение λ^t максимизирующее функцию правдоподобия

$$\lambda^t = \arg\max_{\lambda} \left(P(\eta^t \mid \lambda) \right)$$

  - Остановимся когда правдоподобие стабилизируется

Кластеризация смесью нормальных распределений

- Будем считать, что наблюдения сгенерированы смесью нормальных распределений, то есть:

$$P(x \mid C^i) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \left|\Sigma_i\right|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu_i)^T \Sigma_i^{-1} (x-\mu_i)\right)$$

$$P(x) = \sum_{i=1}^{k} P(x \mid C^i) P(C^i)$$

$$P(x \mid C^i) = N(\mu_i, \Sigma_i)$$

- Пусть k известно заранее, будем осуществлять кластеризацию EM алгоритмом

$\eta = (\eta_1, \ldots, \eta_l)$ - Индексы кластеров наблюдений

$\lambda = \{\mu_i, \Sigma_i\}_{i=1}^{k}$

Кластеризация смесью нормальных распределений

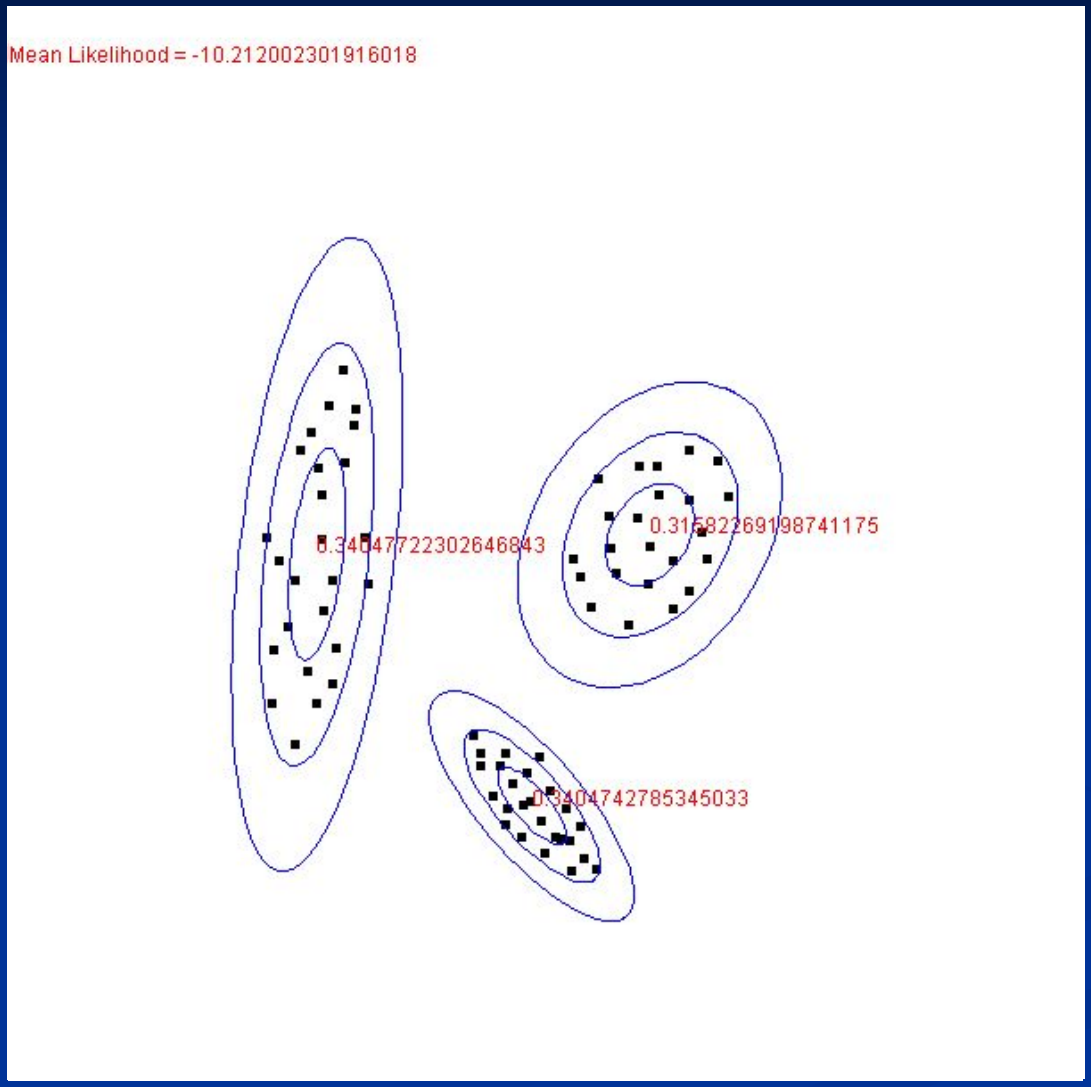
- Возьмем некоторые (случайные) начальные приближения $\lambda = \{\mu_i, \Sigma_i\}_1^k$

- Итеративно для $t = 1 \ldots$:
  - E: согласно текущему значению λ высчитываем наиболее вероятные значения индексов $\eta = (\eta_1, \ldots, \eta_l)$ кластеров для наблюдений из X^l

$$\eta_j^t = \arg\max_i \left(P(x \mid C^i) \right)$$

  - M: согласно текущем значениям индексов пересчитаем параметры распределений (методом максимального правдоподобия)

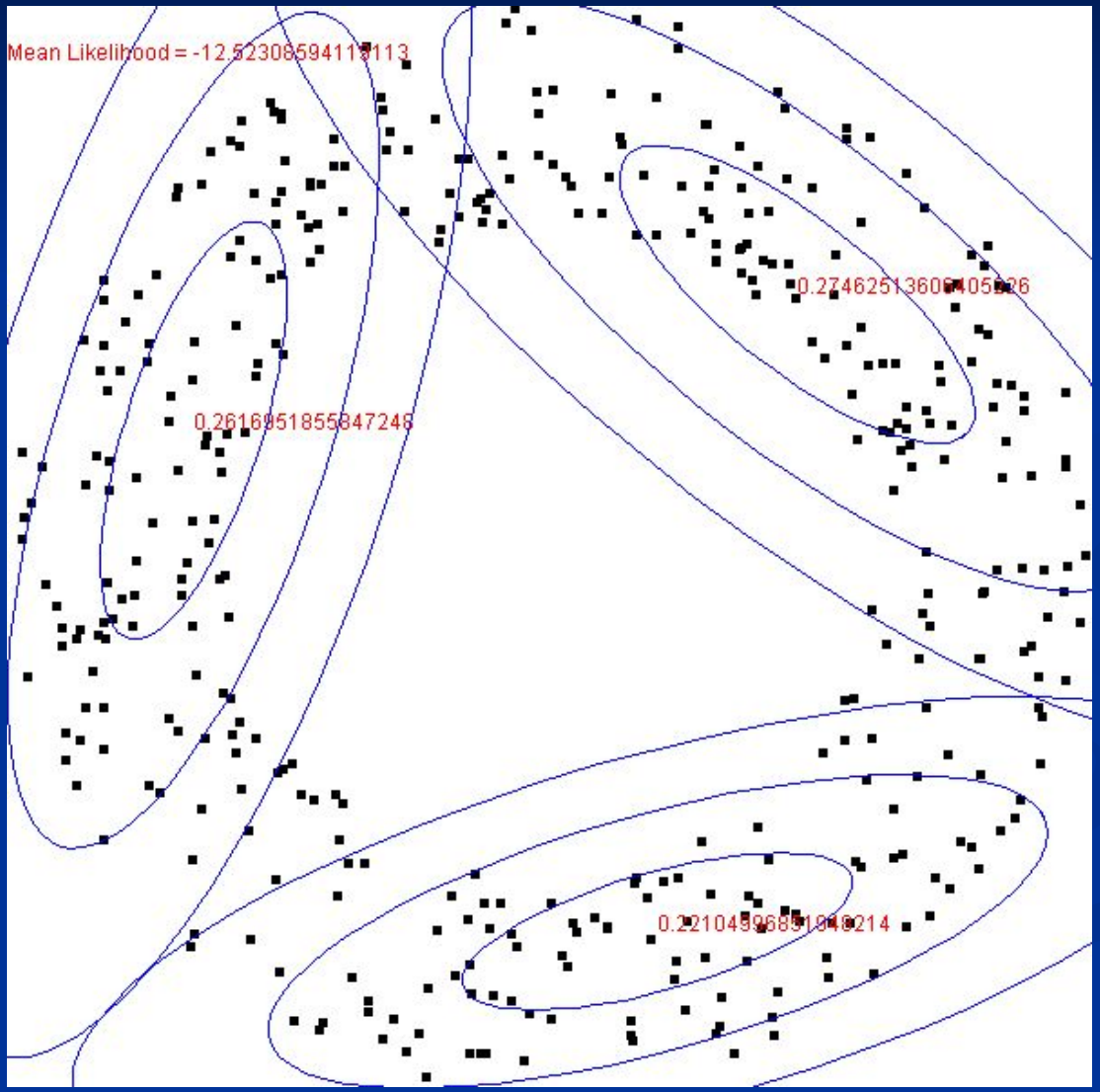
Иллюстрация



Кластеризация смесью нормальных распределений

- Плюсы
  - Более полная модель кластеров (больше итоговой информации)
  - Более качественная аппроксимация
  - Эффективная оценка качества кластеризации (правдоподобие)
- Минусы
  - Все равно некоторая ограниченная модель со строгой «геометрией»
  - Чувствительность к размерности и нормализации данных

Иллюстрация



Понижение размерности наблюдаемых данных

- Зачастую, наблюдаемые данные могут обладать высокой размерностью, но в действительности быть функцией всего нескольких скрытых (латентных) переменных

- Задачей понижения размерности является некоторое преобразование исходного пространства в пространство более низкой размерности без существенной потери информативности данных

Метод главных компонент

- Пусть имеется набор наблюдений $X^l = \{x_1, \ldots, x_l\}, X \in R^d$
- Будем строить новый базис в пространстве R^d, таким образом что:
  - Центр координат совпадает с мат. ожиданием наблюдений (выборочным средним)
  - Первый вектор направлен таким образом, что дисперсия вдоль него была максимальной
  - Каждый последующий вектор ортогонален предыдущим и направлен по направлению максимальной дисперсии

Метод главных компонент
Расчет базиса

- Сдвинем все данные таким образом, чтобы их выборочное среднее равнялось нулю
- Рассчитаем ковариационную матрицу:

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \operatorname{cov}(x^1, x^1) & \operatorname{cov}(x^1, x^2) & \dots & \operatorname{cov}(x^1, x^d) \\ \operatorname{cov}(x^2, x^1) & \operatorname{cov}(x^2, x^2) & \dots & \operatorname{cov}(x^2, x^d) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \operatorname{cov}(x^d, x^1) & \operatorname{cov}(x^d, x^2) & \dots & \operatorname{cov}(x^d, x^d) \end{pmatrix}$$

Выборочное среднее

$$\operatorname{cov}(X, Y) = \frac{\sum_{i=1}^{n} \left(X_i - \overline{X}\right) \cdot \left(Y_i - \overline{Y}\right)}{(n-1)}$$

Ковариация двух сл. величин

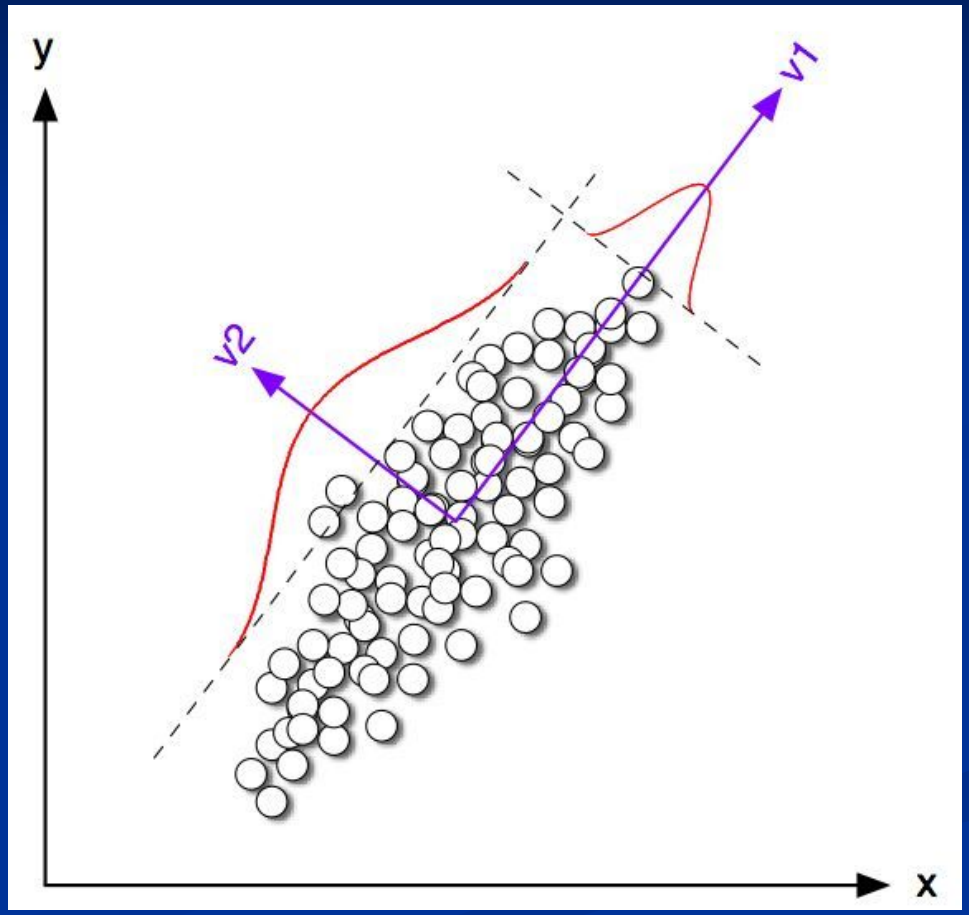
Метод главных компонент
Расчет базиса

- Векторами нового базиса будут являться собственные вектора ковариационной матрицы
- Собственные числа – значениями дисперсии наблюдений вдоль них

Иллюстрация

- Убирая базисные вектора с малыми значениями мы можем сократить размерность без существенной потери информации

***Вопрос: Почему это так?**



Случай нормального распределения

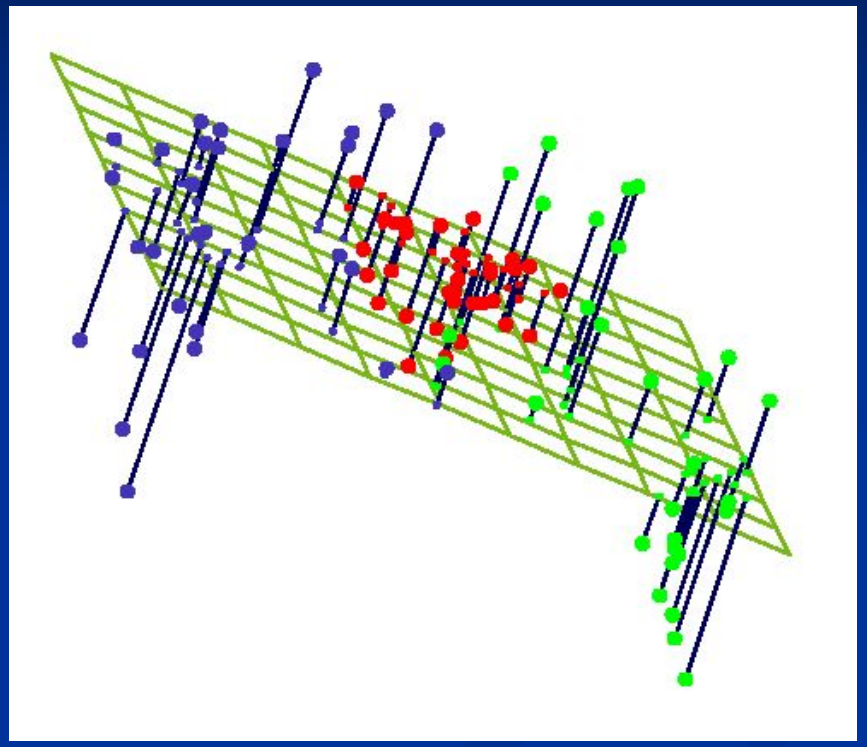
- Расстояние от центра распределения в новой системе координат равно:

$$\sqrt{(x-\bar{x})^T \Sigma_y{}^{-1} (x-\bar{x})}$$

- Так называемое расстояние Махалонобиса

- Пропорционально правдоподобию наблюдения

Метод главных компонент
Связь с линейной аппроксимацией



- Если рассмотреть систему проекций данных на первые $1 \le n \le d$ главных компонент, то мы получим систему наилучших линейных приближений данных (в смысле среднеквадратичного отклонения)

Метод главных компонент

- Следует применять:
  - Данные распределены нормально и требуется привести их к более удобной форме
  - Или предполагается, что данные содержатся в линейном многообразии исходного пространства и требуется выделить лишь его и сократить размерность
- НЕ следует применять:
  - Распределение данных произвольно и далеко от нормального
  - Данные нелинейные

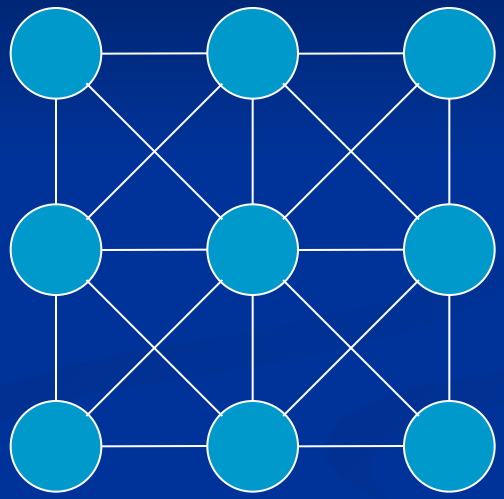
Самоорганизующиеся карты SOM (Карты Кохенена)

- Основная идея
  - вписать в данные сетку низкой размерности, и анализировать ее, вместо самих данных

SOM (Карты Кохенена)
Модель сетки

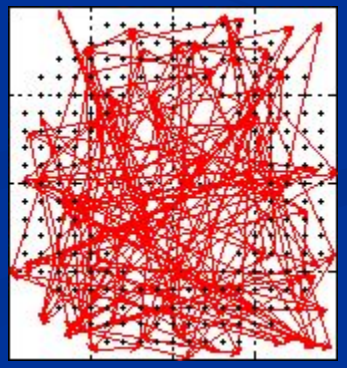
- Матрица узлов $M^{KL} = (m_{kl})$
- Соседство - 4 или 8 связность
- Каждому узлу соответствует точка в исходном пространстве

$$m_{kl} \in R^d$$

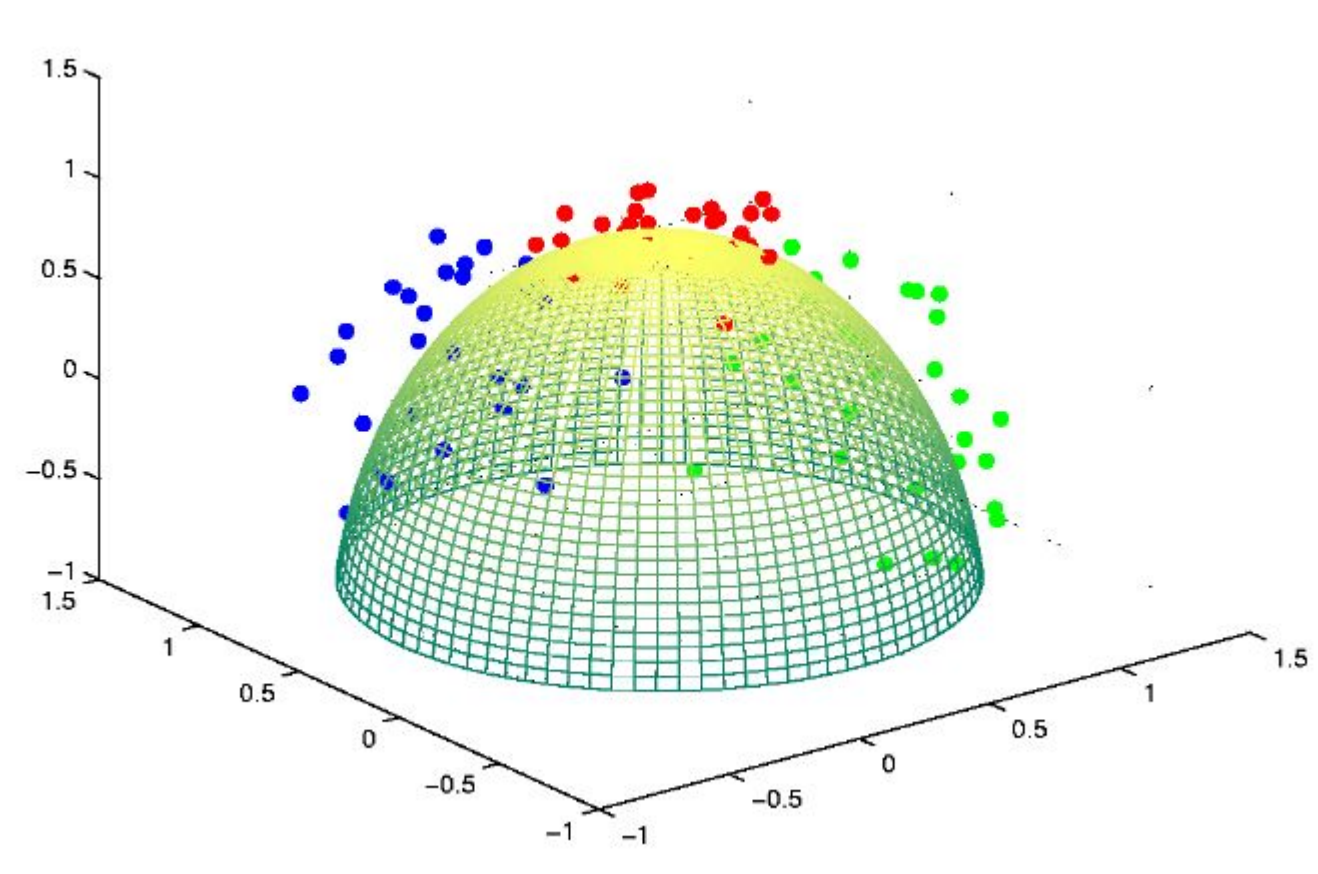


SOM (Карты Кохенена) Алгоритм построения

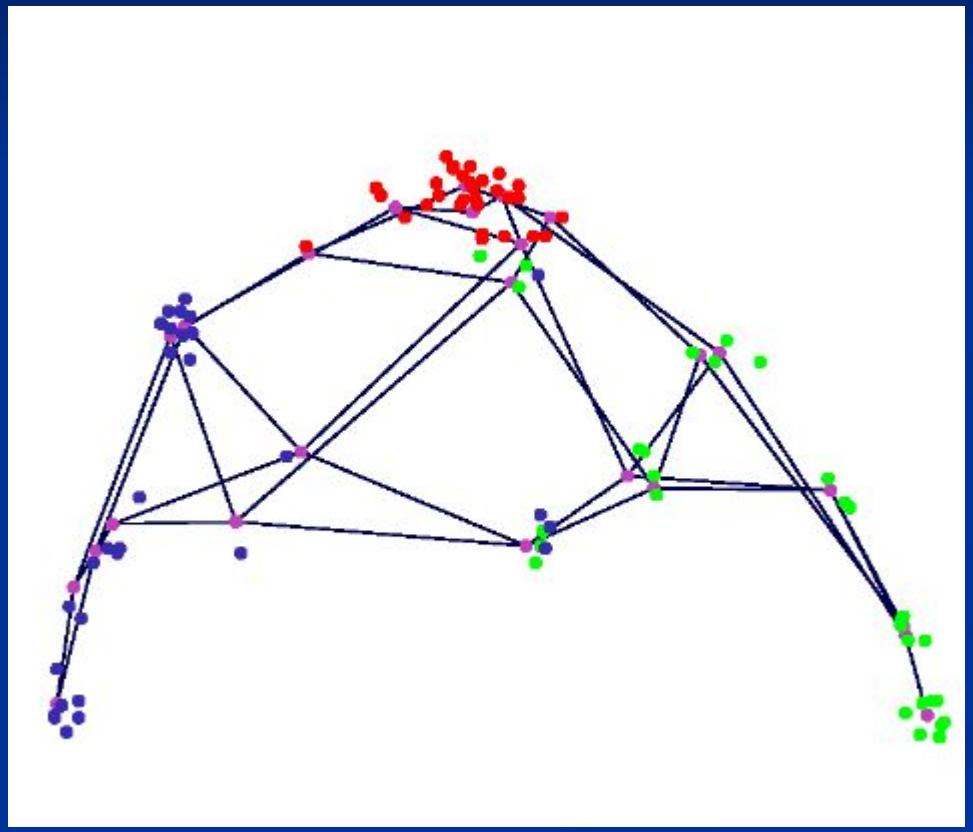
- Проинициализируем (m_{ij}) случайными значениями
- Далее, в случайном порядке будем предъявлять наблюдения и для каждого:
  - Вычисляем ближайший узел
  - Выберем множество соседей узла, такое что расстояние на сетке между ними меньше r
  - Для некоторого множества соседей узла, включая сам узел, изменяем их положения согласно: $m_{kl} \leftarrow m_{kl} + \alpha(x_i - m_{kl})$
  - Повторяем процедуру уменьшая r и α пока сеть не стабилизируется



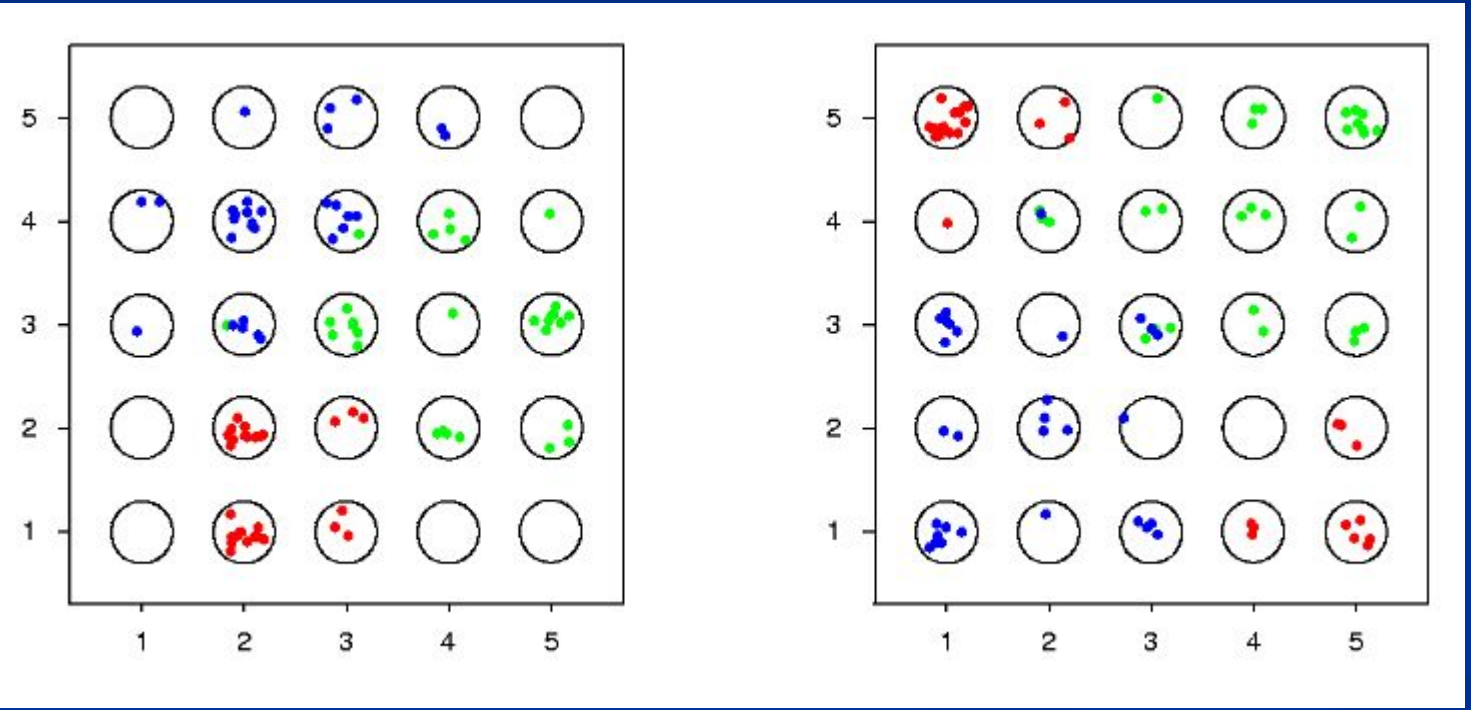
SOM (Карты Кохенена)
Иллюстрация: исходные данные



SOM (Карты Кохенена)
Иллюстрация: сетка



SOM (Карты Кохенена)
Иллюстрация: проекции на матрицу



SOM (Карты Кохенена) Практическое использование

- Данные представляют некоторую поверхность, требуется сократить размерность
- Хорошо подходят для последующей кластеризации
- Могут работать «online»
- В случае слишком сложных данных не информативны

Задание №2

- Каждому будут выданы
  - Данные (3 набора)
  - Алгоритмы классификации, реализованные в MatLab
- Требуется
  - Для каждого из наборов натренировать наилучший возможный классификатор (из выданных вам)
  - Написать отчет (по форме лежащий на сайте) описывающий каким образом вы выбирали классификатор и настроили параметры
- Оценка складывается из:
  - Аккуратности и полноты отчета
  - Результатов работы Вами присланного классификатора на *наших* данных (часть выборки мы дали Вам, часть оставили себе)

Содержание отчета

- Применявшиеся методы
  - Список
- Алгоритм, по которому оценивались алгоритмы и выбирались параметры
- Результаты в виде
  - Графиков
  - Таблиц
- Выводы (кратко!)
  - Какой классификатор был выбран в итоге
  - Почему именно этот классификатор

Оформление решения

- Классификаторы
  - <Номер данных>_<Название метода>
    - Например 23_SVM
- Отчет
  - Файл в формате MS Word