KLASTERIZACIJA

JELENA JOVANOVIĆ

Email: jeljov@gmail.com

Web: http://jelenajovanovic.net

Pregled predavanja

- Šta je klasterizacija?
- Koje su oblasti/primeri primene?
- Klasterizacija primenom K-Means algoritma
- Klasterizacija primenom EM algoritma

Šta je klasterizacija?

Klasterizacija je jedan od oblika nenadgledanog m. učenja

- ono što je raspoloživo od podataka su podaci o instancama koje je potrebno na neki način grupisati;
- ne posedujemo podatke o poželjnoj / ispravnoj grupi za ulazne instance

Šta je klasterizacija?

Klasterizacija je zadatak grupisanja instanci, tako da za svaku instancu važi da je *sličnija* instancama iz svoje grupe (klastera), nego instancama iz drugih grupa (klastera)

Sličnost instanci se određuje primenom neke od mera za računanje

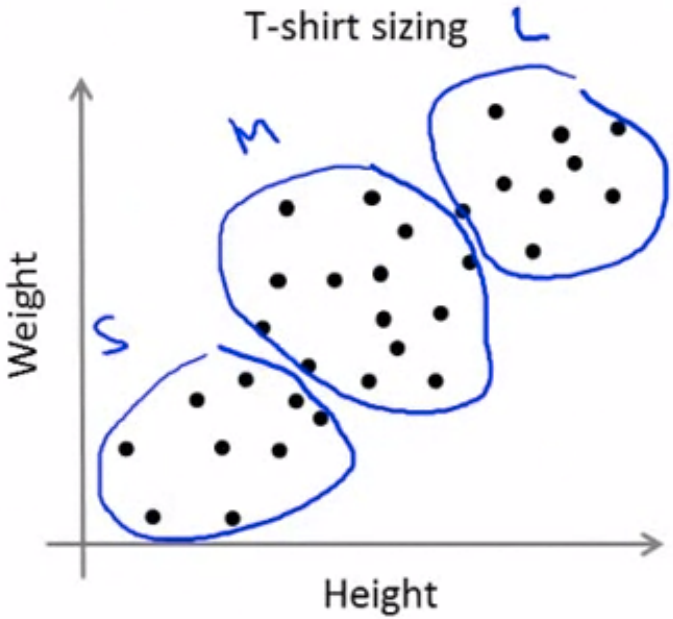
- sličnosti (npr. Kosinusna sličnost) ili
- udaljenosti dve instance (npr. Euklidska udaljenost)

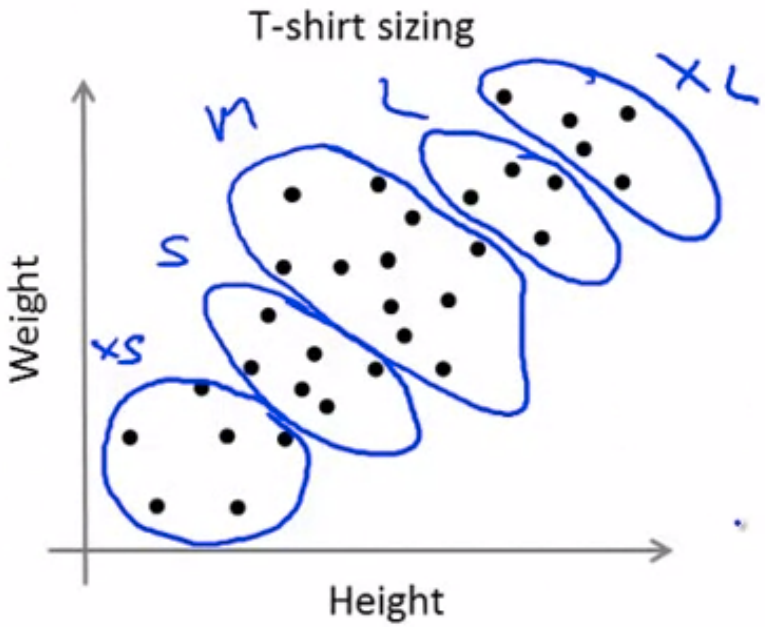
ŠTA JE KLASTERIZACIJA?

Za razliku od klasifikacije, ovde nemamo “tačno” rešenje

- ocena uspešnosti algoritma je dosta teža nego kod klasifikacije
- pogodnost rešenja zavisi od domena i slučaja primene – jedno isto rešenje može biti različito ocenjeno u različitim slučajevima primene
- zahteva angažovanje domenskih eksperata koji će evaluirati rešenje

Primer različitih dobrih rešenja za isti polazni skup podataka





Oblasti primene

- Segmentacija tržišta
- Uočavanje grupa u društvenim mrežama
- Identifikacija korisnika koje karakterišu slični oblici interakcije sa sadržajima nekog Web sajta/aplikacije
- Grupisanje objekata (npr., slika/dokumenata) prema zajedničkim karakteristikama
- …

K-MEANS ALGORITAM

K-MEANS

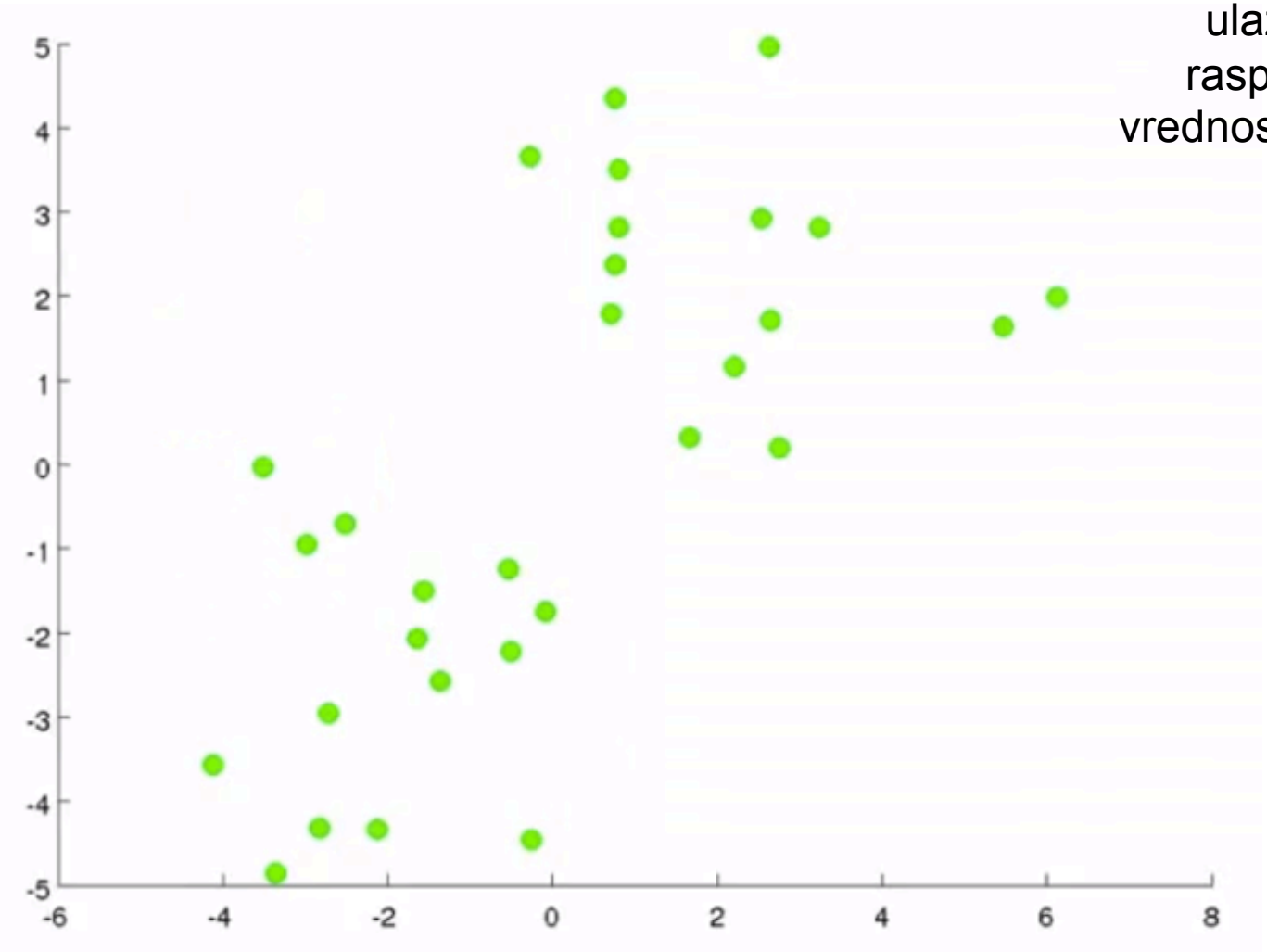
Jedan od najpoznatijih i najjednostavnijih algoritama klasterizacije

Najlakše ga je razumeti na primeru, pa ćemo prvo razmotriti jedan primer

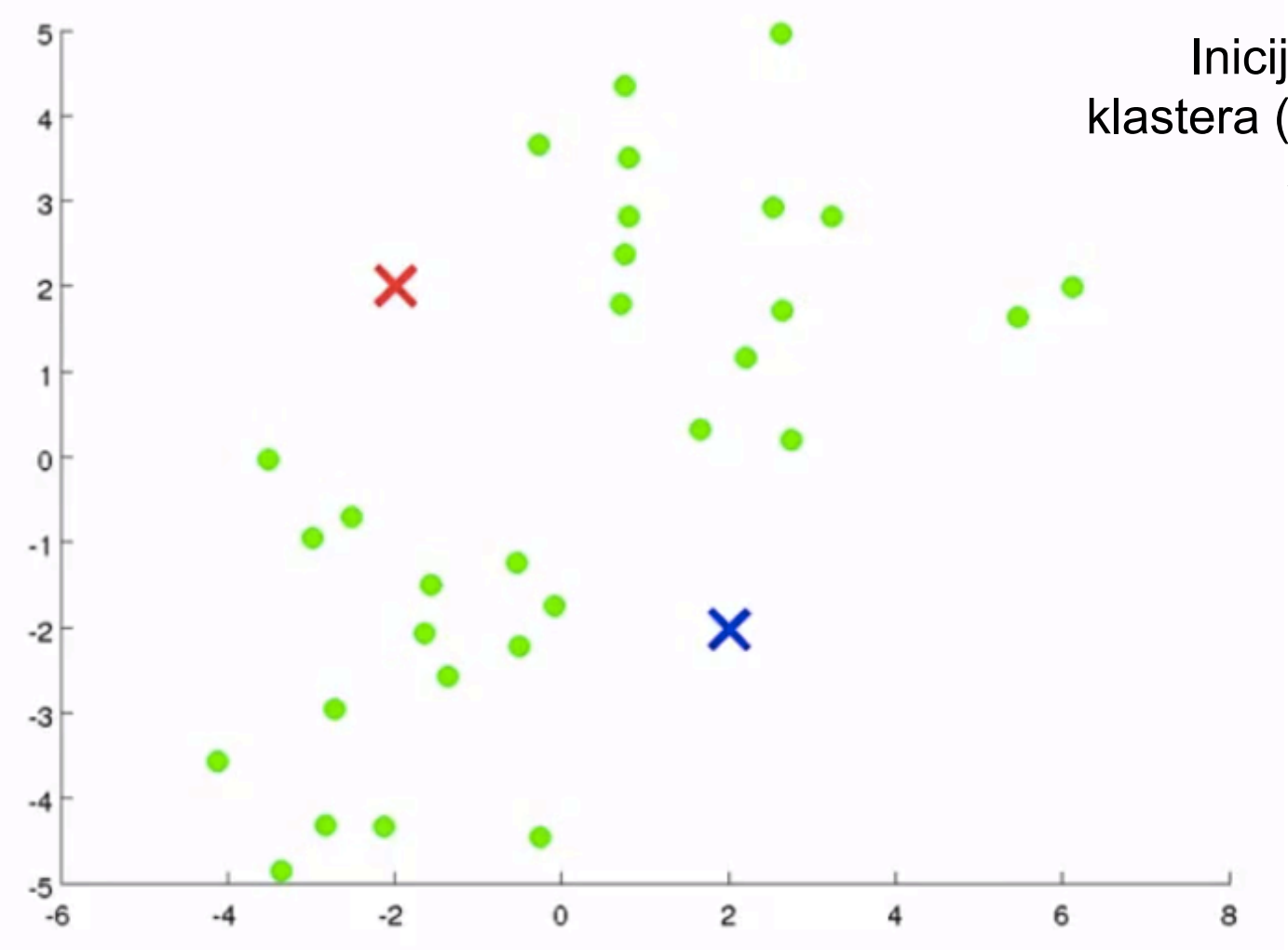
Primer je preuzet iz kursa: https://www.coursera.org/course/ml

K-MEANS ALGORITAM – PRIMER

Pretpostavimo da su ovo ulazni podaci kojima raspolažemo, opisani vrednostima dva atributa

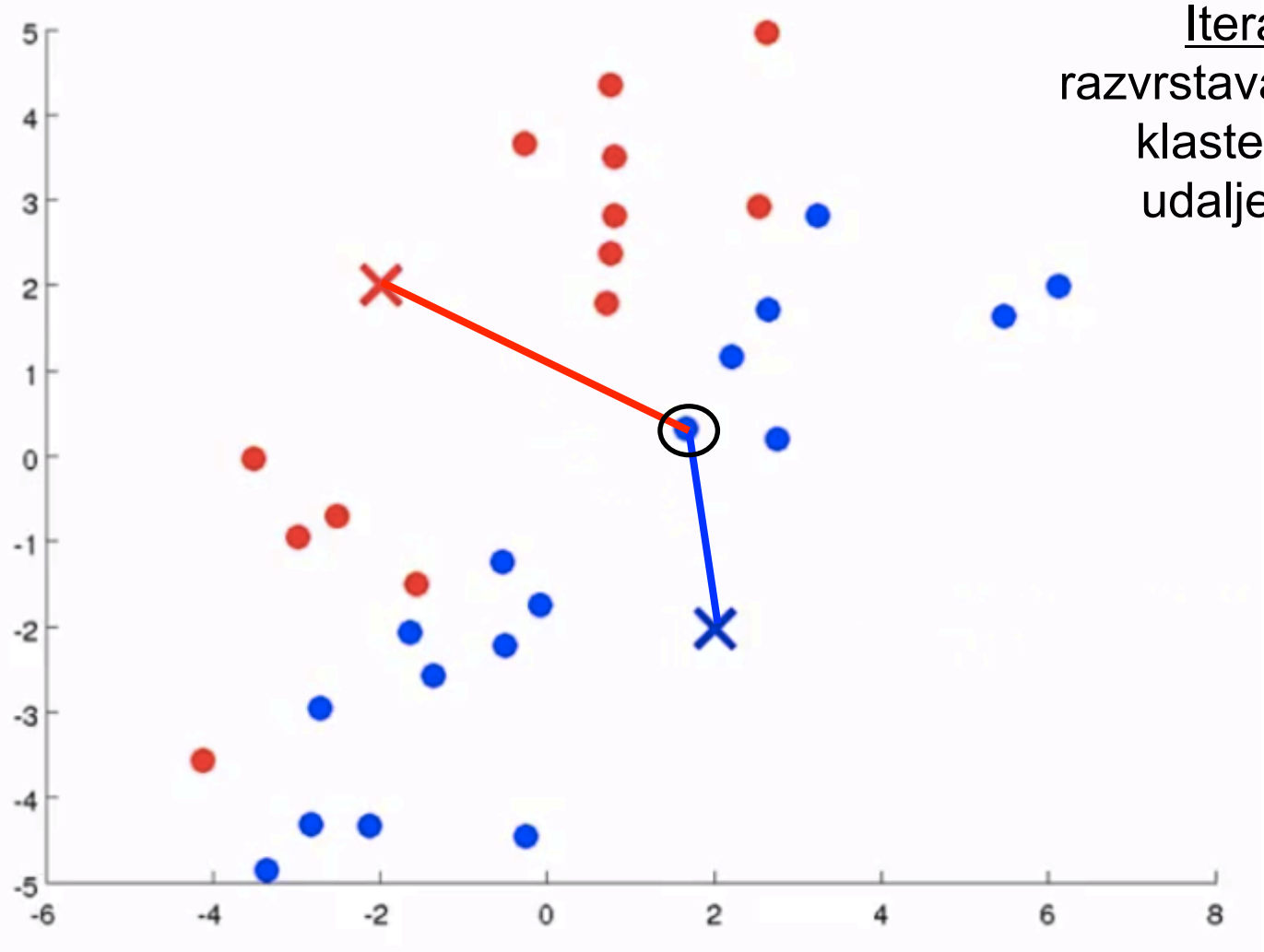


K-MEANS: PRIMER



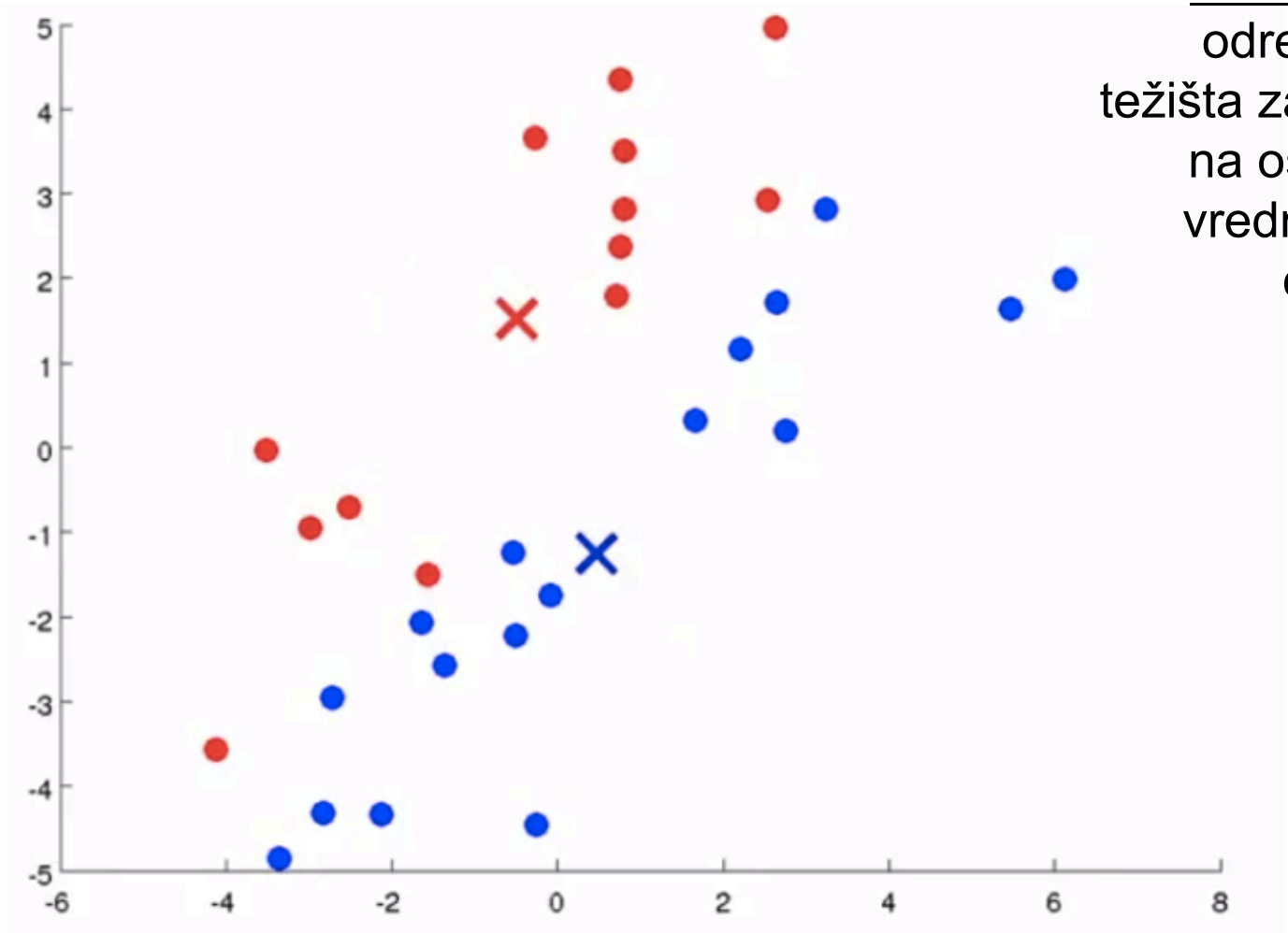
<u>Inicijalizacija</u>:
Inicijalni izbor težišta klastera (K = 2) metodom slučajnog izbora

K-MEANS: PRIMER



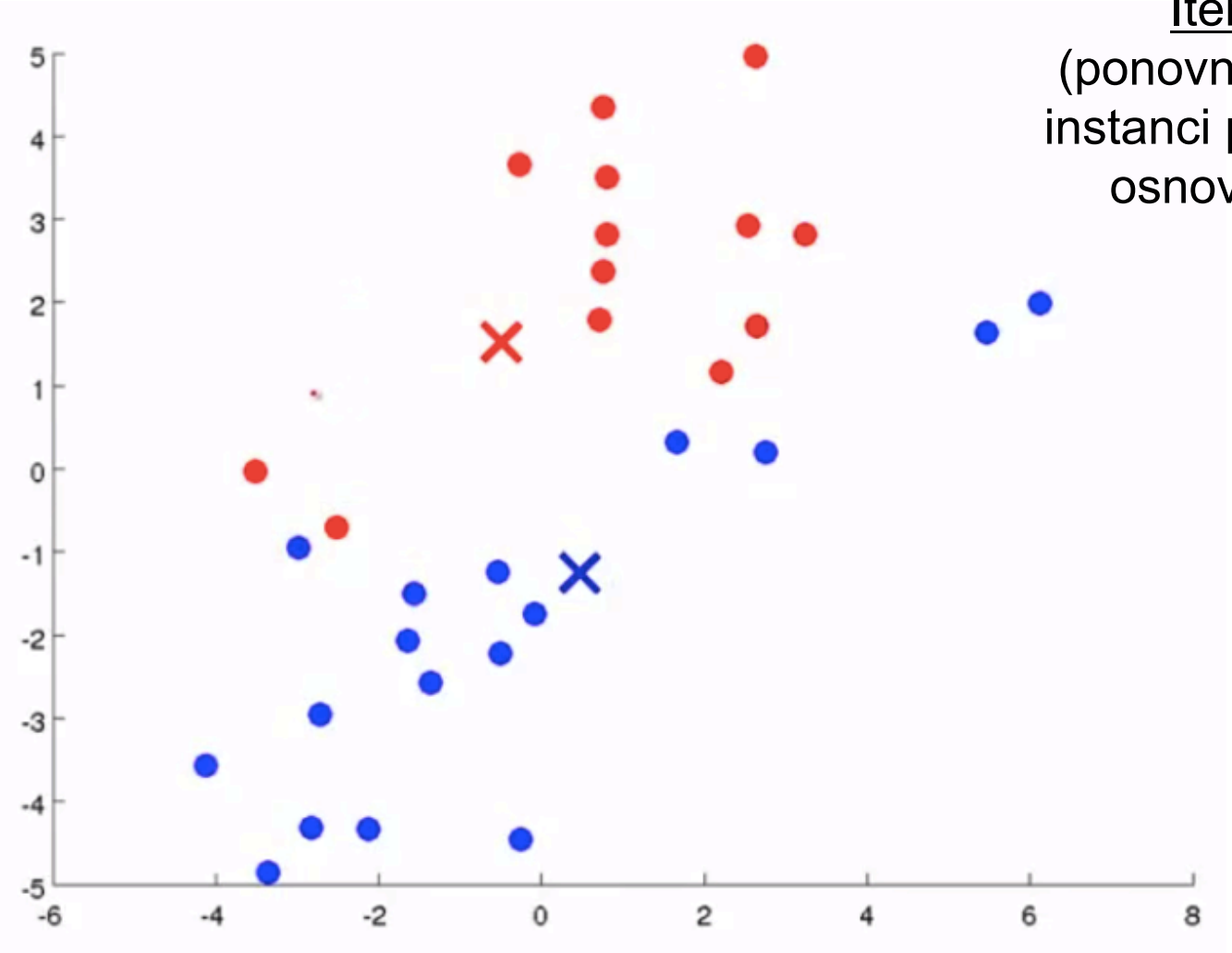
Iteracija 1, korak 1:
razvrstavanje instanci po klasterima na osnovu udaljenosti od težišta klastera

K-MEANS: PRIMER



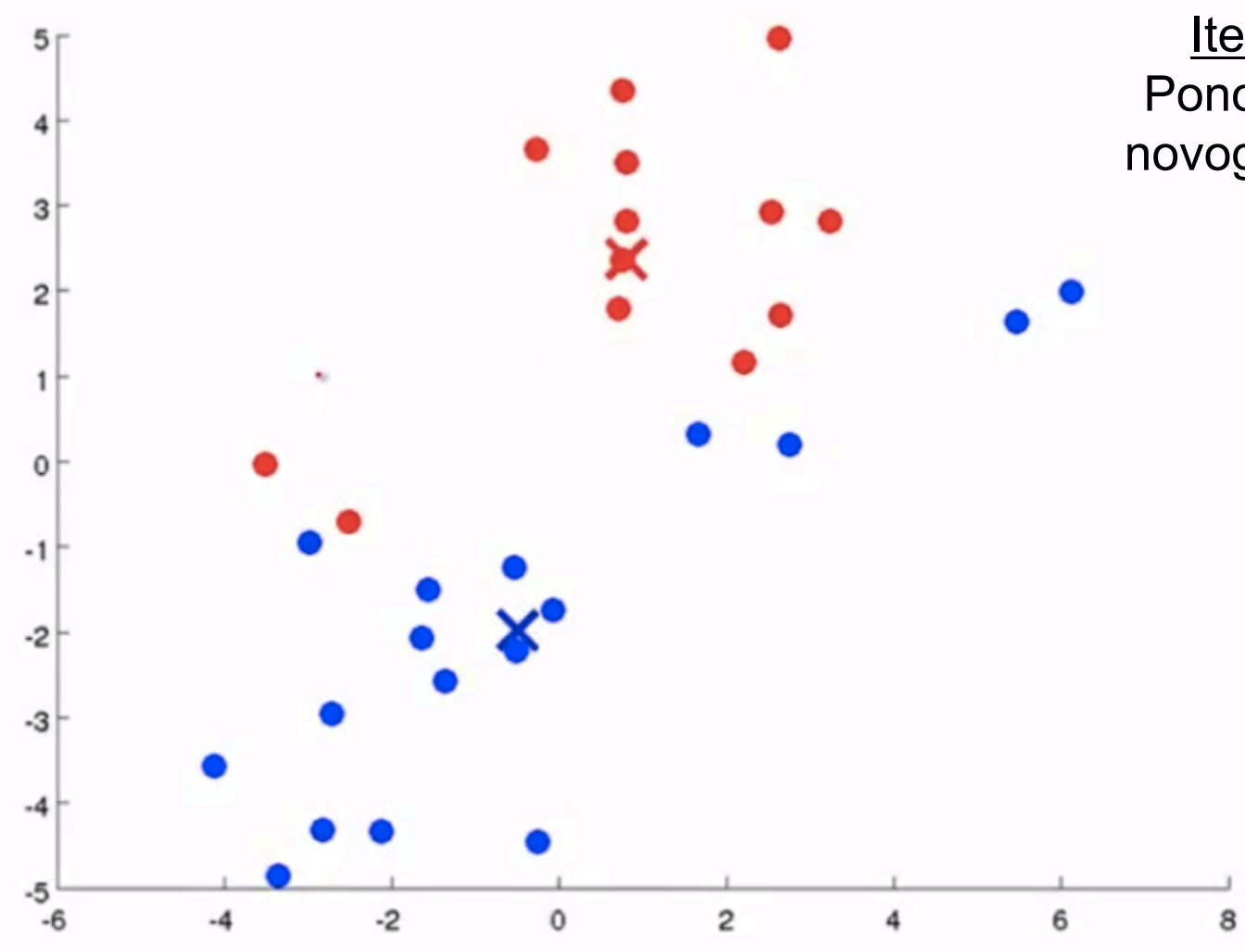
Iteracija 1, korak 2: određivanje novog težišta za svaki klaster, na osnovu proseka vrednosti instanci u datom klasteru

K-MEANS: PRIMER



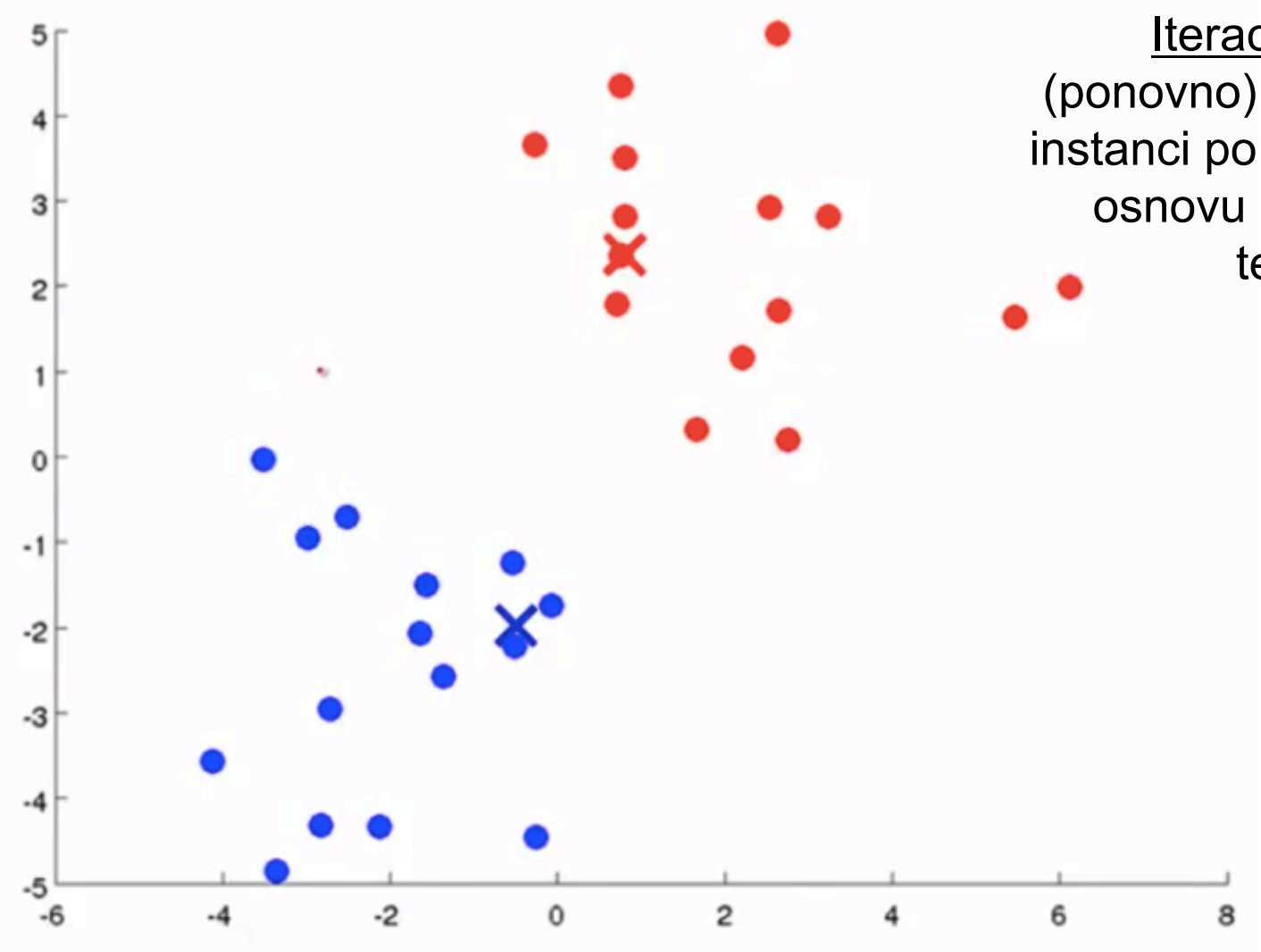
Iteracija 2, korak 1:
(ponovno) razvrstavanje instanci po klasterima na osnovu udaljenosti od težišta klastera

K-MEANS: PRIMER



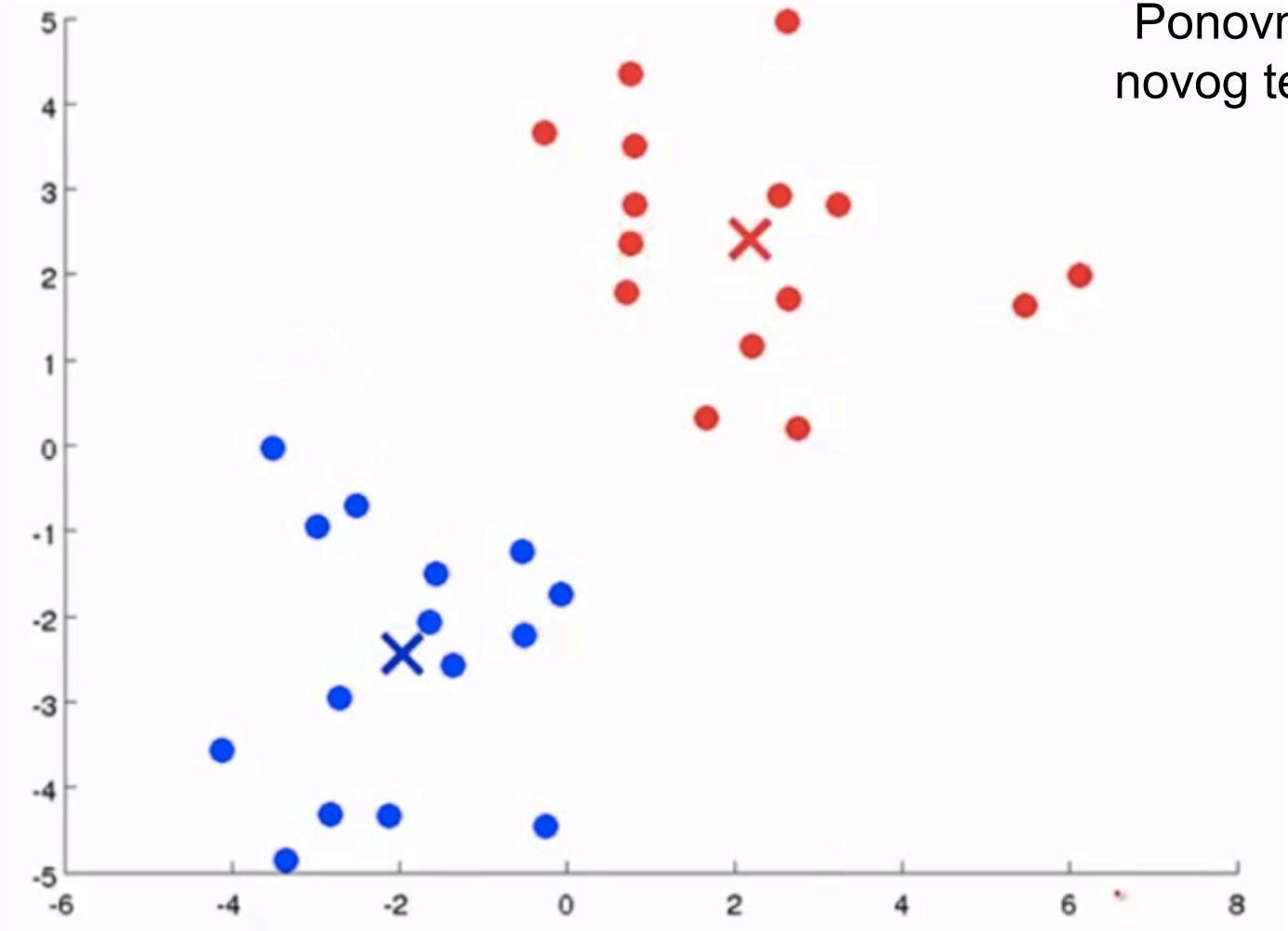
Iteracija 2, korak 2:
Ponovno određivanje novog težišta za svaki klaster

K-MEANS: PRIMER



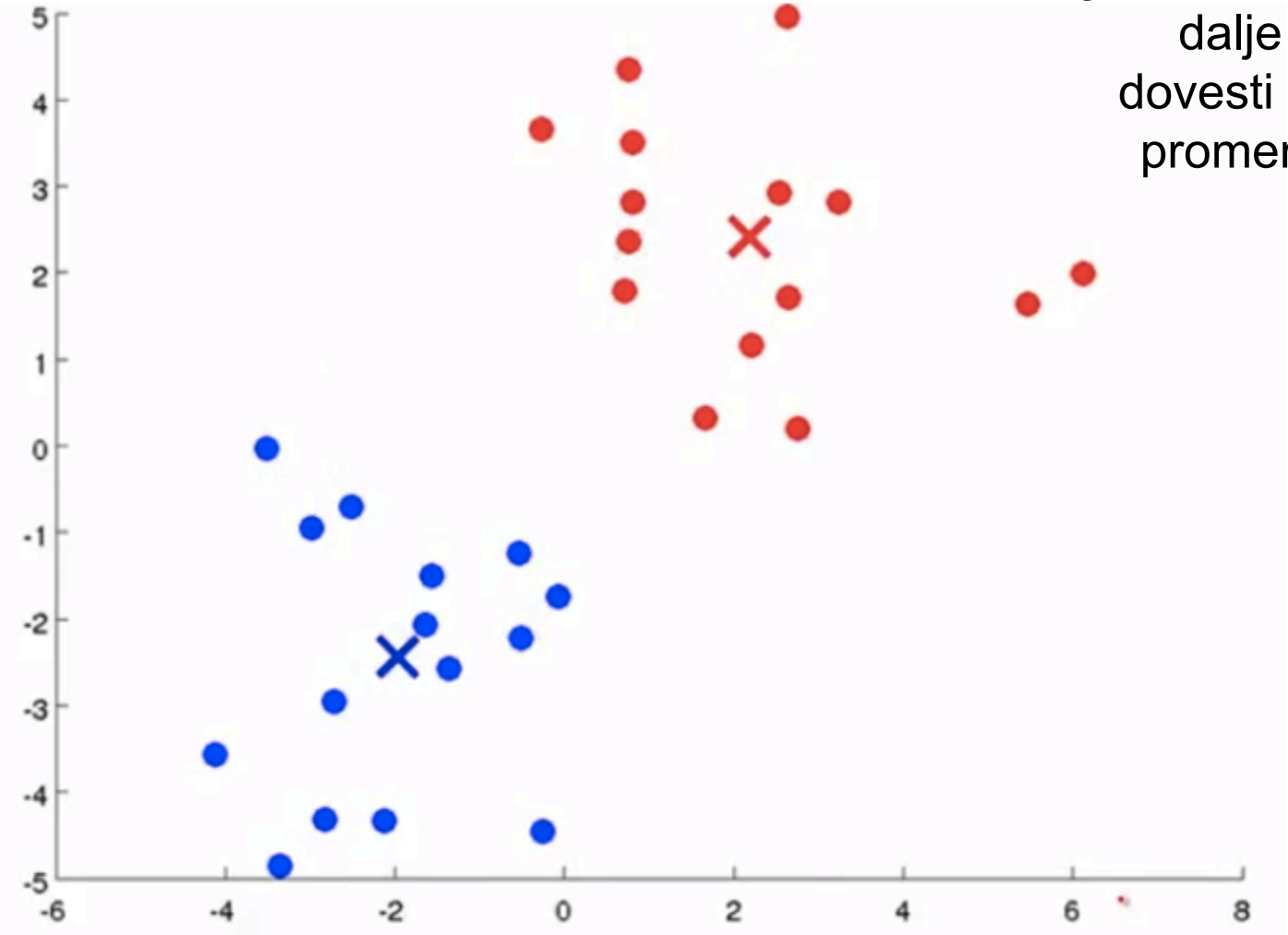
Iteracija 3, korak 1:
(ponovno) razvrstavanje instanci po klasterima na osnovu udaljenosti od težišta klastera

K-MEANS: PRIMER



Iteracija 3, korak 2:
Ponovno određivanje novog težišta za svaki klaster

K-MEANS: PRIMER



Algoritam već konvergira: dalje iteracije neće dovesti do značajnijih promena i proces se zaustavlja

K-MEANS: ALGORITAM

Ulaz:

- *K* - broj klastera
- (neobeležen) skup za trening sa *m* instanci; svaka instanca u skupu je vektor opisan sa *n* atributa (x_1, x_2, …, x_n)
- *max* - max broj iteracija (opcioni parametar)

K-MEANS: ALGORITAM

Koraci:

1) Inicijalni izbor težišta klastera, slučajnim izborom
   - težišta se biraju iz skupa instanci za trening, tj. *K* instanci za trening se nasumično izabere i proglasi za težišta

2) Ponoviti dok algoritam ne konvergira ili broj iteracija <= *max*:
   1) *Grupisanje po klasterima*: za svaku instancu iz skupa za trening, i = 1,m, identifikovati najbliže težište i dodeliti instancu klasteru kome to težište pripada
   2) *Pomeranje težišta*: za svaki klaster izračunati novo težište uzimajući prosek tačaka (instanci) koje su dodeljene tom klasteru

K-MEANS ALGORITAM: FUNKCIJA KOŠTANJA

Smisao K-means algoritma je *minimizacija funkcije koštanja* ***J*** (cost function):

$$J(c^{(1)}, \ldots, c^{(m)}, \mu_1, \ldots, \mu_K) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} ||x^{(i)} - \mu_{c^{(i)}}||^2$$

$x^{(i)}$ – *i*-ta instanca u skupu podataka za trening, i=1,m

$c^{(i)}$ – indeks klastera u koji je instanca $x^{(i)}$ trenutno raspoređena

μ_j – težište klastera j, j=1,K

$\mu_{c(i)}$ – težište klastera u koji je instanca $x^{(i)}$ trenutno raspoređena

Ova funkcija se zove i funkcija distorzije (distortion function)

K-MEANS ALGORITAM: FUNKCIJA KOŠTANJA

$$\min_{\substack{c^{(1)},\ldots,c^{(m)},\\ \mu_1,\ldots,\mu_K}} J(c^{(1)},\ldots,c^{(m)},\mu_1,\ldots,\mu_K)$$

Minimizacija funkcije koštanja ***J*** kroz K-means algoritam:

- faza *Grupisanja po klasterima* minimizuje ***J*** po parametrima $c^{(1)}$, …,$c^{(m)}$, držeći μ_1,…, μ_K fiksnim
- faza *Pomeranja težišta* minimizuje ***J*** po parametrima μ_1,…, μ_K, držeći $c^{(1)}$,…,$c^{(m)}$ fiksnim

K-MEANS: EVALUACIJA

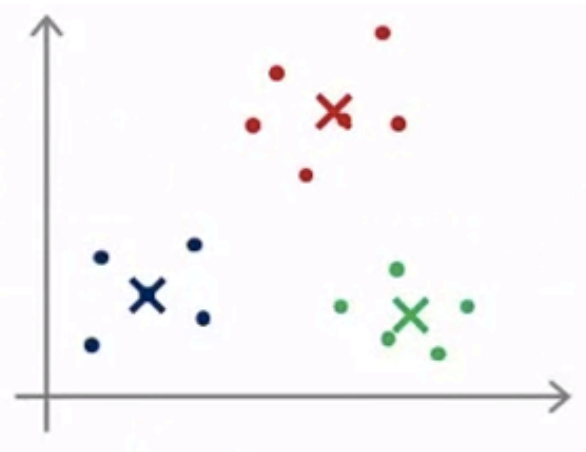
Kriterijumi za procenu “kvaliteta” kreiranih klastera:

- Međusobna udaljenost težišta
  - što su težišta dalje jedno od drugog, to je stepen preklapanja klastera manji, i njihov kvalitet viši
- St. devijacija pojedinačnih instanci u odnosu na težište
  - što je st. devijacija manja, to su instance tešnje grupisane oko težišta i klasteri se smatraju boljim
- Suma kvadrata greške unutar klastera (within cluster sum of squared errors)
  - daje kvantitativnu meru za procenu kvaliteta kreiranih klastera
  - razmotrićemo detaljnije na primeru (slajd 23)

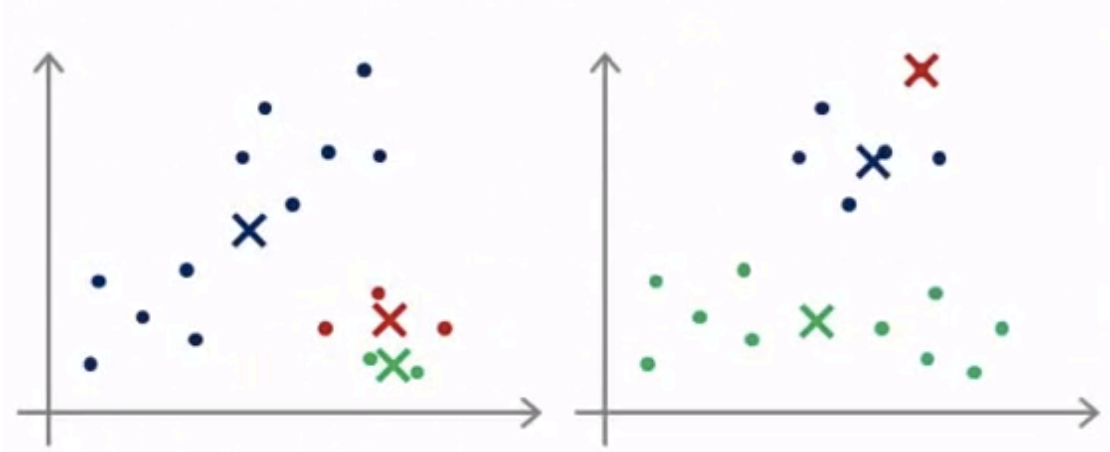
K-MEANS:
PROBLEM INICIJALNOG IZBORA TEŽIŠTA

Zavisno od inicijalnog izbora težišta:

- K-means algoritam može konvergirati brže ili sporije;
- Takodje, može “upasti” u tzv. lokalni minimum i dati loše rešenje
  - reč je o lokalnom min. funkcije koštanja



Idealna inicijalizacija



Inicijalizacija koja vodi u lokalne minimume

K-MEANS: VIŠESTRUKA NASUMIČNA INICIJALIZACIJA

Omogućuje da se izbegnu situacije koje K-means dovode u lokalni minimum

Sastoji se u sledećem:

```
for i = 1 to n { //n obično uzima vrednosti 50 - 1000
      Nasumično odabrati inicijalni skup težišta;
      Izvršiti K-Means algoritam;
      Izračunati funkciju koštanja (cost function)
}
Izabrati instancu algoritma koja daje najmanju vrednost
za f. koštanja
```

Ovaj pristup daje dobre rezultate ukoliko je broj klastera relativno mali (2 - 10); za veći broj klastera ne bi ga trebalo koristiti

Alternativa: K-means++ algoritam

K-MEANS: KAKO ODREDITI K?

Kako odrediti broj klastera K?

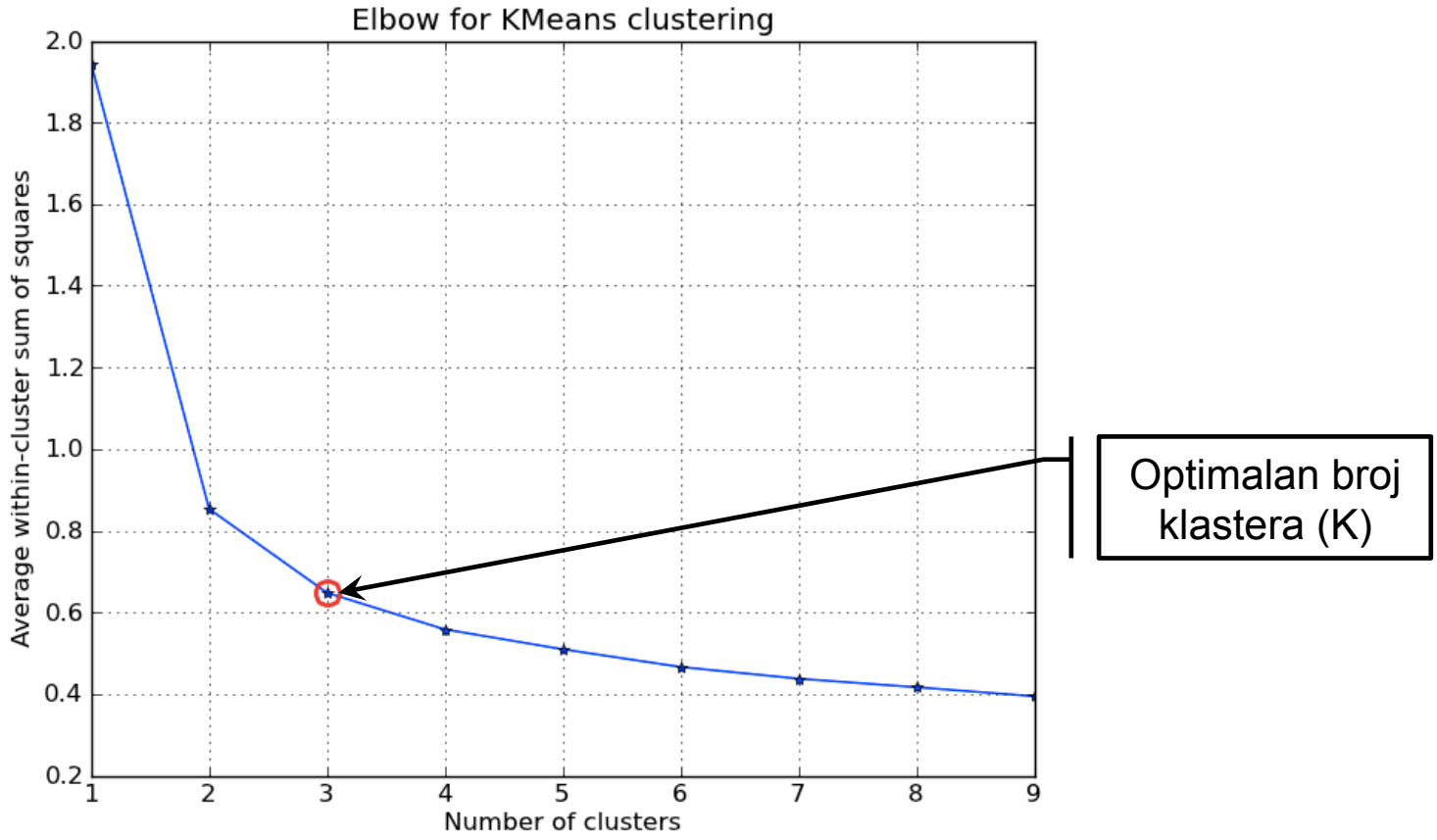
- U slučaju da posedujemo znanje o fenomenu/pojavi koju podaci opisuju
  - Pretpostaviti broj klastera (K) na osnovu domenskog znanja
  - Testirati model sa K-1, K, K+1 klastera i uporediti grešku*

- Ukoliko ne posedujemo znanje o fenomenu/pojavi
  - Krenuti od malog broja klastera i u više iteracija testirati model uvek sa jednim klasterom više
  - U svakoj od iteracija, uporediti grešku* tekućeg i prethodnog modela i kad smanjenje greške postaje zanemarljivo, prekinuti postupak

*Na primer, within cluster sum of squared errors

K-MEANS: KAKO ODREDITI K?

Kada ne posedujemo znanje o fenomenu/pojavi koja je u osnovi zadatka klasterizacije



Izvor: http://i.stack.imgur.com/BzwBY.png

K-MEANS: PRIMER PRIMENE U WEKA-I

Primer je preuzet iz članka sa IBM Developer Works sajta:

http://www.ibm.com/developerworks/library/os-weka2/

EXPECTATION MAXIMIZATION (EM) ALGORITAM

PROBABILISTIČKA KLASTERIZACIJA

EM klasterizacija spada u grupu probabilističkih pristupa klasterizaciji

Osnovna ideja: instance *ne* pripadaju jednom i samo jednom klasteru, već svaka instanca sa određenom verovatnoćom pripada svakom od klastera

PROBABILISTIČKA KLASTERIZACIJA

U osnovi ovog oblika klasterizacije je statistički model pod nazivom *finite mixture*

Mixture je skup *k* raspodela verovatnoća koje predstavljaju *k* klastera

- Klaster je praktično određen raspodelom verovatnoća
- Ove raspodele određuju verovatnoću da instanca koja pripada određenom klasteru bude opisana određenim skupom vrednosti (atributa)

Postoji, takođe, i raspodela verovatnoća koja karakteriše pripadanost klasteru tzv. *prior probability*

FINITE MIXTURE PROBLEM

Razmotrimo najjednostavniji *finite mixture* model:

- Sve instance su opisane jednim numeričkim atributom koji ima Normalnu raspodelu u svim klasterima (ukupno k klastera)
- Svaki klaster (C_i) ima specifične vrednosti parametara Normale raspodele – srednje vrednosti (μ_i) i st. devijacije (σ_i)
- p_i predstavlja tzv *prior probability* i-tog klastera (C_i) tj. verovatnoću da nasumice izabrana instanca dolazi iz C_i

Pretpostavimo da smo dobili skup instanci za koje znamo da dolaze iz ovih k klastera, ali ne znamo iz kojih, niti znamo parametre modela (μ_i, σ_i , p_i , $i=1,k$).

Problem određivanja parametara opisanog modela samo na osnovu datog skupa instanci je poznat kao *finite mixture problem*.

EM ALGORITAM KAO REŠENJE *FINITE MIXTURE* PROBLEMA

Opisani problem se može rešiti primenom postupka koji predstavlja generalizaciju K-means algoritma:

1) Inicijalno, definisati broj klastera (k) i nasumice izabrati vrednosti parametara modela (μ_i, σ_i, p_i, $i=1,k$)
2) Za date vrednosti parametara, za svaku instancu iz dataset-a, izračunati verovatnoću pripadanja svakom od klastera
3) Na osnovu verovatnoća pripadnosti klasterima (instanci iz dataset-a), odrediti nove vrednosti parametara modela

Iterativno ponavljati korake 2) i 3) dok vrednosti parametara ne počnu da konvergiraju

Opisani postupak predstavlja suštinu EM algoritma

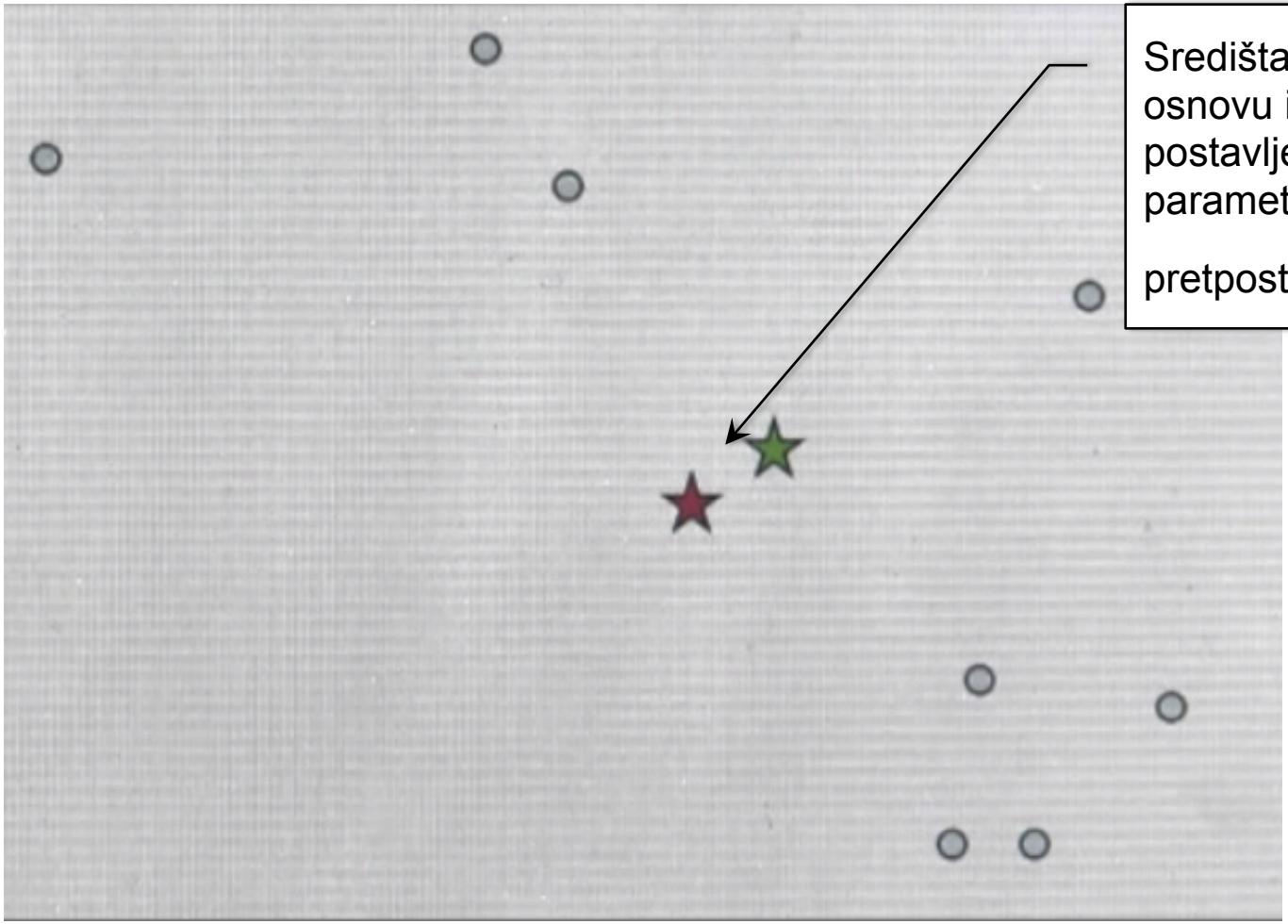
EM ALGORITAM

Sastoji se iz dva osnovna koraka:

- **E (expectation) korak** – u ovom koraku podrazumevamo da znamo vrednosti parametara modela i na osnovu njih, za svaku instancu, računamo verovatnoću pripadanja svakom od klastera
- **M (maximization) korak** – na osnovu datih instanci, računamo (ponovo) vrednosti parametara modela; maksimizacija se odnosi na usklađivanje (parametara) modela sa datim podacima

Ovi koraci se ponavljaju sve dok algoritam ne počne da konvergira

EM ALGORITAM: INICIJALIZACIJA



Primer je preuzet iz AI kursa: https://www.udacity.com/course/cs271

EM ALGORITAM: E KORAK

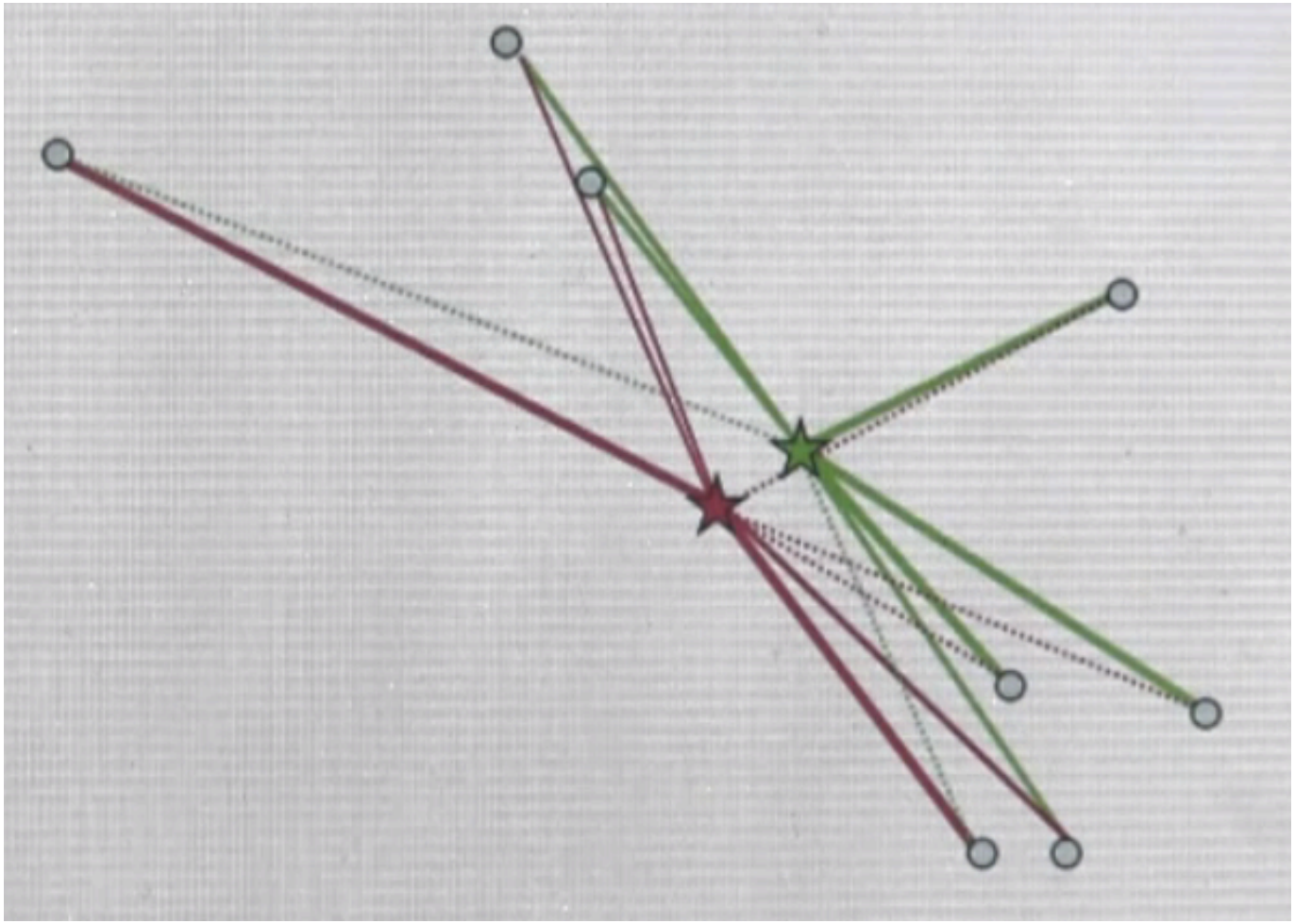
Za svaku instancu iz dataset-a x_j (j=1,n), računamo verovatnoću pripadanja i-tom klasteru (C_i, i=1,k)

$$e_{ij} = p_i * P(x_j \mid C_i)$$

$P(x_j|C_i)$ se računa primenom funkcije Normalne raspodele $f(x; \mu, \sigma)$

Podsećanje: pretpostavka je da su nam parametri – μ_i, σ_i, p_i – poznati za svako i, i=1,k

EM ALGORITAM: E KORAK



Debljina linije ukazuje na verovatnoću pripadnosti određenom klasteru tj. odražava izračunatu vrednost za e_{ij}

EM ALGORITAM: M KORAK

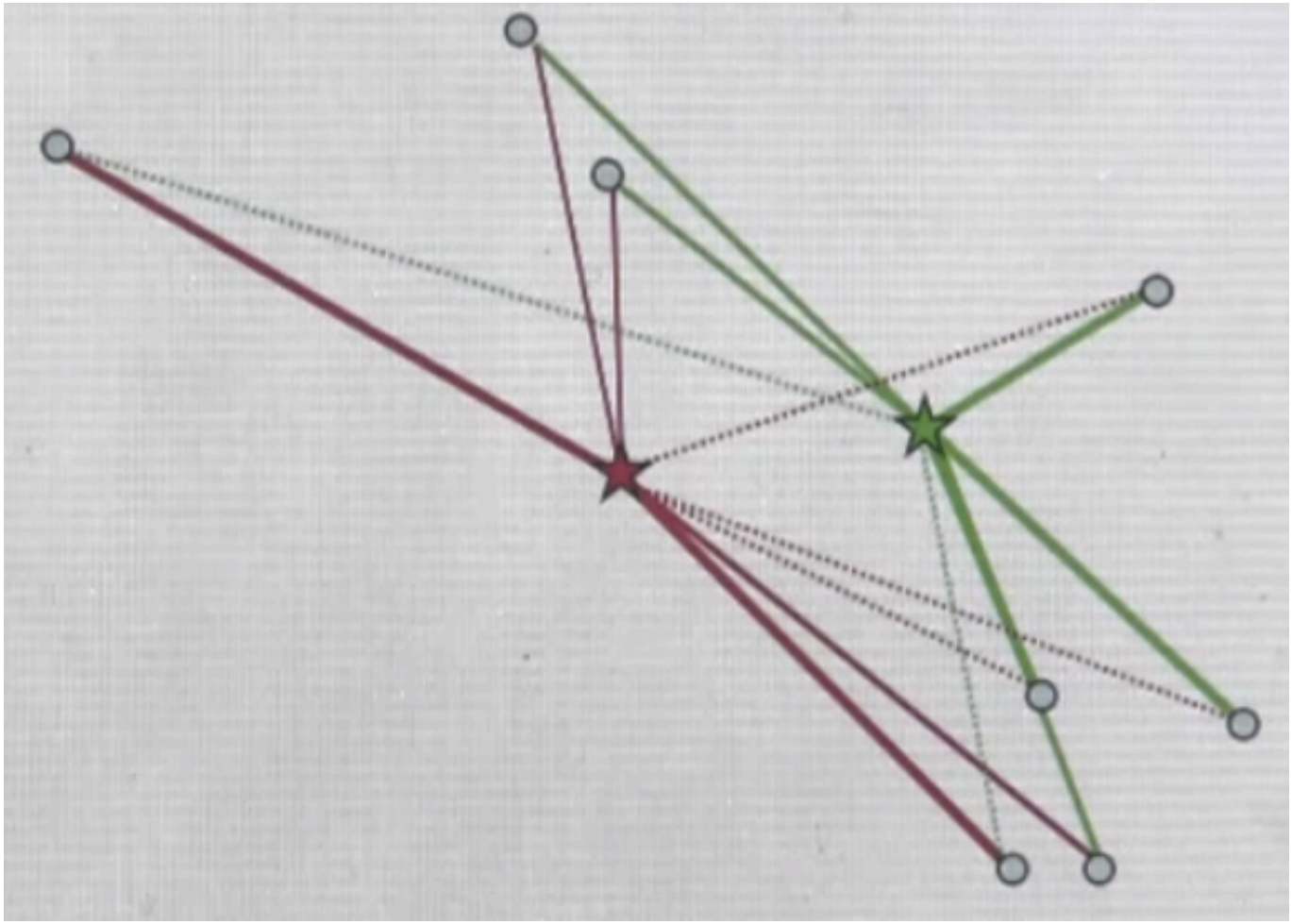
Određuju se nove vrednosti parametara modela:

$p_i = \Sigma_j e_{ij} / n$

$\mu_i = (\Sigma_j e_{ij} * x_j) / \Sigma_j e_{ij}$

$\sigma_i^2 = (\Sigma_j e_{ij} * (x_j - \mu_i)^2) / \Sigma_j e_{ij}$

EM ALGORITAM: M KORAK



Središta klastera se pomeraju na osnovu novo izračunatih vrednosti parametara modela

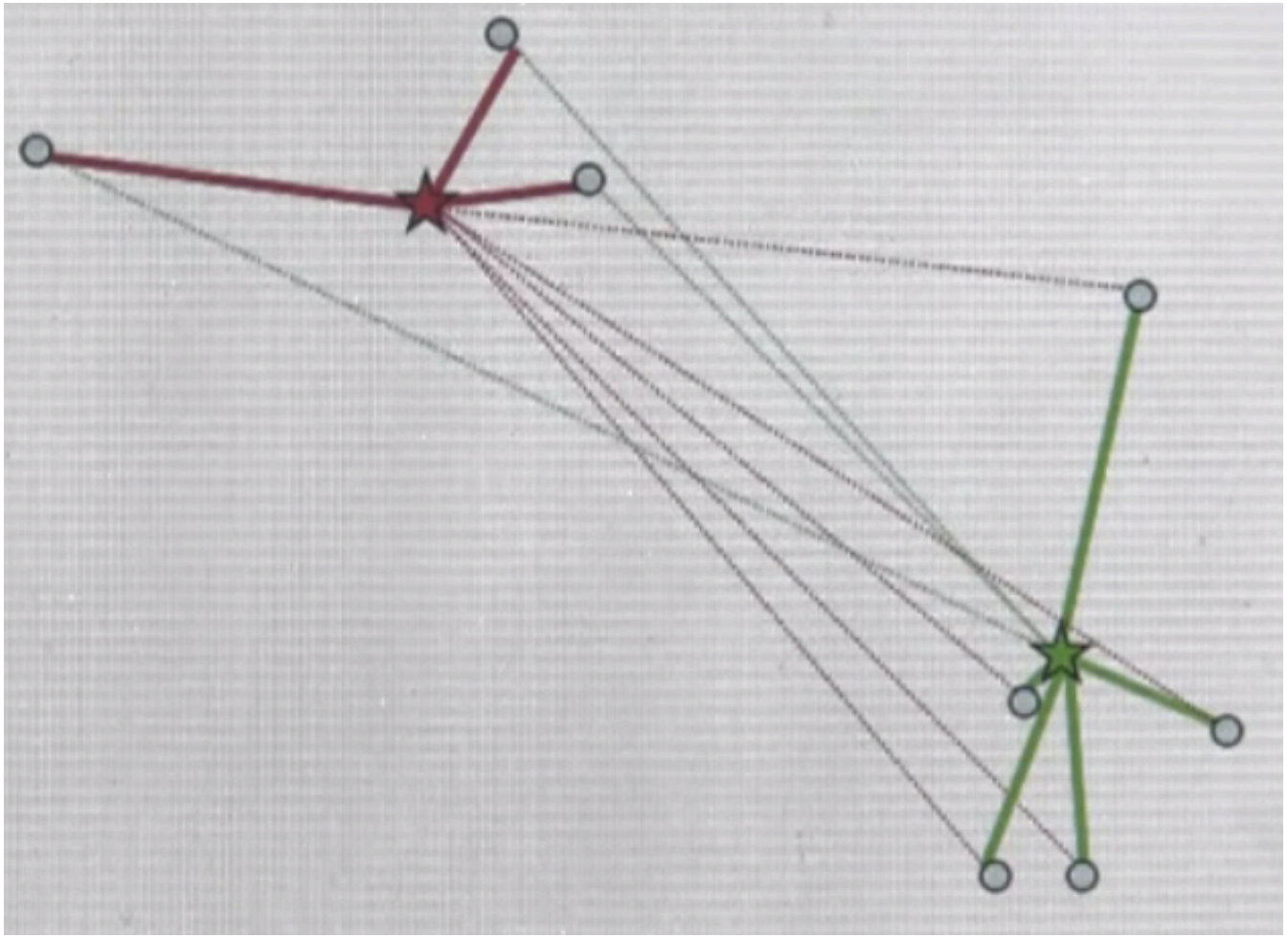
EM ALGORITAM: KONVERGENCIJA

Koraci algoritma se ponavljaju sve dok ima značajne promene (tj. porasta) loga ukupne verovatnoće modela (*overall log-likelihood*):

$$\log P(x) = \log \Sigma_i (p_i * P(x|C_i))$$

Tipično, ova vrednost intenzivno raste tokom prvih nekoliko iteracija algoritma, a zatim vrlo brzo dolazi u stanje gde maltene nema promene

EM ALGORITAM: KONVERGENCIJA



Stanje konvergencije (parametara) modela

EM ALGORITAM

Za EM algoritam se pokazuje da sigurno konvergira ka maksimumu *log-likelihood* funkcije

Međutim, reč je o lokalnom maksimumu, koji ne mora biti i globalni maksimum

Da bi se obezbedilo dostizanje globalnog maksimuma, potrebno je celu proceduru ponoviti više puta, uz različit izbor inicijalnih vrednosti parametara modela

Na kraju se, naravno, bira konfiguracija koja generiše najvišu vrednost *log-likelihood* funkcije

EM ALGORITAM

Mi smo razmatrali jednostavan *mixture* model, ali EM algoritam se može na isti način primeniti i na složenije *mixture* modele

- Umesto jednog atributa, svaka instanca može biti opisana proizvoljnim brojem atributa, pod uslovom da su atributi međusobno nezavisni
  - u tom slučaju, verovatnoće atributa se množe kako bi se dobila ukupna verovatnoća za svaku instancu
- Atributi ne moraju biti numerički, već mogu biti i nominalni
  - u tom slučaju, Normalna raspodela se ne može primeniti;
  - nominalni atribut sa *v* mogućih vrednosti se predstavlja preko *v* brojeva koji predstavljaju verovatnoću nominalnih vrednosti

EM ALGORITAM

Normalna raspodela je najčešće dobar izbor za numeričke atribute, ali ima situacija kad to nije slučaj:

- Numerički atributi koji imaju definisanu donju, ali ne i gornju granicu (npr. vremenski period); u tom slučaju se preporučuje log-normalna raspodela
- Numerički atributi koji imaju definisanu i gornju i donju granicu (npr. godine) se modeluju preko log-odds raspodele
- Atributi čije su vrednosti celi brojevi (ne decimalni), najbolje se modeluju preko Poisson-ove raspodele

EM: PRIMER PRIMENE U WEKA-I

ZAHVALNICA I PREPORUKA

Stanford

Machine Learning

Andrew Ng

Learn about the most effective machine learning techniques, and gain practice implementing them and getting them to work for yourself.

Workload: 5-7 hours/week

Taught In: English

Subtitles Available In: English

Preview

Sessions:

Oct 14th 2013 (10 weeks long) Sign Up

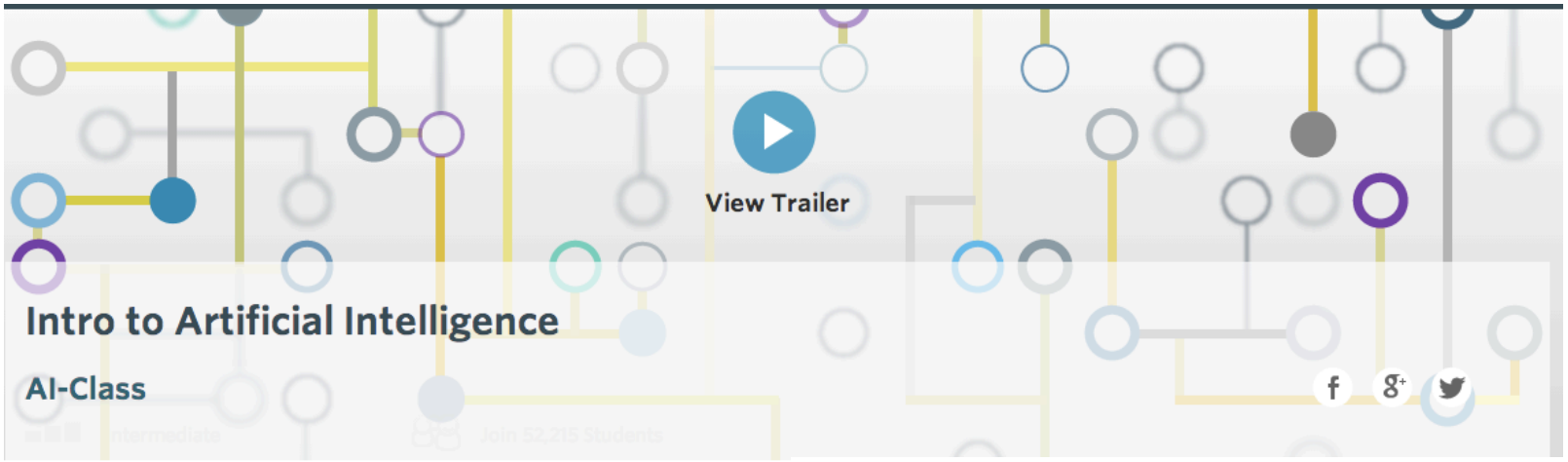
Apr 22nd 2013 (10 weeks long) Sign Up

3,484 Tweet 12k +1 13k Like

Coursera:
https://www.coursera.org/course/ml

Stanford YouTube channel:
http://www.youtube.com/view_play_list?p=A89DCFA6ADACE599

ZAHVALNICA I PREPORUKA



Intermediate

Join 52,215 Students

Class Summary

The objective of this class is to teach you modern AI. You will learn about the basic techniques and tricks of the trade. We also aspire to excite you about the field of AI.

Course Instructors

Peter Norvig

INSTRUCTOR

Peter Norvig is Director of Research at Google Inc. He is also a Fellow of the American Association for Artificial Intelligence and the Association for Computing Machinery. Norvig is co-author of the popular textbook Artificial Intelligence: A Modern Approach. Prior to joining Google he was the head of the Computation Sciences Division at NASA Ames Research Center.

Sebastian Thrun

INSTRUCTOR

Sebastian Thrun is a Research Professor of Computer Science at Stanford University, a Google Fellow, a member of the National Academy of Engineering and the German Academy of Sciences. Thrun is best known for his research in robotics and machine learning, specifically his work with self-driving cars.

URL: https://www.udacity.com/course/cs271

(Anonimni) upitnik za vaše kritike, komentare, predloge:

http://goo.gl/cqdp3l