Vytěžování dat, přednáška 5: Self Organizing Map

Miroslav Čepek

Evropský sociální fond
Praha & EU: Investujeme do vaší budoucnosti

Fakulta elektrotechnická, ČVUT

Shlukovací algoritmy a nevýhody

- Jaké znáte shlukovací algoritmy?
- KMeans
- Hierarchické shlukování
- KMeans – nedopadne pokaždé stejně, musím zkoušet počet centroidů.
- Hiearachické shlukování – musím spočítat N^2 vzdáleností. Což pro větší N není jednoduché.

Další shlukovací algoritmy

- Existuje spousta dalších algoritmů pro shlukování dat.
- Ukáži vám ještě jeden – **Self Organizing Map (SOM)**.

Kompetitivní učení

- Jedinci (reprezentanti, centroidy, neurony, jedinci) spolu soutěží – o něco :).
- Nepotřebuji žádného arbitra (učitele), který by říkal, kam se mají jedinci přesunout. Každý jedinec to umí zjistit sám.
- Jedinci se učí z příkladů.
- Systém (populace jedinců) se v průběhu času **samoorgranizuje** sám.
- A teď to zkusíme použít na shlukování.

Kompetitivní učení v pohádce

- Vzpomínáte si na pohádku o Králích z minulé přednášky?
- Do země s N domy přijelo K králů a někde se usídlili. A každý král zabral domy, které mu byli nejblíž a z nich vybíral daně. A protože lidé chtěli, aby jim byl král co nejblíž, král se přestěhoval do geometrického středu domů.
- Tím se ale některé domy ocitly blíže jinému králi a tak z nich daně začal vybírat jiný král. Králové se opět přesunout a tak dále.
- Nejbližší král tedy získá všechny daně z domů, které jsem mu nejblíž.

Kompetitivní učení v KMeans

- KMeans také používá kompetitivní učení. Jak?
- KMeans je trochu skromější.
- Reprezentanti (centroidy) soutěží o data. A nejbližší reprezentant vyhraje – zabere celou instanci a jiného reprezentant k ní nepustí. "Bere vše".

Kvantizační chyba

- Minule jsem v souvislosti s KMeans mluvil o optimalizaci (minimalizaci) chyby.
- Této chybě se říká **kvantizační chyba**. A vyjadřuje průměrnou vzdálenost mezi daty a odpovídajícími reprezentanty.
- Průměrná vzdálenost mezi krály a jejich poddanými.

$$\text{kvantizační chyba} = \frac{1}{\text{počet instancí}} \sum_{i=0}^{k} \sum_{x \in nearest(r_i)} dist(r_i, x)$$

- r_i je i-tý reprezentant. A $nearest(r_i)$ je množina instancí, které jsou mu nejblíž.
- x je jedna z instancí.

Vektorová kvantizace

- A cílem (nejen) KMeans je minimalizovat tuto chybu.
- Tím že minimalizuji kvantizační chybu tlačím reprezentanty do míst, kde se nachází hodně instancí.
- Snažím se tím aproximovat hustotu instancí pomocí (menší hustoty) reprezentantů.
- Do míst, kde je vysoká hustota instancí, se snažím dostat hodně reprezentatnů a naopak – do míst s málo instancemi dávám málo reprezentatnů.
- Cílem kvantizace vektorů je aproximace hustotu pravděpodobnosti $p(x)$ výskytu instancí x pomocí konečného počtu reprezentantů w_i.

Vítěz NEbere vše

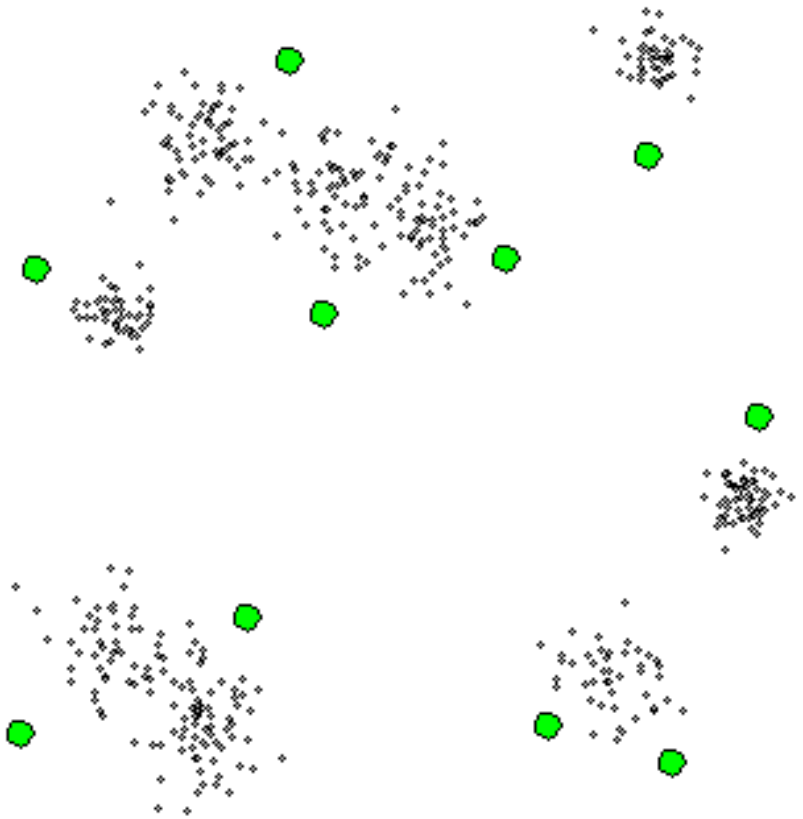
- U KMeans z domu vybírá daně jen nejbližší král. "Winner takes all".
- Co když platí, že část daní může vybírat i jiný blízký král?
- Pak už neplatí, že vítěz bere vše a něco zbude i na ostatní.
- Zde je důležité okolí – tj. jak daleko se králi ještě vyplatí jet pro svůj díl daní.
  - Malé okolí – vítěz bere vše - daně vybírá jen jeden král
  - Velké okolí – komunismus - každý král dostane z každého domu kousek.

Neuronový plyn

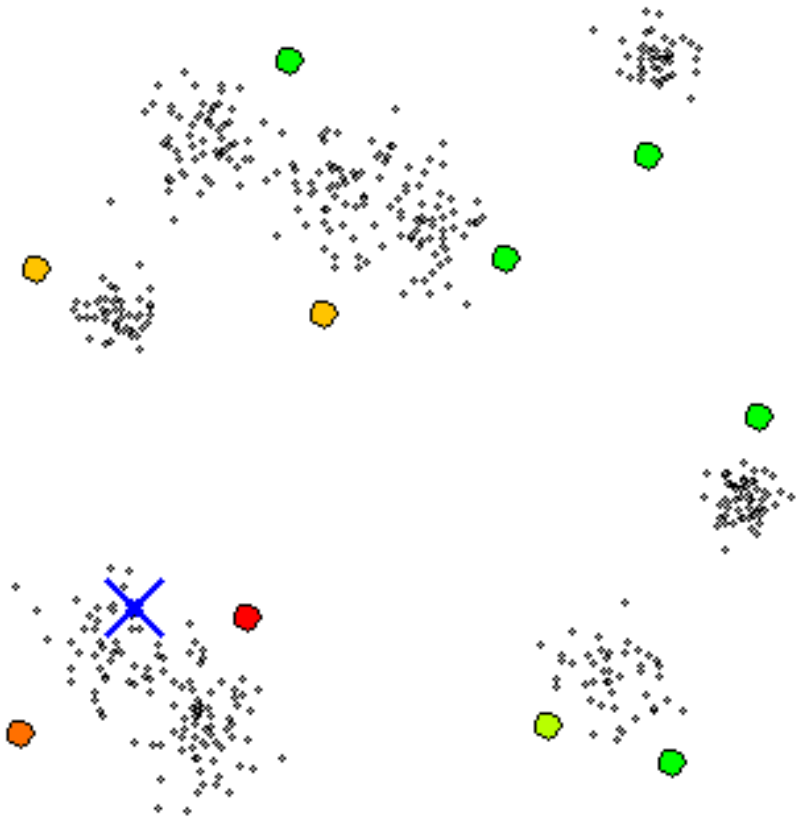
- Jiný způsob, jakým lze minimalizovat kvantizační chybu.
- Na rozdíl od KMeans používám okolí a jinak počítám nové pozice středů.

1. Náhodně rozmísti reprezentanty a zvol velké okolí.
2. Vyber *nějakou* vstupní instanci x_j.
3. Spočítej vzdálenost mezi x_j a všemi reprezentanty w_i $\forall i$.
4. Uprav pozice všech středů v závislosti na vzdálenosti od instance a okolí.
5. Zmenši okolí.
6. Pokud ještě chceš pokračovat, pokačuj bodem 2.

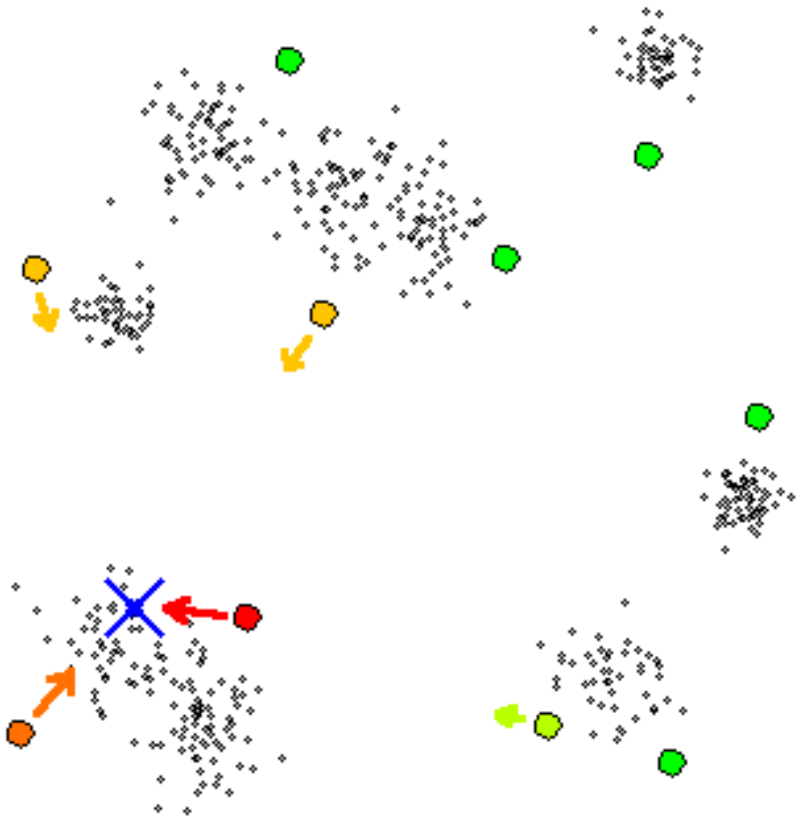
Ilustrace iterace Neuronového plynu



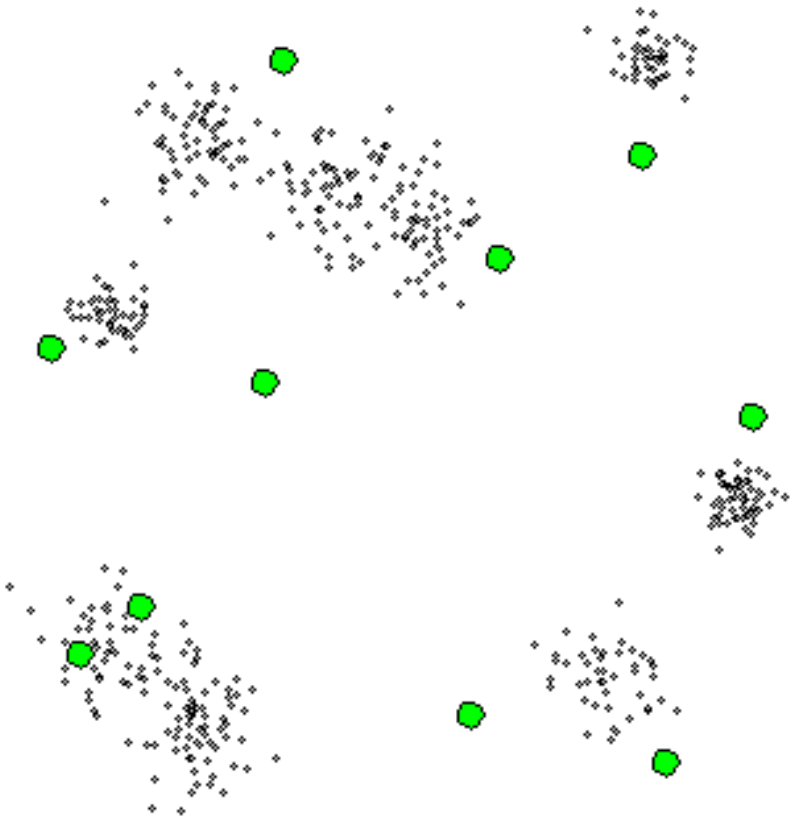
Ilustrace iterace Neuronového plynu



Ilustrace iterace Neuronového plynu



Ilustrace iterace Neuronového plynu



Neuronový plyn (II)

- V algoritmu je několik stupňů volnosti.
- "Vyber *nějakou* vstupní instanci"
  - Procházíme postupně jednotlivé instance postupně v pevném pořadí.
    - Nevhodné protože výstup může záviset na pořadí předkládání instancí.
  - Projde všechny instance jednou, pak v jiném pořadí podruhé, atd...
  - Vybírá skutečně náhodně. Čili nezaručuje, že počet předložení síti bude pro všechny instance stejný.
    - Nepoužívá se, protože není zaručeno, že nepředložím x_1 10x, pak x_2 12x, atd...

Neuronový plyn (III)

- "Uprav pozice všech středů v závislosti..."
- Čím vzdálenější reprezentant, tím se posouvá méně.
- $w_i^{t+1} = w_i^t + \eta^t e^{-k/\lambda^t}(x - w_i^t)$
  - η^t je adaptační krok v kroku t a určuje o kolik se maximálně může reprezentant posunout. (Typicky o dost menší než 1 a s roustoucím t klesá k 0).
  - k pořadí ve vzdálenosti reprezentanta od instance.
  - λ^t definuje velikost okolí a s rostoucím t klesá.

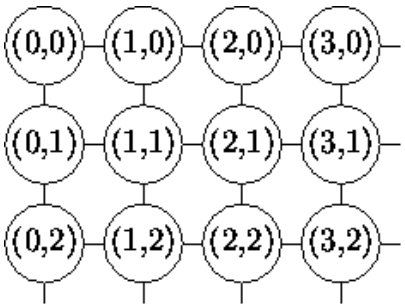
Neuronový plyn (IV)

- "Zmenši okolí"
  - Okolí (λ^t) se typicky postupně zmenšuje o nějaký násobek. Např. $\lambda^{t+1} = \lambda^t * 0.95$
  - Při zmenšování okolí se podobným způsobem zmenšuje i adaptační krok. $\eta^{t+1} = \eta^t * 0.95$.
- "Pokud ještě chceš pokračovat..."
  - Dopředu určím, že chci pokračovat dokud je $\lambda > 0.05$ nebo skonči poté, co předložíš všechny instance 10x.

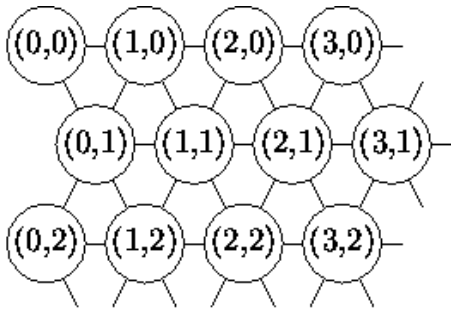
Kontrolní otázka: Za jakých podmínek se přesune nejbližší reprezentant na pozici právě předložené instance?

Vylepšení Neuronového plynu

- Jak by se dal neuronový plyn vylepšit dál?
- Co kdyby se neposouvali všechni reprezentanti blízko instance?
- Vytvoříme "přátelské" vztahy mezi reprezentanty. A budou se posouvat jen "kamarádi" vítězného reprezentanta.
- Když vizualizujeme "přátelství" mezi reprezentanty získáme pravidelnou mřížku (síť).
- Typicky se používá čtvercová nebo hexagonální síť.



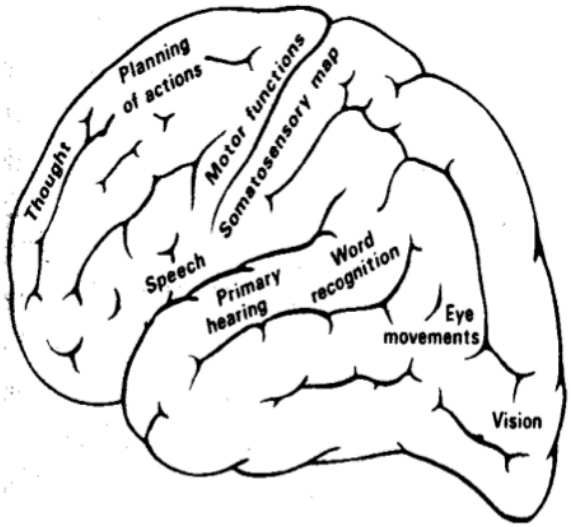
Rectangular

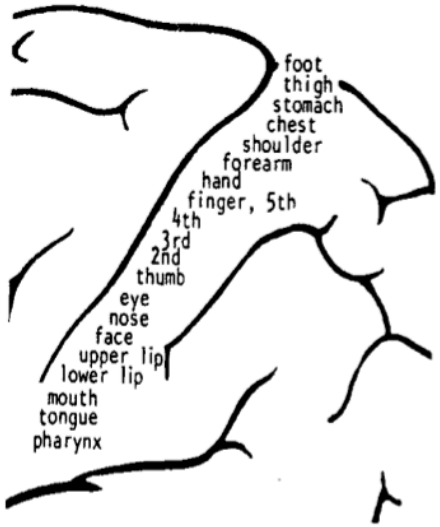


Hexagonal

Inspirace pro SOM

- Inspirací nejsou králové, ale oblasti v lidském mozku.
- Řídící centra jednotlivých končetin spolu souvisí a navzájem se ovlivňují.





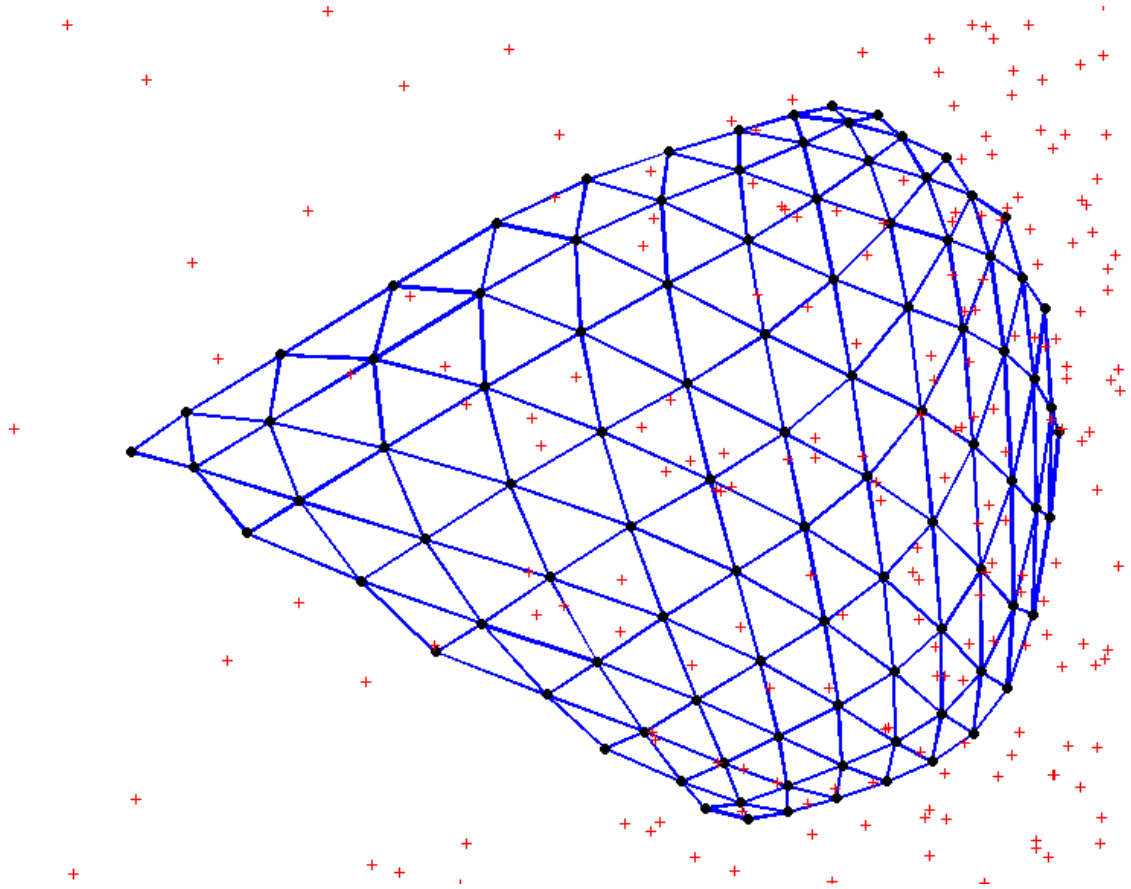
SOM

- Neuronová síť SOM je vynálezem prof. Kohonena z Finska.
- Původně vznikla jako model motorického cortexu a její první aplikace byl fontetický psací stroj.
- A protože se prof. Kohonen zabýval umělými neuronovými sítěmi, převzal i SOM jejich terminologii.

SOM - Pozice neuronů

- Každý reprezentant – v terminologii SOMu **neuron** – je opět reprezentován jeho souřadnicemi v prostoru.
- Souřadnice každého neuronu (reprezentanta) se označují jako váhy.
- Když si zkusím takovou síť vizualizovat, dostaneme například:

SOM - Pozice neuronů (II)



- WTF? Ještě před chvílí byla ta síť přece pravidelná!
- To ano, ale to byla idealizovaná projekce, aby bylo názorně vidět vztahy!

SOM - Algoritmus

- Celý SOM algoritmus vypadá pak takto:

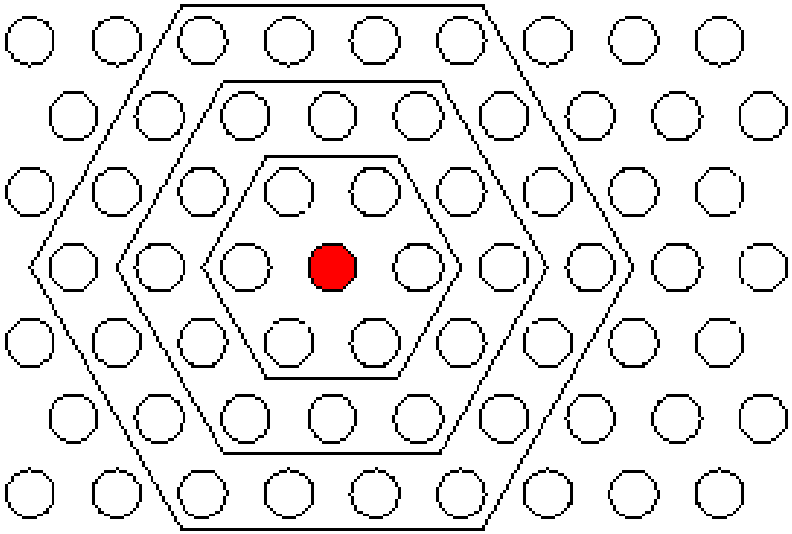
1. Inicializuj váhy všech neuronů (souřadnice všech reprezentantů).
2. Vyber *nějakou* vstupní instanci x_j.
3. Spočítej vzdálenost mezi x_j a všemi neurony w_i $\forall i$.
4. Urči nejbližší neuron – BMU (Best Matching Unit).
5. Uprav váhy (pozici) BMU a jeho okolí.
6. Pokud ještě chceš pokračovat, pokačuj bodem 2.

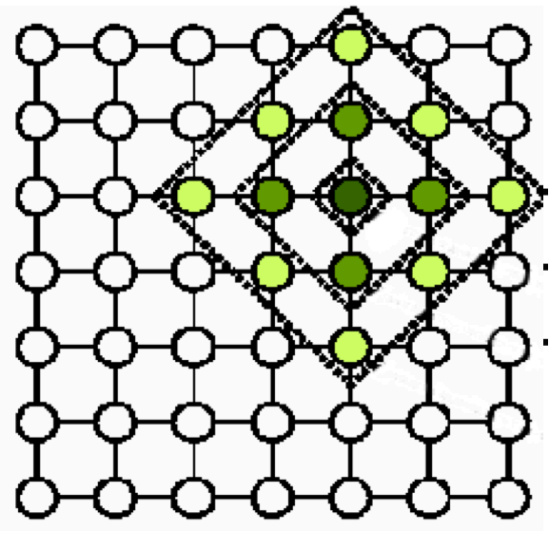
Detaily algoritmu

- Inicializace vah:
  - Rovnoměrné rozprostření pro prostoru.
  - Náhodně.
- Výběr instancí:
  - Opět můžeme vybírat instance úplně náhodně.
  - Ale mnohem častější je vybrat všechny instance jednou, pak všechny podruhé (v jiném pořadí), atd... Prochází se permutace vstupní množiny.

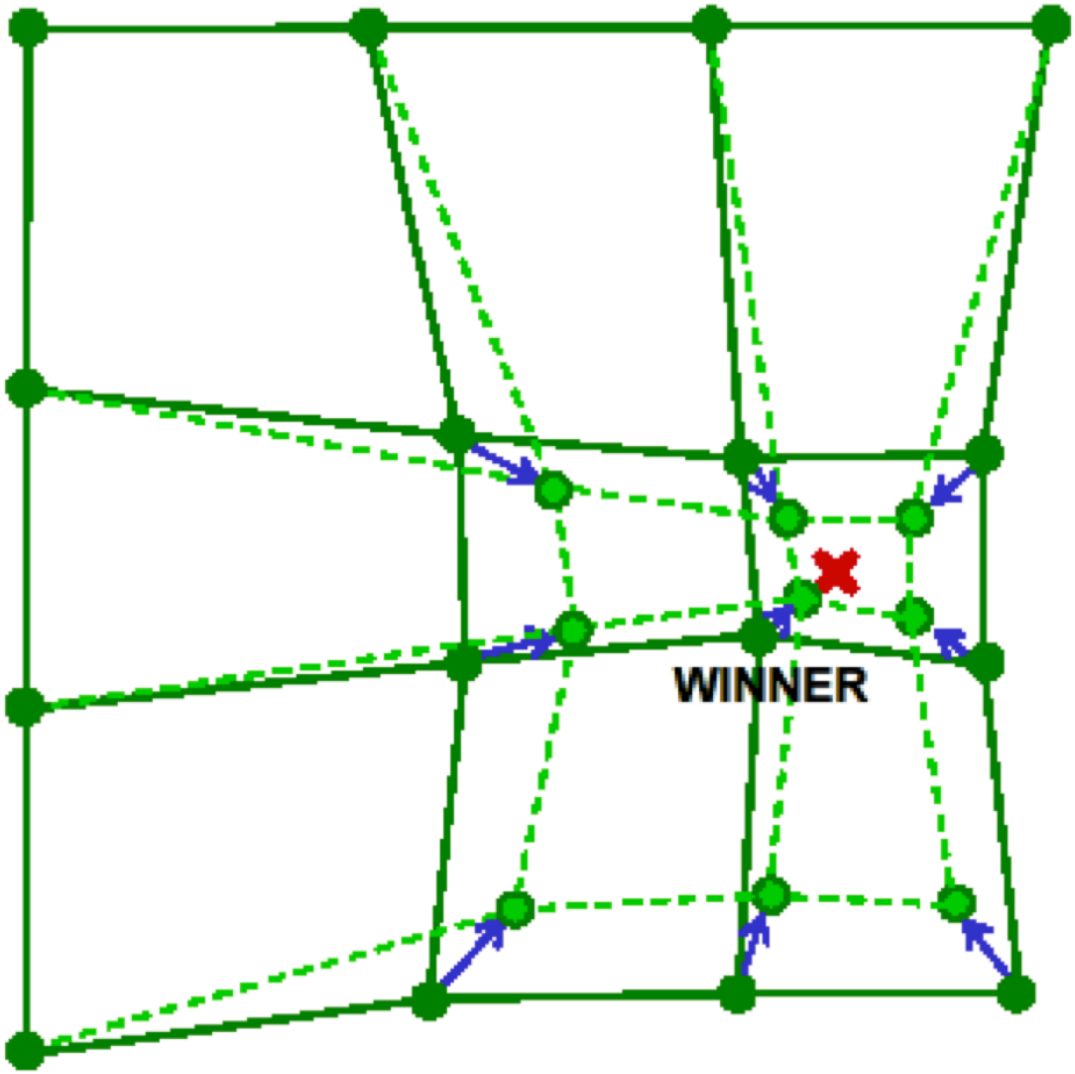
Detaily algoritmu (II)

- Výpočet vzdáleností a určení BMU je celkem jednoduchá záležitost.
- Určím si metriku, kterou budu využívat a tu aplikuji.
- Mnohem zajímavější je úprava pozice BMU a jeho okolí :).
- Jak vlastně určím neurony v okolí?





Změna vah graficky



Detaily algoritmu (III)

- Novou pozici neuronu w_i v kroku $t+1$ (po předložení vzoru x_j) určím jako:
- $w_i^{t+1} = w_i^t + \mu(t)(x_j - w_i^t)$
- Kde $\mu(t)$ je sdružený učící koeficient, který v sobě sdružuje jak vzdálenost neuronu od BMU tak i maximální možnou změnu vah (pozice).
- $\mu(t)$ s postupujícím časem klesá k nule.

Detaily algoritmu (IV)

$$\mu(t) = \alpha(t) e^{-\frac{dist(w_i, BMU)}{2\sigma^2(t)}}$$

- $\alpha(t)$ představuje učící krok (tedy jak moc se maximálně mohou změnit váhy neuronu).
- e^{blabla} určuje, že okolí neuron má tvar gausovky.
- $\sigma^2(t)$ určuje velikost okolí a postupně s časem klesá.

Příklad

Máme 3 neurony $w_1 = (0, 0) w_2 = (2, 1) w_3 = (0, 3)$ a ty jsou na lince. w_1 je sousedem w_2, w_2 je sousedem w_3 a w_1, w_2 je sousedem w_3.
A instanci $x = (1, 1)$
Který neuron je BMU? (Použijeme eukleidovskou metriku)

$$d(w_1, x) = \sqrt{(0-1)^2 + (0-1)^2} = \sqrt{2} = 1.41...$$

$$d(w_2, x) = \sqrt{(2-1)^2 + (1-1)^2} = \sqrt{1} = 1$$

$$d(w_3, x) = \sqrt{(0-1)^2 + (3-1)^2} = \sqrt{5} = 2.23..$$

Příklad (II)

BMU je tedy w_2. Řekněme, že $\sigma(t) = 1$ a $\alpha(t) = 0.25$
A zkusme vypočítat novou pozici BMU (w_2).

$$\mu(t) = \alpha(t) e^{-\frac{dist(w_i, BMU)}{2\sigma^2(t)}} = 0.25 * e^{-\frac{dist(w_2, w_2)}{2*1^2}} = 0.25 * e^0 = 0.25$$

$$w_2^{t+1} = w_2^t + \mu(t)(x - w_2^t) = (2,1) + 0.25 * ((1,1) - (2,1)) =$$
$$= (2,1) + 0.25(-1,0) = (1.75, 1)$$

Pro w_1 se posune do pozice:

$$\mu(t) = \alpha(t) e^{-\frac{dist(w_1, w_2)}{2\sigma^2(t)}} = 0.25 * e^{-\frac{1}{2}} = 0.25 * 0.606 = 0.151$$

$$w_1^{t+1} = w_1^t + \mu(t)(x - w_1^t) = (0,0) + 0.151 * ((1,1) - (0,0)) =$$
$$= (0,0) + (0.151, 0.151) = (0.151, 0.151)$$

Chyba SOM

- Stejně jako v Hierarchickém shlukování a K-Means potřebujeme nějakou míru "dobrého shluknutí".
- Kvantizační chyba
  - Ale tu už známe! To je přece chyba, o které jsme mluvili na začátku přednášky!
  - Průměrná vzdálenost mezi instancemi a nejbližšími neurony.
- Topografická chyba
  - Popisuje kvalitu "natažení" mřížky sítě na vstupní data.
  - Procento instancí, pro které platí, že jejich BMU a druhý nebližší neuron nejsou sousedy v mřížce sítě.

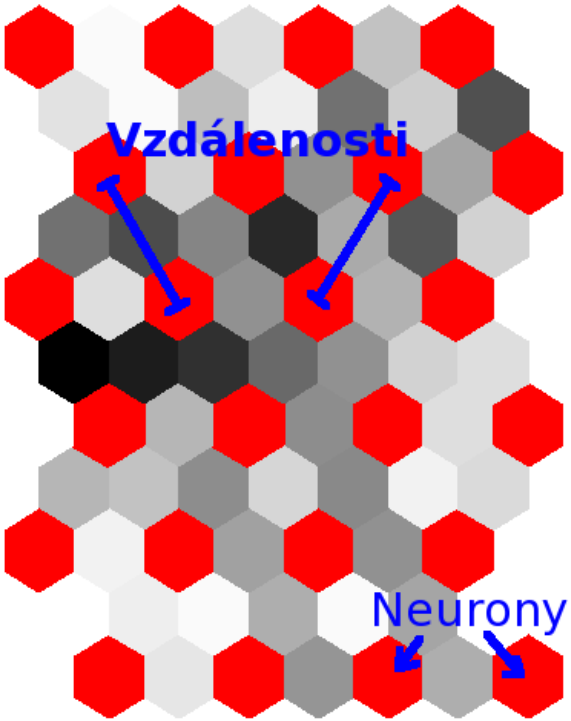
$err_{topo} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} u(x_i)$
$u(x_i) = 1 \iff$ BMU a druhý nejbližší neuron pro x_i nejsou sousedé v mřížce.

Vizualizace SOM

- Dokud máme jen 2D data, tak s vizualizací není problém. Ale co když máme více dimenzí?
  - U-Matice
  - Analýza hlavních komponent
  - Sammonova projekce

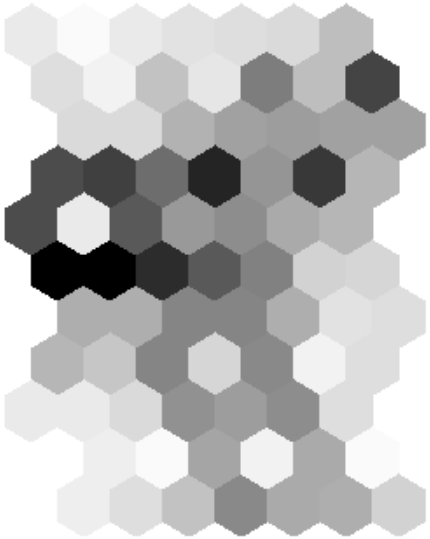
U-Matice

- Matice vzdáleností mezi váhovými vektory jednotlivých neuronů, typicky se vizualizuje, vzdáleností vyjádřeny barvou – světlá barva = malá vzdálenost.
- Zobrazuje strukturu vzdáleností v prostoru dat.



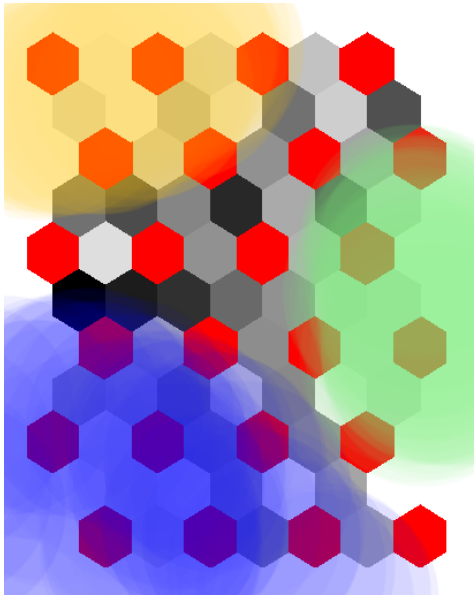
U-Matice

- Barva neuronu je vzdálenost je váhového vektoru od všech ostatních váhových vektorů.
- Tmavé váhové vektory jsou vzdáleny od ostatních datových vektorů ve vstupním prostoru.
- Světlé váhové vektory jsou obklopeny cizími vektory ve vstupním prostoru.



U-Matice (III)

- Jak z U-Matice poznám shluky?
- Ze vzdáleností mezi neurony.
- Kopce oddělují clustery (údolí).

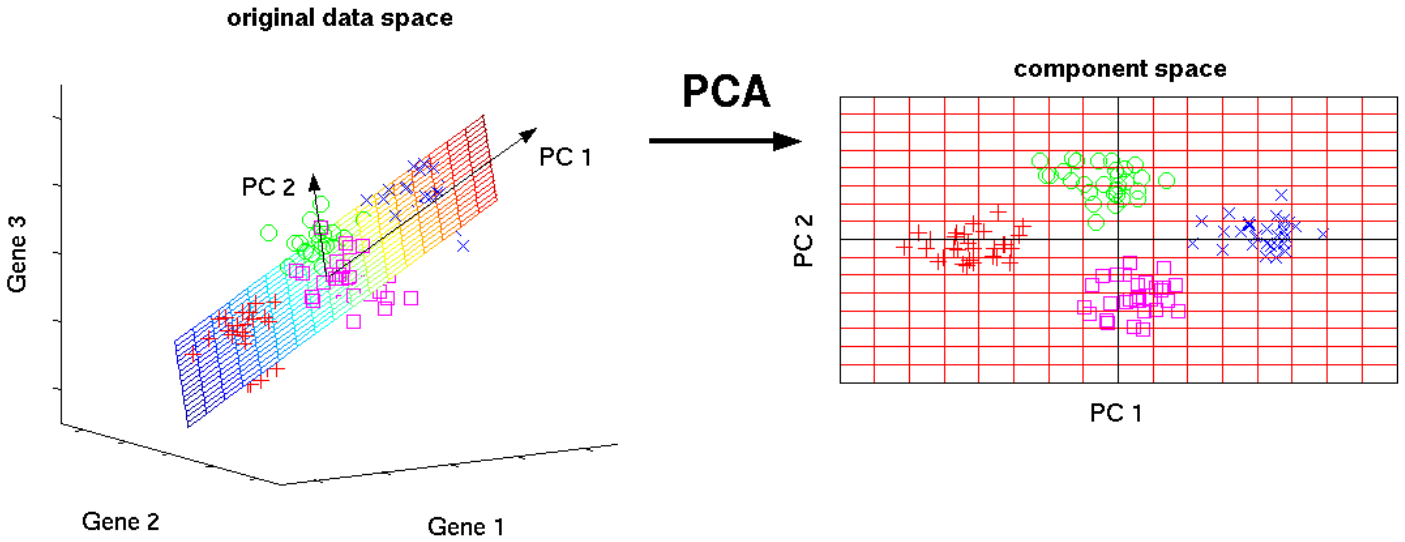


Analýza hlavních komponent

- Jde o statistickou metodu pro redukci dimenzionality.
- Označuje se jako PCA z anglického Principal Component Analysis.
- Snaží se najít nové osy, které lépe popisují data s minimální ztrátou informace.
- První osa vede směrem, který má největší rozptyl hodnot, druhá osa směrem, kde je druhý největší rozptyl, atd...
- Vždy mi vrátí stejný počet nových os, jako mají původní data dimenzí, ale já se mohu rozhodnout některé nepoužít.

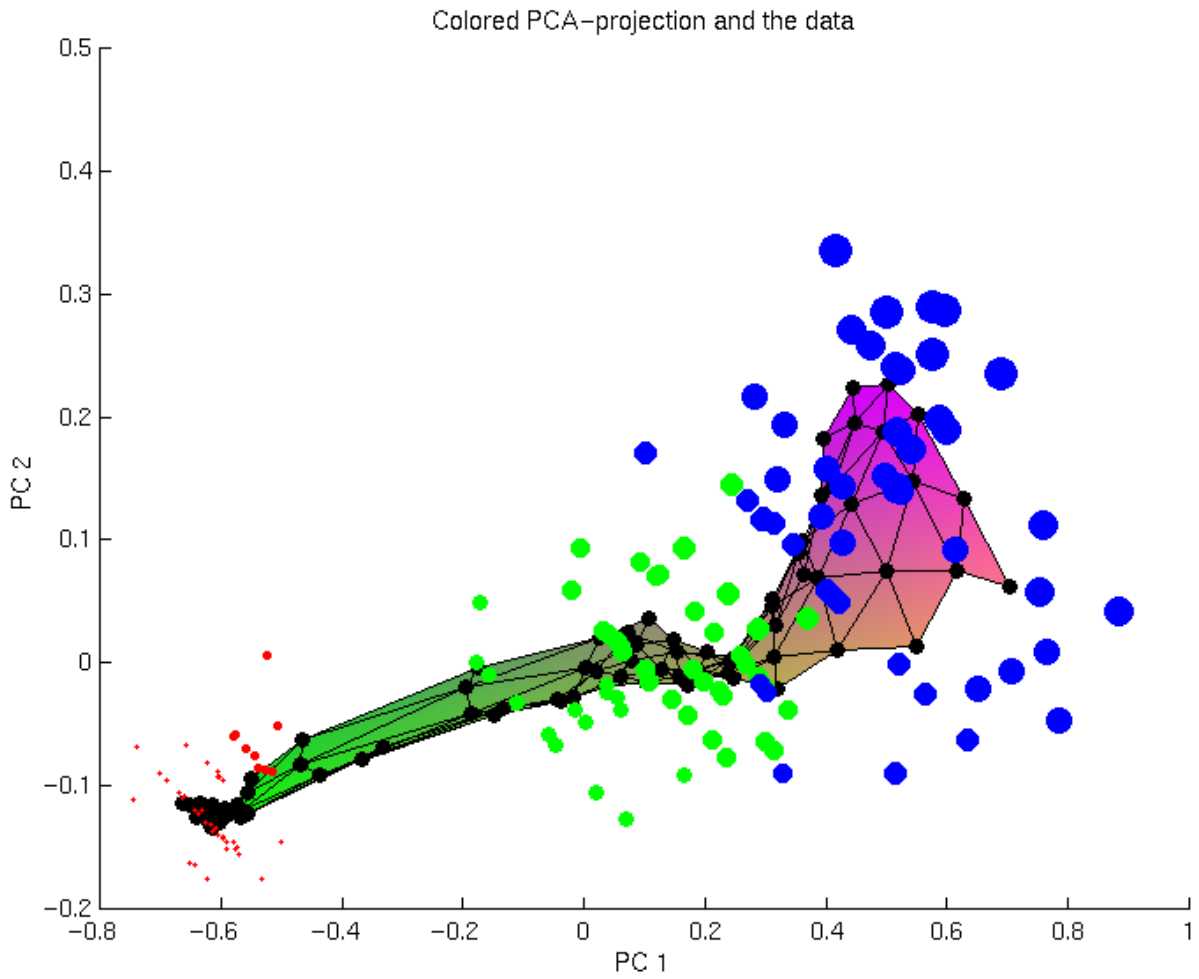
Analýza hlavních komponent (II)

- Pro výpočet nových souřadnic se používá konvariance, vlastní čísla a vlastní vektory.
- Tím vás nebudu trápit :).
- `http://www.cs.otago.ac.nz/cosc453/student_tutorials/principal_components.pdf`



Využití PCA v SOM

- Nyní můžu provést PCA projekci SOM sítě do 2D a zobrazit si ji.



Využití PCA mimo SOM

- Samozřejmě využití PCA není nutně limitováno jen na použití v SOM, ale můžu ji použít například pro průzkumu dat.
- Stejně tak, některé metody vytěžování dat nemají rády příliš mnoho dimenzí a PCA jim můžete pomoci k lepším výsledkům.
- Nevýhodou je umělost nových os, která znesnadňuje interpretaci získaných výsledků.
- $0.125 * \textit{petal\_length} + 0.578 * \textit{petal\_width} + 0.934 * \textit{sepal\_length} - .0346 * \textit{sepal\_width}$

Sammonova projekce

- Jinou možností je Sammonova projekce.
- Ta netransformuje osy, ale znovu umísťuje objekty v novém (méně dimenzionálním) prostoru.
- Při umisťování se snaží zachovat vztahy v datech (data, která byla blízko v původním prostoru, budou blízko i v novém prostoru).

Sammonova projekce (2)

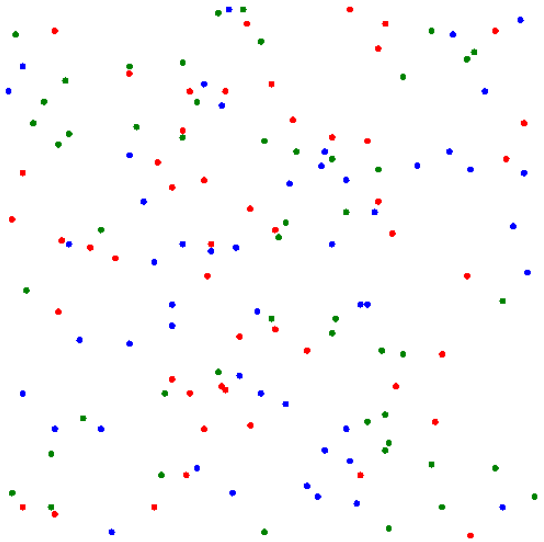
- Sammonova projekce se snaží minimalizovat následující funkci:

$$E = \frac{1}{\sum_{i<j} dist^*(x_i, x_j)} \sum_{i<j} \frac{(dist^*(x_i, x_j) - dist(x_i, x_j))^2}{dist^*(x_i, x_j)}$$

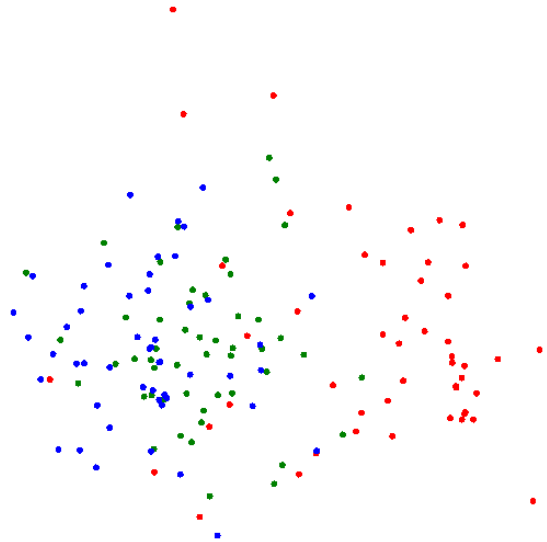
- $dist^*(x_i, x_j)$ je vzdálenost x_i a x_j v původním prostoru.
- $dist(x_i, x_j)$ je vzdálenost x_i a x_j v novém prostoru (v projekci).
- Pro minimalizaci se používají standardní optimalizační metody – pro tuto úlohu typicky iterační metody.
- Při minimalizaci se pohybuje body v novém prostoru (v projekci). Tím ovlivníte $dist(x_i, x_j)$ a můžete dosáhnout zmenšení E.

Sammonova projekce - ukázka

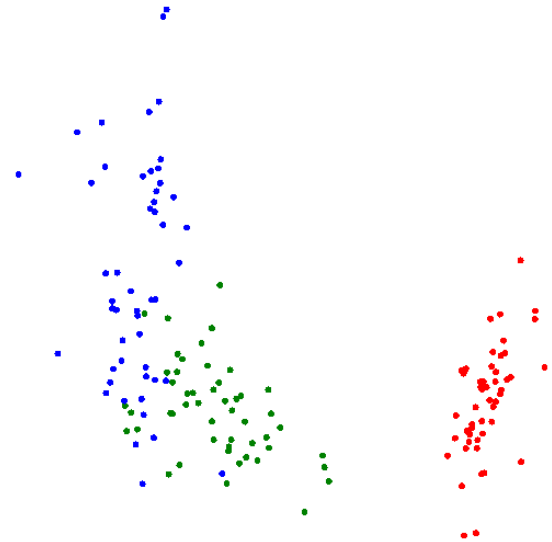
Ukázka několika iterací Sammonovy projekce na Iris datech.



Počáteční stav



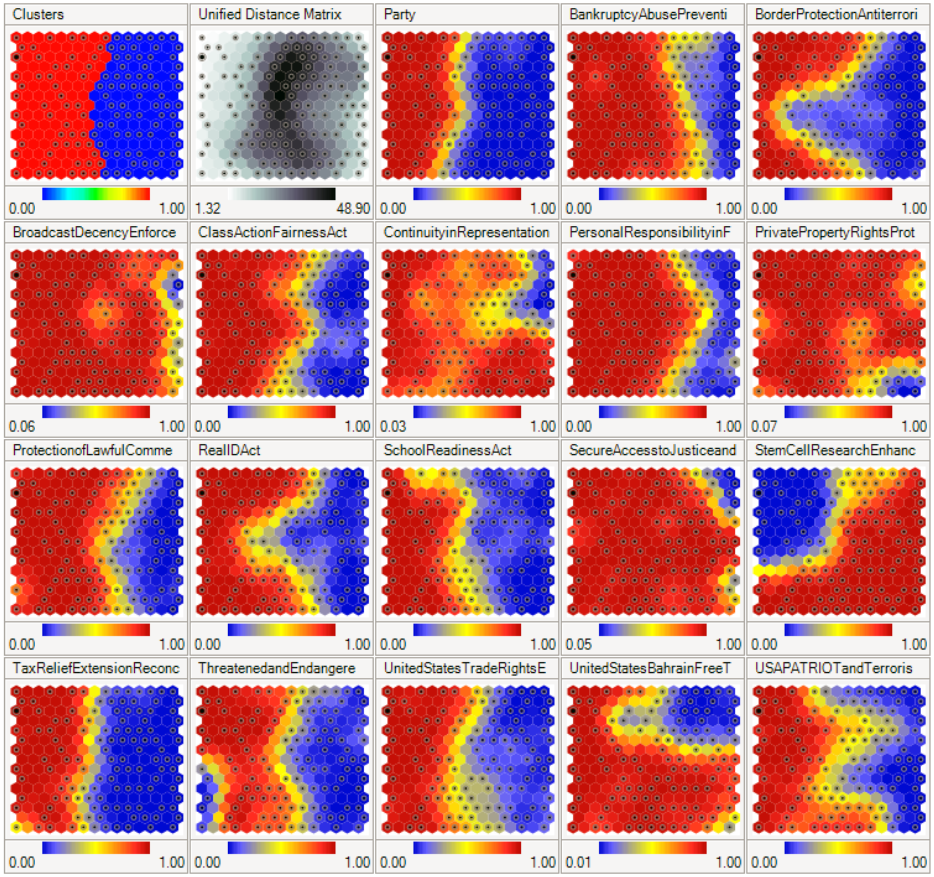
1. iterace



10. iterace

Další vizualizace – Příznakové grafy

- Vychází z U-Matice, ale místo vzdálenosti jednotlivých vektorů se do šestiúhelníčků kreslí hodnoty vybrané proměnné.



Další čtení

- http://www.cis.hut.fi/somtoolbox/theory/somalgorithm.shtml
- http://www.cis.hut.fi/research/som-research/
- http://www.ai-junkie.com/ann/som/som1.html
- www.cs.bham.ac.uk/~jxb/NN/l16.pdf