



Sistemi Intelligenti Clustering

Alberto Borghese
Università degli Studi di Milano
Laboratorio di Sistemi Intelligenti Applicati (AIS-Lab)
Dipartimento di Scienze dell'Informazione
Alberto.borghese@unimi.it



A.A. 2013-2014





Riassunto

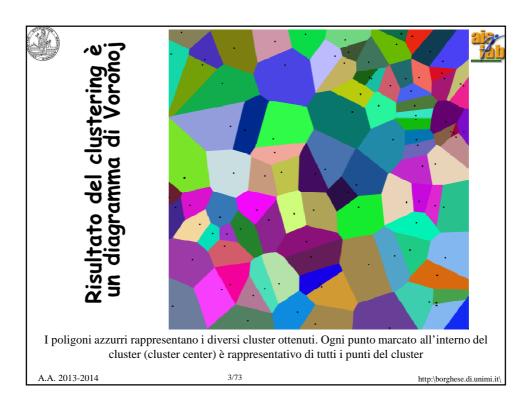


- Clustering partitivo
- Mappe di Kohonen
- Regressione
- Regressione multi-scala
- Classificazione

A.A. 2013-2014

2/73

 $http: \! \backslash borghese.di.unimi.it \backslash$





K-means (partitional): framework



- Siano $X_1, ..., X_D$ i dati di addestramento, features (per semplicità, definiti in R^2);
- Siano $C_1, ..., C_K$ i *prototipi* di K classi, definiti anch'essi in R^2 ; ogni *prototipo* identifica il baricentro della classe corrispondente;
- Lo schema di classificazione adottato sia il seguente: " X_i appartiene a C_j se e solo se C_j è il *prototipo* più vicino a X_i (distanza euclidea)";
- L'algoritmo di addestramento permette di determinare le posizioni dei prototipi C_i mediante successive approssimazioni.

A.A. 2013-2014 4/73

 $http: \borghese.di.unimi.it \label{limit} \\$

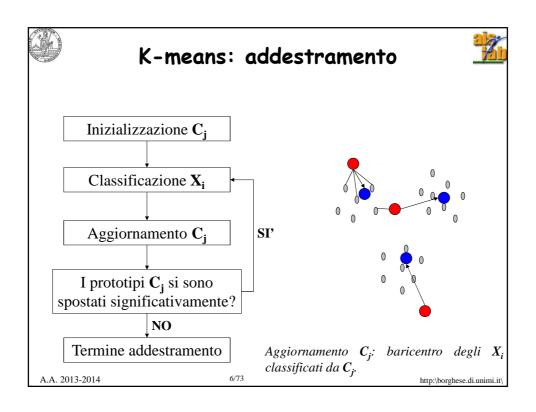


Algoritmo K-means



L'obiettivo che l'algoritmo si prepone è di minimizzare la varianza totale intra-cluster. Ogni cluster viene identificato mediante un centroide o punto medio. L'algoritmo segue una procedura iterativa. Inizialmente crea K partizioni e assegna ad ogni partizione i punti d'ingresso o casualmente o usando alcune informazioni euristiche. Quindi calcola il centroide di ogni gruppo. Costruisce quindi una nuova partizione associando ogni punto d'ingresso al cluster il cui centroide è più vicino ad esso. Quindi vengono ricalcolati i centroidi per i nuovi cluster e così via, finché l'algoritmo non converge (Wikipedia).

A.A. 2013-2014 5/73 http:\borghese.di.uni





Algoritmo K-means::formalizzazione



- Dati N pattern in ingresso {x_i} e C_k prototipi che vogliamo diventino i centri dei cluster, x_i e $C_k \in R^N$. Ciascun cluster identifica una regione nello spazio, P_k .
- Valgono le seguenti proprietà:

$$\bigcup_{k=1}^{K} P_k = Q \supseteq R^D \qquad \text{I cluster coprono lo spazio delle feature}$$

$$\bigcap_{k=1}^{K} P_k = \emptyset \qquad \text{I cluster sono disgiunti.}$$

$$x_j \in C_k \qquad \text{Se: } \left(\left| x_j - C_k \right| \right)^2 \le \left(\left| x_j - C_l \right| \right)^2 \ l \ne k$$

$$\bigcap^{K} P_{k} = \emptyset$$
 I cluster sono disgiunti.

- La funzione obbiettivo viene definita come: $\sum_{i=1}^{K} \sum_{j=1}^{N} \left(|x_{j(k)} C_k| \right)^2$

A.A. 2013-2014



Algoritmo K-means::dettaglio dei passi



- Inizializzazione.
 - ◆ Posiziono in modo arbitrario o guidato i K centri dei cluster.
- Iterazioni
 - Assegno ciascun pattern al cluster il cui centro è più vicino, formando così un certo numero di cluster ($\leq K$).
 - Calcolo la posizione dei cluster, Ck, come baricentro dei pattern assegnati ad ogni cluster, sposto quindi la posizione dei centri dei cluster.
- Condizione di uscita
 - I centri dei cluster non si spostano più.

A.A. 2013-2014



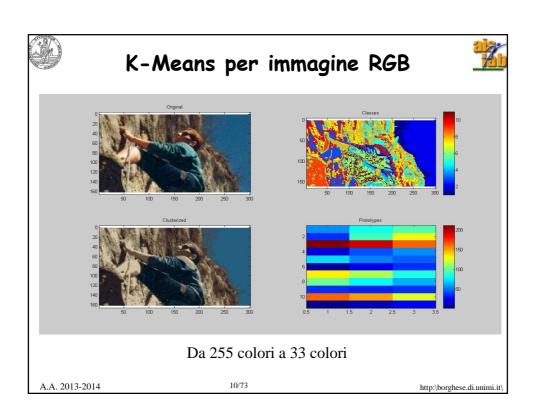
K-means::limiti



- Partitional, hard, deterministic;
- Veloce, semplice da implementare;
- Trova un minimo locale della funzione $f=\Sigma_j\Sigma_i[dist(x_i,prot_j)]/N_i$;
- Il risultato dipende dall'inizializzazione!
- Possono essere usati altri metodi (es. GA) per inizializzare K-means... es. GA per la minimizzazione di f, effettuano una ricerca globale, ma sono lenti!

Sw in Matlab available

A.A. 2013-2014 9/73 http:\b



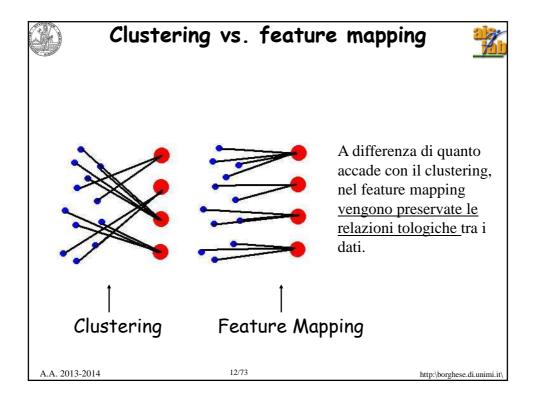


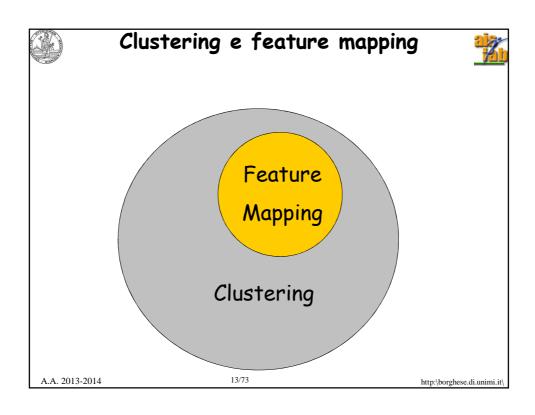
Riassunto

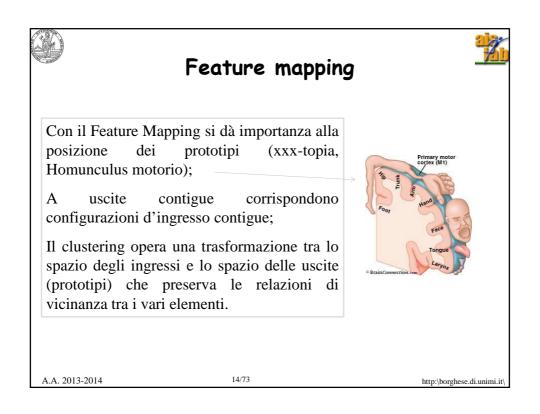


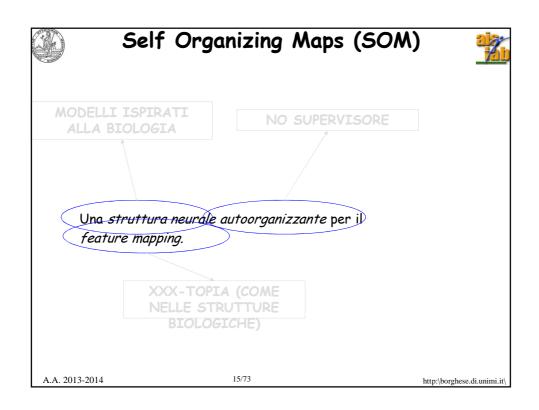
- Clustering partitivo
- Mappe di Kohonen
- Regressione
- Regressione multi-scala
- Classificazione

A.A. 2013-2014 11/73













Tipo di apprendimento

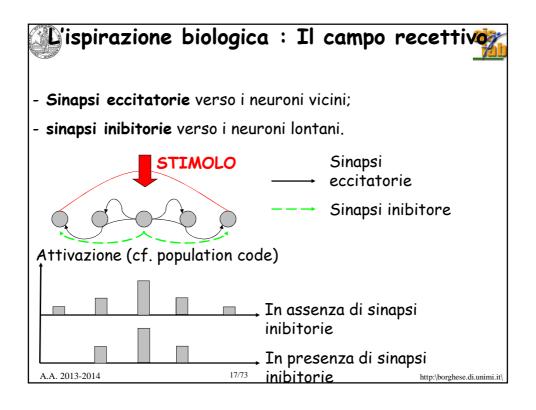
COMPETITIVE LEARNING. Apprendimento competitivo. Dato un certo input, le unità **competono** tra loro per "aggiudicarsi" l'input.

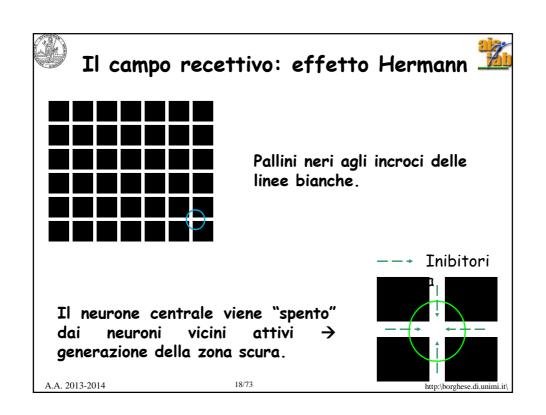
Questo meccanismo può essere hard. Nel caso estremo: "winner-take-all", "spara" un solo neurone per volta (grandmother cell). Opppure può essere soft, le unità raggiungono un grado diverso di "vincita".

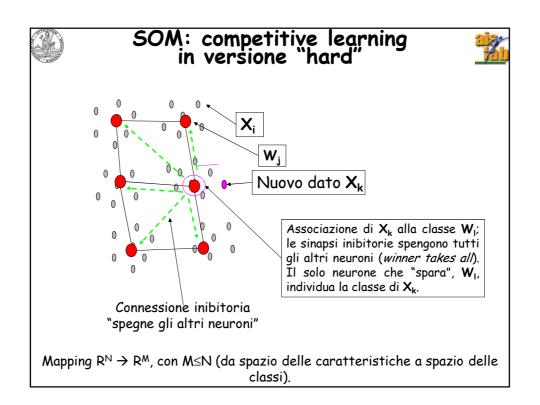
Winner-take-all → hard approach

More than one winner \rightarrow *soft approach*

A.A. 2013-2014 16/73 http:\borghese.di.unimi.it\





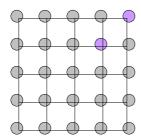




SOM: organizzazione topologica



I neuroni della SOM sono ordinati topologicamente nello spazio dei neuroni (es. griglia ordinata in R²). In tale spazio viene definita la distanza tra neuroni.



La distanza tra i due neuroni (nello spazio dei neuroni) è:

$$\int (\Delta x^2 + \Delta y^2) = 1.4142$$
 [Metrica Euclidea]

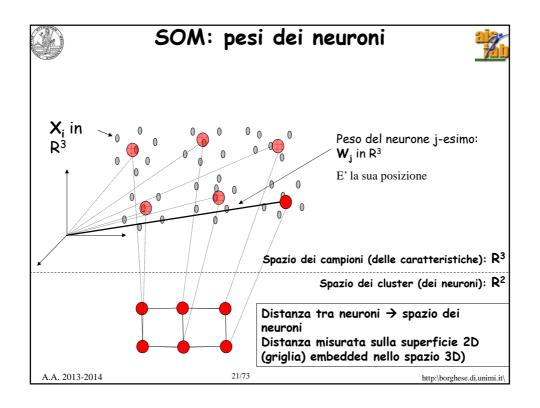
$$|\Delta \times| + |\Delta y| = 2$$
 [Manhattan]

...

A.A. 2013-2014

20/73

 $http: \backslash borghese.di.unimi.it \backslash$





SOM: addestramento



- Siano $X_1, ..., X_D$ i dati di addestramento (per semplicità, definiti in R^3);
- siano $W_1, ..., W_K$ i *prototipi* di K classi, definiti anch'essi in \mathbb{R}^3 ; ogni *prototipo* identifica il peso di un neurone della SOM $(\mathbf{W_i})$;
- lo schema di associazione adottato sia il seguente: " X_i appartiene a W_j se e solo se W_j è il prototipo (peso del neurone) più vicino a X_i , nello spazio dei campioni (delle caratteristiche, R^3)";
- l'algoritmo di addestramento permette di determinare i pesi dei neuroni (le posizioni dei prototipi) W_j mediante successive approssimazioni;
- L'algoritmo di addestramento tiene conto della topologia dei neuroni nello spazio dei neuroni (feature mapping).

A.A. 2013-2014 22/73 http:\borghese.di.unimi.i



SOM: output



- All'interazione k- esima, si presenti alla rete il dato X_i;
- Unità vincente (associazione): j^* t.c. $\|\mathbf{W}_{i^*} - \mathbf{X}_{i}\| = \min_i \|\mathbf{W}_{i} - \mathbf{X}_{i}\|$
- Uscita:
 - $u_{j^*} = 1$, se $j = j^*$
 - $u_j = 0$ se j!=j*

UNITA' VINCENTE

A.A. 2013-2014 23/73



Competitive learning



- All'interazione k- esima, si presenti alla rete il dato X_i ;
- Aggiornamento di tutti i prototipi W_i;
- Generalized competitive Learning Rule:

AGGIORNAMENTO PESI DEI NEURONI

 $\Lambda_k(i,j)$ è una funzione "campo recettivo"

FUNZIONE DE

A.A. 2013-2014

24/73

 $http: \label{lem:http:borghese.di.unimi.it} \\$



Soft-clustering



$$\Delta \mathbf{W}_{j} = \eta_{k} \Lambda_{k}(i,j) (\mathbf{X}_{i} - \mathbf{W}_{j})$$

 $\Lambda_k(i,j)$ è l'elemento chiave. I "Campi recettivi" dei diversi neuroni sono parzialmente sovrapposti.

In "Competitive clustering" $\Lambda_k(i,j)$ è una Gaussiana nello spazio dei dati \underline{o} dei prototipi (mappe di Kohonen).

In "Neural-gas" $\Lambda_k(i,j)$ è una ranking function nello spazio dei dati e dei prototipi.

In "Fuzzy c-means" $\Lambda_k(i,j)$ è realizzata mediante membership function nello spazio dei dati.

A.A. 2013-2014 25/73



SOM e competitive learning



- All'interazione k- esima, si presenti alla rete il dato X_i ;
- Unità vincente (associazione): j^* t.c. $||\mathbf{W}_{i^*} - \mathbf{X}_{i}|| = \min_i ||\mathbf{W}_{i} - \mathbf{X}_{i}||$

UNITA' VINCENTE

- Competitive Learning Rule (SOM, Kohonen '81):

AGGIORNAMENTO PESI DEI NEURONI

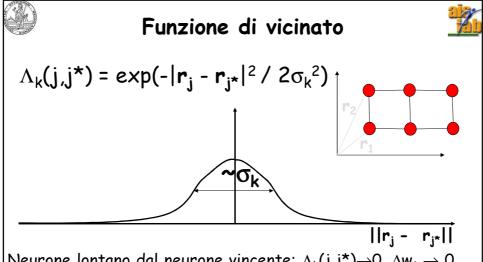
FUNZIONE DI

Calcolata nello spazio dei prototipi

A.A. 2013-2014

26/73

 $http: \backslash borghese.di.unimi.it \backslash$



Neurone lontano dal neurone vincente: $\Lambda_k(j,j^*) \rightarrow 0$, $\Delta w_j \rightarrow 0$ $\sigma_k \rightarrow 0$, l'esponenziale va rapidamente a O, solo il neurone vincente, j^* , viene aggiornato.

 $\sigma_k \to \infty$ l'esponenziale rimane costantemente = 1. aggiorno tutti i neuroni di una quantità pari a: $\Delta W_i = \eta_k (X_i - W_i)$

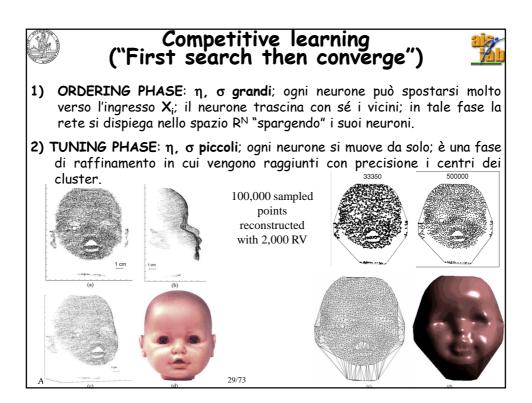
Funzione di vicinato nel tempo

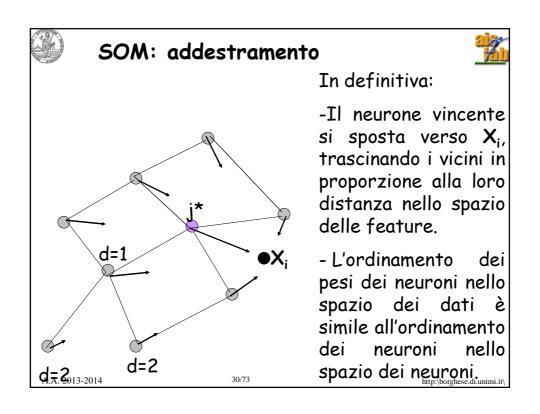
k (# esempi presentati)

$$\Delta \mathbf{w_j} = \eta_k \Lambda_k(\mathbf{j}, \mathbf{j^*}) (\mathbf{X_i} - \mathbf{w_j}) \rightarrow \mathbf{w'} = \mathbf{w} + \eta_k \Lambda_k \mathbf{X_i} - \eta_k \Lambda_k \mathbf{w}$$
$$\Lambda_k(\mathbf{j}, \mathbf{j^*}) = \exp(-||\mathbf{r_j} - \mathbf{r_{j^*}}||^2 / 2\sigma_k^2)$$

Procedendo nell'addestramento della rete, un neurone perde la capacità di spostare i suoi vicini.

A.A. 2013-2014 28/73 http:\borghese.di.unimi.it\

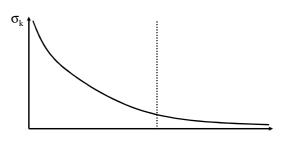






Funzione di vicinato nel tempo





k (# esempi presentati)

$$\Delta \mathbf{w_j} = \eta_k \Lambda_k(\mathbf{j}, \mathbf{j^*}) (\mathbf{X_i} - \mathbf{w_j}) \rightarrow \mathbf{w'} = \mathbf{w} + \eta_k \Lambda_k \mathbf{X_i} - \eta_k \Lambda_k \mathbf{w}$$
$$\Lambda_k(\mathbf{j}, \mathbf{j^*}) = \exp(-||\mathbf{r_j} - \mathbf{r_{j^*}}||^2 / 2\sigma_k^2)$$

Procedendo nell'addestramento della rete, un neurone perde la capacità di spostare i suoi vicini.

A.A. 2013-2014

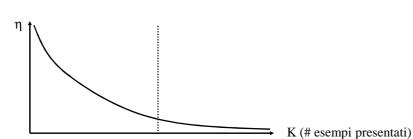
31/73

http:\borghese di unimi it



Learning rate nel tempo





$$\Delta w_j = \eta_k \; \Lambda_k(j,j^*) \; (\boldsymbol{X_i} - \boldsymbol{w_j}) \to \boldsymbol{w'} = \boldsymbol{w} + \eta_k \Lambda_k \boldsymbol{X_i} - \eta_k \Lambda_k \boldsymbol{w_i}$$

Procedendo nell'addestramento della rete, i pesi dei neuroni perdono la possibilità di muoversi => rete più stabile.

A.A. 2013-2014

32/73

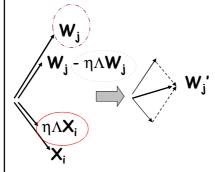
 $http: \label{lem:http:lorghese.di.unimi.it} http: \label{lem:http:lorghese.di.unimi.it}$



Competitive Learning come forze contrapposte



$$\Delta \mathbf{W_{j}} = \eta_{k} \Lambda_{k}(i,j) (\mathbf{X_{i}} - \mathbf{W_{j}}) \rightarrow \mathbf{W_{j}}' = \mathbf{W_{j}} + \eta_{k} \Lambda_{k}(i,j) \mathbf{X_{j}} - \eta_{k} \Lambda_{k}(i,j) \mathbf{W_{j}}$$



Il peso **W**j del neurone vincente j si sposta verso l'ingresso presentato **X**i.

- $\eta \mathbf{W_j}$ evita che il peso $\mathbf{W_j}$ cresca a dismisura.

A.A. 2013-2014 33/73 http:\b



SOM: addestramento



- L'addestramento avviene presentando alla rete i vettori (dati) $\mathbf{X}_i \in \mathbb{R}^N$ per un numero di epoche E;
- Per ogni esempio presentato \mathbf{X}_{i} vengono aggiornati i pesi dei neuroni della rete;
- Durante l'addestramento il learning rate η e la neighborhood distance σ decrescono;
- Se presentiamo alla rete un nuovo esempio \mathbf{X}_i alla fine dell'addestramento, la rete lo associa al neurone vincente (clustering);

In più:

- Categorie simili sono rappresentate da neuroni vicini (feature mapping).

A.A. 2013-2014 34/73



SOM: problemi



- -E' necessario scegliere η , σ , numero di epoche, durata della ordering phase \rightarrow metodi empirici(!);
- Scelta della topologia e del numero di neuroni corretti;
- I dati di addestramento devono presentare una certa ridondanza;
- Unità "morte" (dead-units);

A.A. 2013-2014 35/73



SOM per ordinamento



Spazio dei dati X_i (e dei pesi w) : R^3

Topologia della SOM : circolare



Parametri di addestramento : # neuroni, $\eta(t)$, $\sigma(t)$, ...

Movie here (with RealPlayer)

A.A. 2013-2014

36/73



SOM per ricostruzione 3D



Spazio dei dati **q** (e dei pesi **w**) : R³

Topologia della SOM : griglia 2D

Parametri di addestramento

 10×10 , $0.5 \rightarrow$

1 lin, ...

: # neuroni = $0.1 \text{ lin, } 10 \rightarrow$

Movie here

A.A. 2013-2014

http:\borghese.di.unimi.it\



SOM per ricostruzione 3d



Problemi:

- Oscillazioni della rete all'inizio dell'addestramento;

Sol.: Scelta accurata di $\eta(t)$, $\sigma(t)$

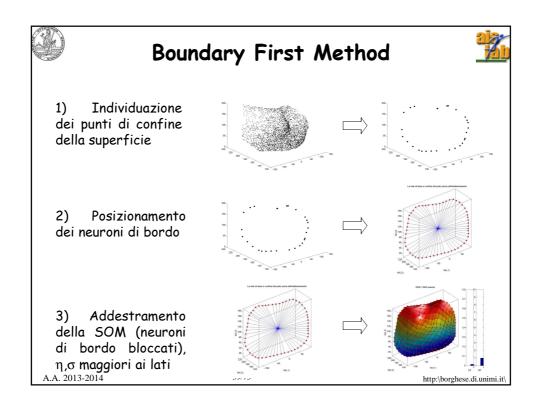
- Raggiungimento dei confini della superficie aperta; Sol.: Boundary First Method + η , σ modificati
 - Numero insufficiente di neuroni;

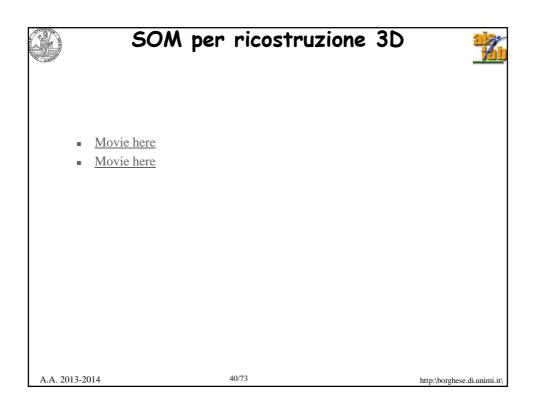
Sol.: Parametrizzazione della points cloud

A.A. 2013-2014

38/73

http:\borghese.di.unimi.it\





Competitive learning



- All'interazione k- esima, si presenti alla rete il dato X_i;
- Unità vincente (associazione): j^* t.c. $||\mathbf{W}_{i^*} - \mathbf{X}_{i}|| = \min_i ||\mathbf{W}_{i} - \mathbf{X}_{i}||$

UNITA' VINCENTE

• Competitive Learning Rule:

AGGIORNAMENTO
PESI DEI NEURONI

FUNZIONE DI VICINATO

Calcolata nello spazio dei dati, stesso spazio dei prototipi.

A.A. 2013-2014

41/73

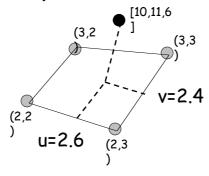
http:\borghese.di.unimi.it\



Parametrizzazione Points Cloud



- Ad ogni punto 3D [x,y,z] vengono assegnate le coordinate 2D [u,v] corrispondenti nello spazio 2D della SOM tramite una proiezione (parametrizzazione)



A.A. 2013-2014

42/73

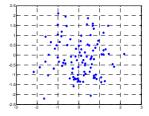
 $http: \backslash borghese.di.unimi.it \backslash$

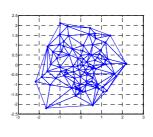


Triangolazione punti in [u,v] (Delaunay)



- Dato un set di punti nello spazio 2D, è possibile trovare un set di triangoli tale per cui (triangolazione di Delaunay):
 - ogni punto si trova al vertice di uno o più triangoli
 - nessun punto si trova all'interno di un triangoli
- Utile in computer graphics.
- In modo più rigoroso:
 a Delaunay triangulation for a set P of points in the plane is a triangulation DT(P) such that no point in P is inside the circumcircle of any triangle in DT(P). Delaunay triangulations maximize the minimum angle of all the angles of the triangles in the triangulation; they tend to avoid "sliver" triangles.





A.A. 2013-2014

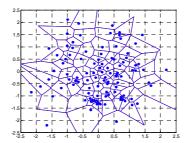
http:\borghese.di.unimi.it



Delaunay e Voronoi



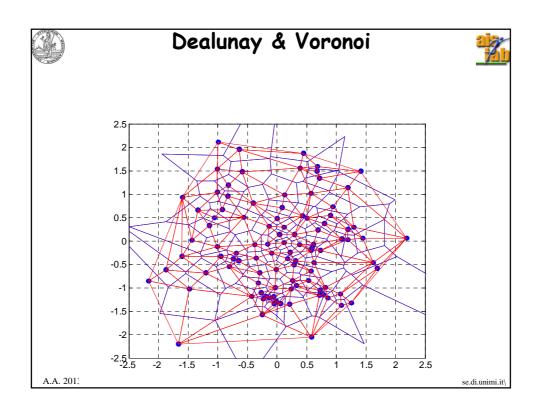
- Duale della triangolazione di Delaunay → Tessellazione di Voronoi.
- Suddivisione "regolare" dello spazio.

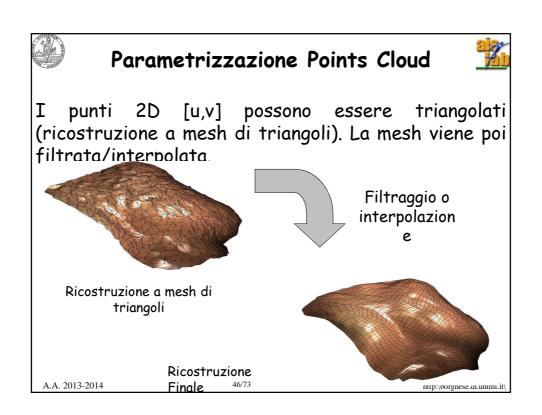


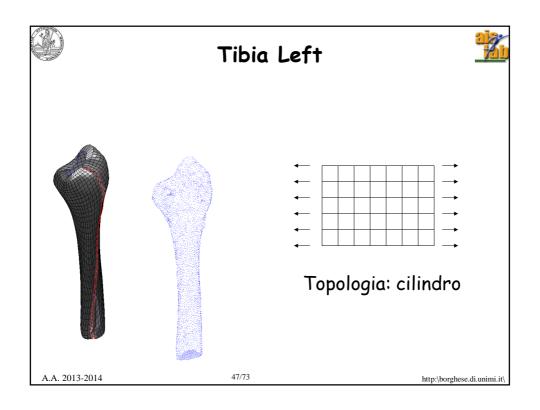
A.A. 2013-2014

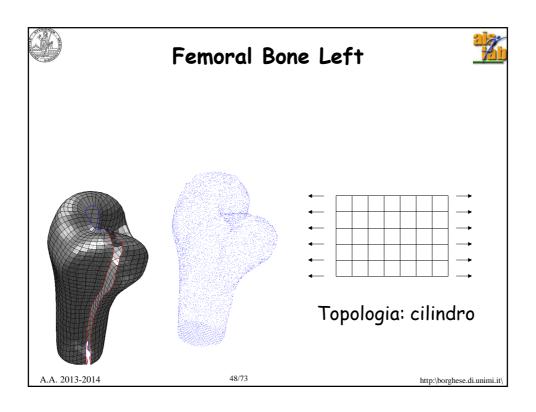
44/73

 $http: \label{lem:http:lem:ht$











Varianti SOM



- SELF CREATING MAP

- Aggiunta di un neurone:
- Vicino al neurone vincente con f maggiore;
- Vicino al neurone con curvatura massima;
- -SOM SUPERVISIONATE (per la classificazione);

- ...

A.A. 2013-2014 49

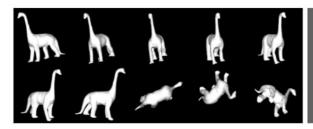
http:\borohese di unimi it\



Other methods



Baloons Level sets Volume carving





Kinect fusion – camera motion + 3D reconstruction

A.A. 2013-2014

50/73

 $http: \label{lem:http:borghese.di.unimi.it} \\$

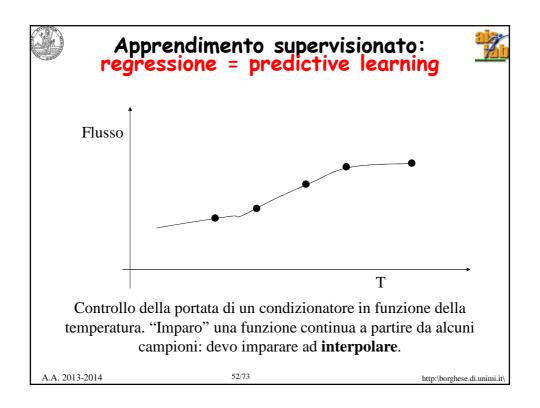


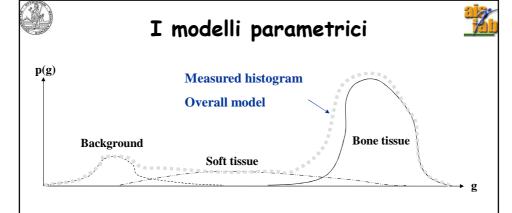
Riassunto



- Clustering partitivo
- Mappe di Kohonen
- Regressione
- Regressione multi-scala
- Classificazione

A.A. 2013-2014 51/7





$$p(g) = \sum_{j=1}^{M} P(j) \cdot p(g \mid j) = \sum_{j=1}^{M} w_{j} \cdot p_{j}(g)$$

La probabilità di avere un livello di grigio g è la somma pesata delle tre probabilità di avere background, $p_1(g)$, tessuto molle, $p_2(g)$ o tessuto osseo, $p_3(g)$.

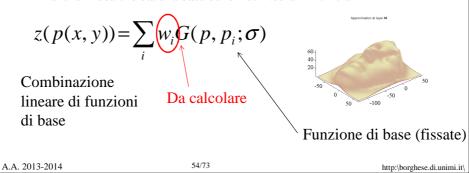
A.A. 2013-2014 53/73 http:\borghese.di.unimi.it\



I modelli semi-parametrici



- L'approssimazione è ottenuta mediante funzioni "generiche", dette di base, soluzione molto utilizzata nelle NN e in Machine learning. E' anche associato all' approccio «black-box» in teoria dei controlli. Non si hanno informazioni sulla struttura dell'oggetto che vogliamo rappresentare.
- (Il concetto di Base in matematica è definito mediante certe proprietà di approssimazione che qui non consideriamo, consideriamo solo l'idea intuitiva).
- E' anche l'idea che sta alla base delle Reti Neurali Artificiali







Modelli lineari e non lineari

Classificazione alternativa dei modelli. Vengono utilizzate classi molto diversi di algoritmi per stimare i parametri di questi due tipi di modelli.

$$z(p(x,y)) = f(x) = \sum_{i} w_{i}x$$

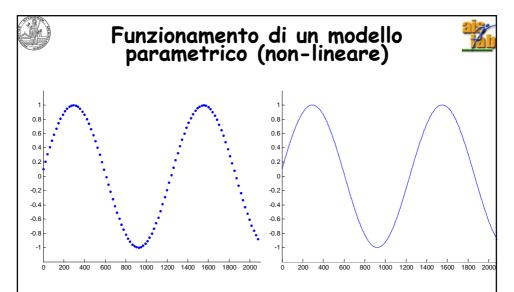
$$z(p(x,y)) = \sum_{i} f_{i}(G(p,p_{i};\sigma))$$

 $f(.) = w_i$ è funzione lineare

f(.) è funzione non lineare

e.g.
$$f(.) = e^{G(.)}$$

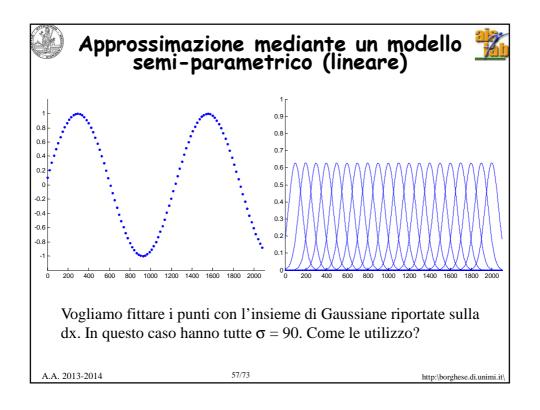
A.A. 2013-2014 55/73 http:\borghese.di

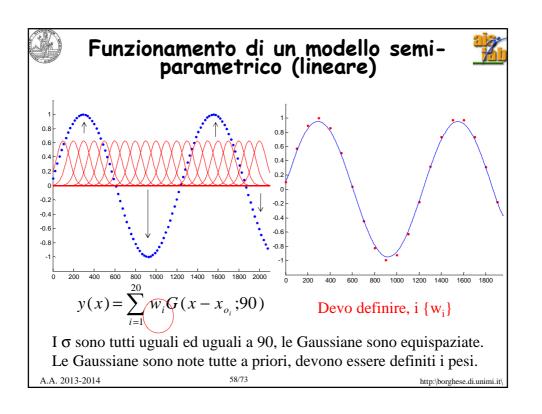


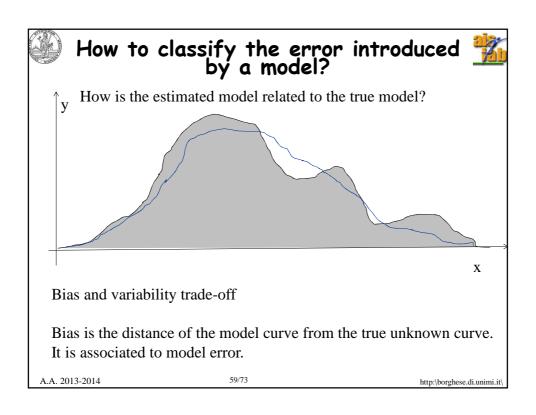
I punti vengono fittati perfettamente da una sinusoide: $y = A \sin(\omega x + \phi)$. Devo determinare i parametri della sinusoide (non lineare), i cui valori ottimali sono: $\omega = 1/200$, $\phi = 0.1$.

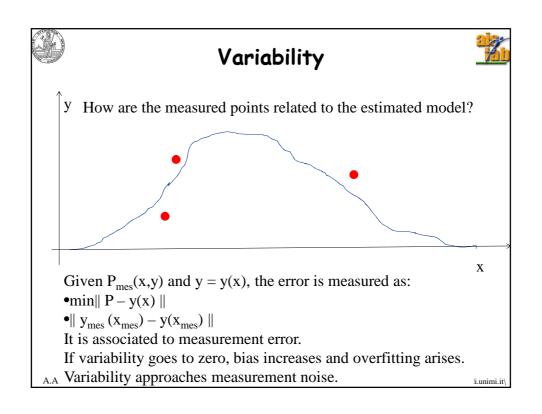
A.A. 2013-2014 56

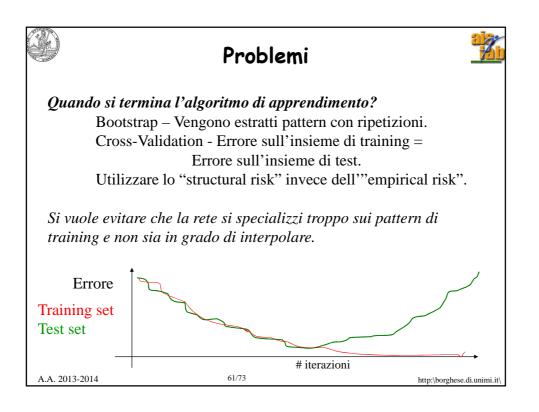
http:\borghese.di.unimi.it\

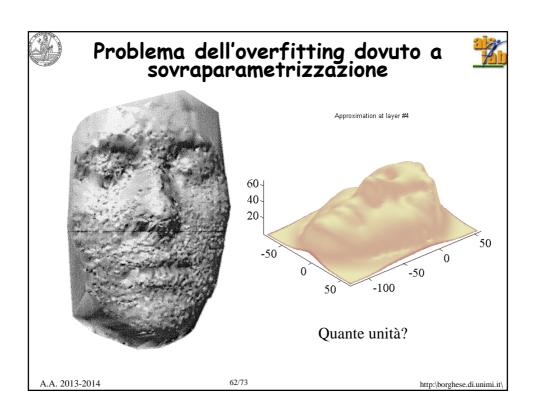














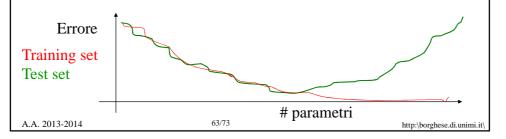
Problemi



Quando si termina l'algoritmo di apprendimento?

Bootstrap – Vengono estratti pattern con ripetizioni. Cross-Validation - Errore sull'insieme di training = Errore sull'insieme di test. Utilizzare lo "structural risk" invece dell'"empirical risk".

Si vuole evitare che la rete si specializzi troppo sui pattern di training e non sia in grado di interpolare.





Riassunto

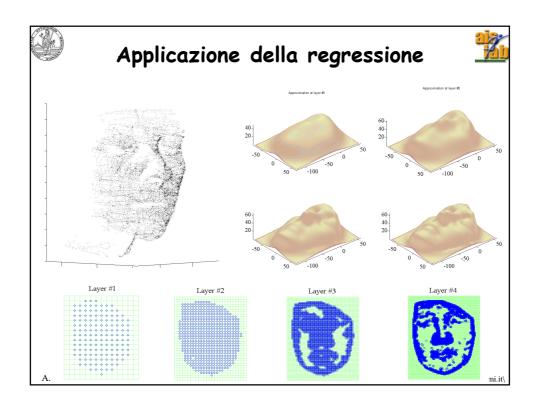


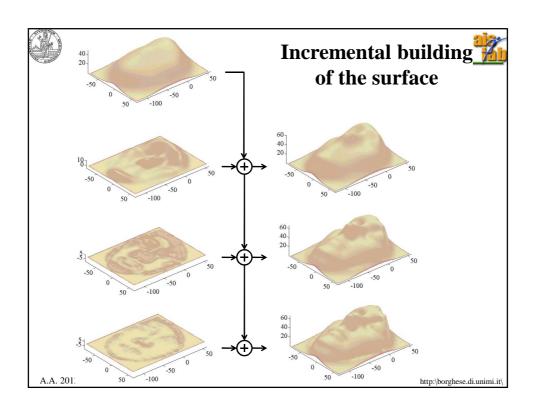
- Clustering partitivo
- Mappe di Kohonen
- Regressione
- Regressione multi-scala
- Classificazione

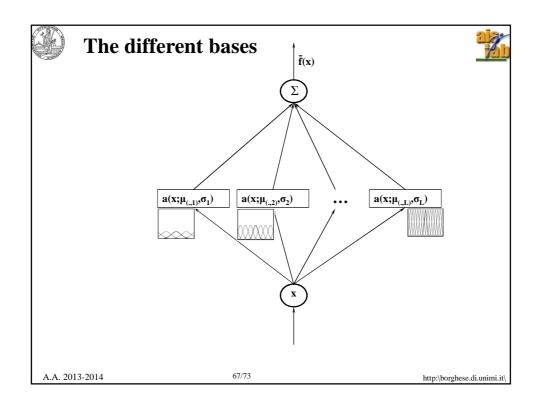
A.A. 2013-2014

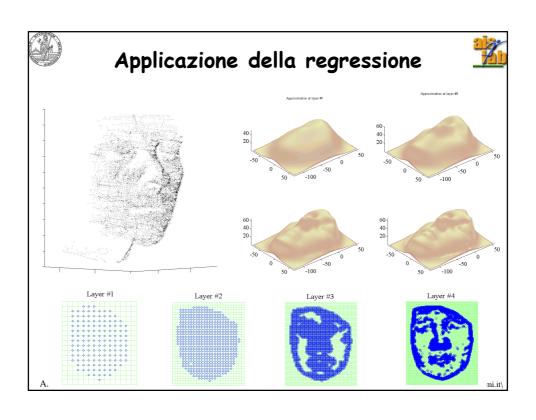
64/73

 $http: \label{lem:http:lorghese.di.unimi.it} \\$











Riassunto



- Clustering partitivo
- Mappe di Kohonen
- Regressione
- Regressione multi-scala
- Classificazione

A.A. 2013-2014 69/73

Classificazione

Un'interpretazione geometrica:

Mappatura dello spazio dei campioni nello spazio delle classi.

Classe 1

Classe 2

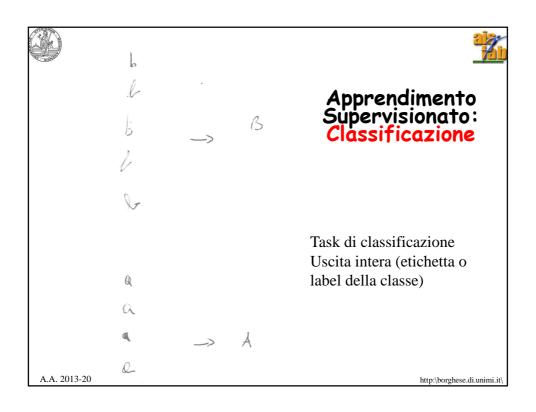
Classe 3

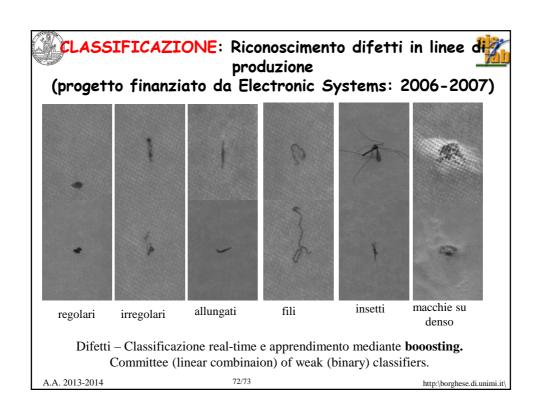
SPAZIO DEI CAMPIONI / DELLE FEATURES (CARATTERISTICHE)

A.A. 2013-2014

7073

http://borghese.di.unimi.it/







Riassunto



- Clustering partitivo
- Mappe di Kohonen
- Regressione
- Regressione multi-scala
- Classificazione

A.A. 2013-2014 73/73

 $http: \label{lem:http:lorghese.di.unimi.it} \\$