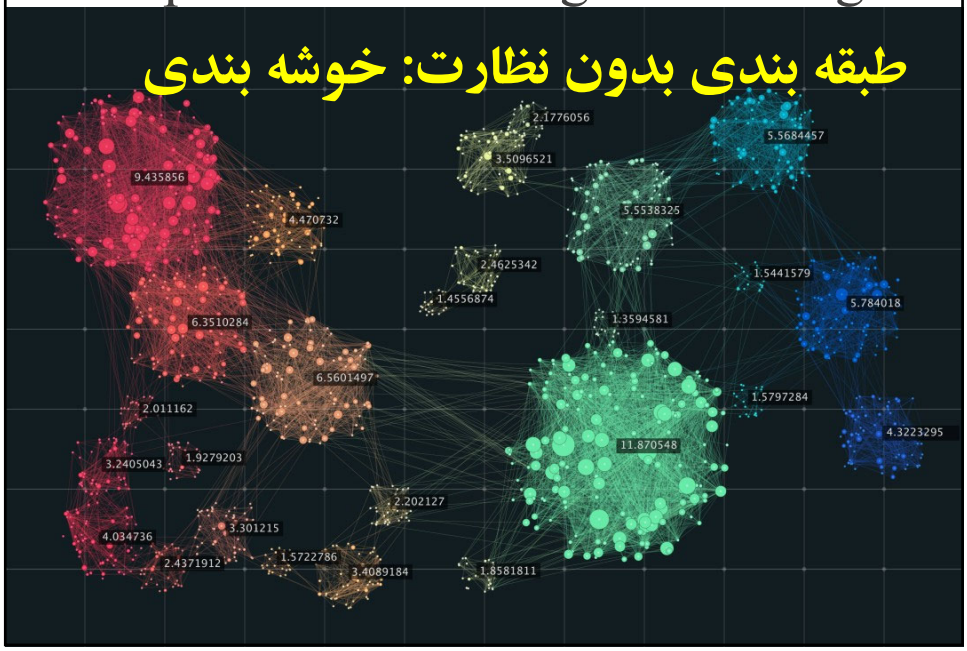
Artificiel Intelligence and Soft computing

K.N.TOOSI University of Technology

Hasan Ghasemzadeh
http://wp.kntu.ac.ir/ghasemzadeh

Unsupervised Learning: Clustering

طبقه بندی بدون نظارت: خوشه بندی



یادگیری بدون نظارت

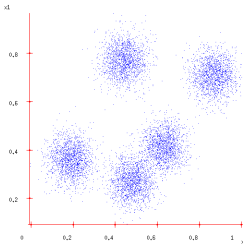
Unsupervised learning: The data have no target attribute.
We want to explore the data to find some intrinsic structures in them.

- ✓ در این قسمت داده‌ها برچسب ندارند.
- ✓ هزینه برچسب گذاری بسیار زیاد است.

- ✓ خوشه‌بندی (clustering)
  - K-means
  - خوشه بندی طیفی
  - خوشه‌بندی سلسله مراتبی
  - DBSCAN
- ✓ کاهش ابعاد
  - تجزیه اصلی مؤلفه‌ها (PCA)
  - t-SNE
  - Autoencoders
- ✓ تشخیص ناهنجاری (Anomaly detection)
- ✓ مدلهای مولد(Generative modelling)

خوشه بندی

- ✓ روشی که شباهت‌های بین گروهی از داده ها را در کل داده ها پیدا می کند خوشه بندی نام دارد.
- ✓ خوشه‌بندی یکی از روشهای بدون نظارت است.
- ✓ بدلیل تاریخچه آن معمولا خوشه بندی مترادف با یادگیری بدون نظارت استفاده می‌شود.
- ✓ روش خوشه بندی بیشترین استفاده را در داده کاوی دارد.



مثال
- افراد با سایز لباس مختلف
- ساختمانهایی که در هنگام زلزله خرابی مشابه دارند
- خوشه‌بندی بندی متن‌های مشابه

الگوریتم‌های معروف:
- خوشه بندی کی میانگین(K-means)
- خوشه بندی طیفی(Spectral clustering)
- خوشه‌بندی سلسله مراتبی (Hierarchical clustering)
- خوشه بندی بر مبنای دانسیته (DBSCAN: Density-based spatial clustering of applications with noise)

خوشه بندی

Clustering: one of the most utilized data mining techniques

- A clustering algorithm
  - Partitional clustering
  - Hierarchical clustering
- A distance (similarity, or dissimilarity) function
- Clustering quality
  - Inter-clusters distance ⇒ maximized
  - Intra-clusters distance ⇒ minimized

کیفیت خوشه‌بندی به الگوریتم، تابع فاصله و نوع مساله بستگی دارد

K-means clustering

- K-means is a partitional clustering algorithm
- Set of data points D

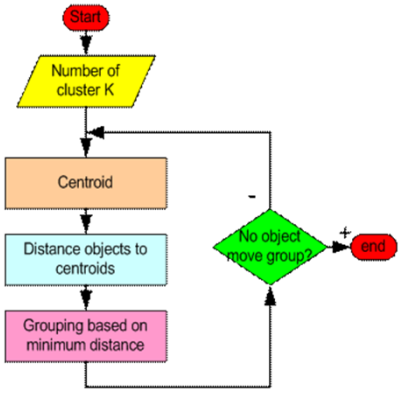
  $D = \{x_1, x_2, ..., x_n\}$ $\quad x_i = (x_{i1}, x_{i2}, ..., x_{ir})$

  n the number of data

  r the number of attributes (dimensions) in the data.
- The k-means partitions the data into k clusters.
  - **Center of** each cluster, called **centroid**.
  - k is specified by the user ($k < n$)

K-means clustering

- the *k-means* algorithm:
  1) Randomly choose *k* data points (seeds) to be the initial centroids, cluster centers
  2) Assign each data point to the closest centroid
  3) Re-compute the centroids using the current cluster memberships.
  4) If a convergence criterion is not met, go to 2).



Artificial intelligence 7

Stopping/convergence criterion

1. Minimum or no re-assignments of data points to different clusters,
2. minimum or no change of centroids
3. minimum decrease in the ***sum of squared error*** (SSE),

$$SSE = \sum_{j=1}^{k} \sum_{i=1}^{no\ of\ x \in C_j} dist(x, m_j)^2$$

- m_j is the centroid of cluster C_j
- $dist(x, m_j)$ is the distance between data point x and centroid m_j.

Artificial intelligence 8

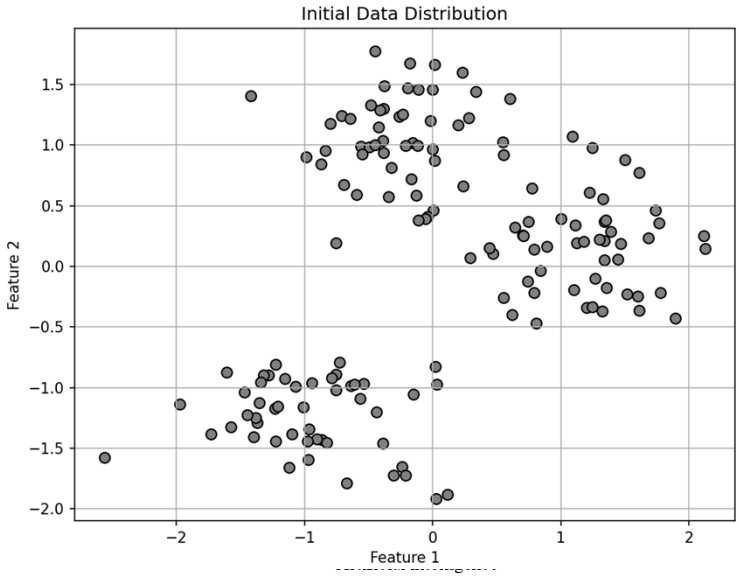
مثال

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.datasets import make_blobs
from sklearn.preprocessing import StandardScaler

# Generate synthetic 2D data
np.random.seed(42)
X, _ = make_blobs(n_samples=150, centers=3, n_features=2,
cluster_std=2.5)

# Standardize the data
scaler = StandardScaler()
X = scaler.fit_transform(X)

# Plot the initial data distribution
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c='gray', edgecolor='k', s=50)
plt.title('Initial Data Distribution')
plt.xlabel('Feature 1')
plt.ylabel('Feature 2')
plt.grid(True)
plt.show()
```

12 clustering k means.py

Artificial Intelligence 9

مثال خوشه بندی لغات

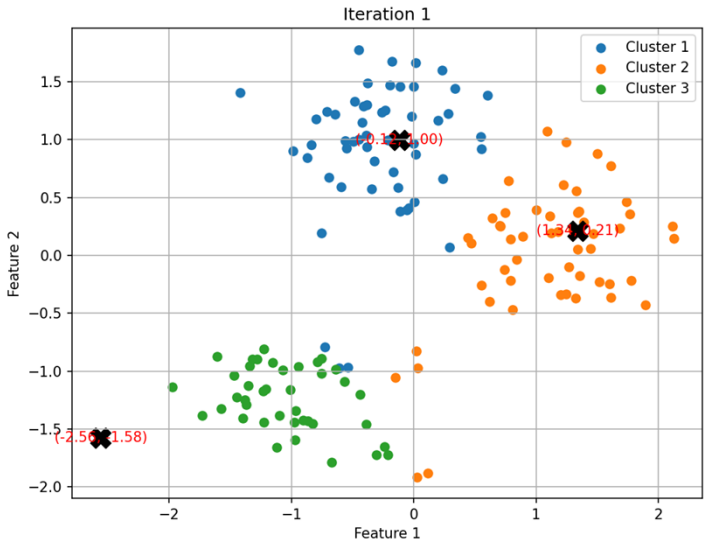


10

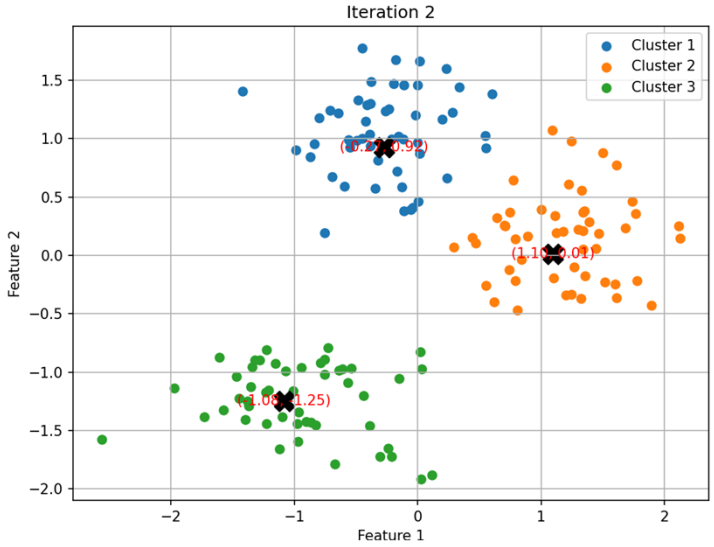
مثال

```
def kmeans_clustering(X, n_clusters, max_iters=10):
    # Randomly initialize centroids
    np.random.seed(42)
    centroids = X[np.random.choice(X.shape[0], n_clusters, replace=False)]

    for i in range(max_iters):
        # Assign clusters based on closest centroid
        distances = np.linalg.norm(X[:, np.newaxis] - centroids, axis=2)
        labels = np.argmin(distances, axis=1)
        # Plot current state
        plt.figure(figsize=(8, 6))
        for j in range(n_clusters):
            plt.scatter(X[labels == j][:, 0], X[labels == j][:, 1], label=f'Cluster {j+1}')
            plt.scatter(centroids[j, 0], centroids[j, 1], s=200, c='black', marker='X')
            # Add centroid coordinates as text
            plt.text(centroids[j, 0], centroids[j, 1], f'({centroids[j, 0]:.2f},
{centroids[j, 1]:.2f})',
                     fontsize=10, color='red', ha='center', va='center')
        plt.title(f'Iteration {i+1}')
        plt.xlabel('Feature 1')
        plt.ylabel('Feature 2')
        plt.legend()
        plt.grid(True)
        plt.show()
        # Update centroids
        new_centroids = np.array([X[labels == j].mean(axis=0) for j in range(n_clusters)])
        # Check for convergence
        if np.all(centroids == new_centroids):
            break
        centroids = new_centroids
# Perform K-means clustering and visualize iterations
kmeans_clustering(X, n_clusters=3, max_iters=10)
```

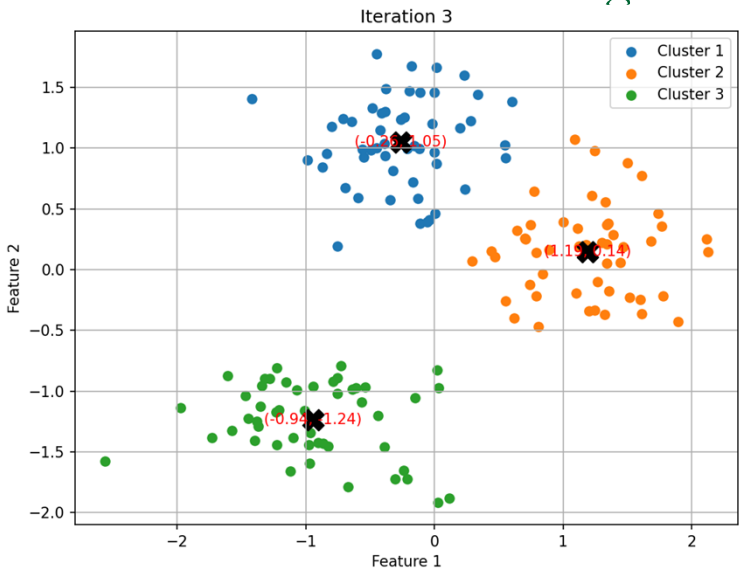

K-means clustering



K-means clustering



K-means clustering

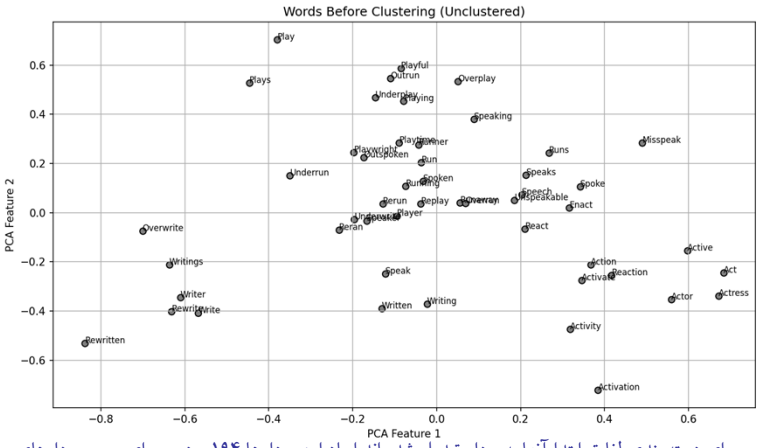


مثال خوشه بندی لغات

```
import pandas as pd
from sklearn.feature_extraction.text import TfidfVectorizer
from sklearn.cluster import KMeans
import matplotlib.pyplot as plt

# Load the uploaded file
file_path = "family_words.csv"
data = pd.read_csv(file_path)

# Extract the words from the file (correcting the column
name)
words = data['Words_Family']
```

12 Hierarchical Clustering.py

ترسیم به روش کاهش بعد

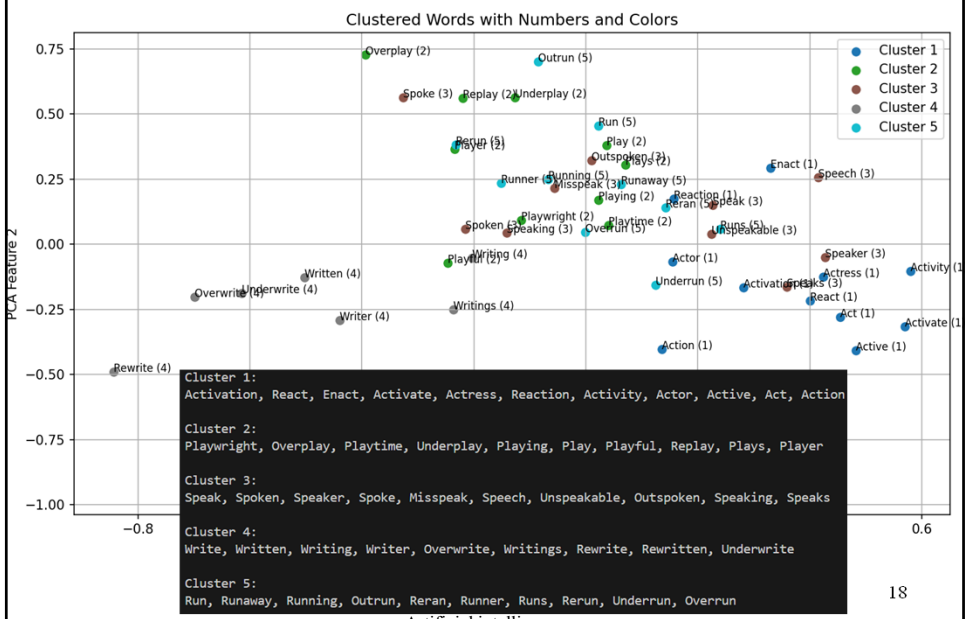


برای دسته بندی لغات ابتدا آنها به بردار تبدیل شده اند ابعاد این بردارها ۱۹۴ بوده و برای رسم بردارهای نقاط داده از یکی از روشهای معروف یادگیری بدون نظارت -کاهش ابعاد استفاده شده است. نام الگوریتم استفاده شده تجزیه اصلی مؤلفه‌ها (PCA: Principal Component Analysis) است.

مثال خوشه بندی لغات

```
# Vectorize the words using TF-IDF
vectorizer = TfidfVectorizer(analyzer='char', ngram_range=(2, 3))
X = vectorizer.fit_transform(words)

# Apply K-means clustering
n_clusters = 5  # You can adjust the number of clusters
kmeans = KMeans(n_clusters=n_clusters, random_state=42)
kmeans.fit(X)
# Assign clusters to words
data['Cluster'] = kmeans.labels_
# Visualize the clustering results
for cluster in range(n_clusters):
    cluster_words = data[data['Cluster'] ==
cluster]['Words_Family'].values
    print(f"Cluster {cluster + 1}:")
    print(", ".join(cluster_words))
    print()
# Save the clustered data for further use
clustered_file_path = "family_words_clustered.csv"
data.to_csv(clustered_file_path, index=False)
```


مثال خوشه بندی لغات



K-means clustering – Disk version

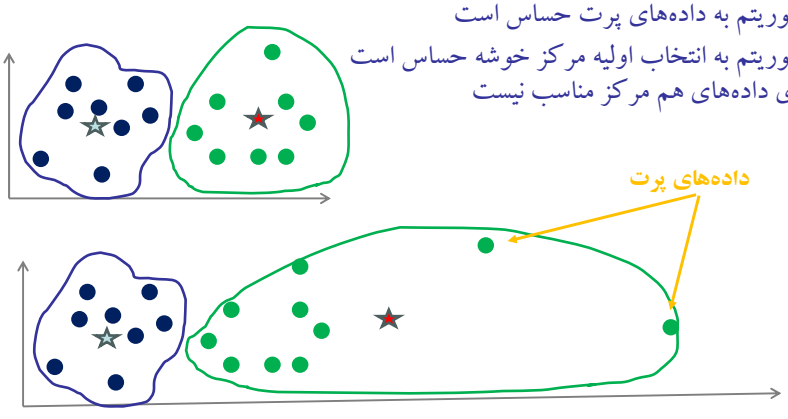
وقتی داده‌ها خیلی زیاد است نمی توان روی حافظه رایانه تمام داده ها را با بارگذاری نمود در این حالت بایستی از ویرایش دیسک برای خوشه بندی استفاده نمود

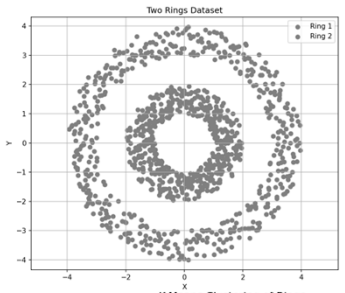
در این روش بسته‌های کوچکی (mini-batches) از داده در هر مرحله انتخاب می‌شود و سپس خوشه‌بندی (با سرعت زیاد و اشغال حافظه کم) بر روی آنها انجام می‌شود.
تعداد تکرارها محدود است و ممکن است کمی خطا ایجاد شود (جواب به نقطه بهینه محلی ختم شود و به نقطه بهینه کلی نرسیم)

We need to limit the number of iterations (< 50 normally).
There are other scale-up algorithms, e.g., BIRCH
(Balanced Iterative Reducing and Clustering using Hierarchies)

نقاط ضعف K-means

- مقدار k توسط کاربر بایستی تعیین شود
- مرکز خوشه‌ها (سنترویید) تحت تاثیر داده‌های با فراوانی زیاد قرار می‌گیرد
- الگوریتم به داده‌های پرت حساس است
- الگوریتم به انتخاب اولیه مرکز خوشه حساس است
- برای داده‌های هم مرکز مناسب نیست

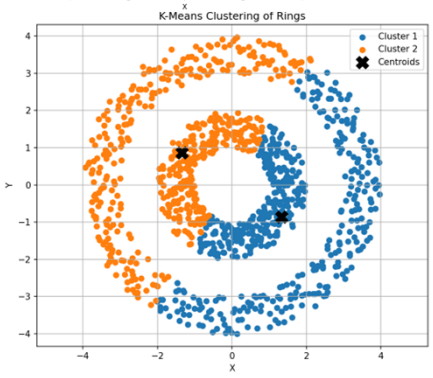


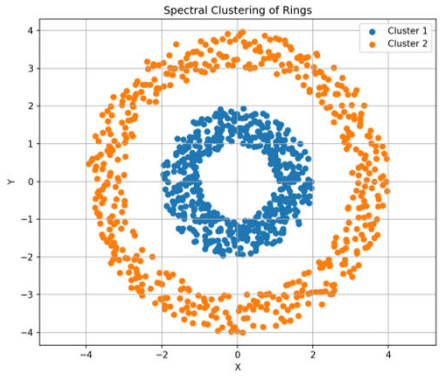


نقاط ضعف K-means

داده‌های هم مرکز

یک روش استفاده از خوشه بندی طیفی است که فاصله بین نقاط را اندازه می گیرد.

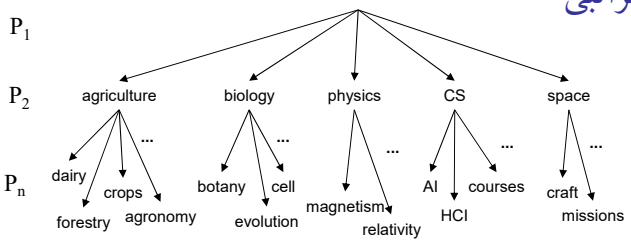




Artificial intelligence 21

Hierarchical Clustering

خوشه‌بندی سلسله مراتبی



یک توالی تو در تو از خوشه ها یا دیاگرام درختی(دندروگرام) تولید می کند

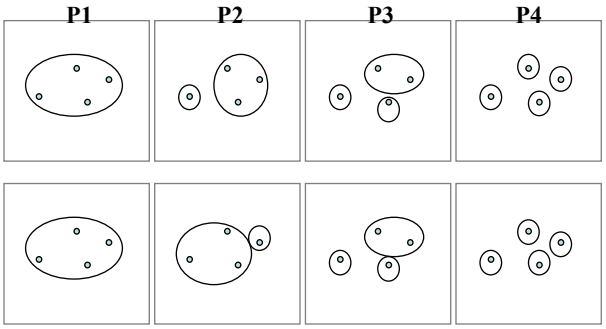
خوشه‌بندی سلسله مراتبی، سلسله‌ای از پارتیشن‌ها ارایه می کند

a partition P_1 into 1 clusters (the entire collection)
• a partition P_2 into 2 clusters
…
• a partition P_n into n clusters (each object forms its own cluster)
It is then up to the user to decide which of the partitions reflects actual sub-populations in the data.

Artificial intelligence 22

Hierarchical Clustering

در صورتی دنباله‌ای از پارتیشن‌بندی سلسله مراتبی است که هر خوشه در یک پارتیشن معین اجتماعی از خوشه‌ها در پارتیشن بزرگتر بعدی باشد



hierarchical sequence of partitions

non hierarchical sequence

Artificial intelligence 23

Hierarchical Clustering

روشهای خوشه‌بندی سلسله مراتبی

روش تجمیعی (از پایین به بالا)

Agglomerative methods:

- Start with partition P_n, where each object forms its own cluster.
- Merge the two closest clusters, obtaining P_{n-1}.
- Repeat merge until only one cluster is left.

روش تقسیمی(از بالا به پایین)

Divisive methods:

- Start with P_1.
- Split the collection into two clusters that are as homogenous (and as different from each other) as possible.
- Apply splitting procedure recursively to the clusters.

در روش تجمیعی نیاز به قاعده ای برای تجمیع خوشه‌ها و در روش تقسیمی نیاز به قاعده ای برای تقسیم خوشه‌ها است که معمولا با استفاده از مقدار فاصله انجام می‌شوند.

Artificial intelligence 24

خوشه‌بندی سلسله مراتبی تجمیعی

تعیین فاصله بین خوشه‌ها

d(P,Q) فاصله بین خوشه‌های P و Q بر اساس فاصله مشاهدات در دو خوشه d(x,y) تعیین می‌شود

For x in P, y in Q

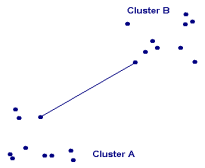
1. $d_1(P,Q) = \min d(x,y)$ (single linkage)
2. $d_2(P,Q) = \text{ave } d(x,y)$ (average linkage)
3. $d_3(P,Q) = \max d(x,y)$ (complete linkage)
4. $d_4(P,Q) = \left\| \bar{x}_P - \bar{x}_Q \right\|$ (centroid method)
5. $d_5(P,Q) = 2\frac{|P||Q|}{|P|+|Q|}\left\| \bar{x}_P - \bar{x}_Q \right\|^2$ (Ward's method)

d_5 is called Ward's distance.

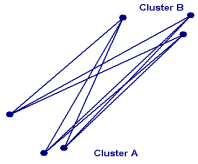
خوشه‌بندی سلسله مراتبی تجمیعی

تعیین فاصله بین خوشه‌ها

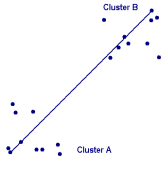
$d_1(P,Q) = \min d(x,y)$ (single linkage)



$d_2(P,Q) = \text{ave } d(x,y)$ (average linkage)



$d_3(P,Q) = \max d(x,y)$ (complete linkage)



خوشه‌بندی سلسله مراتبی تجمیعی

تعیین فاصله بین خوشه‌ها – فاصله Ward

Let $\mathbf{P}_k = P_1, \ldots, P_k$ be a partition of the observations into k groups.

- Measure goodness of a partition by the sum of squared distances of observations from their cluster means:

$$RSS(\mathbf{P}_k) = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j \in P_i} \left\| x_j - \bar{x}_{P_i} \right\|^2$$

- Consider all possible (k-1)-partitions obtainable from $\mathbf{P}_k$ by a merge
- Merging two clusters with smallest Ward's distance optimizes goodness of new partition.

Artificial intelligence 27

خوشه‌بندی سلسله مراتبی تقسیمی

There are divisive versions of single linkage, average linkage, and Ward's method.

Divisive version of single linkage:

- Compute minimal spanning tree (graph connecting all the objects with smallest total edge length.
- Break longest edge to obtain 2 subtrees, and a corresponding partition of the objects.
- Apply process recursively to the subtrees.

Agglomerative and divisive versions of single linkage give identical results (more later).

Artificial Intelligence 28

خوشه‌بندی سلسله مراتبی تقسیمی

Divisive version of Ward's method.

Given cluster R.

Need to find split of R into 2 groups P,Q to minimize

$$RSS(P,Q) = \sum_{i \in P} \left\| \mathbf{x}_i - \overline{\mathbf{x}}_P \right\|^2 + \sum_{j \in Q} \left\| \mathbf{x}_j - \overline{\mathbf{x}}_Q \right\|^2$$

or, equivalently, to maximize Ward's distance between P and Q.

Note: No computationally feasible method to find optimal P, Q for large |R|. Have to use approximation.

Artificial Intelligence 29

خوشه‌بندی سلسله مراتبی تقسیمی

Iterative algorithm to search for the optimal Ward's split

Project observations in R on largest principal component.

Split at median to obtain initial clusters P, Q.

Repeat { Assign each observation to cluster with closest mean

Re-compute cluster means

} Until convergence

Note:

- Each step reduces RSS(P, Q)
- No guarantee to find optimal partition.

Divisive version of average linkage

Algorithm Diana, Struyf, Hubert, and Rousseuw

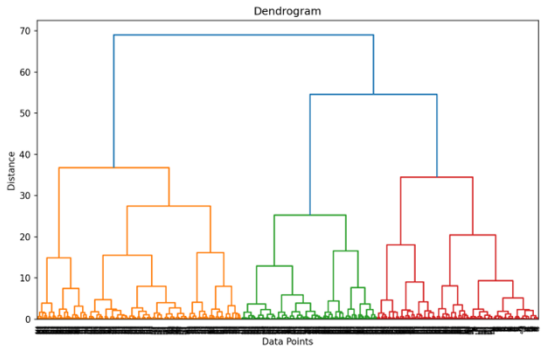
Artificial Intelligence 30

خوشه‌بندی سلسله مراتبی

خوشه بندی سلسله مراتبی بوسیله دیاگرام درختی(دندروگرام) نمایش داده می‌شود

Result of hierarchical clustering can be represented as binary tree:
- Root of tree represents entire collection
- Terminal nodes represent observations
- Each interior node represents a cluster
- Each subtree represents a partition

y-coordinate of vertex = distance between daughter clusters.



Artificial Intelligence 31

بررسی خوشه‌بندی

Silhouette Score

It measures how well each data point fits within its assigned cluster compared to other clusters.

For a single data point *i*, the silhouette score *s(i)* is calculated as:

$$s(i) = \frac{b(i) - a(i)}{\max(a(i), b(i))}$$

a(i): The mean intra-cluster distance
b(i): The mean nearest-cluster distance

The score ranges from **-1 to 1**, where:
s(i) = **1** indicates that the data point is well-clustered and far from neighboring clusters.
s(i) = **0** indicates that the data point lies on the boundary between clusters.
s(i) = **-1** indicates that the data point may be assigned to the wrong cluster.

Artificial intelligence 32

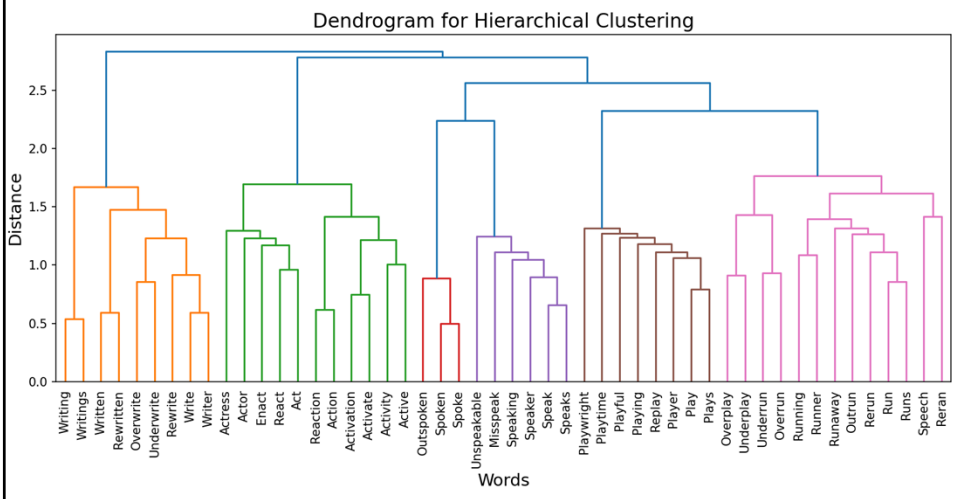
خوشه‌بندی سلسله مراتبی

مثال

```
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.datasets import make_blobs
from scipy.cluster.hierarchy import dendrogram, linkage, fcluster
from sklearn.metrics import silhouette_score
from sklearn.cluster import AgglomerativeClustering

# Generate artificial data using make_blobs
X, y = make_blobs(n_samples=500, centers=3, cluster_std=1.0, random_state=42)


# Perform hierarchical clustering
# 1. Compute linkage matrix
linkage_matrix = linkage(X, method='ward')  # 'ward' linkage minimizes variance

# 2. Plot the dendrogram
plt.figure(figsize=(12, 8))
dendrogram(linkage_matrix, truncate_mode='level', p=5)  # Display only the top 5
levels
plt.title("Dendrogram")
plt.xlabel("Data Points")
plt.ylabel("Distance")
plt.show()

# Apply Agglomerative Clustering
n_clusters = 3  # Number of clusters
agg_clustering = AgglomerativeClustering(n_clusters=n_clusters, linkage='ward')
labels = agg_clustering.fit_predict(X)
```

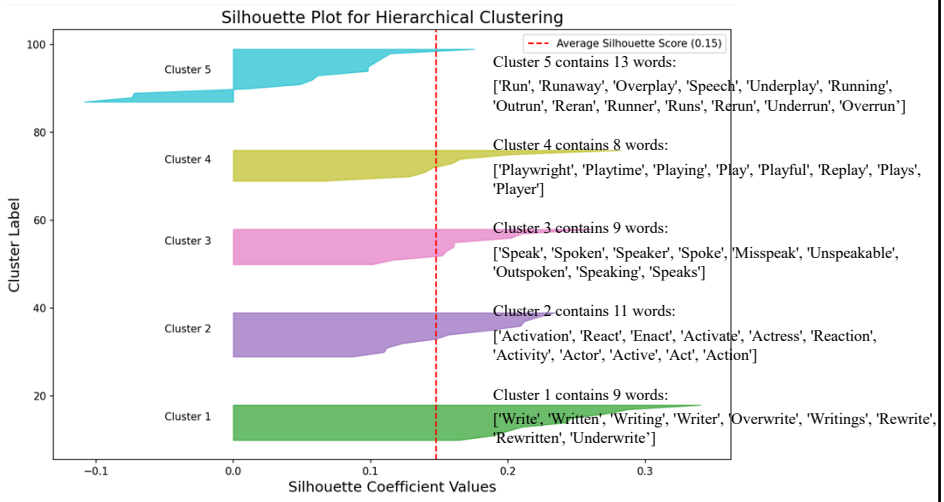
12 Hierarchical Clustering.py Artificial intelligence 33

خوشه‌بندی سلسله مراتبی



Silhouette Score for 5 clusters: 0.15

Artificial intelligence 34



Artificial Intelligence 35

تمرین برنامه نویسی

تمرین ششم : یک برنامه به زبان پایتون بنویسید که یک فایل داده را خوانده و خوشه‌بندی نماید.

۱- به روش K means

۲- با استفاده از خوشه‌بندی سلسله مراتبی

۳- بررسی صحت نتایج برای دوحالت فوق

Artificial Intelligence 36