Кластер анализа

Ненад Митић

Математички факултет
nenad.mitic@matf.bg.ac.rs

Увод

Задатак који се решава методама кластеровања се упрошћено може дефинисати на следећи начин:

Извршити поделу датог скупа објеката $X = \{x_1, x_2, ..., x_n\}$ на групе (подскупове) тако да је објекат x_i који припада групи G_l сличнији по неком критеријуму објектима x_j који припадају (истој) групи G_l него неком објекту x_k који припада некој другој групи G_m. Свака од група G се назива кластер, а целокупан поступак поделе улазног скупа кластеровање.

У литератури се за кластеровање користе и синоними *сегментација* и *партиционисање*. Такође, у оквиру дела везаног за кластеровање као синоними ће се користити елемент и тачка.

Увод

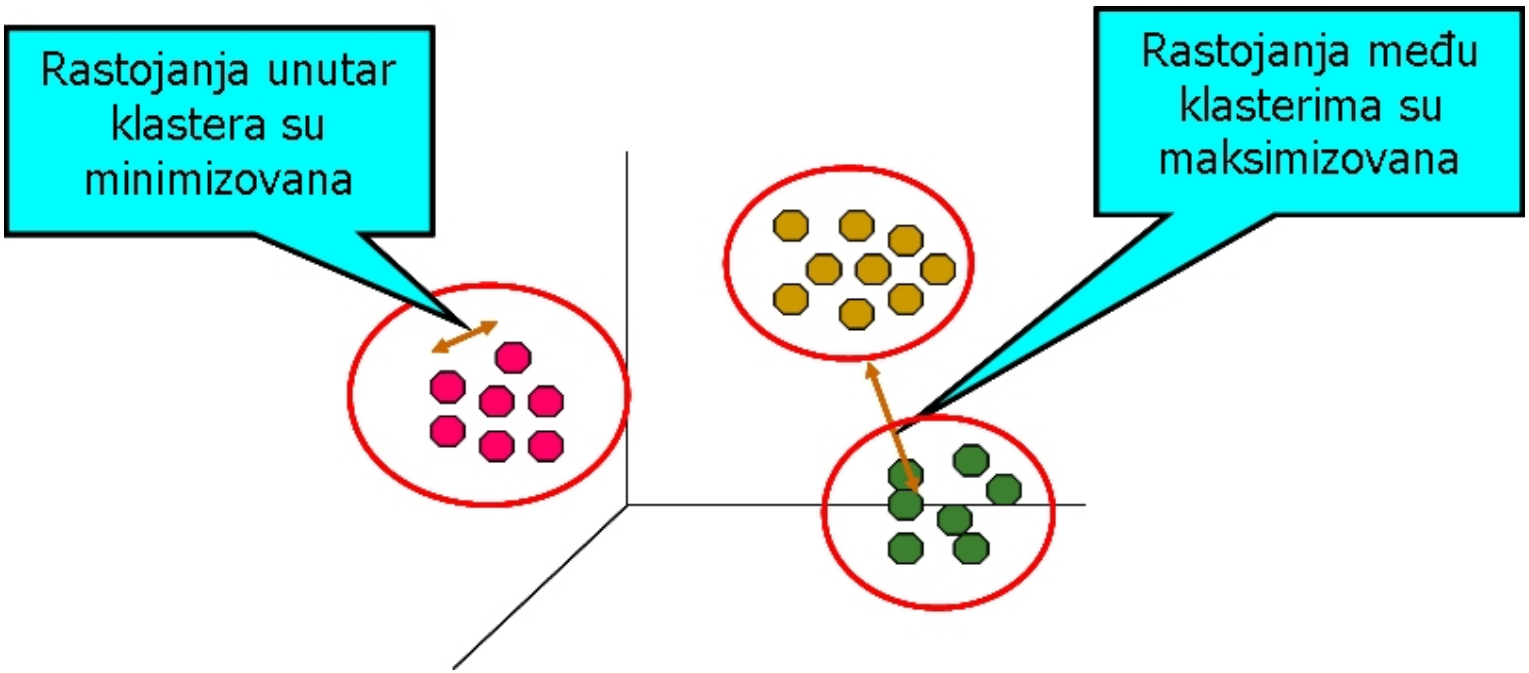
Избор методе кластеровања и мере помоћу које се рачуна сличност у великој мери зависе од типа података које треба кластеровати. Такође, у великом броју случајева није до краја јасно дефинисано шта све могу да буду целине које представљају кластере, тако да је честа недоумица да ли је број кластера који се добије као резултат коректан.

Теме и алгоритми кластеровања који ће бити обрађени

- Увод у кластер анализу и избор карактеристика података
- Алгоритми за кластеровање засновани на репрезентативним представницима
- Алгоритми хијерахијског кластеровања (сакупљајућег и раздвајајућег)
- Алгоритми засновани на мрежама и густини
- Алгоритми засновани на неуронским мрежама
- Критеријуми провере коректности кластеровања

Шта је кластер анализа?

Проналажење група објеката таквих да су објекти у групи међусобно слични (или повезани), и да су објекти у различитим групама међусобно различити (или неповезани)



Шта јесте а шта није кластер анализа?

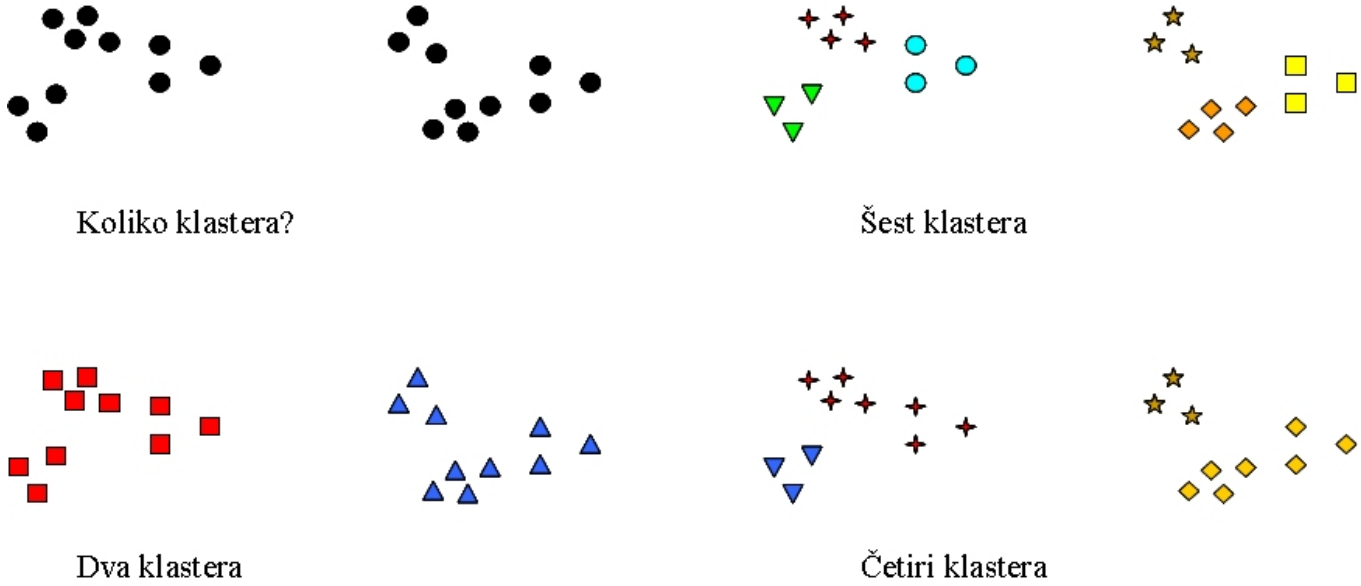
Припадност објеката (елемената) једном кластеру не значи да су елементи међусобно слични по свим критеријумима. Тако, на пример кластери који су приказани на претходној слици су добијени према просторном груписању елемената, међутим, нема никавих препрека да део елемената једног кластера буде по неком критеријуму сличнији елементима другог кластера него сваком од елемената кластера у коме се налазе.

Шта јесте а шта није кластер анализа?

Не представља свака подела материјала у групе кластер анализу. Тако нпр. кластер анализа није

- Класификација под надзором (то је класификација у ужем смислу!)
- Једноставна подела (нпр. подела студената по првом слову презимена)
- Резултат упита (подела елемената на оне који задовољавају или не задовољавају неки елементарни услов)
- Подела графа
- ....

Двосмисленост појма кластера



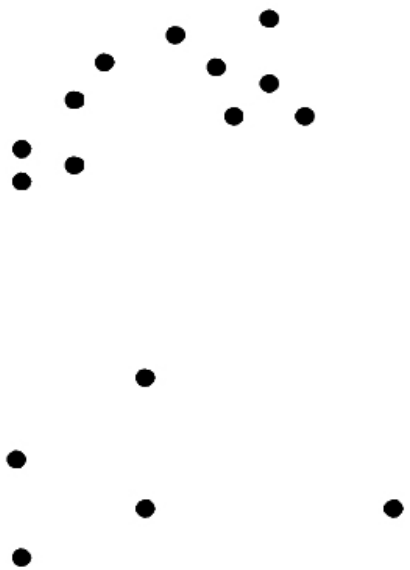
Број кластера зависи од посматраног критеријума. Нпр. на слици се препознају

- два кластера, ако се посматра само просторни положај група
- четири кластера, ако се посматра распоред елемената (елементи означени крстићима и квадратима су рапоређени дуж хипотетички правих линија, док елементи означени звездицама и троугловима одступају од тог правила)
- шест кластера, ако се посматра међусобна удаљеност елемената (мерена нпр. као еуклидско растојање) и постави горња граница на растојање два елемента за припадност истом кластеру

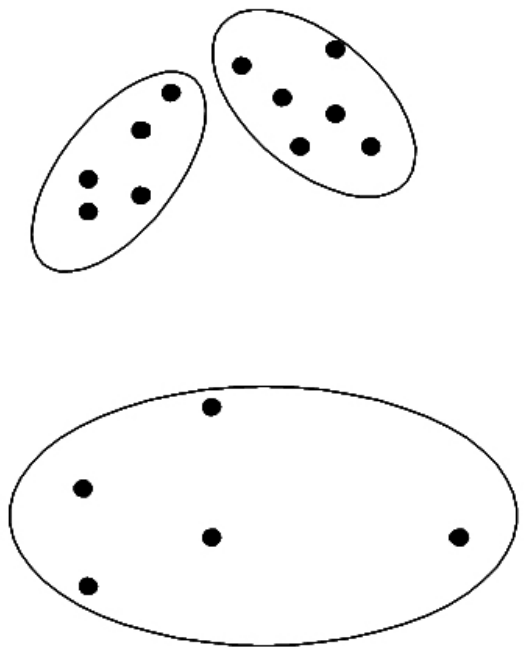
Типови кластеровања

У зависности од карактеристика кластера који се добијају као резултати, постоје различити типови кластеровања.

Код партиционог кластеровања скуп улазних података се дели у непреклапајуће подскупове (кластере) такве да сваки податак припада тачно једном кластеру



Početni podaci

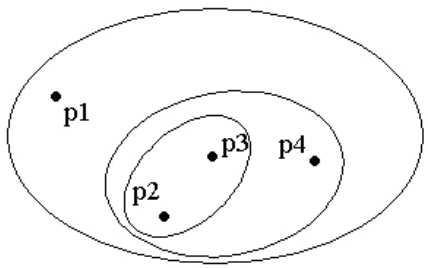


Particiono klasterovanje

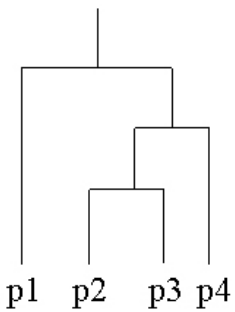
Типови кластеровања (наставак)

У случају да кластери могу да садрже (угнеждене) кластере, тада један елемент може да припада више кластера на различитим нивоима хијерархије - хијерархијско кластеровање

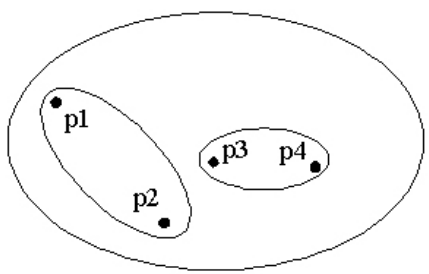
Приказ хијерархије кластера се често назива *дендограм*, и доста често је у употреби у природним наукама, поготову у биологији.



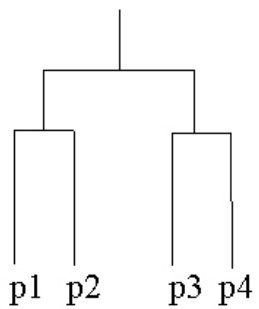
Tradicionalno hijerarhijsko klasterovanje



Tradicionalni dendogram



Netradicionalno hijerarhijsko klasterovanje



Netradicionalni dendogram

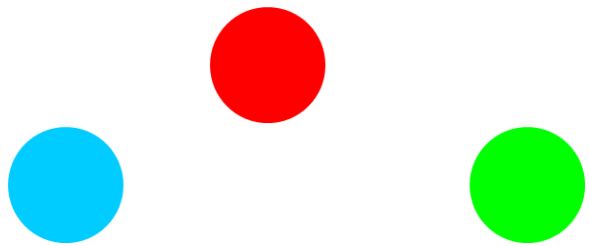
Типови кластеровања (наставак)

Типови кластеровања могу да зависе и од других критеријума:

- Екслузивно/неекслузивно кластеровање, у зависности од тога да ли појединачни елемент који се кластерује припада само једном (ексклузивно) или може истовремено да се налази у више кластера (неексклузивно кластеровање). Пример неексклузивног кластеровања је евиденција студената на универзитету где студент може да буде евидентиран као студент једног или више студијских програма, у зависности да ли их паралелно студира.
- Расплинуто/нерасплинуто кластеровање. У расплинутом кластеровању елемент припада сваком кластеру са неком тежином између 0 и 1, при чему је збир тежина елемента у свим кластерима једнак 1
- Делимично/комплетно кластеровање у зависности од тога да ли се кластерује само део података или комплетан скуп
- Хетерогено/хомогено кластеровање. Ако су кластери различите величине, облика и/или густине тада се кластеровање назива нехомогено.

Типови кластера

Добро раздвојени кластери (енг. *well-separated*)



Карактеристика добро раздвојених кластера је да им припадају елементи такви да су ближе било ком другом елементу у кластеру него осталим елементима који нису у кластеру, при чему се често поставља праг за максималну удаљеност елемената у истом кластеру. Овај случај се јавља само код природно раздвојених кластера.

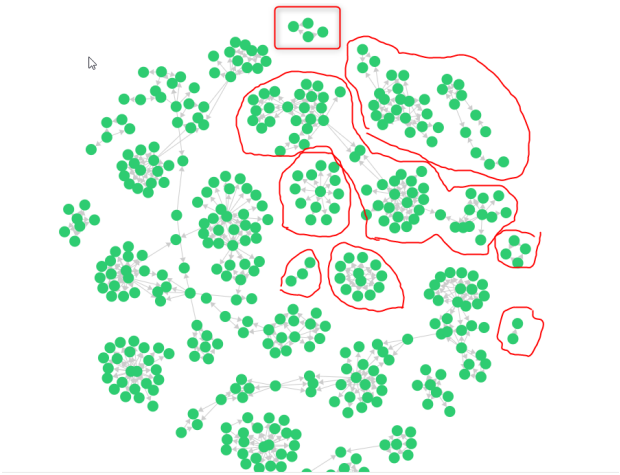
Типови кластера

Кластери засновани на центру (енг. *center-based, prototype-based*)

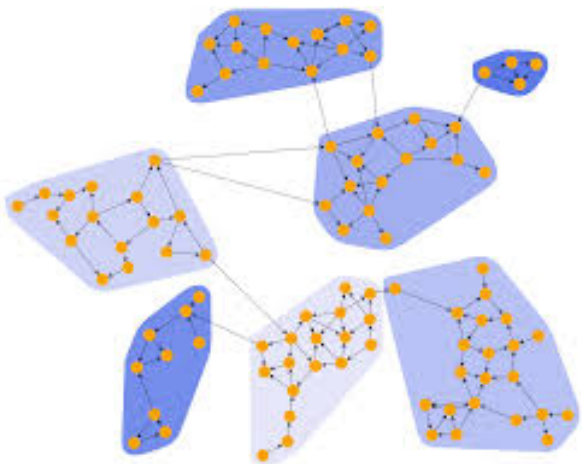
Кластер је скуп објеката таквих да је било који објекат у кластеру ближи (или више сличан) прототипу (“центру”) кластера у односу на прототипове (центре) осталих кластера. Центар кластера је често центроид (просек свих тачака у кластеру) или медоид (најрепрезентативнија тачка у кластеру)

Типови кластера (наставак)

Кластери засновани на графовима (енг. *graph based*)



Ако су елементи представљени као чворови повезаног графа, тада кластери могу да буду скупови објеката који су међусобно повезани, али нису повезани са објектима ван групе, односно који припадају изолованом подграфу.



Неке дефиниције допуштају да између кластера (подграфова) постоје везе, али у много мањем броју (или са много већим растојањем) него између елемената подграфа.

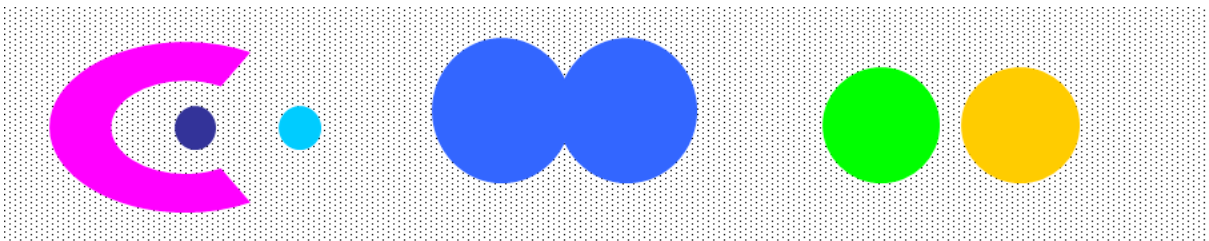
Типови кластера (наставак)

Кластери засновани на суседству (енг. *contiguous based clusters*)

Кластери засновани на суседству представљају врсту кластера заснованих на графовима код којих два елемента припадају истом кластеру акко су на растојању које је мање од унапред дефинисаног прага. Последица оваквог услова је да за сваки елемент који припада овом типу кластера постоји елемент из истог кластера коме је он ближи него било ком елементу који припада другом кластеру.

Типови кластера (наставак)

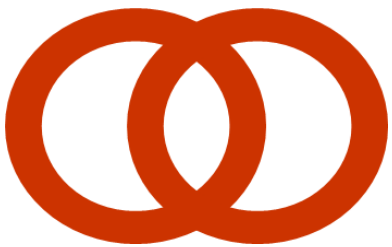
Кластери засновани на густини (енг. *density-based*)



Кластери су области са великом густином тачака које су раздвојене областима са малом густином тачака. Ова карактеристика кластера се користи када су кластери неправилни или испреплетени, и када су присутни шум или елементи ван граница.

Типови кластера (наставак)

Концептуални кластери/кластеровање на основу заједничких особина (енг. *conceptual clusters*)



Овај тип кластера се добија када се кластер дефинише као скуп елемената који имају исту заједничку карактеристику. Иако ова дефиниција обухвата велики број претходно наведних дефиниција кластера, постоје случајеви када заједничка особина не може да се изрази преко уобичајених мера. Тако на претходној слици, заједничка особина елемената је њихов облик.

Алгоритми засновани на репрезентативним представницима

Основни принцип: За скуп од n тачака $X_1, X_2, ..., X_n$ у d димензионом простору циљ је пронаћи k репрезентативних тачака $Y_1, Y_2, ... Y_k$, где је k које минимизују циљну функцију

$$O = \sum_{i=1}^{n} [min_j Dist(X_i, Y_j)]$$

где је $Dist(A, B)$ функција растојања

Алгоритми засновани на репрезентативним подацима

Алгоритам за кластеровање помоћу репрезентативних представника може да се представи преко следећег псеудокода:

```
/* Skup podataka: D={x1,x2,...,xn},
   Broj reprezent. predstavnika: k */
klasterovanje_sa_reprezentativnim_predstavnicima(D, k)
begin
  inicijalni izbor skupa reprezentativnih predstavnika
       S={Y1,Y2,...,Yk};
  repeat
    Formiraj klastere (C1, ...Ck) dodelom svake tacke
       iz D najblizem predstavniku iz S koristeci
       funkciju rastojanja Dist(xi,Yj);
    Ponovo formiraj S odredjivanjem novog predstavnika Yj
       za svaki Cj koji minimizuje prethodnu funkciju O
  until doslo je do konvergencije;
  return (C1, ..., Ck);
end
```

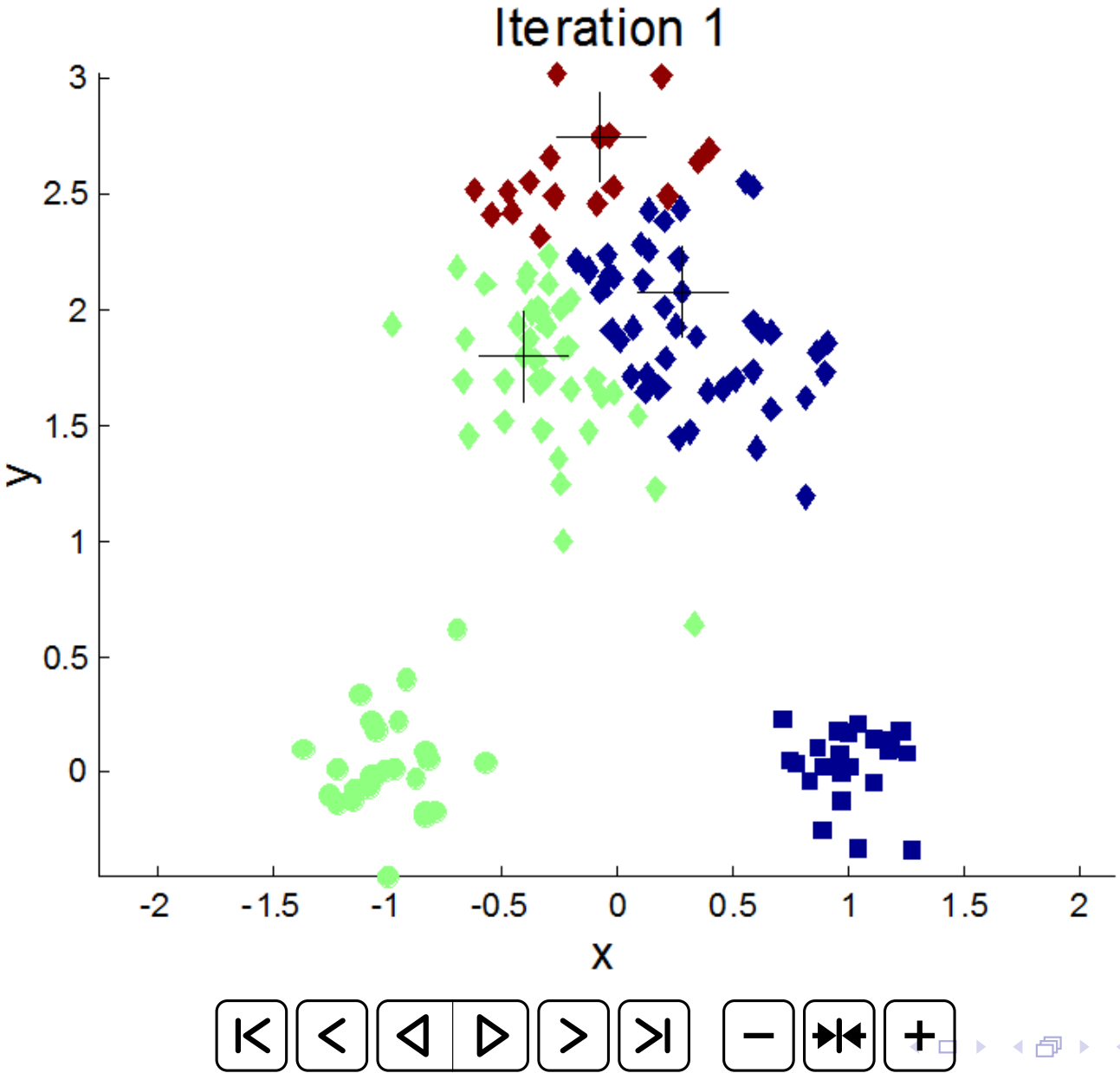
Алгоритам к-средина

Алгоритам k-средина је један од два (поред k-медијана) најзначајнија представника модела са прототипом. У овом алгоритму се прототип дефинише као *центроид*.

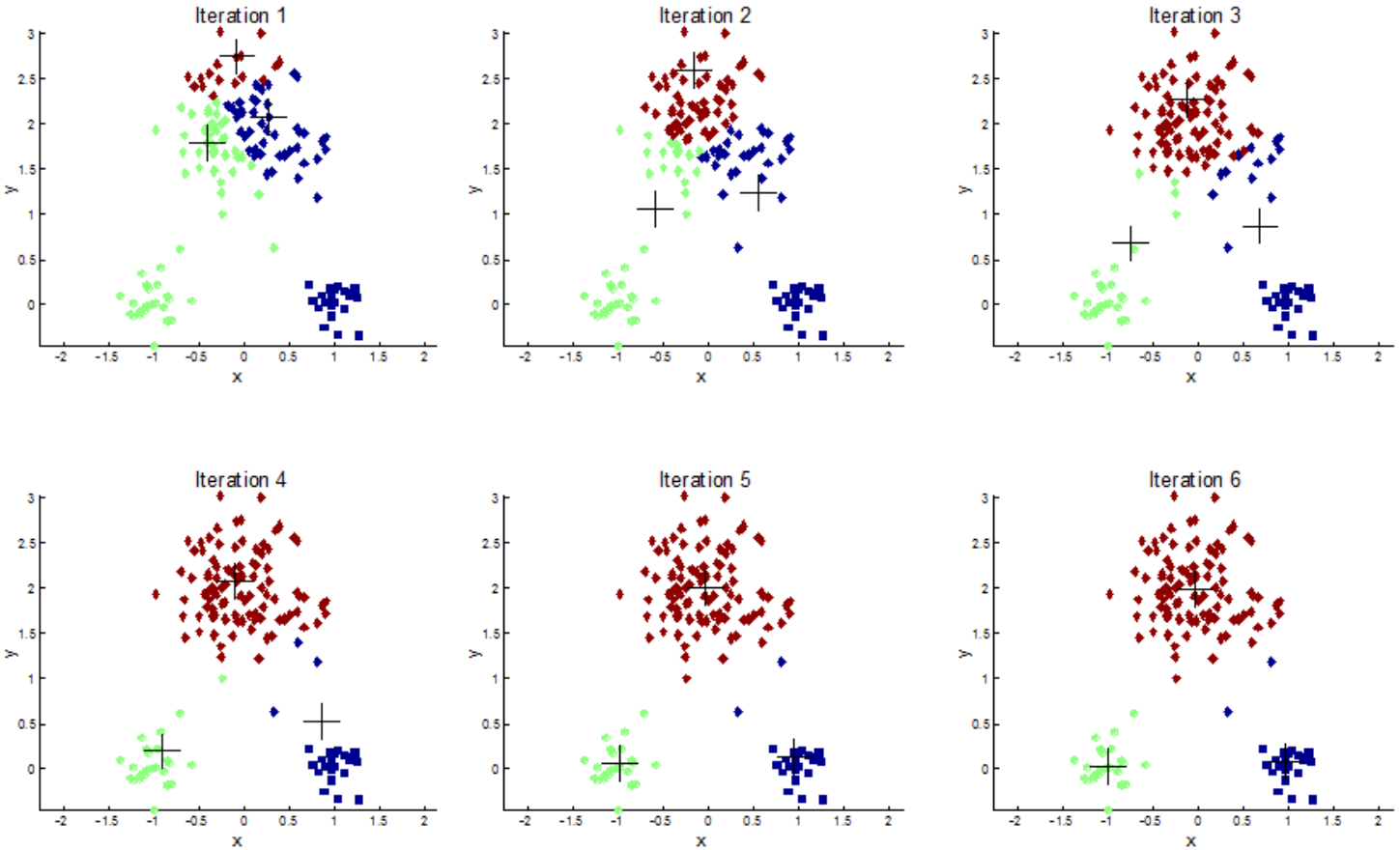
За разлику од алгоритама кластеровања који интерно одређују најбољи број кластера, алгоритам k-средина захтева да се број кластера k наведе унапред. Алгоритам се извршава тако што се иницијално свака тачка додељује кластеру са најближим центроидом. У наредном кораку се врши израчунавање нових центроида, и ре-израчунавање припадности сваке тачке појединим кластеру.

На наредним слајдовима је приказан процес кластеровања алгоритмом k-средина итеративним поступком, при чему је иницијално задата вредност k=3;

Алгоритам к-средина: пример



Алгоритам к-средина: пример



Алгоритам к-средина

- За одређивање растојања могу да се користе различите мере (обрађене у уводном делу курса!).
- Алгоритам конвергира за поменуте мере, при чему се највећи део конвергенције дешава у првих неколико итерација
- Као услов заустављања алгоритма се задаје број тачака које промене кластер у одређеној итерацији. Ако је број тачака које промене кластер мањи од задатог прага, алгоритам се зауставља.

Алгоритам к-средина

- Један од недостатака методе је често бирање почетних центроида на случајан начин. Резултат оваквог начина избора је добијање кластера који могу да се разликују од 'природних' кластера, односно добијање незадовољавајућих резултата (видети пример у даљем тексту)
- Сложеност: временска $O(n * K * I * d)$, просторна $O((n + K) * d)$ где је n број тачака, K број кластера, I број итерација, и d број атрибута. Одавде се види да је алгоритам k средина релативно неефикасан за материјал са јако великим бројем тачака јер захтева велики број израчунавања.

Евалуација методе K-средина

Када се уради кластеровање методом k-средина поставља се питање да ли су добијени резултати коректни, односно да ли су могли да се добију 'бољи' резултати нпр. за избор неке друге вредности за k. Постоји више мера помоћу којих може да се процени квалитет добијеног кластеровања. За податке у Еуклидском простору се најчешће као мера користи збир квадрата грешака (енг. *sum of squared errors, SSE*).

Формално, рачуна се грешка сваке од тачака тако што се одреди растојање до центара кластера, и одреди се збир квадрата грешака свих тачака у кластеру. Од два могућа кластера бира се онај са мањом . Интуитивно значење мање вредности је да центроиди у том кластеровању боље представљају тачке у кластеру.

Евалуација методе K-средина (наставак)

- Формално

$$SSE = \sum_{i=1}^{K} \sum_{x \in C_i} dist(c_i, x)^2$$

  где је x је тачка у кластеру C_i а c_i је репрезентативна тачка у кластеру C_i

- Један од начина за смањење SSE је повећање броја кластера k
- Добро кластеровање са малим k може да има мању SSE грешку од лошег кластеровања са великим k

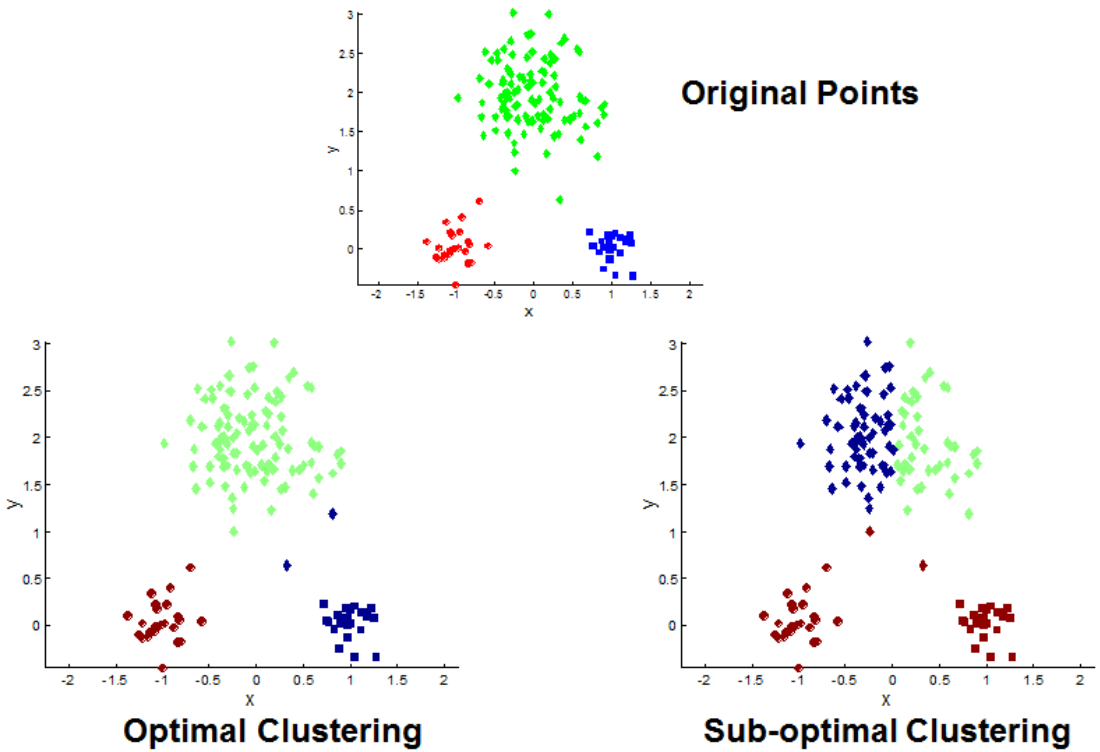
Кластеровање докумената методом K-средина

- За документе се као мера користи косинусно растојање
- Подаци се представљају преко матрице термова
- Степен сличности докумената у кластеру са центроидом се назива *кохезија кластера*
- Аналогон *SSE* у случају кластеровања текстуалних докумената је укупна кохезија која се израчунава као

$$\text{Ukupna kohezija} = \sum_{i=1}^{K} \sum_{x \in C_i} cosinus(c_i, x)$$

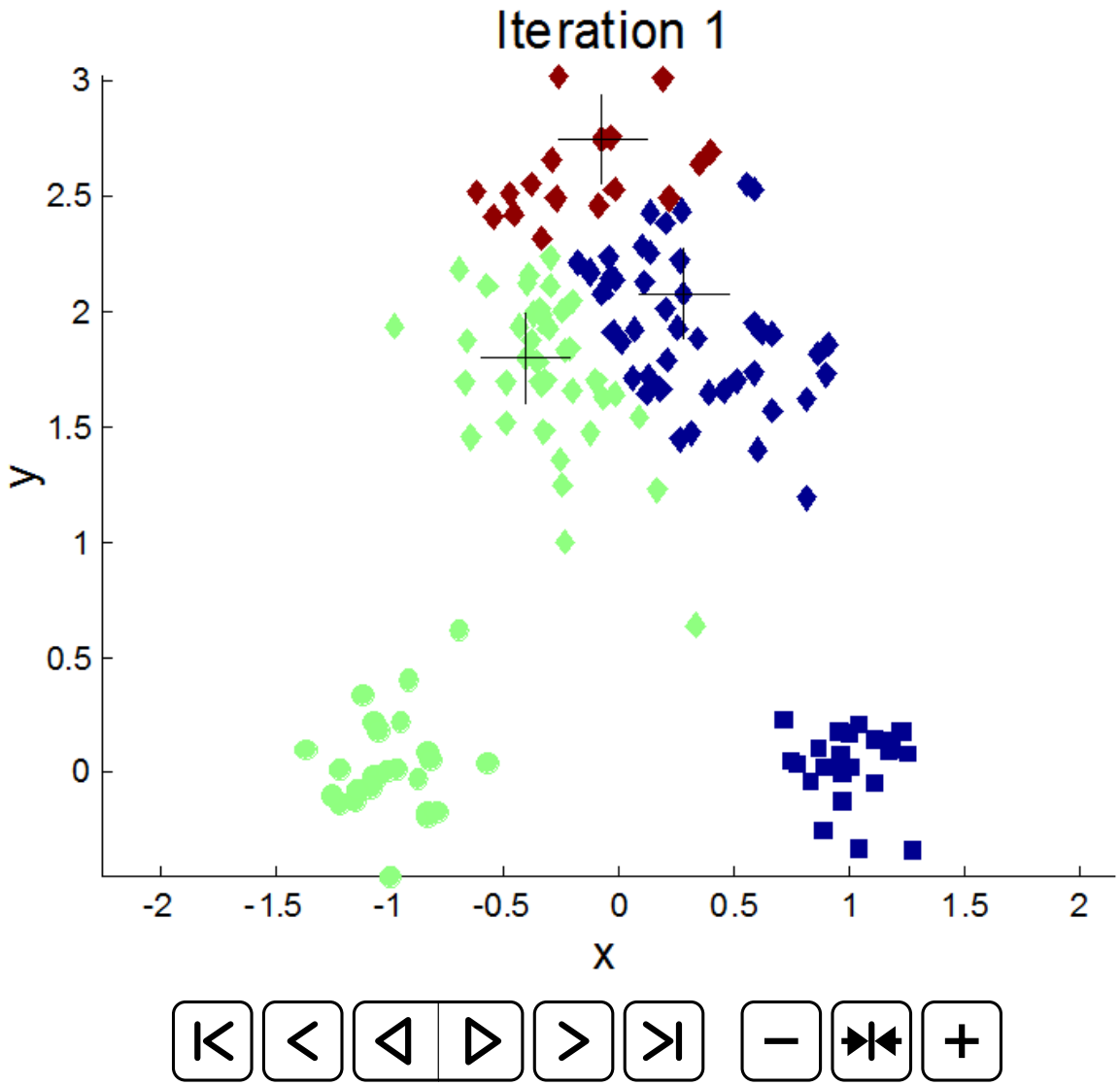
Оптимално и субоптимално кластеровање

Избор почетног центроида је јако важан јер може да доведе до некоректних резултата. У групу некоректних резултата спада и тзв. суб-оптимално кластеровање у ком случају је извршено кластеровање материјала, али није добијена глобално већ само локално најмања вредност *SSE*

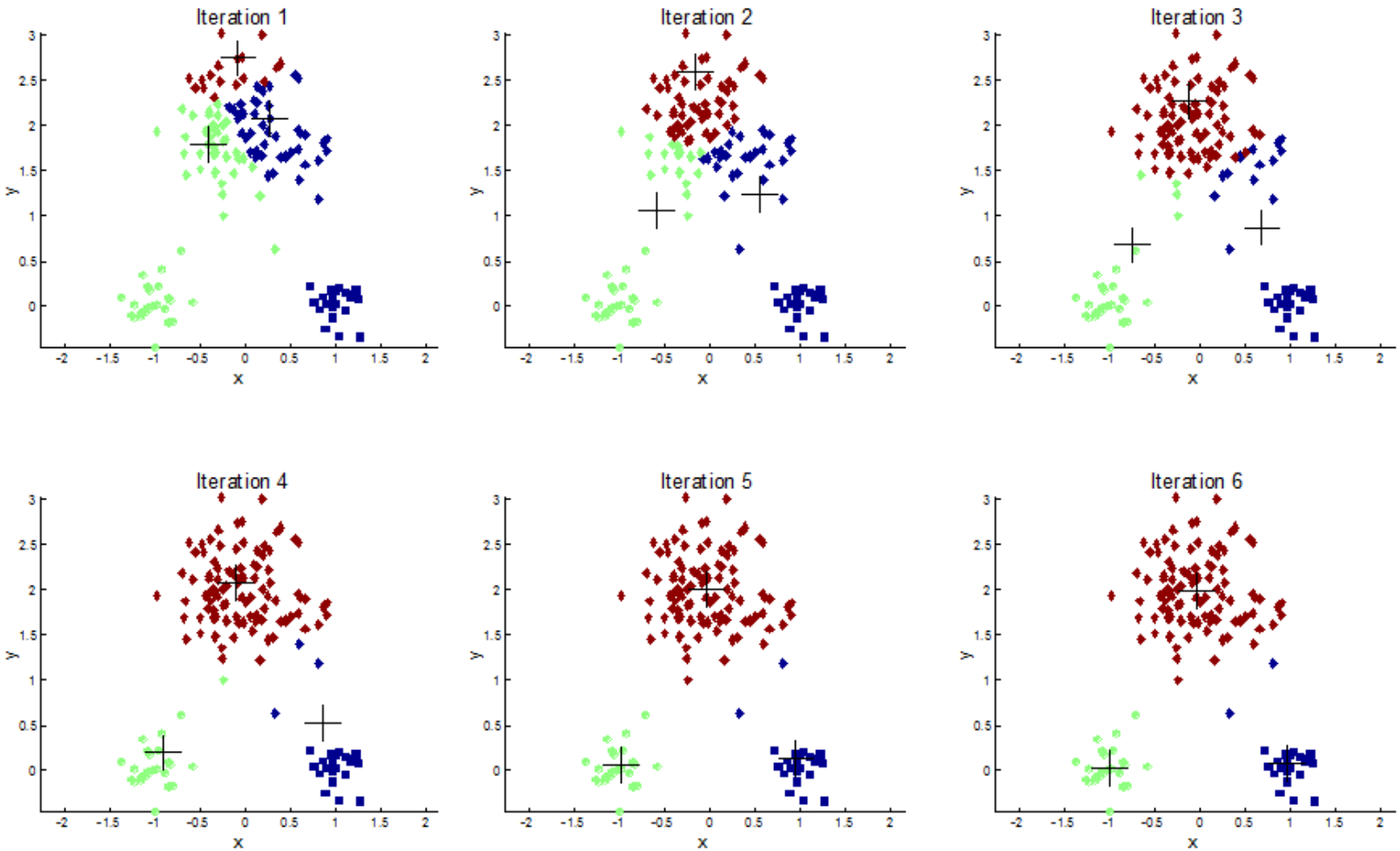


Случајан избор почетних центроида не доводи увек до најбољег решења - илустрација на наредним слајдовима

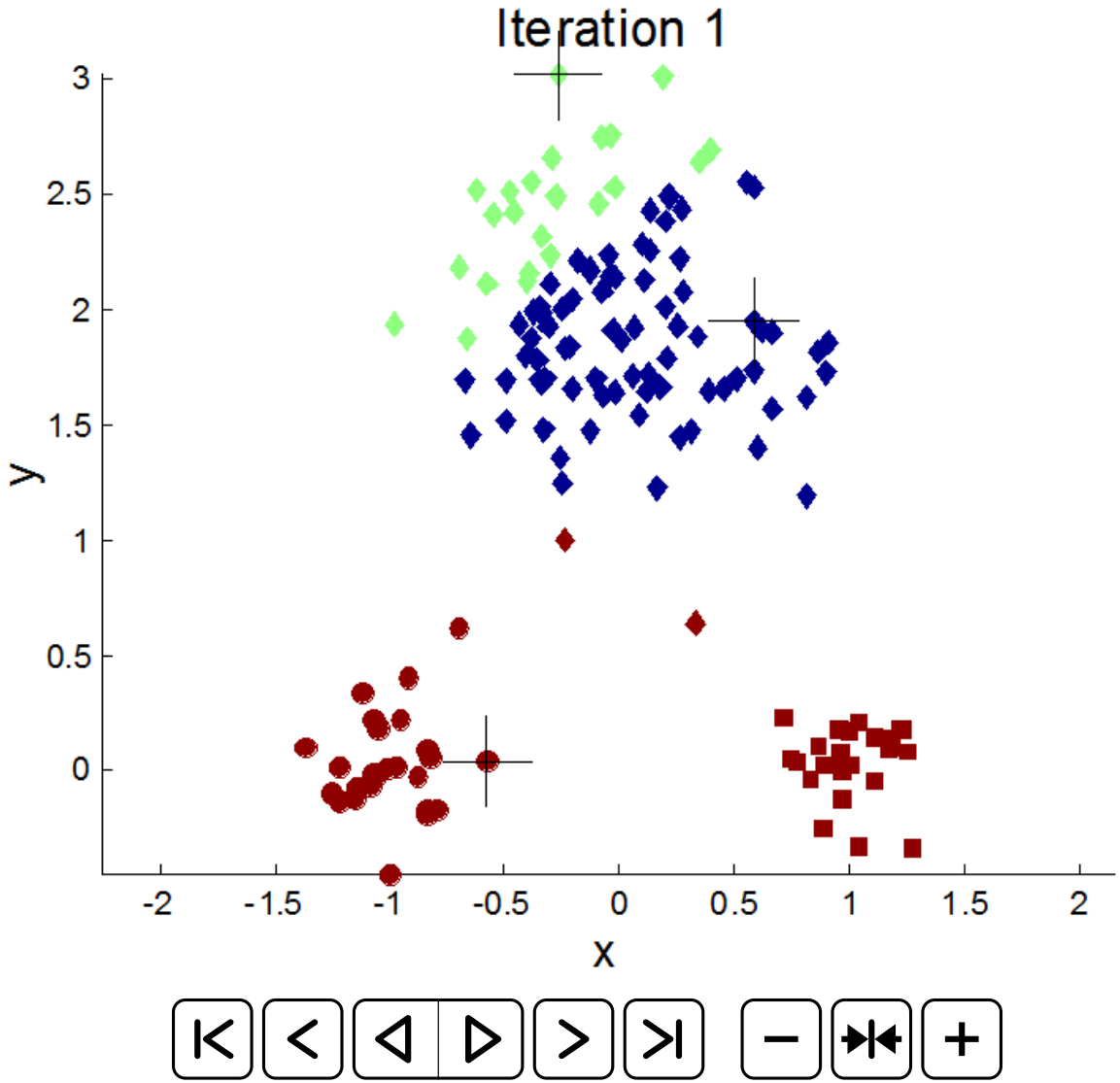
Важност избора почетног центроида - пример 1



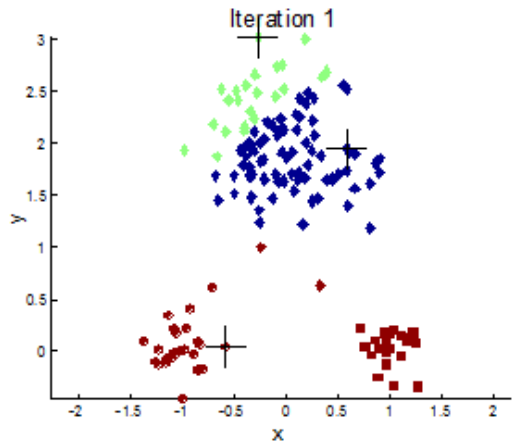
Важност избора почетног центроида - пример 1

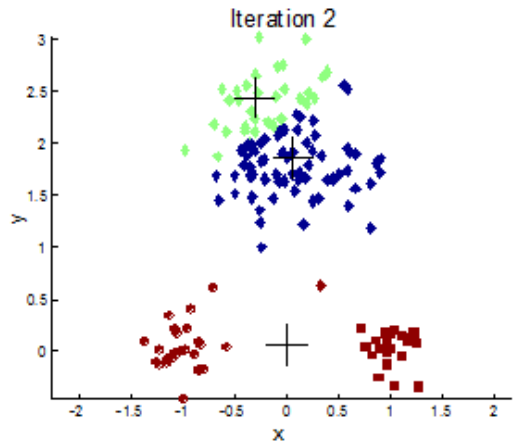


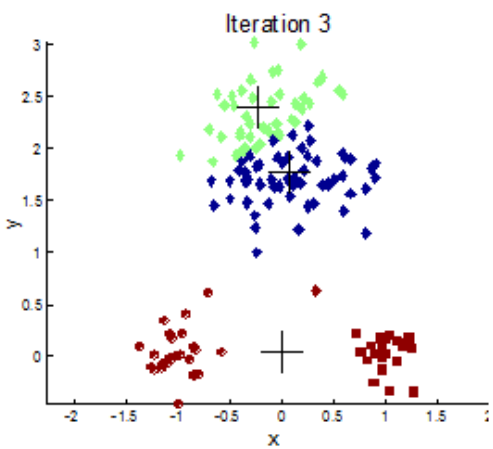
Важност избора почетног центроида - пример 2

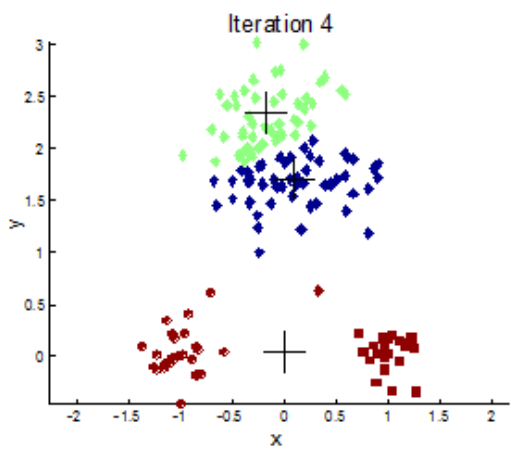


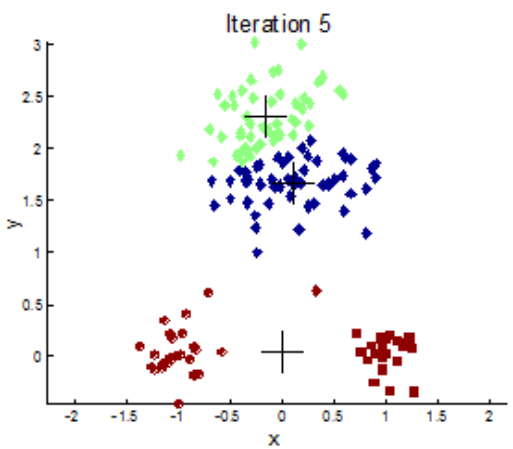
Важност избора почетног центроида - пример 2











Избор почетних центроида

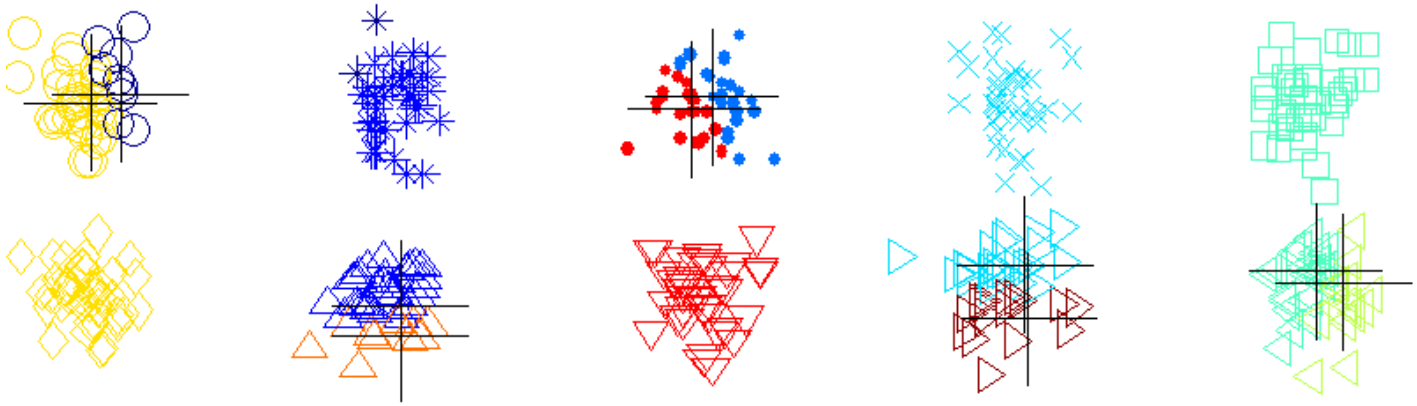
- Ако постоји k 'реалних' кластера тада је вероватноћа да се изабере по један центроид у сваком од њих релативно мала
  - Ако је k велико шанса за добар избор је мала
  - Ако кластери имају исту величину n, тада важи

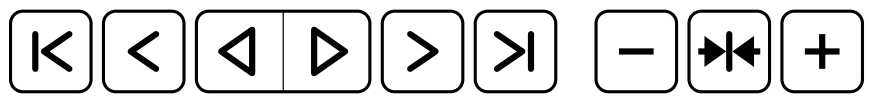
$$P = \frac{\text{број начина за избор центроида у сваком кластеру}}{\text{број начина за избор к центроида}}$$

$$P = \frac{k!n^k}{(kn)^k} = \frac{k!}{k^k}$$

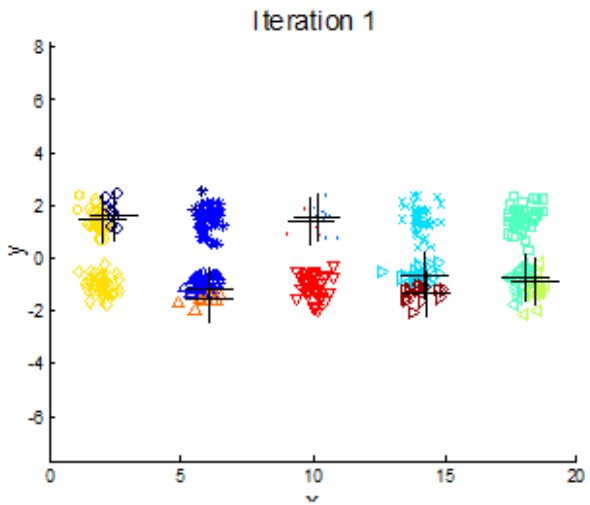
- На пример, за $k = 10$, вероватноћа је $10!/10^10$=0.00036
- Понекад се иницијални центроиди сами поравнају на 'прави' редослед, а понекад не

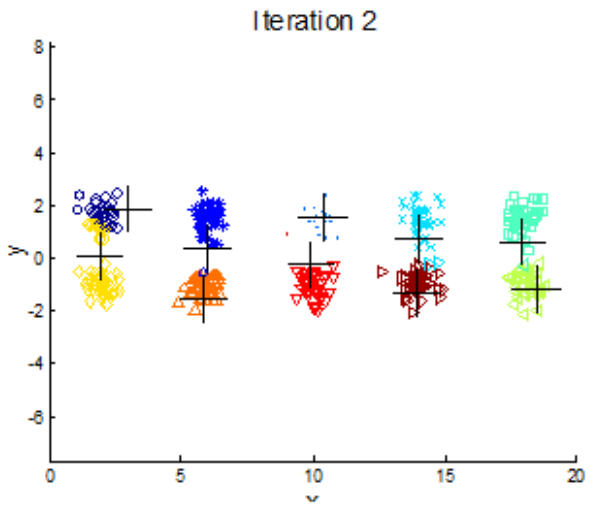
Избор почетних центроида - коректно поравнање

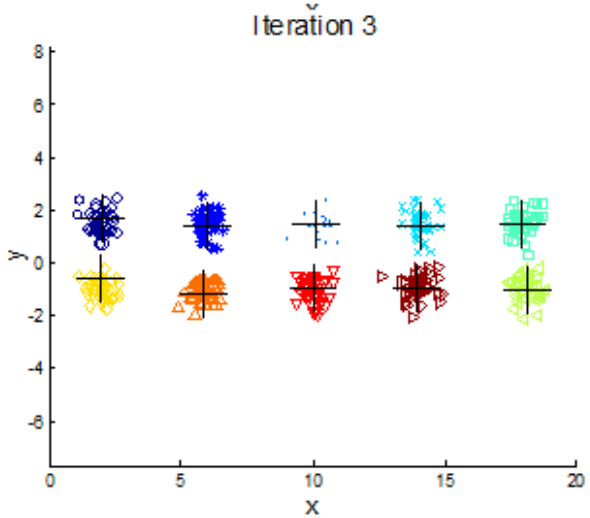


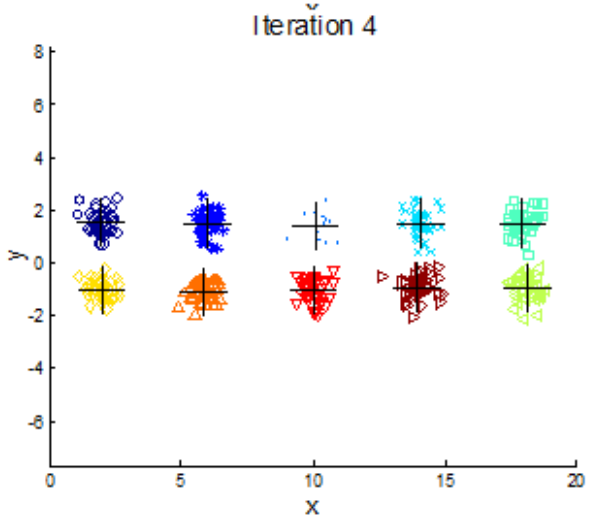


Важност избора почетног центроида - коректно поравнање

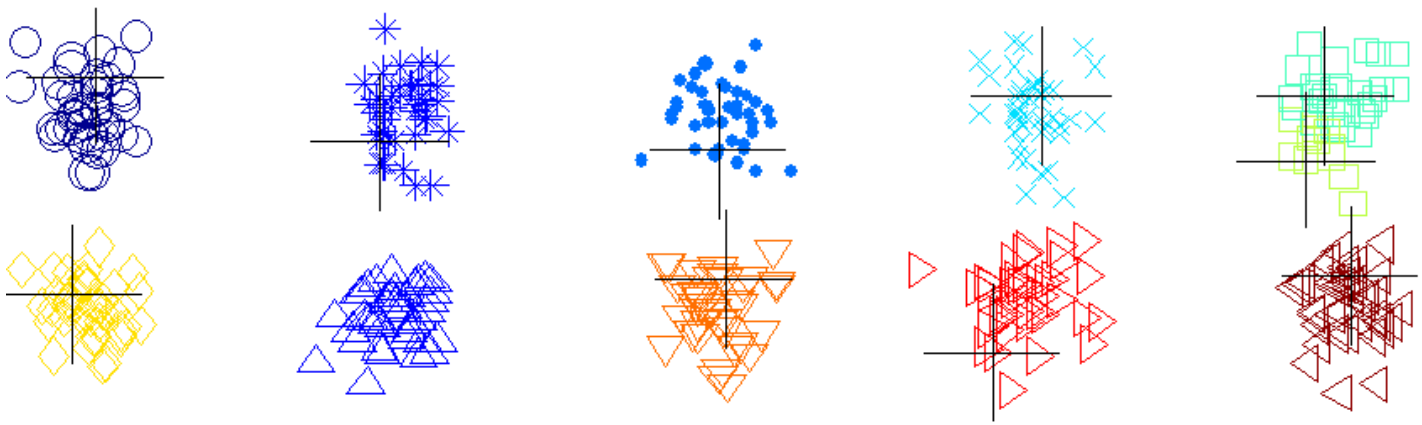




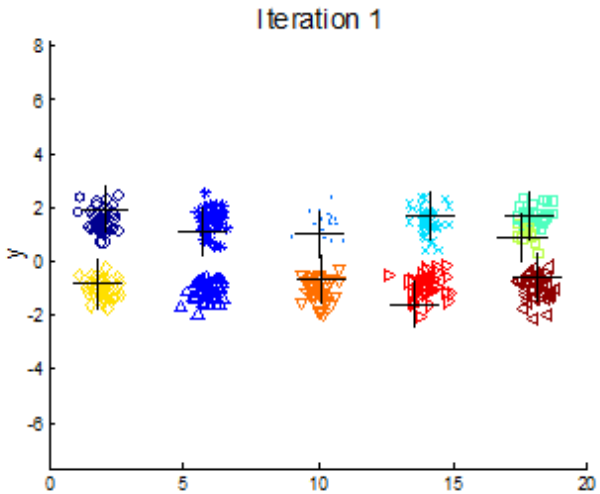


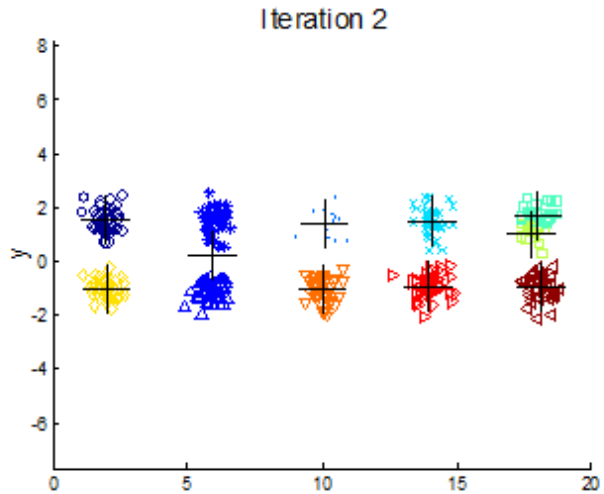


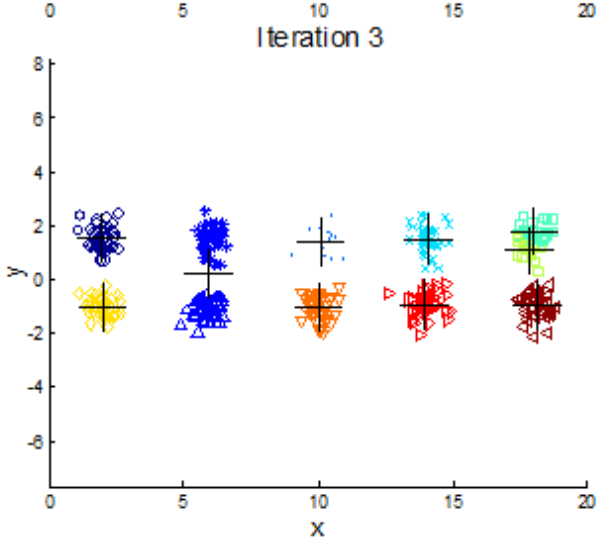
Избор почетних центроида - некоректно поравнање

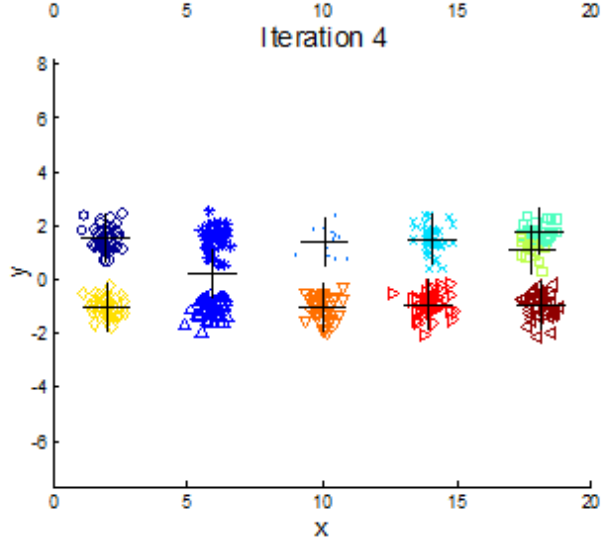


Важност избора почетног центроида - некоректно поравнање









Избор почетних центроида

Различите технике могу да се примене ради побољшања добијених резултат или повећања шанси за добијање квалитетнијих резултата. Један део техника се односи на избор почетних центроида, док је други оријентисан на додатну обраду добијених резултата. Могуће технике су:

- Узастопна извршавања алгоритма
  - Свако извршавање са нпр. случајно изабраним центроидима
  - Између њих се изабере кластер са најмањим *SSE*
- Над узорцима се примени хијерархијско кластеровање и изаберу почетни центроиди
- Изабере се m ($m > k$) почетних центроида и бирају се 'добри' центроиди између њих
  - Да би овај начин био успешан потребно је да изабрани кандидати за центроиде покривају што шири простор
- Применити приступ *K-средине++*
- Применити методу *бисекције K-средина*
- Извршити постпроцесирање добијених резултата

K-средине++

- Један од начина за иницијализацију скупа иницијалних центроида
- Даје боље резултате у односу на CCE
- Алгоритам може да се представи преко следећег псеудокода:

```
Izabrati slucajno tacku kako prvi centroid
for i=1 to k do
    Odrediti rastojanje d(x) svake (do sada
       neizabrane) tacke do najblizeg centroida
    Svakoj tacki dodeliti verovatnocu proporcionalnu
        njenom d(x)^2
    Izabrati novi centroid od preostalih tacaka
       koristeci verovatnoce kao tezine
end for
```

Постпроцесирање добијених резултата

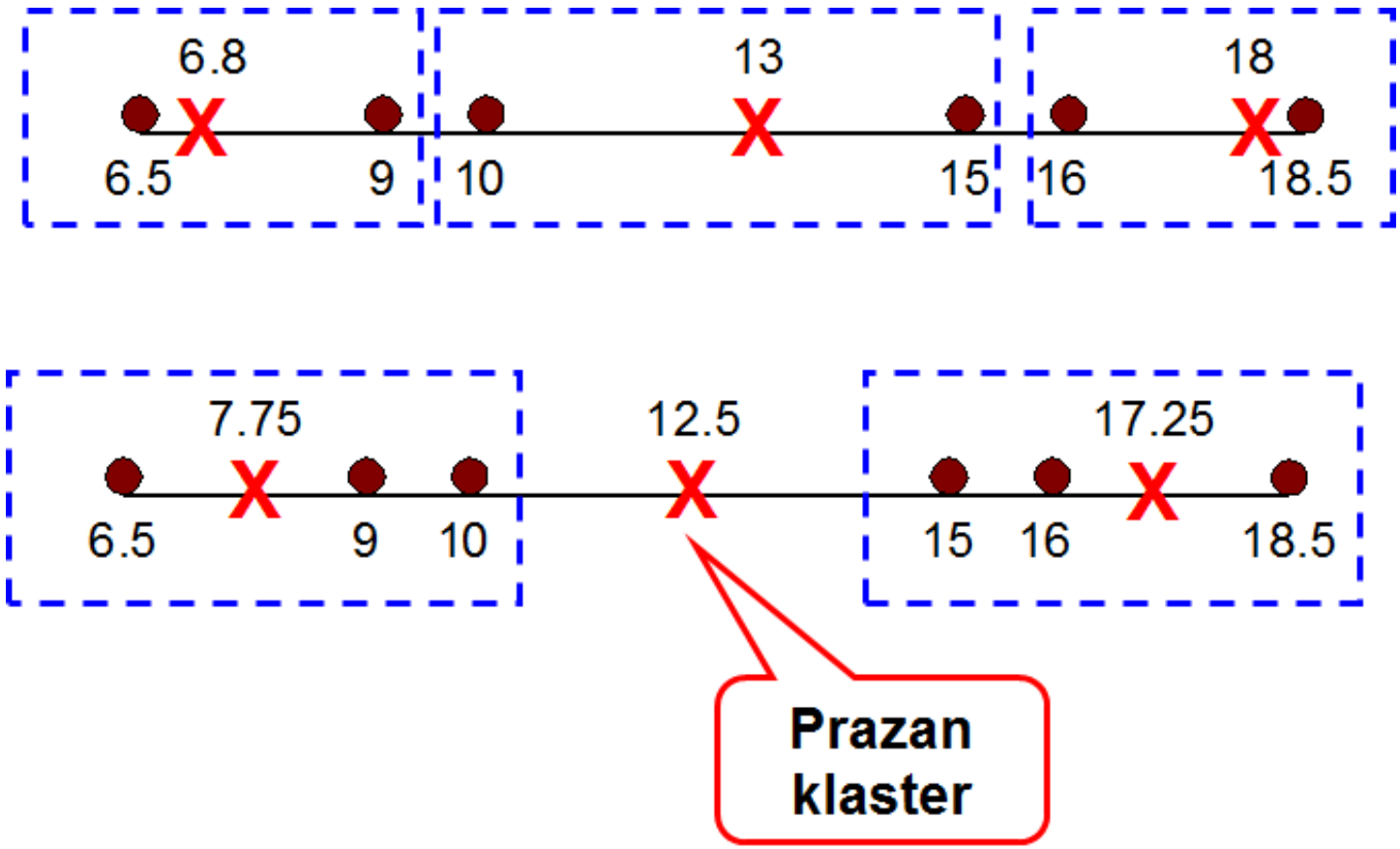
Доста често, елементи ван граница могу знатно да утичу на лоше резултате кластеровања. Квалитет кластеровања може да се додатно побољша анализом резултата и уклањањем елемената ван граница. Уклањање може да се изврши и у фази препроцесирања података. При томе треба бити опрезан, јер уклањање елемента ван граница не важи за сваку врсту апликација (нпр. не важи у случају компресије података).

Додатне технике постпроцесирања које доводе до побољшања резултата су:

- Елиминација малих кластера са елементима ван граница
- Подела кластера са високим *SSE*
- Интеграција кластера који су 'близу' и имају релативно мали *SSE*

Рад са празним кластерима

Основни алгоритам k-средина може да произведе празне кластере при извршавању. При томе 'празан' означава да се у том кластеру налази само центроид, без иједног елемента.



Рад са празним кластерима

Стратегије за елиминацију празних кластера укључују замену центроида на неки од следећих начина:

- Изабрати тачку која највише учествује у *SSE*
- Изабрати тачку која је најдаље од текућих центроида
- Изабрати тачку из кластера са највећим *SSE*. Овај начин обично доводи до деобе кластера
- Ако има више празних кластера поновити поступак

Алгоритам бисекције K-средина

Алгоритам бисекције k-средина је варијанта алгоритма k-средина која може да произведе партиционо или хијерархијско кластеровање

Основна идеја: за добијање k кластера подели се скуп свих тачака у два кластера, изаберe се један од њих за поделу, уз понављање поступка све док се не добије K кластера. Различити начини поделе кластера су:

- подели се највећи кластер
- подели се кластер са највећим CCE
- користи се критеријум заснован и на величини кластера и на величини CCE-а

Ова метода се често не користи за само кластеровање, већ се добијени центроиди користе за улаз у основни K-средина алгоритам кластеровања

Алгоритам бисекције K-средина - пример

Недостаци алгоритма k-средина

Недостаци и ограничења алгоритма k-средина су

- не функционише за кластере произвољног облика
- не функционише за кластере различитих густина
- осетљив је на елементе ван граница који могу да доведу до јединичних или празних кластера
- проблем представља одређивање репрезентативних представника и броја кластера k

Добре стране алгоритма k-средина

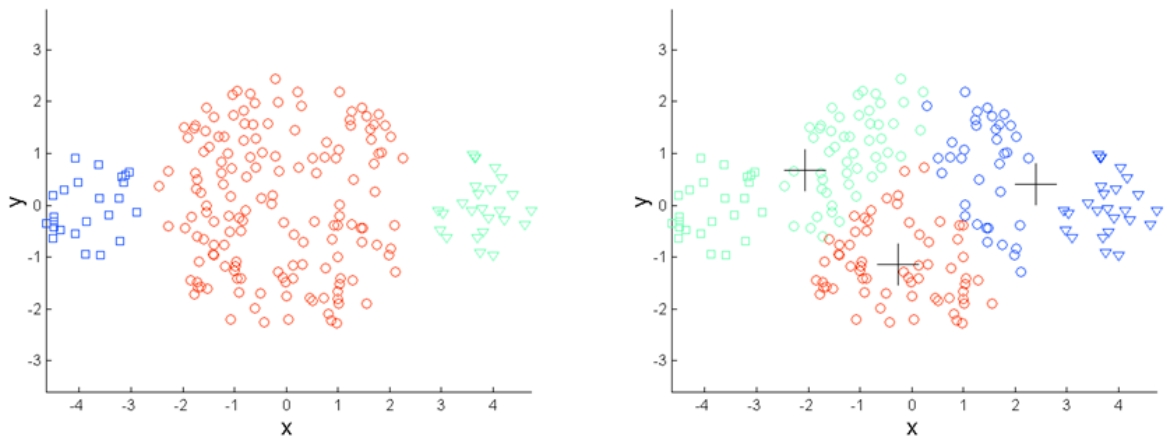
Добре стране алгоритма k-средина су

- Једноставност имплементације и примене
- Најбоље ради са глобуларним подацима
- Ако се као мера растојања користи Махаланобисово растојање, алгоритам к-средина препознаје кластере различитих густина

Неки недостаци и ограничења алгоритма k-средина су илустровани на наредним слајдовима. У сва три случаја приказана ограничења могу да се превазиђу повећањем броја кластера k и налажењем кластера који су подкластери природних кластера.

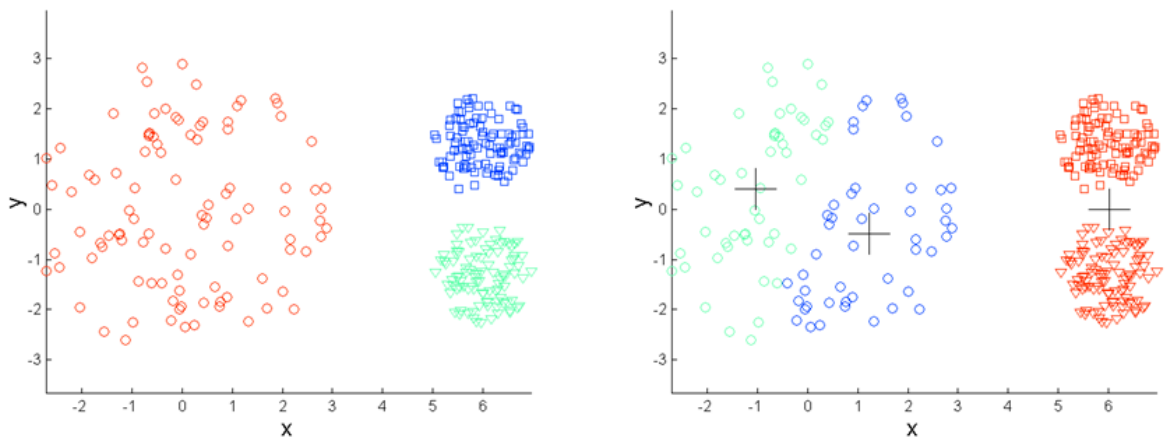
Ограничења алгоритма k-средина

Примена алгоритма k-средина на кластере различитих величина



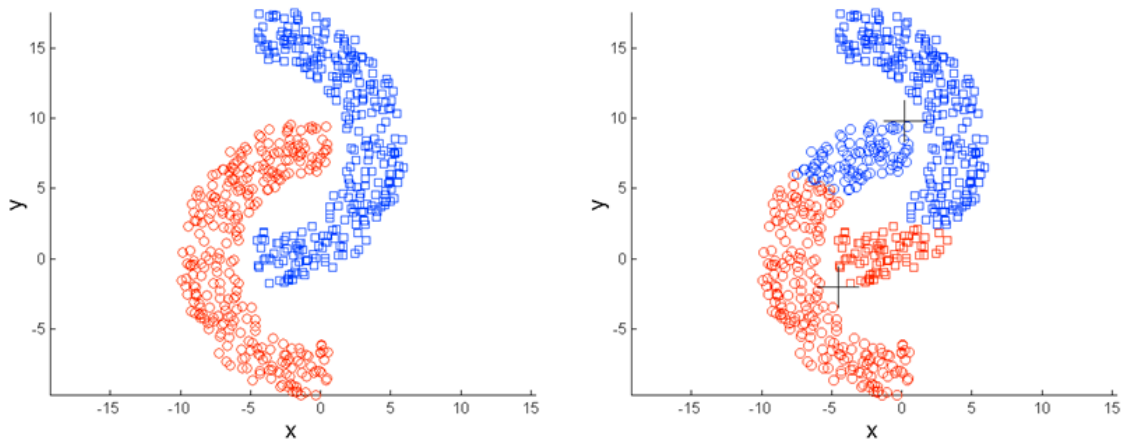
Ограничења алгоритма k-средина

Примена алгоритма k-средина на кластере различитих густина

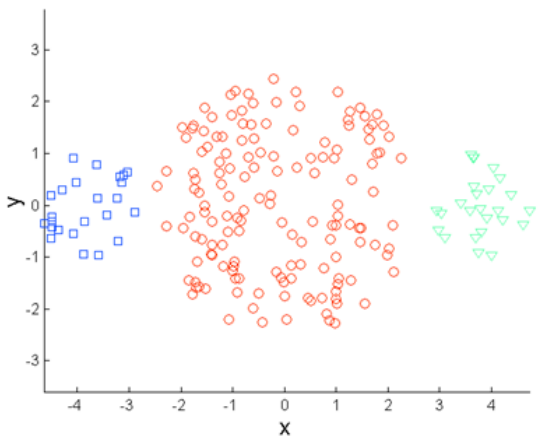


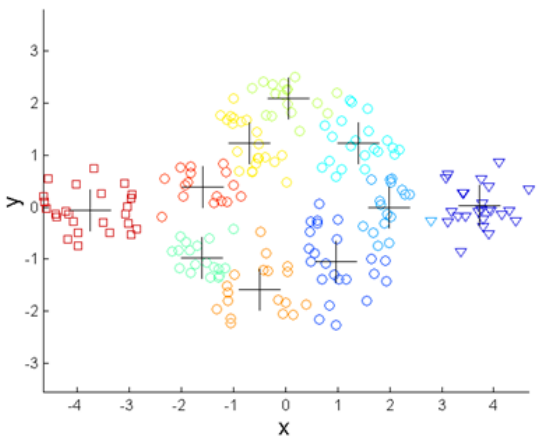
Ограничења алгоритма k-средина

Примена алгоритма k-средина на не-глобуларне кластере

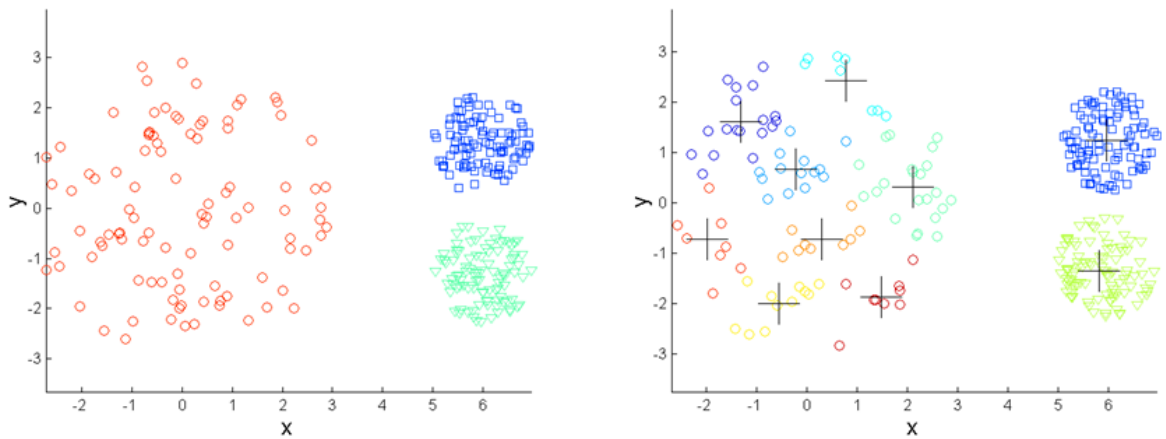


Превазилажење ограничења алг. к-средина

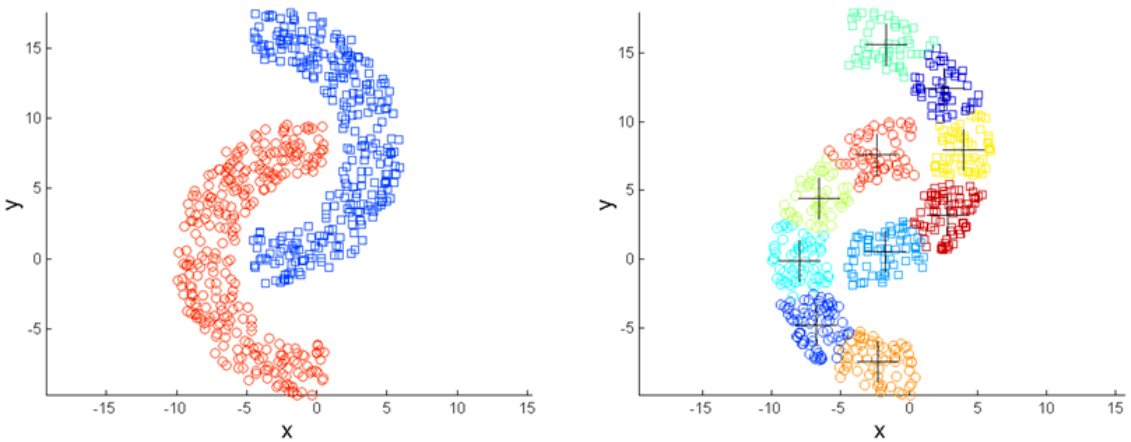




Превазилажење ограничења алг. к-средина



Превазилажење ограничења алг. к-средина



Алгоритам к-медијана

Алгоритам k-медијана је сличан алгоритму k-средина, при чему се као центроид користи медијана. Неке карактеристике овог алгоритма су:

- Користи се растојање *такси блок*.
- Показује се да репрезентативни представник медијана података по свакој димензији кластера C_j
- Мања је осетљивост на елементе ван граница

Алгоритам к-медоида

У алгортиму k-медоида избор центроида се увек врши из инцијалног скупа тачака. Иако није оптималан, разлог за овакав избор је утицај елемената ван граница на медијану, мада је понекад тешко израчунати центар за одређене (сложене) типове података. Као и код k-медијане и у овом алгоритму се као мера растојања користи *такси блок*.

Пример алгоритма k-медоида је приказан на наредном слајду.

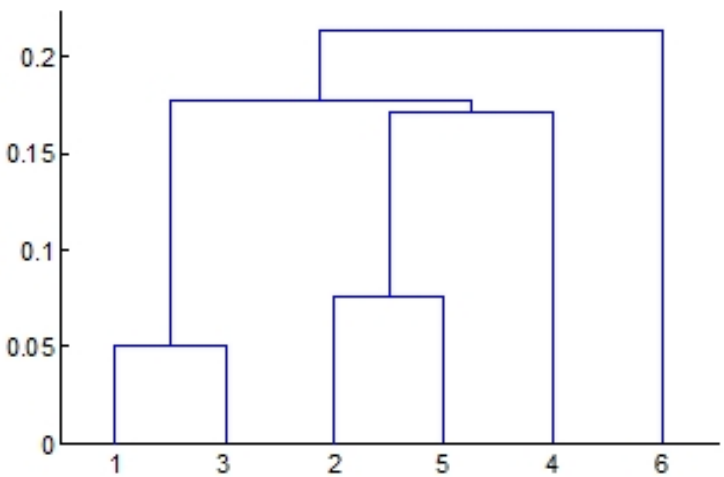
Детаљније информације о алгоритму k-медоида могу да се нађу у књизи Charu C. Aggarwal: Data Mining The Textbook, Springer, 2015

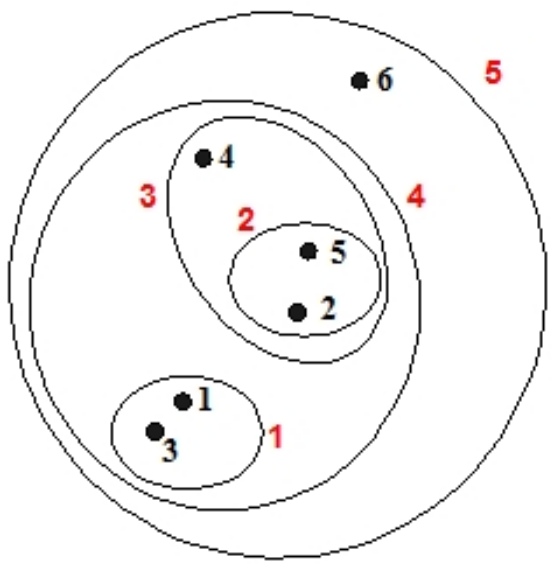
Алгоритам к-медоида

```
/* Skup podataka: D={x1,x2,...,xn},
   Broj reprezent. predstavnika: k */
klasterovanje_sa_reprezentativnim_predstavnicima(D, k)
begin
inicijalni izbor skupa reprezentativnih predstavnika
       S={Y1,Y2,...,Yk} iz skupa D;
  repeat
    Formiraj klastere (C1, ...Ck) dodelom svake tacke
       iz D najblizem predstavniku iz S koristeci
       funkciju rastojanja Dist(xi,Yj);
    Odrediti par xi iz D i Yj iz S tako da zamena
       Yj sa xi daje najbolje moguce povecanje
       ciljne funkcije;
    Izvrsiti zamenu Xi i Yj samo ako je
       povecanje pozitivno;
  until nema poboljsanja vrednosti funkcije;
  return (C1, ..., Ck);
end
```

Алгоритми хијерархијског кластеровања

Другу велику групу алгоритама за кластеровање чине алгоритми хијерархијског кластеровања. Основна идеја ове групе алгоритама је формирање скупа угнеждених кластера који су организовани у облику хијерахије по нивоима. Резултати ове групе алгоритама се најчешће визуелизују у облику дендограма или дијаграма са угнежденим кластерима на коме се, поред односа кластер/подкластер, види и редослед формирања кластера, односно која два подкластера се спајају у кластер. На наредној слици приказани су резултати кластеровања скупа од 6 тачака у облику дендограма и дијаграма са угнежденим кластерима.





Алгоритми хијерархијског кластеровања

Алгоритми хијерархијског кластеровања се деле у две групе:

- алгоритме сакупљајућег кластеровања (енг. *agglomerative clustering*). Код ове групе алгоритама хијерархија кластера се формира одоздо/навише. На почетку алгоритма се свака тачка посматра као посебан кластер, и у сваком од наредних корака се врши спајање два најближа (према неком критеријуму) кластера.
- алгоритме раздвајајућег кластеровања (енг. *divisive clustering*). Код ове групе алгоритама хијерархија кластера се формира одозго/наниже. На почетку алгоритма се сматра да све тачке припадају једном кластеру (на врхи хијерархије) који се у наредним корацима дели све док се не дође до кластера који садрже само појединачне тачке.
- Традиционални хијерархијски алгоритми деле или спајају по један кластер у једном кораку и користе матрице сличности или матрице растојања (два кластера су најсличнија ако је растојање између њих најмање и обратно)
- Карактеристика ове групе алгоритама је да се иницијално не наводи број кластера који ће се формирати

Алгоритми сакупљајућег кластеровања

- Заједничка особина свих алгоритама хијерахијског кластеровања је начин формирања хијерахије - креће се од појединачних тачака које се посматрају као јединични кластери. У сваком од наредних корака алгоритама се врши сакупљање најближег пара кластера у нови кластер све док не остане један кластер
- Имплементације неких алгоритама допуштају тзв. пресецање, односно раније заустављање алгоритма уколико се дође до k кластера или се дође до l-тог нивоа хијерархије, где су k и l унапред задати бројеви
- Главна разлика између алгоритама овог типа је избор функције/методе за израчунавање сличности на основу које се врши спајање два кластера. Од овог избора зависи и облик добијене хијерархије.
- За одређивање растојања могу да се користе различите мере: растојање Минковског (Еуклидско растојање, такси блок, ...), Махаланобисово растојање, ...

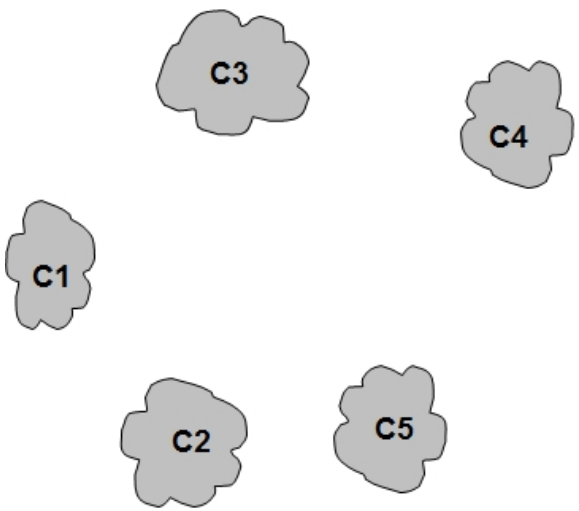
Алгоритми сакупљајућег кластеровања

Псеудокод алгоритма сакупљајућег хијерахијског кластеровања

```
/* Podatak: D, matrica slicnosti (rastojanja) M */
Sakupljajuce_klasterovanje(D)
begin
  inicijalizacija matrice slicnosti M dimenzije n x n
       na osnovu podataka D;
  repeat
    Uzeti najblizi par klastera i i j koristeci M;
    Kombinovati klastere i i j;
    Obrisati redove i kolone klastera i i j iz M i
       formirati novi red i kolonu u M za
       novodobijeni klaster;
    Uneti novi red i kolonu u M;
  until kriterijum izlaska;
  return tekuci skup klastera;
end
```

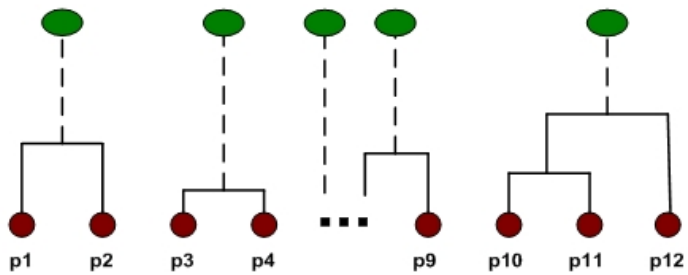
Алгоритми сакупљајућег кластеровања

- Проблем - чување матрице растојања
- Формирање новог кластера - матрица се модификује (или се прави нова)

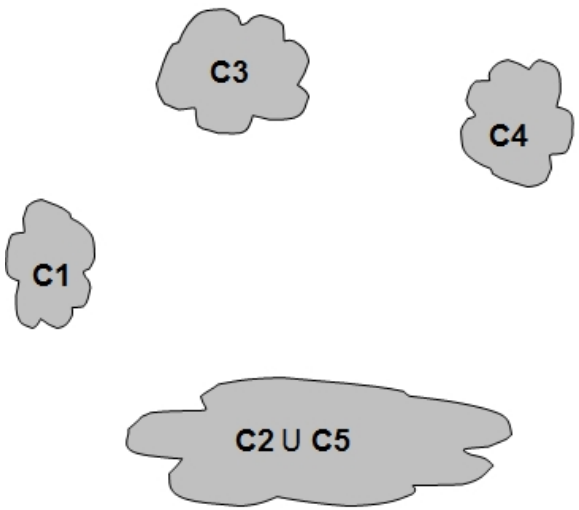


	C1	C2	C3	C4	C5
C1					
C2					
C3					
C4					
C5					

Proximity Matrix

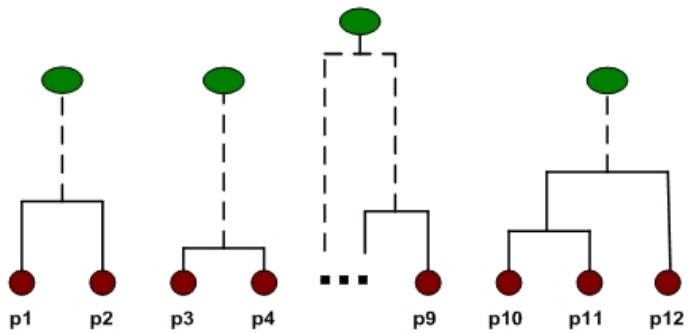


Алгоритми сакупљајућег кластеровања



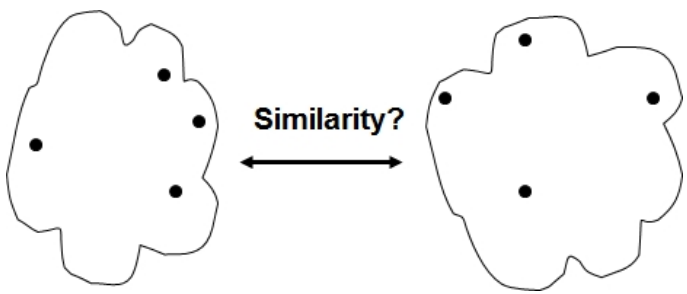
	C1	C2 U C5	C3	C4
C1		?		
C2 U C5	?	?	?	?
C3		?		
C4		?		

Proximity Matrix



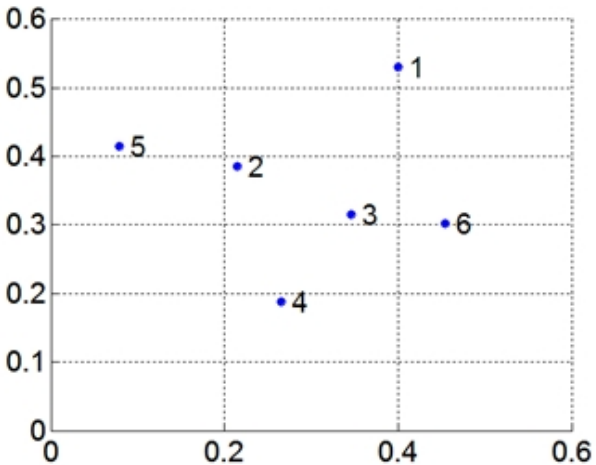
Сличност кластера

У складу са општим принципом за извршавање алгоритама (сакупљајућег) хијерархијског кластеровања који подразумева спајање два кластера која су најсличнија (на најмањем растојању), поставља се питање како дефинисати функције и методе за израчунавање сличности (растојања) два кластера P и Q са m и n елемената.



Сличност кластера

На основу матрице сличности текућег скупа кластера, свака од функција која се користи израчунава сличност између пара кластера и добијену вредност уписује у матрицу сличности.



Distance Matrix:

	p1	p2	p3	p4	p5	p6
p1	0.00	0.24	0.22	0.37	0.34	0.23
p2	0.24	0.00	0.15	0.20	0.14	0.25
p3	0.22	0.15	0.00	0.15	0.28	0.11
p4	0.37	0.20	0.15	0.00	0.29	0.22
p5	0.34	0.14	0.28	0.29	0.00	0.39
p6	0.23	0.25	0.11	0.22	0.39	0.00

Методе за израчунавање сличности кластера

Неке од метода које се могу користити за израчунавање растојања два кластера P и Q са m и n елемената су:

1) Растојање између кластера P и Q је једнако најмањем растојању између било које две тачке које им припадају, тј.

$$D(P,Q) = min(d(p_i, q_j)), i = 1, ..., m, j = 1, ..., n, p_i \in P, q_j \in Q$$

где је $d(x,y)$ мера за растојање између две тачке, а m и n број тачака у кластерима P и Q (*најбоља*, *најкраћа*, *појединачна* веза)

2) Растојање између кластера је једнако највећем растојању између било које две тачке које припадају кластерима P и Q, тј.

$$D(P,Q) = max(d(p_i, q_j)), i = 1, ..., m, j = 1, ..., n, p_i \in P, q_j \in Q$$

где је $d(x,y)$ мера за растојање између две тачке, а m и n број тачака у кластерима P и Q (*најгора*, *најдужа*, *комплетна* веза)

Методе за израчунавање сличности кластера

3) Растојање између кластера P и Q је једнако просечном растојању тачака које им припадају, тј.

$$D(P,Q) = \frac{\sum_{p_i \in P, q_j \in Q, i=1,\ldots,m, j=1,\ldots,n,} d(p_i, q_j)}{m \times n}$$

где је $d(x,y)$ мера за растојање између две тачке, а и број тачака у кластерима P и Q.

У рачунање просечног растојања могу да буду укључени и тежински фактори, при чему тежине зависе од броја тачака у сваком кластеру.

Модификација: Растојање између кластера P и Q је једнако просечном растојању свих парова тачака које су присутни у оба кластера, тј.

$$D(P,Q) = \frac{\sum_{i \in P \cup Q} \sum_{j \in P \bigcup Q, i \neq j} d(i,j)}{(m+n) \times (m+n-1)}$$

Методе за израчунавање сличности кластера

4) Растојање између кластера P и Q је једнако растојању између њихових центроида кластера. У наредном кораку се спајају два кластера чији су центроиди најближи. Лоше особине
   - не прави разлику код спајања између кластера различитих величина ако је растојање њихових центроида једнако
   - након спајања се поново израчунавају центроиди и може да се деси да је растојање између (центроида) два кластера на нивоу k мање него растојање (центроида) неких кластера на нивоу $k-1$

   Уместо центроида за растојање кластера могу да се користе и медијане.

5) Нови кластер се формира од два кластера чијим спајањем се минимизује промена варијансе унутар новодобијеног кластера. Промене у варијанси после спајања кластера могу да се изразе формулом

$$\nabla SE_{ij} = SE_{ij} - SE_i - SE_j$$

   где SE_x означава просечну квадратну грешку кластера x.

Методе за израчунавање сличности кластера

6) *Ward*-ов метод и коме се уместо варијансе користи збир квадрата грешака. Нови кластер се формира од два кластера чијим спајањем се добија минимално повећање збира квадарата грешака унутар новог кластера. Тако, у општем случају грешка E је једнака

$$E = \sum_{k=1}^{K} \sum_{x_i \in C_k} || x_i - c_k ||^2$$

где је K број кластера, и c_k центроид кластера C_k добијеног спајањем два кластера. Промена се рачуна само за новодобијени кластер на основу кластера од којих је настао и износи

$$\nabla E_{ij} = \frac{m_i n_j}{m_i + n_j} || c_i - c_j ||^2$$

где m_i и n_j представљају број тачака у кластерима C_i и C_j.

Особине метода за рачунање сличности

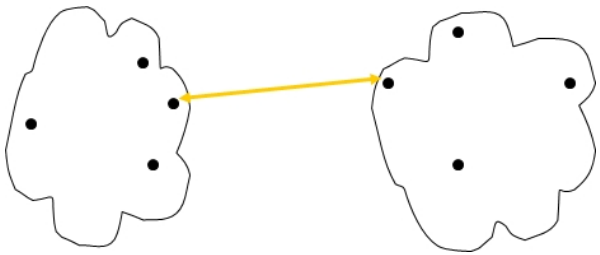
Неки недостаци сакупљајућег хијерархијског кластеровања

- После комбиновања кластери не могу да се раздвоје
  - Превазилажење: коришћење партиционог кластеровања за формирање мањих кластера на које се врши хијерархијско кластеровање (нпр. TwoStep алгоритам у SPSS Modeleru)
- Не постоји глобална функција која се директно минимизује
- У зависности од рачунања растојања јављају се
  - осетљивост на шум и елементе ван граница
  - тешкоће у обради кластера различитих величина
  - тешкоће у обради неглобуларних кластера
  - тенденција ка разбијању великих кластера

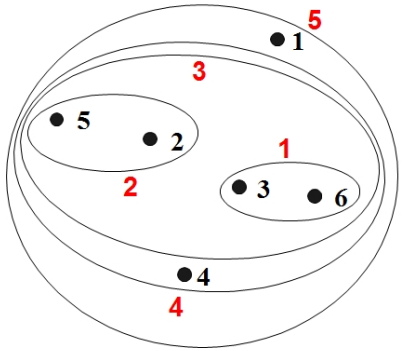
На наредним слајдовима биће илустроване предности и недостаци различитих метода за рачунање сличности кластера.

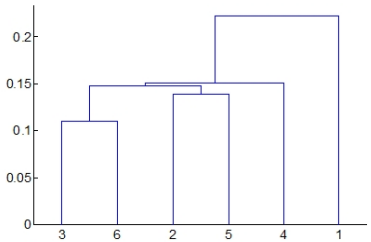
Особине метода за рачунање сличности

Најбоља (најкраћа, појединачна) веза се рачуна као минимум растојања кластера из матрице сличности. Тако би, за дата тачке и њихова растојања



	p1	p2	p3	p4	p5	p6
p1	0.00	0.24	0.22	0.37	0.34	0.23
p2	0.24	0.00	0.15	0.20	0.14	0.25
p3	0.22	0.15	0.00	0.15	0.28	0.11
p4	0.37	0.20	0.15	0.00	0.29	0.22
p5	0.34	0.14	0.28	0.29	0.00	0.39
p6	0.23	0.25	0.11	0.22	0.39	0.00



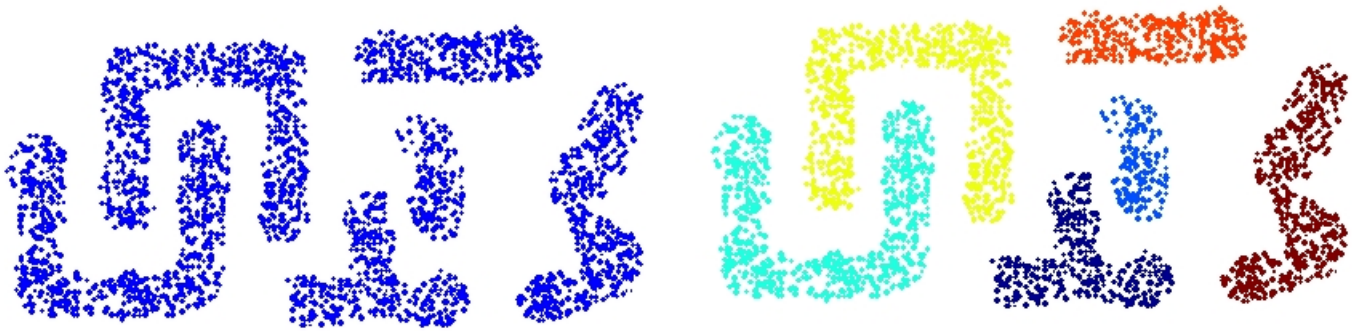


У првом кораку били спојени кластери (тачке) 3 и 6 јер је њихово међусобно растојање најмање (0.11), па иза њих кластери 2 и 5 (растојање 0.14), итд.
Растојање између тако добијених кластера би се рачунало по истом принципу као

dist({3,6},{2,5}) =min(dist(3,2),dist(6,2),dist(3,5),dist(6,5))
=min(0.15,0.25,0.28,0.39)
=0.15

Особине метода за рачунање сличности

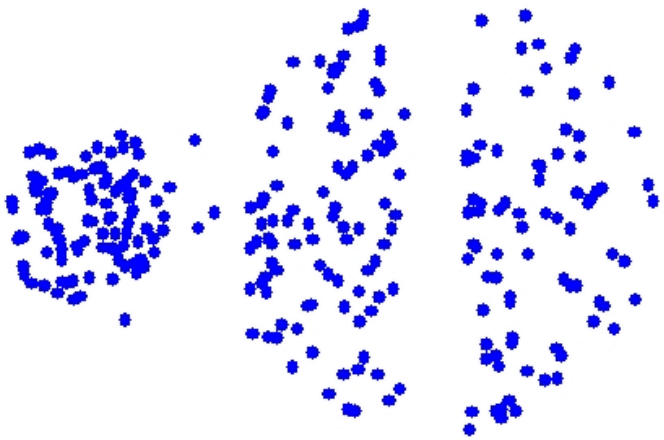
Погодност најбоље везе: може да обради не-елиптичке кластере



Original Points Six Clusters

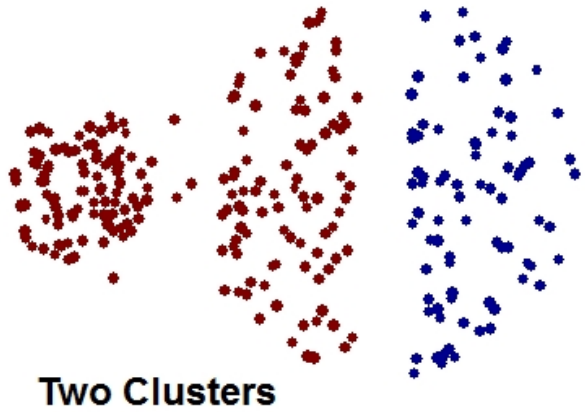
Особине метода за рачунање сличности

Недостаци најбоље везе: осетљивост на шум и елементе ван граница

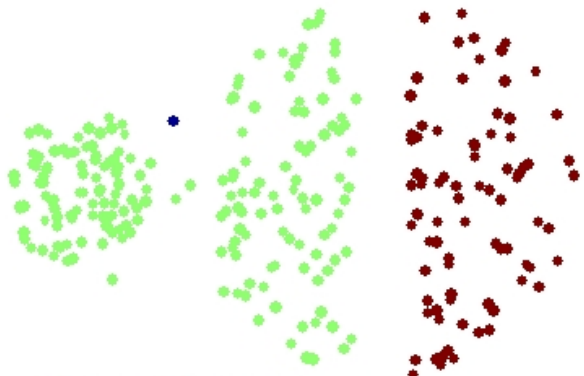


Original Points

• Sensitive to noise and outliers



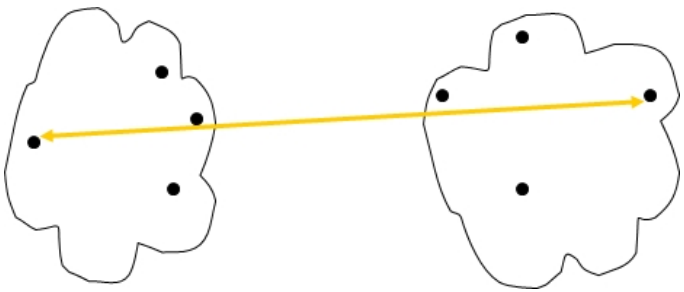
Two Clusters



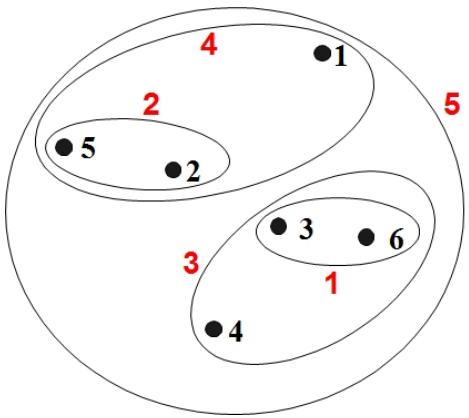
Three Clusters

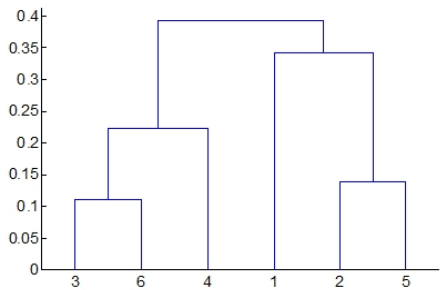
Особине метода за рачунање сличности

Најгора (најдужа, комплетна) веза



	p1	p2	p3	p4	p5	p6
p1	0.00	0.24	0.22	0.37	0.34	0.23
p2	0.24	0.00	0.15	0.20	0.14	0.25
p3	0.22	0.15	0.00	0.15	0.28	0.11
p4	0.37	0.20	0.15	0.00	0.29	0.22
p5	0.34	0.14	0.28	0.29	0.00	0.39
p6	0.23	0.25	0.11	0.22	0.39	0.00

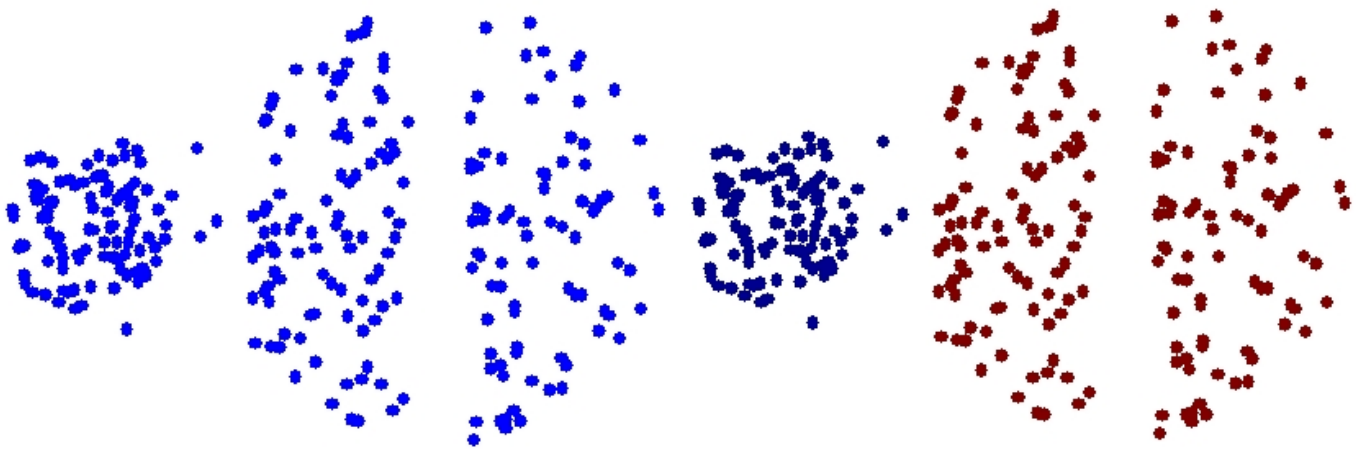




Домаћи задатак: одредити растојање кластера {3,6} и {2,5}, и растојање кластера {3,6} и {4}.

Особине метода за рачунање сличности

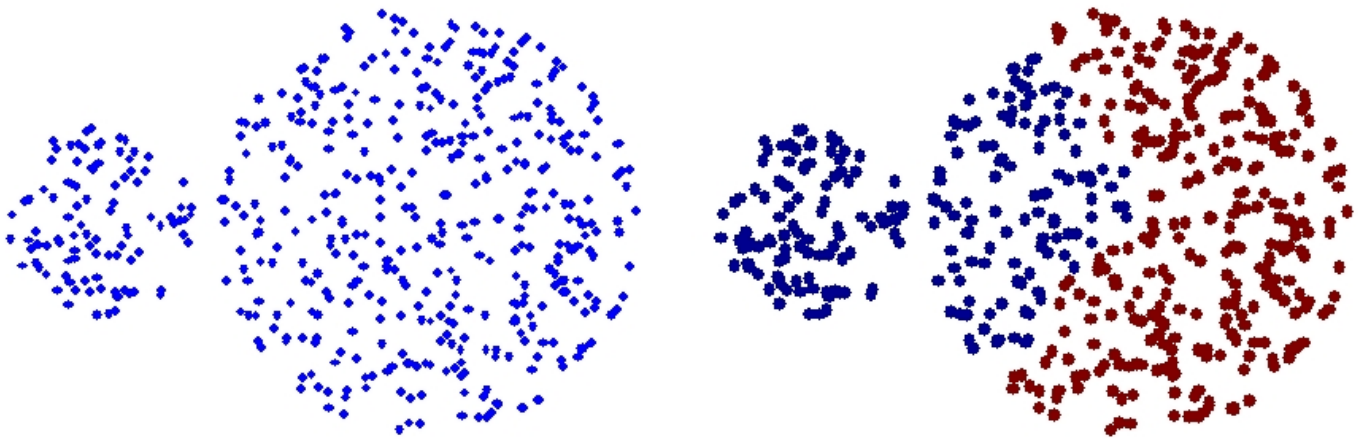
Погодност најгоре везе: отпорност на шум и елементе ван граница



Original Points Two Clusters

Особине метода за рачунање сличности

Недостатак најгоре везе: тенденција разбијања великих кластера и нагињање глобуларним кластерима

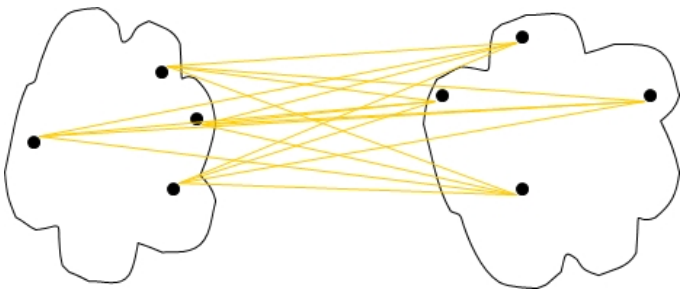


Original Points

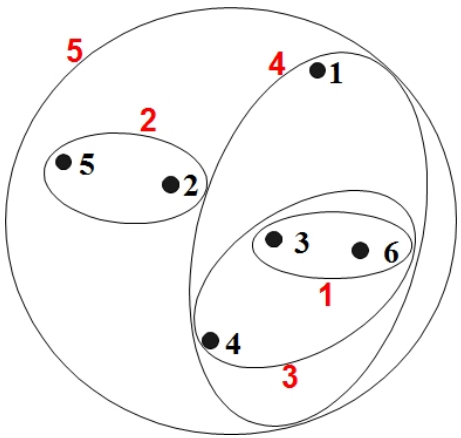
Two Clusters

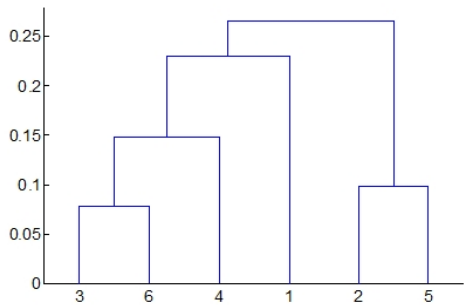
Особине метода за рачунање сличности

Просек растојања парова елемената из два кластера



	p1	p2	p3	p4	p5	p6
p1	0.00	0.24	0.22	0.37	0.34	0.23
p2	0.24	0.00	0.15	0.20	0.14	0.25
p3	0.22	0.15	0.00	0.15	0.28	0.11
p4	0.37	0.20	0.15	0.00	0.29	0.22
p5	0.34	0.14	0.28	0.29	0.00	0.39
p6	0.23	0.25	0.11	0.22	0.39	0.00





Домаћи задатак: одредити растојање кластера {3,6} од осталих кластера.

Особине метода за рачунање сличности

Просек растојања парова елемената из два кластера

- Компромис између појединачне и комплетне везе
- Погодност: мање је осетљива на шум и елементе ван граница
- Недостаци: наклоност ка глобуларним кластерима

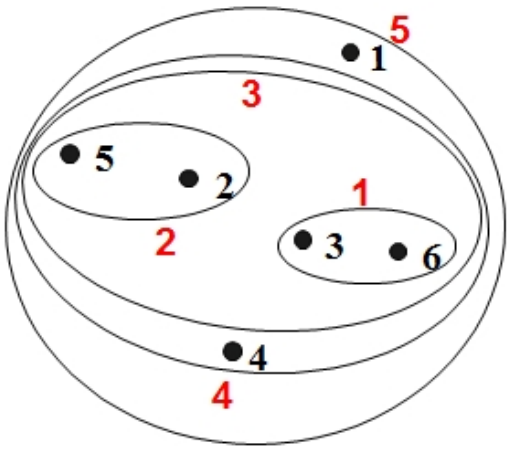
Особине метода за рачунање сличности

Сличност кластера: *Ward*-ова метода

- сличност два кластера се одређује као повећање квадратне грешке при њиховом потенцијалном спајању
- слично просеку растојања парова елемената ако је мера растојања квадрат грешке
- мање је осетљива на шум и елементе ван граница
- наклоност ка глобуларним кластерима
- Хијерархијски аналогон K-средина; може да се користи за иницијализацију K-средина

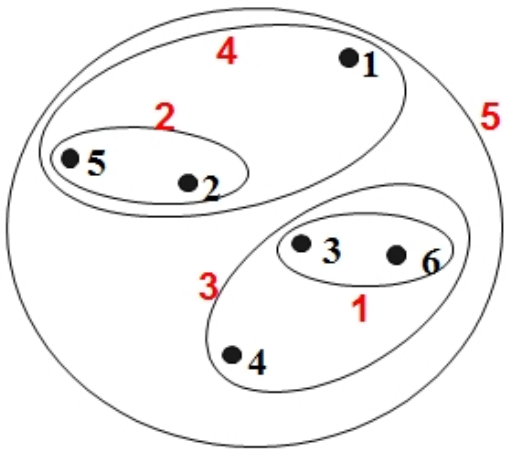
Особине метода за рачунање сличности

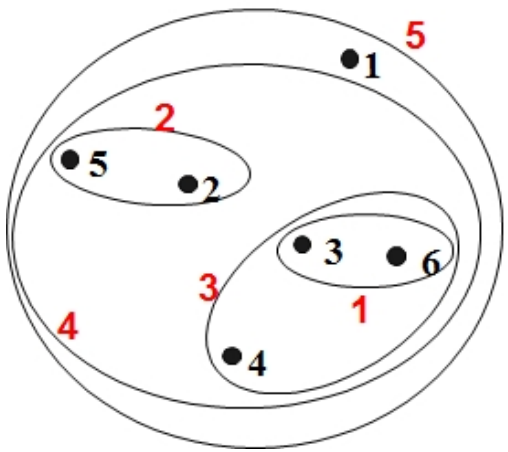
Резултати кластеровања различитим методама



MIN

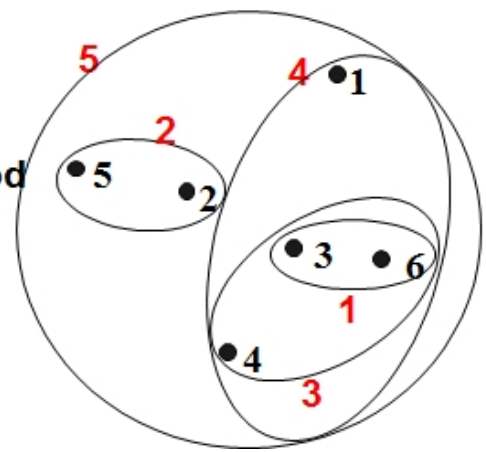
MAX





Group Average

Ward's Method



Временска и просторна сложеност

Временска и просторна сложеност

- Просторна $O(n^2)$ где је n број тачака (због матрице сличности)
- Временска $O(n^3)$: n корака у којима се рачунају елементи матрице сличности ($O(n^2)$)
- Ако се растојања за сваки кластер чувају у облику сортиране листе, цена тражења сличних кластера у итом кораку може да се смањи на $(n-i+1)$, а због додатне цене чувања елемената у облику листе, укупна цена може да се смањи на $O(n^2 log(n))$

Lance-Williams-ова формула за сличност кластера

Све претходно наведене функције за рачунање сличности могу да се посматрају као вредности *Lance-Williams*-ова формуле за изабране параметре.

Ова особина даје могућност да све технике сакупљајућег кластеровања које могу да се представе *Lance-Williams*-овом формулом не морају да чувају оригиналне тачке, већ је могуће да се матрица сличности ажурира код сваког спајања.

Lance-Williams-ова формула за сличност кластера

Нека је кластер R добијен спајањем кластера A и B, и нека је $p(.,.)$ функција сличности. Сличност кластера R и Q је једнака

$$p(R,Q) = \alpha_A p(A,Q) + \alpha_B p(B,Q) + \beta p(A,B) + \gamma |p(A,Q) - p(B,Q)|$$

Метода	α_A	α_B	β	γ
Појединачна веза	$1/2$	$1/2$	0	-1/2
Комплетна веза	$1/2$	$1/2$	0	$1/2$
Просек групе (UPGMA)	$\frac{n_a}{n_a+n_b}$	$\frac{n_b}{n_a+n_b}$	0	0
Тежински просек гр. (WPGMA)	$1/2$	$1/2$	0	0
Центроид (UPGMC)	$\frac{n_a}{n_a+n_b}$	$\frac{n_b}{n_a+n_b}$	$\frac{-n_a \times n_b}{(n_a+n_b)^2}$	0
Медијана (WPGMC)	$1/2$	$1/2$	-1/4	0
Ward-ова метода	$\frac{n_a+n_q}{n_a+n_b+n_q}$	$\frac{n_b+n_q}{n_a+n_b+n_q}$	$\frac{-n_q}{n_a+n_b+n_q}$	0

где су n_a, n_b и n_q бројеви елемената у кластерима A, B и Q

Ознаке - U: unweighted; W: weighted; PGM: pair group method; A: average; C: centroid