Machine Learning

CLUSTERING

Expectation–maximization algorithm

یادگیری ماشین

(۱۳-۱۱-۸۰۵-۰۱)

فصل هفتم

دانشگاه شهید بهشتی

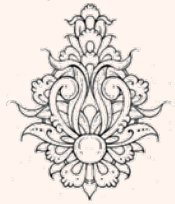
دانشکده‌ی مهندسی برق و کامپیوتر

پاییز ۱۳۹۳

احمد محمودی ازناوه

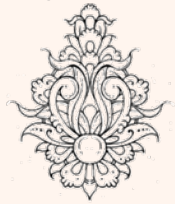
فهرست مطالب

- ترکیب چند توزیع
- K-means
- الگوریتم امید ریاضی–بیشینه کردن



Semiparametric Density Estimation

- «روش‌های پارامتری»: داده‌ها از یک توزیع تصادفی استخراج شده‌اند(مانند $p(\boldsymbol{x} \mid C_i)$).
  - مزیت این دسته از روش‌ها این است که که تنها یافتن پارامترهای مدل کفایت می‌کند.
  - استفاده از روش‌های پارامتری، می‌تواند باعث ایجاد بایاس شود.
  - در برخی کاربردها، داده‌های یک دسته دارای یک توزیع یکسان نیستند، مانند دستنوشته‌های مختلف یا تلفظهای مختلف
- «روش‌های نیمه‌پارامتری»: در این حالت برای هر دسته، خوشه‌ها(گروه‌ها)ی مختلفی در نظر گرفته می‌شود که هر کدام از یک توزیع پیروی می‌کنند.
- «روش‌های ناپارامتری»: هیچ‌گونه مدلی در نظر گرفته نمی‌شود، داده‌ها خود را توصیف می‌کنند.

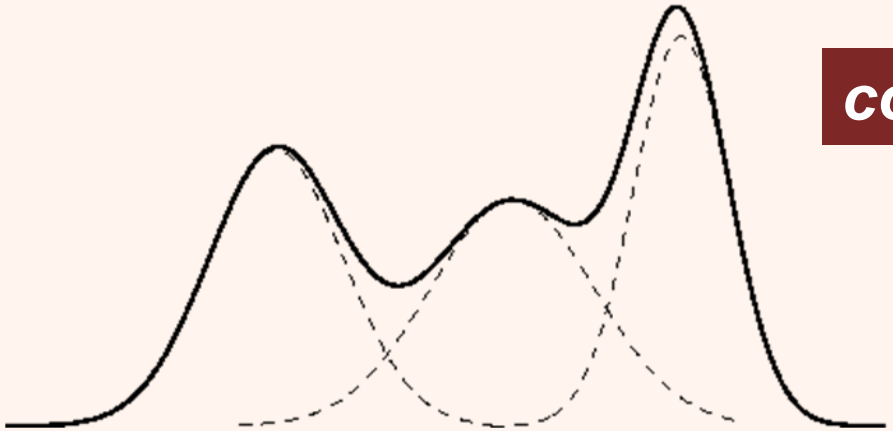


Mixture Densities

component densities **mixture proportions**

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{k} p(\mathbf{x} \mid G_i) P(G_i)$$

components/groups/clusters



در صورتی که خوشه‌ها دارای توزیع گاوسی باشند:

$$p(x|G_i) \sim N(\mu_i, \Sigma_i)$$

با در اختیار داشتن مجموعه‌ی آموزشی $X=\{x^t\}_t$ پارامترهای که در طی فرآیند آموزش تخمین زده می‌شوند:

$$\Phi = \{P(G_i), \mu_i, \Sigma_i\}^k_{i=1}$$

مفهوم «دسته» در مقایسه با «خوشه»

Classes vs. Clusters

Classfiction

- Supervised: $X = \{\boldsymbol{x}^t, \boldsymbol{r}^t\}_t$
- Classes C_i $i=1,\ldots,K$

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{K} p(\mathbf{x} \mid C_i) P(C_i)$$

where $p(\boldsymbol{x} \mid C_i) \sim N(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)$

- $\Phi = \{P(C_i), \boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i\}_{i=1}^{K}$

$$\hat{P}(C_i) = \frac{\sum_t r_i^t}{N} \quad \mathbf{m}_i = \frac{\sum_t r_i^t \mathbf{x}^t}{\sum_t r_i^t}$$

$$\mathbf{S}_i = \frac{\sum_t r_i^t (\mathbf{x}^t - \mathbf{m}_i)(\mathbf{x}^t - \mathbf{m}_i)^T}{\sum_t r_i^t}$$

- Unsupervised: $X = \{\boldsymbol{x}^t\}_t$
- Clusters G_i $i=1,\ldots,k$

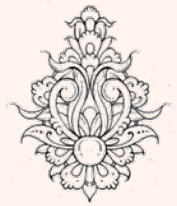
$$p(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{k} p(\mathbf{x} \mid G_i) P(G_i)$$

where $p(\boldsymbol{x} \mid G_i) \sim N(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)$

- $\Phi = \{P(G_i), \boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i\}_{i=1}^{k}$

Labels r_i^t ?

Clustering



k-Means Clustering

- هدف یافتن گروه‌های مشابه از بین داده‌های برچسب‌نخورده است.
  - یافتن k «بردار مرجع» (reference vector) است که به بهترین نحو داده‌ها را نمایش دهند.

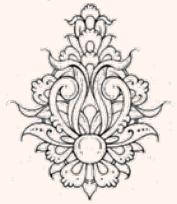
prototypes /codebook vectors /codewords

Reference vectors, m_j, $j = 1,\ldots,k$

- بعد از مشخص شدن بردارهای مرجع، نمونه‌های در خوشه‌ی نزدیک‌ترین بردار مرجع قرار می‌گیرند:

$$\left\|\mathbf{x}^t - \mathbf{m}_i\right\| = \min_j \left\|\mathbf{x}^t - \mathbf{m}_j\right\|$$

- بدین‌ترین می‌توان به جای داده‌های از بردار مرجع متناظر آن استفاده کرد.



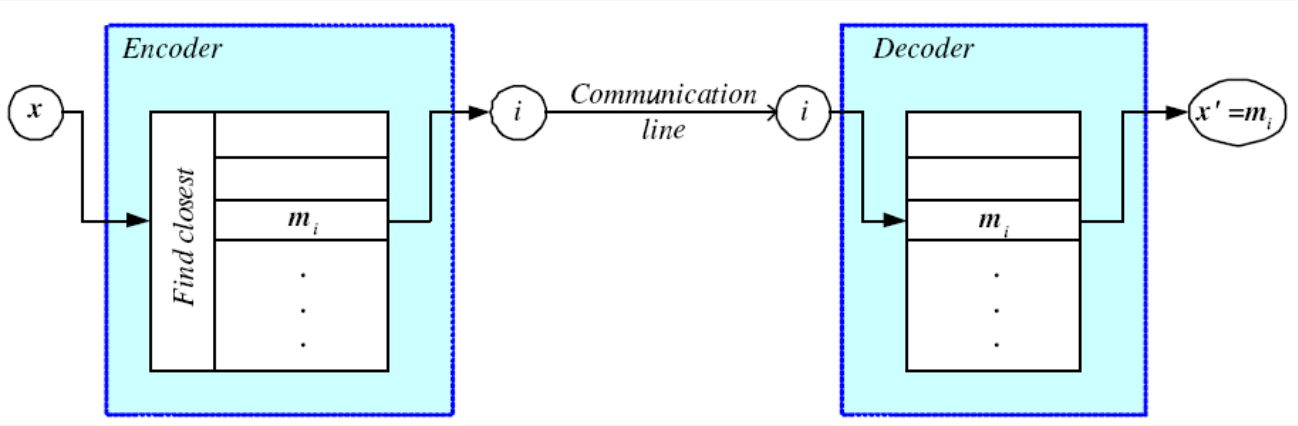
k-Means Clustering

- در این صورت «خطای بازسازی» به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$E\left(\{\mathbf{m}_i\}_{i=1}^{k} \middle| \mathcal{X}\right) = \sum_t \sum_i b_i^t \left\| \mathbf{x}^t - \mathbf{m}_i \right\|$$

Reconstruction error

$$b_i^t = \begin{cases} 1 & \text{if } \left\| \mathbf{x}^t - \mathbf{m}_i \right\| = \min_j \left\| \mathbf{x}^t - \mathbf{m}_j \right\| \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$



Encoding/Decoding

k-Means Clustering

- بهترین بردارهای مرجع، موجب می‌شوند تا خطای بازسازی مینیمم شود.

$$E\left(\{\mathbf{m}_i\}_{i=1}^{k}|\mathcal{X}\right)=\sum_t\sum_i b_i^t\left\|\mathbf{x}^t-\mathbf{m}_i\right\|$$

- این رابطه افزون بر $\boldsymbol{m}_i$ به برچسب‌ها b_i^t هم بستگی دارد، از این رو نمی‌توان برای آن راه حل تحلیلی یافت.

Initialize $\boldsymbol{m}_i, i=1,\ldots,k$, for example, to k random $\boldsymbol{x}^t$

Repeat

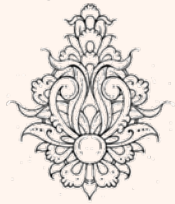
For all $\boldsymbol{x}^t \in \mathcal{X}$

$$b_i^t \leftarrow \begin{cases} 1 & \text{if } \|\boldsymbol{x}^t-\boldsymbol{m}_i\| = \min_j \|\boldsymbol{x}^t-\boldsymbol{m}_j\| \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

For all $\boldsymbol{m}_i, i=1,\ldots,k$

$$\boldsymbol{m}_i \leftarrow \sum_t b_i^t \boldsymbol{x}^t / \sum_t b_i^t$$

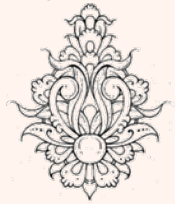
Until $\boldsymbol{m}_i$ converge



در صورتی که بخش‌بندی داده‌ها تغییر نکند، الگوریتم به پایان رسیده است.

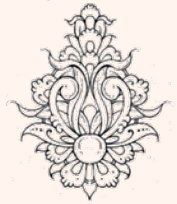
مشکلات k-means

- این فرآیند، جستجوی محلی است و پاسخ نهایی وابسته به مقدار اولیه‌ی بردارهای مرجع است.
- نسبت به داده‌ها پرت مقاوم نیست.
- مقدار k باید از قبل مشخص شود.

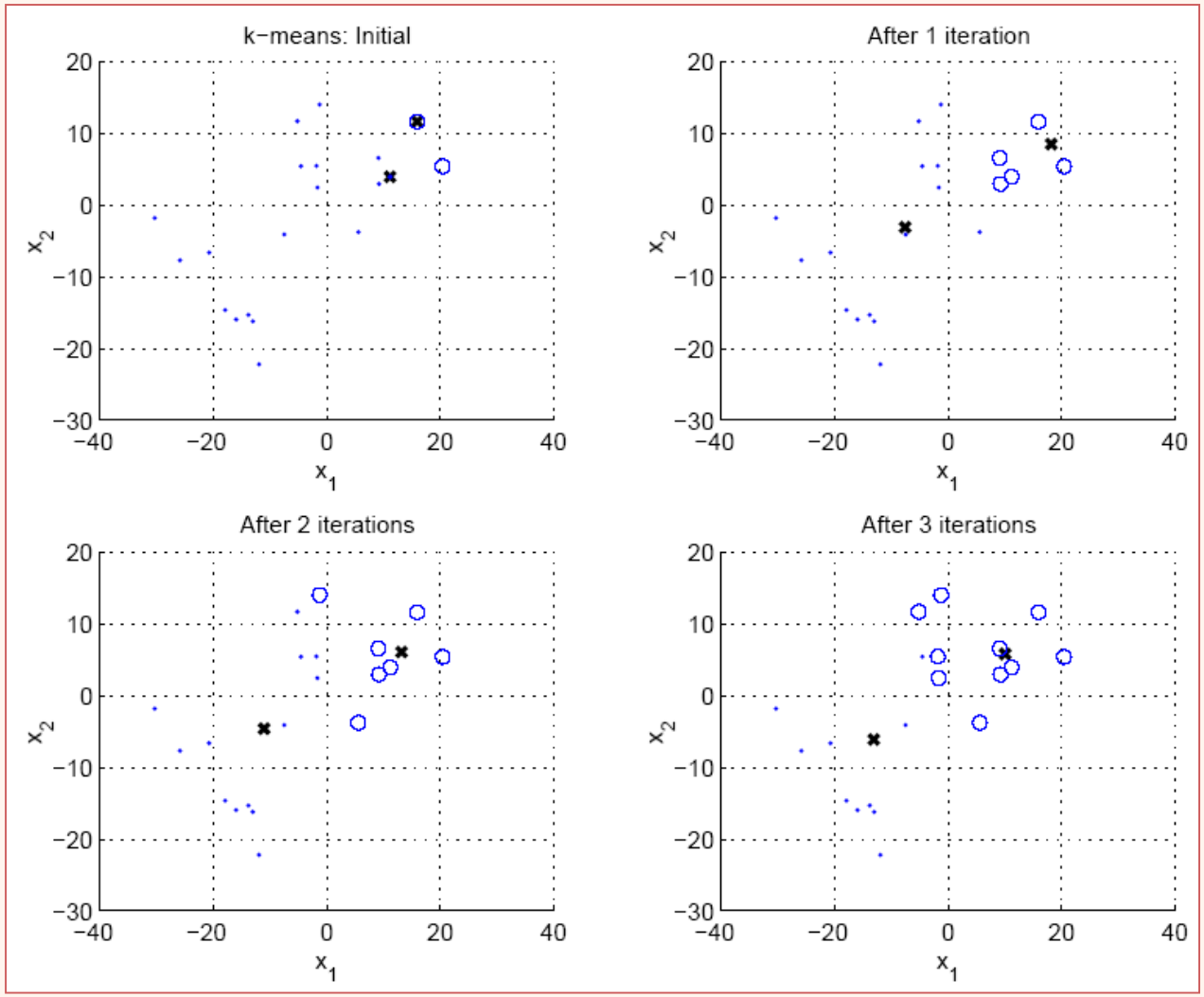


مقدار اولیه‌ی بردارهای مرجع

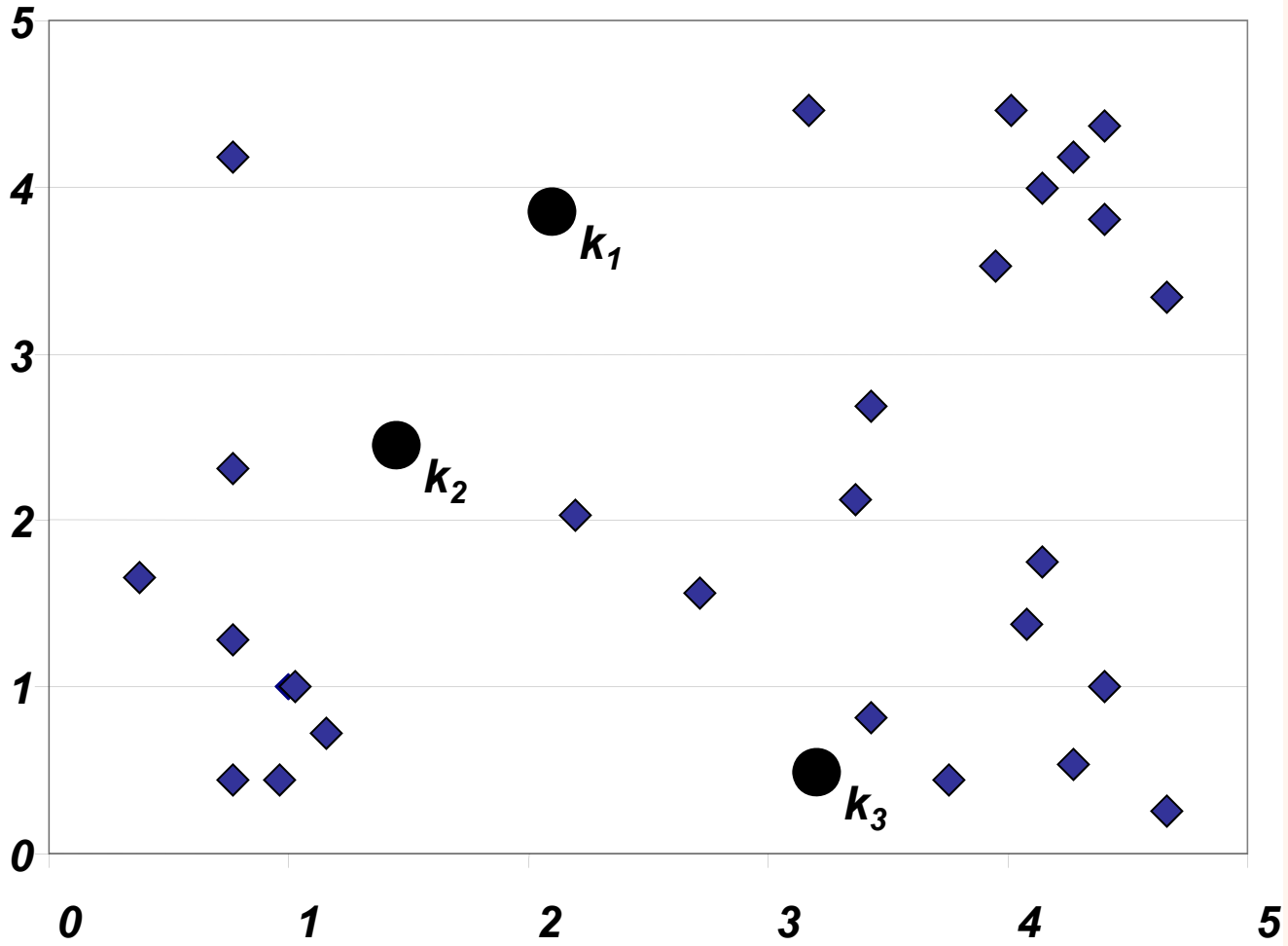
- انتخاب تصادفی همه‌ی بردارهای مرجع
- محاسبه‌ی مقدار میانگین همه نمونه‌ها و انتساب آن به بردارهای مرجع پس از افزودن مقداری تصادفی
- محاسبه‌ی اولین مؤلفه‌ی اساسی و تقسیم آن به k قسمت مساوی و انتساب مقدار میانگین هر قسمت به هر بردار مرجع



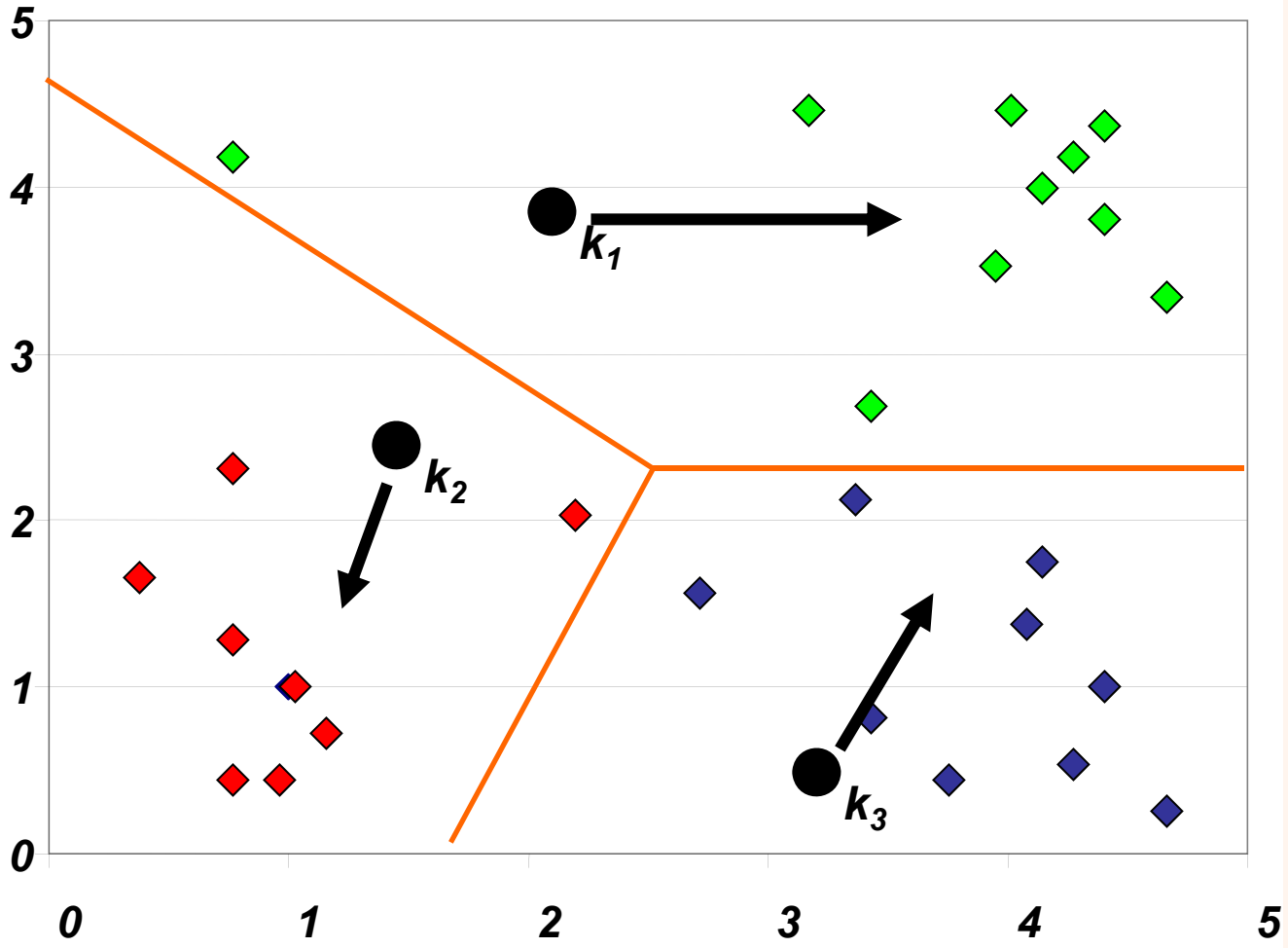
k-Means Clustering



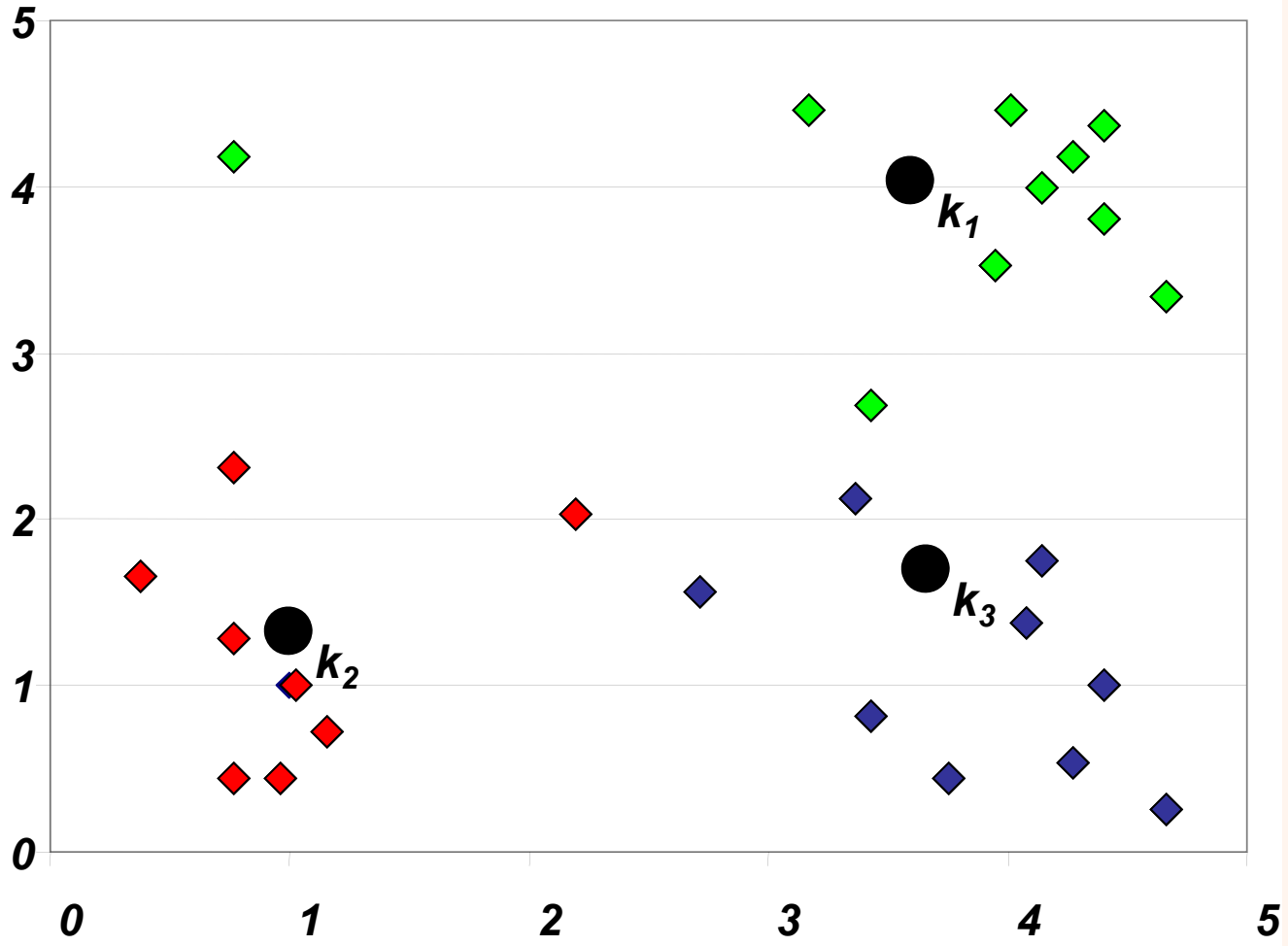
مثال



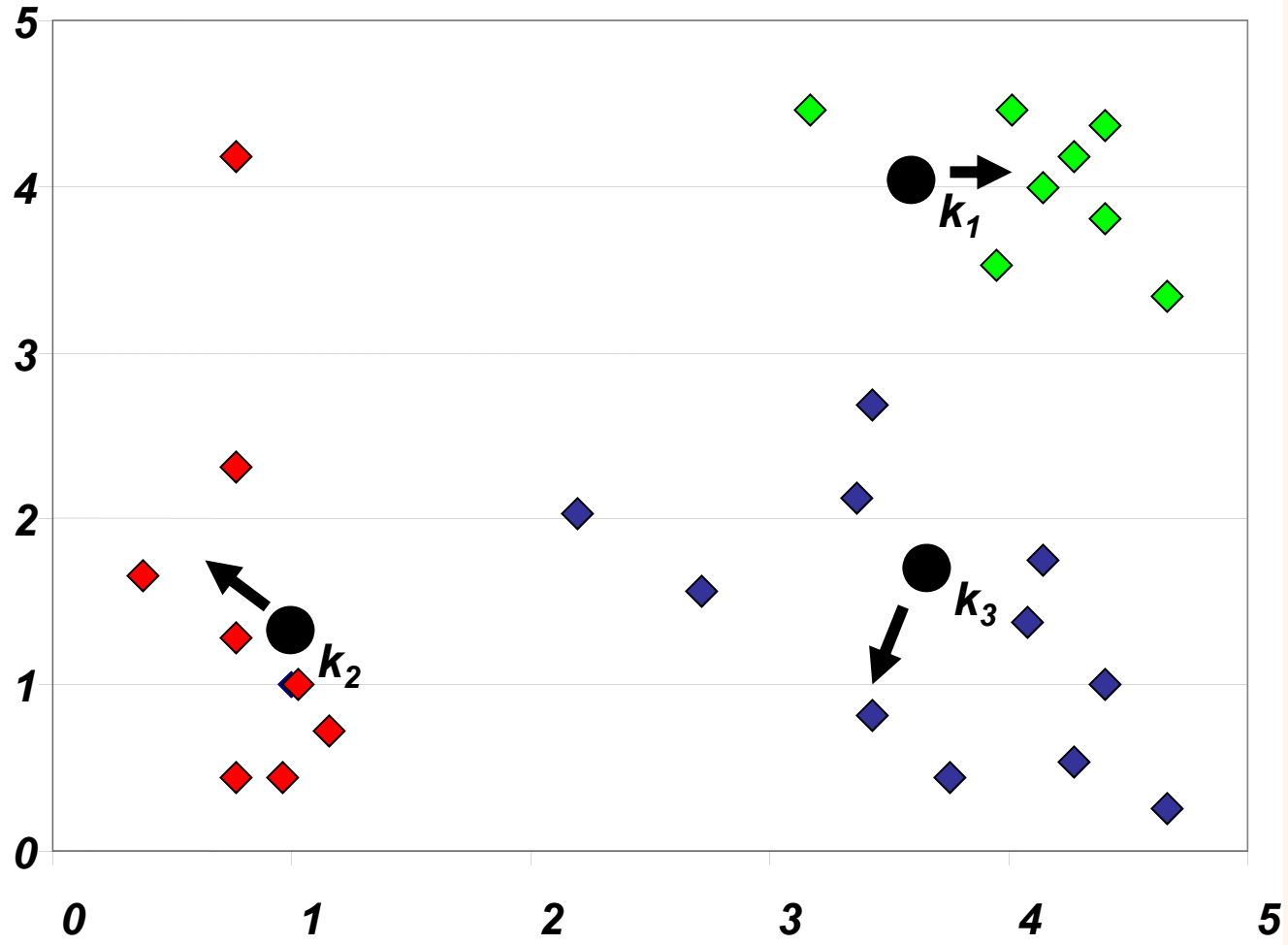
مثال (ادامه...)



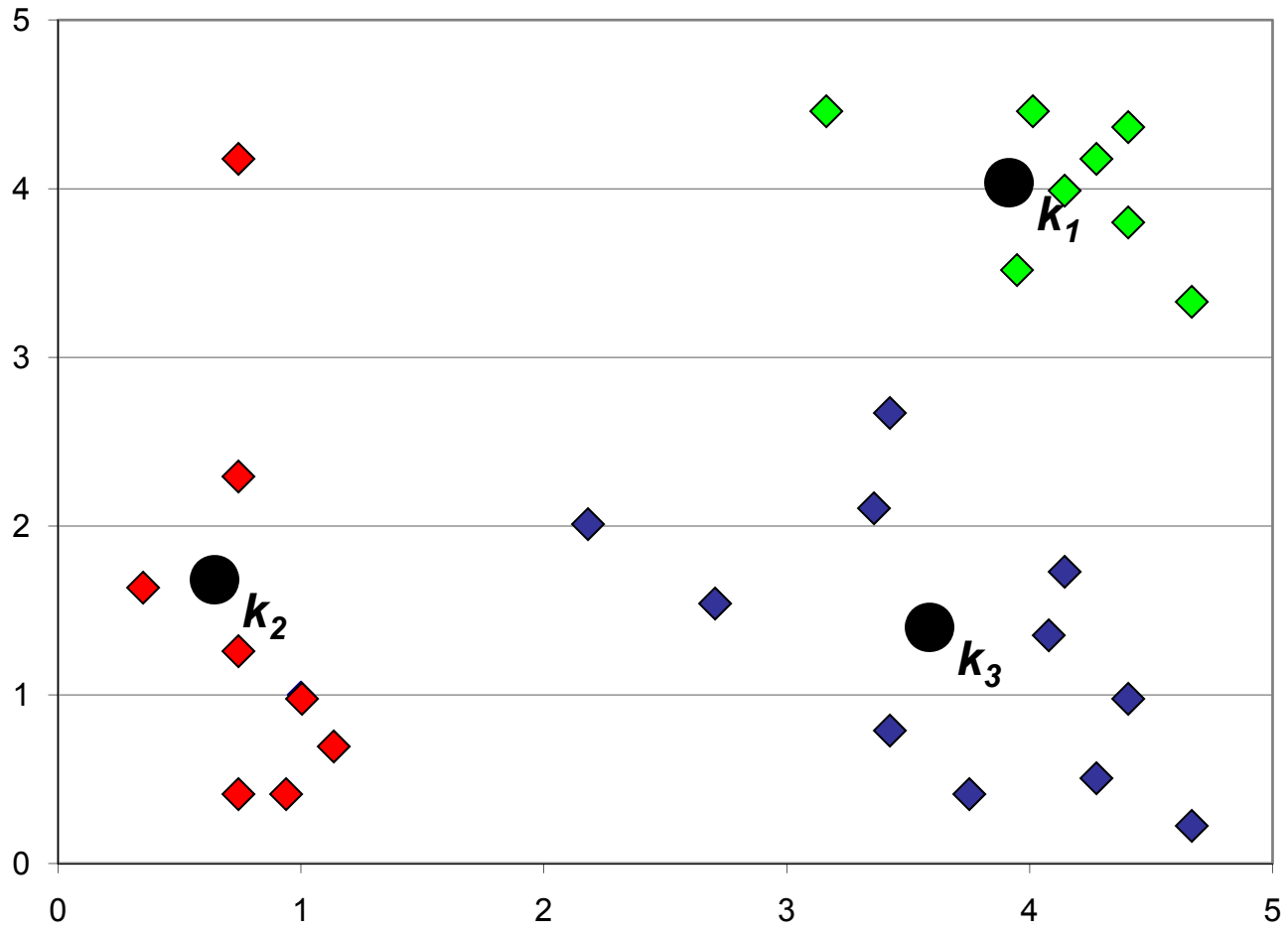
مثال (ادامه...)



مثال (ادامه...)



مثال (ادامه...)



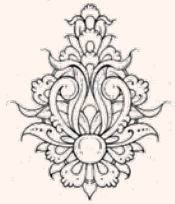
کاربردهای k-means

Bishop, PRML

• از کاربردهای دیگر، دسته‌بندی مشتریان، کشف داده‌های پرت، کشف نمونه‌های غیرعادی را می‌توان نام برد.

Leader cluster algorithm

- در این شیوه در صورتی که یک نمونه از بردارهای مرجع از یک حدآستانه دورتر باشد، یک بردار مرجع برابر با نمونه‌ی مذکور ایجاد می‌شود.
- در صورتی که ناحیه‌ی مربوط به یک بردار مرجع شامل تعداد زیادی نمونه باشند، در آن ناحیه نمونه‌ی جدیدی ایجاد می‌شود.
- به طریق مشابه، در صورتی که ناحیه مربوط به یک بردار مرجع، شامل تعداد کمی نمونه باشد، آن ناحیه حذف می‌شود.



Expectation-Maximization (EM)

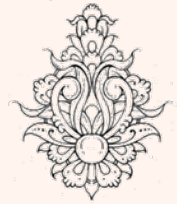
- در صورتی که بخواهیم با استفاده از MLE پارامترهای یک مدل ترکیبی را تخمین بزنیم، راه حل تحلیلی وجود ندارد:

$$\mathcal{L}(\Phi \mid \mathcal{X}) = \log \prod_t p\left(\mathbf{x}^t \mid \Phi\right)$$

$$= \sum_t \log \sum_{i=1}^{k} p\left(\mathbf{x}^t \mid G_i\right) P\left(G_i\right)$$

از این رو روش‌های تکرار شونده، مورد استفاده قرار می‌گیرد.

- این روش برای زمانی مناسب است که برخی پارامترها «پنهان» هستند.



Expectation-Maximization (EM)

- فرض می‌شود متغیرهای پنهان(z) وجود دارند که در صورتی که مشخص باشند، مساله‌ی بهینه‌سازی به سادگی حل می‌شود.
- هدف این الگوریتم یافتن پارامترهایی (Φ) است که احتمال رخداد متغیرهای قابل مشاهده ($L(\Phi \mid X)$) را بیشینه کند.

Incomplete likelihood

- در مواردی که یافتن پارامترها، امکان‌پذیر نیست، متغیرهای پنهان نیز مورد استفاده قرار می‌گیرند:

$L_c(\Phi \mid X,Z)$

Complete likelihood

دو گام این الگوریتم

E-step

- تخمین z از روی داده‌های آموزشی و پارامترهای فعلی
  - در واقع $P(Z|X, \Phi^l)$ را محاسبه می‌کنیم.

M-step

با در اختیار داشتن متغیرهای پنهان و داده‌های آموزشی مقدار پارامترها به گونه‌ای انتخاب می‌شوند که تابع درست‌نمایی بیشینه شود.

$$\text{E-step}: \mathcal{Q}\left(\Phi \mid \Phi^l\right) = E\left[\mathcal{L}_C\left(\Phi \mid \mathcal{X}, \mathcal{Z}\right) \mid \mathcal{X}, \Phi^l\right]$$

$$\text{M-step}: \Phi^{l+1} = \arg\max_{\Phi} \mathcal{Q}\left(\Phi \mid \Phi^l\right)$$

- ثابت شده است با این شیوه در هر تکرار درست‌نمایی افزایش می‌یابد.

$$\mathcal{L}\left(\Phi^{l+1} \mid \mathcal{X}\right) \geq \mathcal{L}\left(\Phi^{l} \mid \mathcal{X}\right)$$

EM in Gaussian Mixtures

- در مثال ترکیب توزیع‌ها، «متغیرهای پنهان» مشخص می‌کنند کدام نمونه به کدام خوشه تعلق دارد.
  - در صورتی که تعلق هر نمونه‌ی به خوشه‌ی متناظرش (برچسب) مشخص باشد(مانند حالت باناظر)، می‌توان به راحتی پارامترهای هر توزیع را به دست آورد.
- در گام E، بر اساس دانش فعلی، این برچسب‌ها تقریب زده می‌شوند.
- در گام M، بر اساس تخمین زده شده، اطلاعاتی که در مورد کلاس داریم، را به روز می‌کنیم.

این دو گام چه شباهتی با دو مرحله‌ی k-means دارند؟

EM in Gaussian Mixtures (cnt'd…)

- بردار $\mathbf{z}^t$ متغیر پنهان در این مسأله است.

$$\mathbf{z}^t = \left\{z_1^t, \quad , z_k^t\right\}$$

- $z^t_i = 1$ اگر $\mathbf{x}^t$ به خوشه‌ی i-ام تعلق داشته باشد.
  - این متغیر دارای توزیع چندجمله‌ای است.
  - در واقع شبیه به r^t_i در حالت باناظر است.

اگر zها مشخص باشند، مانند حالت «باناظر» است:

$$P(C_i) = \frac{\sum_t r_i^t}{N} \qquad \mathbf{m}_i = \frac{\sum_t r_i^t \mathbf{x}^t}{\sum_t r_i^t}$$

$$\mathbf{S_i} = \frac{\sum_t r_i^t \left(\mathbf{x}^t - \mathbf{m}_i^{l+1}\right)\left(\mathbf{x}^t - \mathbf{m}_i^{l+1}\right)^T}{\sum_t r_i^t}$$

EM in Gaussian Mixtures (cnt'd…)

- در گام نخست، مقادیر متغیر پنهان را با توجه به دانش فعلی تقریب می‌زنیم:

$$h_i^t \equiv P\left(G_i \mid \mathbf{x}^t, \Phi^l\right) = P\left(z_i^t = 1 \mid \mathbf{x}^t, \Phi^l\right) = \frac{p\left(\mathbf{x}^t \mid G_i, \Phi^l\right) P\left(G_i\right)}{\sum_j p\left(\mathbf{x}^t \mid G_j, \Phi^l\right) P\left(G_j\right)}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_c(\Phi \mid \mathcal{X}, \mathcal{Z}) &= \log \prod_t p(\boldsymbol{x}^t, \boldsymbol{z}^t \mid \Phi) \\
&= \sum_t \log p(\boldsymbol{x}^t, \boldsymbol{z}^t \mid \Phi) \\
&= \sum_t \log P(\boldsymbol{z}^t \mid \Phi) + \log p(\boldsymbol{x}^t \mid \boldsymbol{z}^t, \Phi) \\
&= \sum_t \sum_i z_i^t [\log \pi_i + \log p_i(\boldsymbol{x}^t \mid \Phi)]
\end{aligned}$$

$P\left(G_i\right) = \pi_i$

$p_i\left(\mathbf{x}^t\right) = p\left(\mathbf{x}^t \mid G_i\right)$

$$\mathcal{Q}\left(\Phi \mid \Phi^l\right) = E\left[\mathcal{L}_C\left(\Phi \mid \mathcal{X}, \mathcal{Z}\right) \mid \mathcal{X}, \Phi^l\right]$$

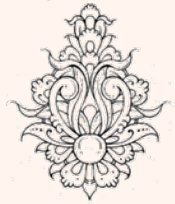
EM in Gaussian Mixtures (cnt'd…)

$$\text{M-step}: \Phi^{l+1} = \arg\max_{\Phi} \mathcal{Q}\left(\Phi \mid \Phi^{l}\right)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}(\Phi|\Phi^l) &\equiv E\left[\log P(X,Z)|\mathcal{X},\Phi^l\right] \\
&= E\left[\mathcal{L}_c(\Phi|\mathcal{X},\mathcal{Z})|\mathcal{X},\Phi^l)\right] \\
&= \sum_t \sum_i E[z_i^t|\mathcal{X},\Phi^l][\log \pi_i + \log p_i(\boldsymbol{x}^t|\Phi^l)]
\end{aligned}$$

$$E\left[z_i^t \mid \mathbf{x}^t, \Phi^l\right] = P\left(z_i^t = 1 \mid \mathbf{x}^t, \Phi^l\right) = h_i^t$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}(\Phi|\Phi^l) &= \sum_t \sum_i h_i^t [\log \pi_i + \log p_i(\boldsymbol{x}^t|\Phi^l)] \\
&= \sum_t \sum_i h_i^t \log \pi_i + \sum_t \sum_i h_i^t \log p_i(\boldsymbol{x}^t|\Phi^l)
\end{aligned}$$



EM in Gaussian Mixtures (cnt'd…)

$$\text{M-step}: \Phi^{l+1} = \arg\max_{\Phi} \mathcal{Q}\left(\Phi \mid \Phi^{l}\right)$$

- در گام E: در این مرحله بر اساس پارمترهای فعلی(تکرار l–ام)؛ پارامترها به گونه‌ای انتخاب می‌شوند که Q ماکزیمم شود:

$$\nabla_{\pi_i} \sum_t \sum_i h_i^t \log \pi_i - \lambda \left(\sum_i \pi_i - 1 \right) = 0$$

$$P(G_i) = \pi_i, \ \sum \pi_i = 1$$

$$P(G_i) = \frac{\sum_t h_i^t}{N}$$

$$P(C_i) = \frac{\sum_t r_i^t}{N} \qquad \mathbf{m}_i = \frac{\sum_t r_i^t \mathbf{x}^t}{\sum_t r_i^t}$$

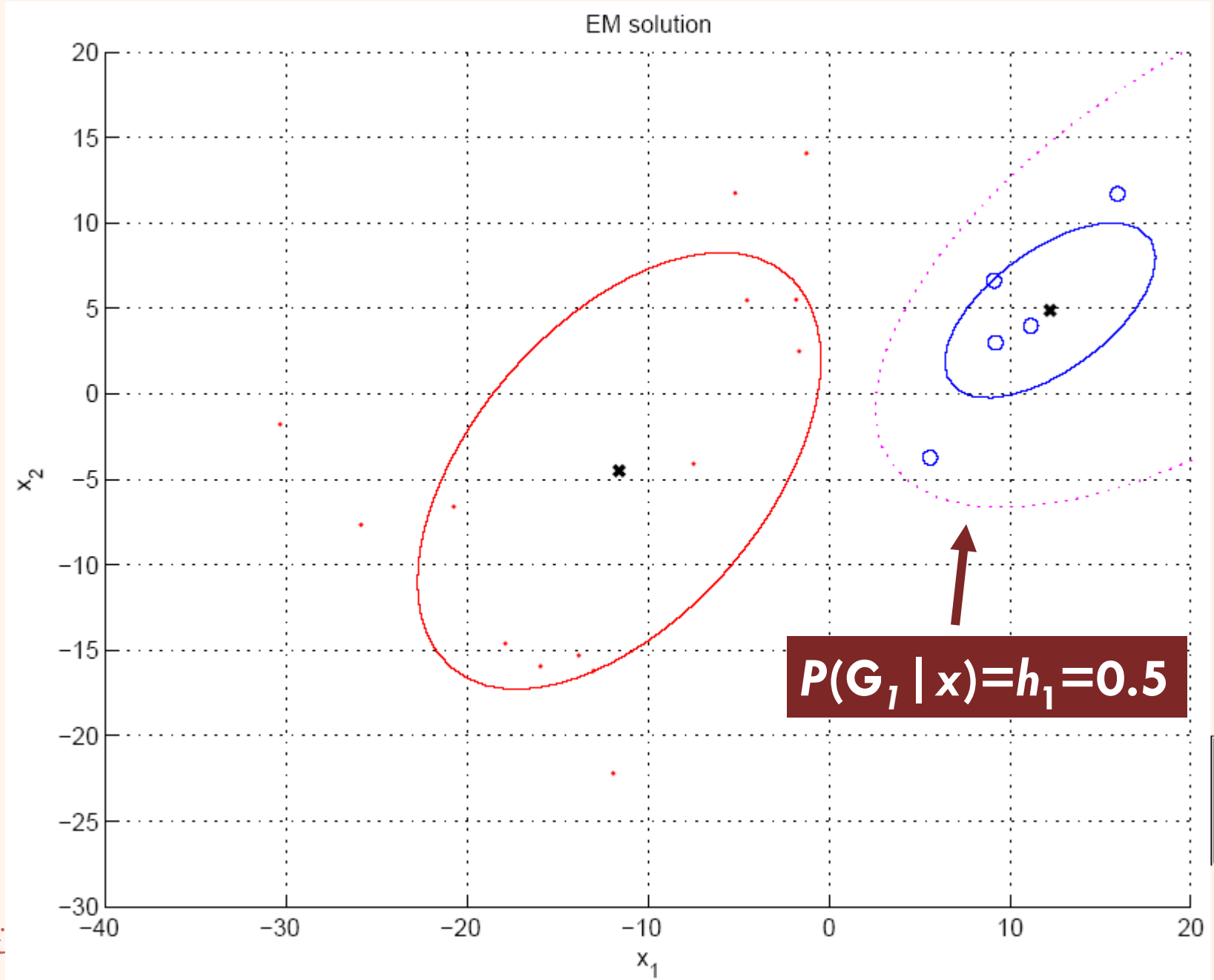
$$\mathbf{S}_i = \frac{\sum_t r_i^t \left(\mathbf{x}^t - \mathbf{m}_i^{l+1}\right)\left(\mathbf{x}^t - \mathbf{m}_i^{l+1}\right)^T}{\sum_t r_i^t}$$

$$\nabla_{\Phi} \sum_t \sum_i h_i^t \log p_i(\boldsymbol{x}^t \mid \Phi) = 0$$

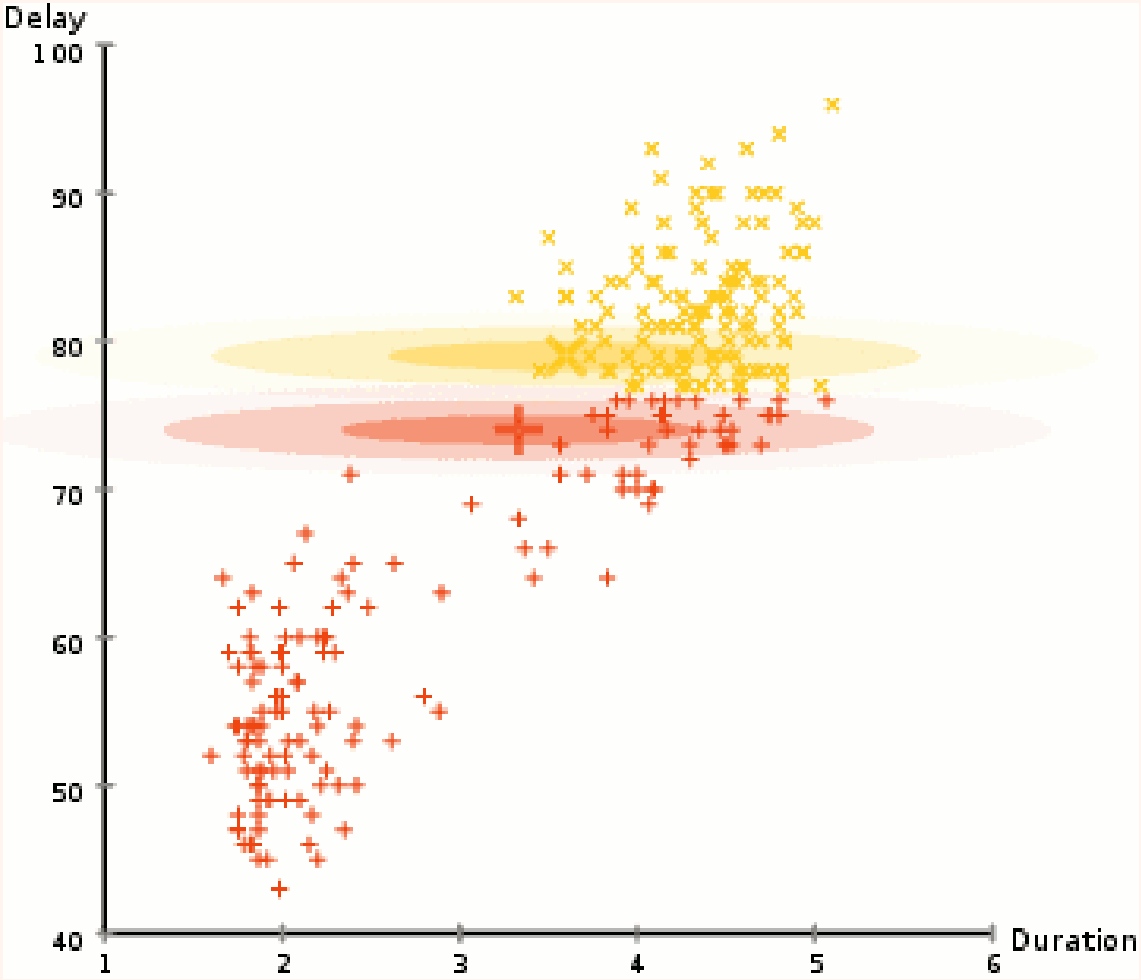
Soft label

$$\mathbf{m}_i^{l+1} = \frac{\sum_t h_i^t \mathbf{x}^t}{\sum_t h_i^t} \qquad \mathbf{S}_i^{l+1} = \frac{\sum_t h_i^t \left(\mathbf{x}^t - \mathbf{m}_i^{l+1}\right)\left(\mathbf{x}^t - \mathbf{m}_i^{l+1}\right)^T}{\sum_t h_i^t}$$

مثال


EM solution
20
15
10
5
0
−5
−10
−15
−20
−25
−30
−40
−30
−20
−10
0
10
20
x2
x1
P(G1 | x)=h1=0.5

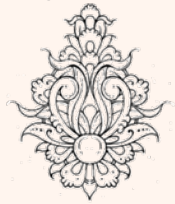
مثال



جمع‌بندی

- پارامترهای اولیه مقداردهی می‌شود: $initialize \quad \Phi^0$
- تا زمانی رسیدن به همگرایی تکرار کن:
  - گام E: $P\left(Z \mid X, \Phi^l\right)$ را تقریب بزن
  - گام M: $\Phi^{l+1} = \arg\max_{\Phi} \mathcal{Q}\left(\Phi \mid \Phi^l\right)$

- برای مقداردهی اولیه، از K-means استفاده می‌شود، بعد از چند تکرار، تخمین میانگین محاسبه شده و پس از مشخص شدن اعضای هر خوشه، ماتریس کواریانس تخمین زده شده و $P(G_i)$ تخمین زده شده و الگوریتم EM آغاز می‌شود.



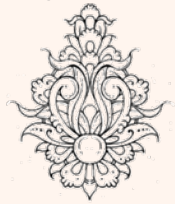
Expectation-Maximization (EM)

- در صورتی که داده‌ها با توزیع گاوسی در نظر گرفته شوند:

$$h_i^t \equiv P\left(G_i \mid \mathbf{x}^t, \Phi^l\right)$$

$$h_i^t = \frac{\pi_i |\mathbf{S}_i|^{-1/2} \exp[-(1/2)(\boldsymbol{x}^t - \boldsymbol{m}_i)^T \mathbf{S}_i^{-1}(\boldsymbol{x}^t - \boldsymbol{m}_i)]}{\sum_j \pi_j |\mathbf{S}_j|^{-1/2} \exp[-(1/2)(\boldsymbol{x}^t - \boldsymbol{m}_j)^T \mathbf{S}_j^{-1}(\boldsymbol{x}^t - \boldsymbol{m}_j)]}$$

- مانند روش‌های پارامتری در این جا نیز در حالتی که داده‌های آموزشی کم‌تعداد است یا ابعاد ورودی زیاد است، می‌توان از مدل‌های ساده‌تری استفاده کرد تا مشکل overfitting رخ ندهد.



انتخاب مدل

$$\nabla_{\Phi} \sum_t \sum_i h_i^t \log p_i(\boldsymbol{x}^t|\Phi) = 0$$

$$\mathcal{Q}(\Phi|\Phi^l) = \sum_t \sum_i h_i^t \log \pi_i + \sum_t \sum_i h_i^t \log p_i(\boldsymbol{x}^t|\Phi^l)$$

- در صورتی که برای همه‌ی خوشه‌ها کواریانس یکسانی در نظر بگیریم، رابطه‌ی فوق ساده‌تر خواهد شد:

$$\min_{\boldsymbol{m}_i,\mathbf{S}} \sum_t \sum_i h_i^t (\boldsymbol{x}^t - \boldsymbol{m}_i)^T \mathbf{S}^{-1} (\boldsymbol{x}^t - \boldsymbol{m}_i)$$

- در صورتی که توزیع‌های هر خوشه، ناهمبسته بوده و واریانس یکسانی داشته باشند:

$$\min_{\boldsymbol{m}_i,s} \sum_t \sum_i h_i^t \frac{\|\boldsymbol{x}^t - \boldsymbol{m}_i\|^2}{s^2}$$

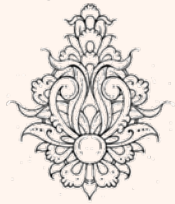
- بسیار شبیه به k-means است ، با این تفاوت که برچسب‌ها در این جا بین صفر و یک هستند.

$$h_i^t = \frac{\exp\left[-(1/2s^2)\|\boldsymbol{x}^t - \boldsymbol{m}_i\|^2\right]}{\sum_j \exp\left[-(1/2s^2)\|\boldsymbol{x}^t - \boldsymbol{m}_j\|^2\right]}$$

انتخاب مدل (ادامه...)

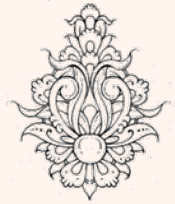
- در نظر گرفتن ماتریس کواریانس یکسان، موجب نادیده گرفتن شکل واقعی خوشه‌ها می‌شود.
  - در نظر گرفتن ماتریس کواریانس قطری با توجه به نادیده گرفتن همبستگی‌ها، به طریق اولی ساختار واقعی را نادیده می‌گیرد.
- پیش از خوشه‌بندی می‌توان از روش‌های کاهش ابعاد(PCA/FA) بهره برد.

$$p(\mathbf{x}_t \mid G_i) = \mathcal{N}\left(\mathbf{m}_i, \mathbf{V}_i\mathbf{V}_i^T + \boldsymbol{\Psi}_i\right)$$



خوشه‌بندی برای استخراج دانش

- مانند کاهش ابعاد برای خوشه‌بندی نیز می‌توان دو هدف متفاوت در نظر گرفت:
- «استخراج دانش»: برای فهم بهتر ساختار داده‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد.
  - کاهش ابعاد همبستگی بین خصیصه‌ها را می‌یابد.
  - خوشه‌بندی شباهت بین نمونه‌های داده را مشخص می‌کند.
- پس از خوشه‌بندی استخراج دانش توسط متخصص قابل انجام است، همچنین پارامترهای خوشه‌بندی نظیر میانگین خوشه‌ها و تعداد آن هم قابل استفاده می‌باشد.
  - از کابردهای می‌توان به CRM اشاره کرد.



خوشه‌بندی به عنوان پیش‌پردازش

- همان‌گونه که در کاهش ابعاد، فضای جدید برای فرآیندهای بعدی (دسته‌بندی، رگرسیون) مورد استفاده قرار می‌گیرد، خوشه‌بندی نیز داده‌ها را به یک فضای k-بعدی نگاشت می‌کند. ابعاد فضای جدید شامل برچسب‌های به دست آمده است (h یا b)، بدین‌ترتیب ممکن با افزایش ابعاد هم مواجه شویم.
- در کاهش ابعاد همه‌ی داده در فرآیند مشارکت دارند، در حالی که در خوشه‌بندی مشارکت به صورت محلی صورت می‌پذیرد.
- در صورت استفاده از چنین پیش‌پردازش‌هایی می‌توان از یک مجموعه داده‌های بدون‌برچسب در فرآیند آموزش بهره برد.

$$p(\mathbf{x}\mid C_i)=\sum_{j=1}^{k_i} p(\mathbf{x}\mid G_{ij})P(G_{ij})$$

Mixture of Mixtures

$$p(\mathbf{x})=\sum_{i=1}^{K} p(\mathbf{x}\mid C_i)P(C_i)$$

خوشه‌بندی سلسله‌مراتبی

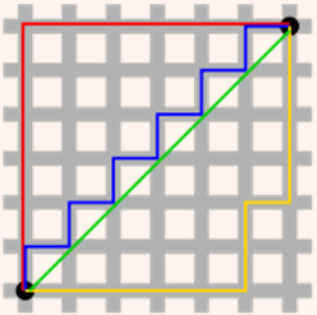
- در k-means هدف مینیمم کردن خطای بازسازی است.
- در خوشه‌بندی سلسله مراتبی، تنها شباهت بین نمونه‌ها در نظر گرفته می‌شود.
- افزون بر فاصله‌ی اقلیدسی معیارهای دیگری نیز در نظر گرفته می‌شوند:

Minkowski

$$d_m\left(\mathbf{x}^r,\mathbf{x}^s\right)=\left[\sum_{j=1}^{d}\left(x_j^r-x_j^s\right)^p\right]^{1/p}$$

City-block distance

$$d_{cb}\left(\mathbf{x}^r,\mathbf{x}^s\right)=\sum_{j=1}^{d}\left|x_j^r-x_j^s\right|$$



Agglomerative Clustering

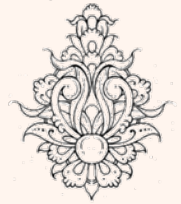
- با N خوشه کار آغاز می‌شود؛ هر خوشه شامل یک نمونه می‌باشد.
- خوشه‌های نزدیک به هم در هر تکرار با هم ادغام می‌شوند.
  - برای انتخاب گروه‌های نزدیک، دو معیار مورد استفاده قرار می‌گیرد:

$$d(G_i, G_j) = \min_{\mathbf{x}^r \in G_i, \mathbf{x}^s \in G_j} d(\mathbf{x}^r, \mathbf{x}^s)$$ **Single-link**

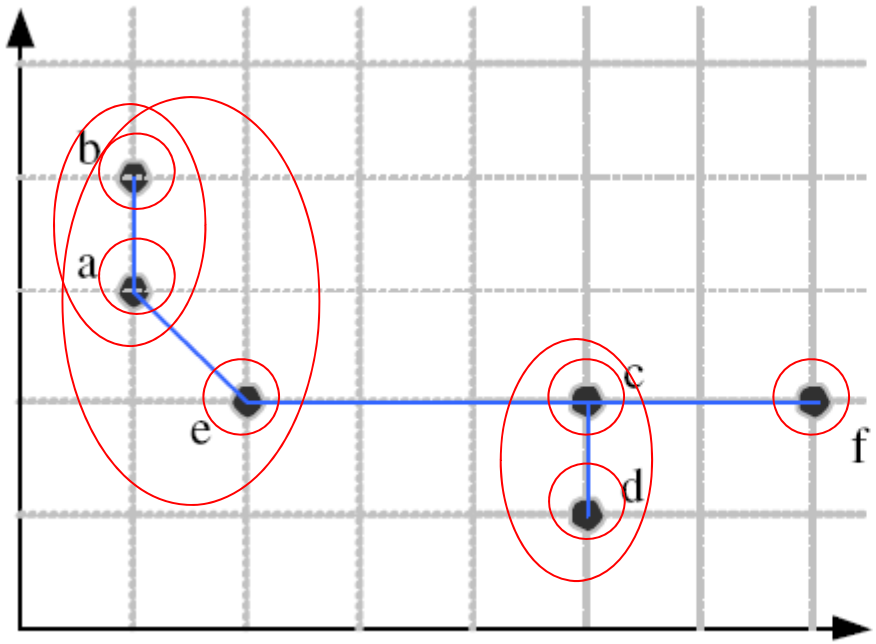
$$d(G_i, G_j) = \max_{\mathbf{x}^r \in G_i, \mathbf{x}^s \in G_j} d(\mathbf{x}^r, \mathbf{x}^s)$$ **Complete-link**

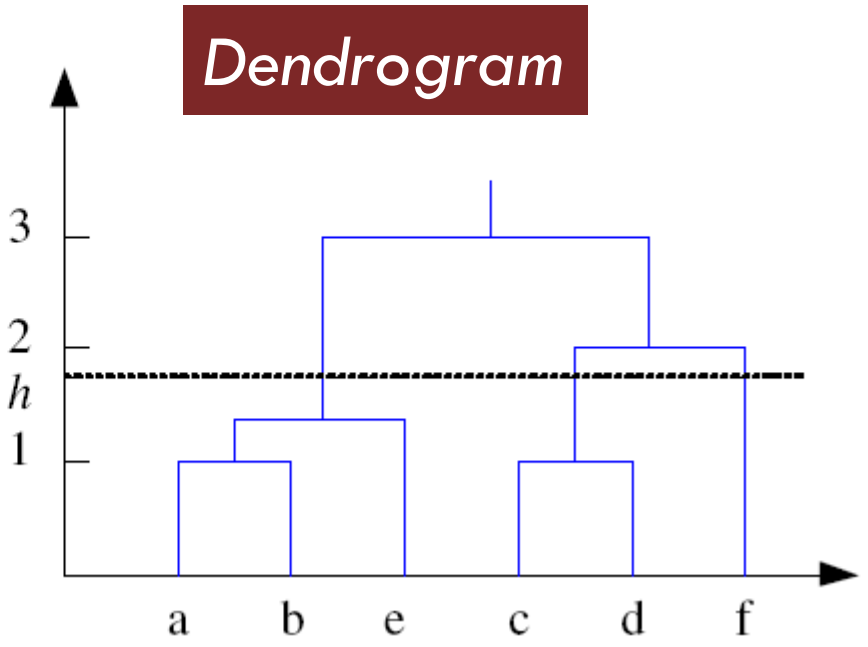
$$d(G_i, G_j) = \text{ave}_{\mathbf{x}^r \in G_i, \mathbf{x}^s \in G_j} d(\mathbf{x}^r, \mathbf{x}^s)$$ **Average-link, centroid**

- این روند تا زمانی که تنها یک خوشه وجود داشته باشد، ادامه می‌یابد.



Agglomerative Clustering

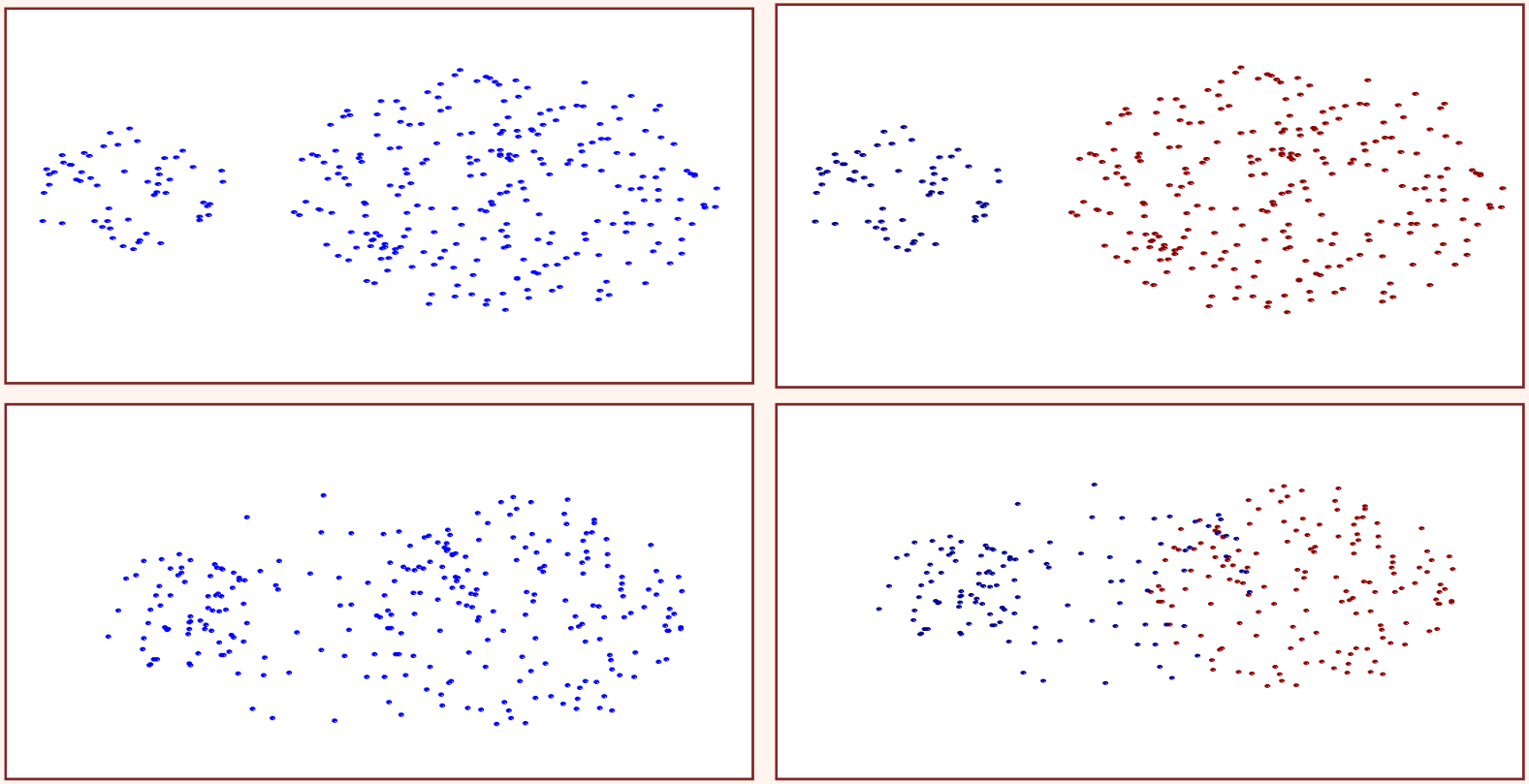




Divisive Clustering

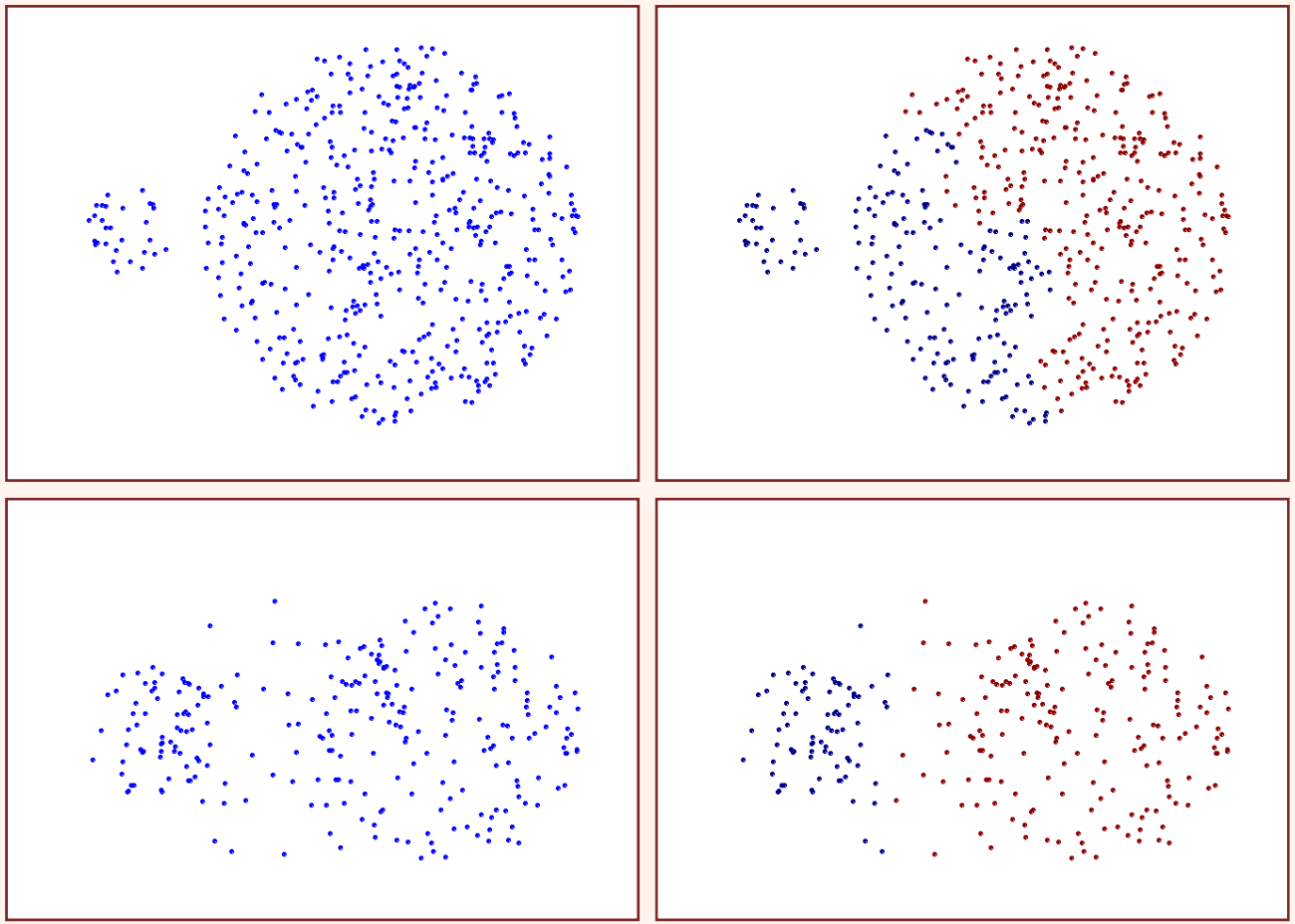
در این شیوه به صورت عکس عمل می‌شود؛ از یک خوشه کار آغاز شده و خوشه‌ها در هر تکرار به خوشه‌های کوچک‌تر تقسیم می‌شوند تا زمانی که هر خوشه شامل یک نمونه باشد.

مقایسه‌ی معیارهای فاصله



این معیار به نویز و داده‌های پرت حساس است و خوشه‌های «کشیده» ایجاد می‌کند.

مقایسه‌ی معیارهای فاصله



خوشه‌های بزرگ را می‌شکند، خوشه‌ها با قطر یکسان تولید می‌کند.
خوشه‌های کوچک را با خوشه‌های بزرگ ادغام می‌کند.

انتخاب تعداد خوشه‌ها

- در برخی کاربردها، با توجه به نیاز k مشخص می‌شود، مانند color quantization
- استفاده از PCA و رسم داده‌ها در دو بعد می‌تواند ساختار داده‌ها را تا حدی مشخص کرده و انتخاب مناسب k کمک کند.
- استفاده از روش‌های افزایشی (leader-cluster)
- در برخی کاربردها بعد از انجام خوشه‌بندی، به صورت دستی می‌توان مناسب بودن خوشه‌ها را بررسی کرد؛ به عنوان مثال در برخی کاربردهای داده‌کاوی
- بسته به نوع الگوریتم خوشه‌بندی مورد استفاده می‌توان نمودار خطای بازسازی بر حسب k را رسم کرده و ر این اساس مقدار مناسب تعداد خوشه‌ها را یافت.