BÀI 6: SỰ PHÂN TÍCH NHÓM

I. Mục tiêu:

Sau khi thực hành xong, sinh viên nắm được:

- Thuật toán K-means

- Thuật toán K-medians

II. Tóm tắt lý thuyết:

Xét tập dữ liệu D chứa n điểm dữ liệu $\overline{X_1}, \overline{X_2}, \ldots, \overline{X_n}$ trong không gian d chiều. Mục tiêu xác định k biểu diễn $\overline{Y_1}, \ldots, \overline{Y_k}$ cực tiểu hóa hàm mục tiêu O theo sau:

$$O = \Sigma_{i=1}^{n} min_j Dist(\overline{X_i}, \overline{X_j})$$

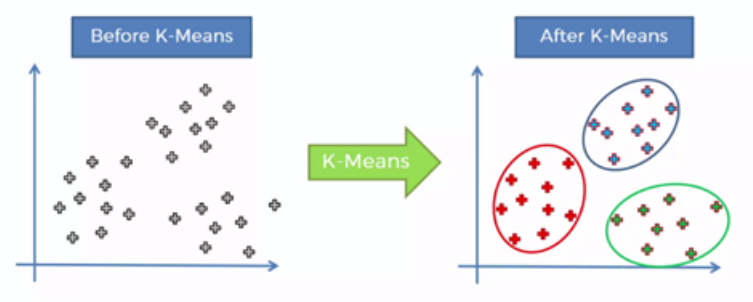
1. Thuật toán K-means

Trong thuật toán k-mean, tổng bình phương các khoảng cách Euclidean của các điểm dữ liệu tới các biểu diễn gần chúng nhất được sử dụng để xác định số lượng hàm mục tiêu của việc phân cụm. Do đó, ta có

$$Dist(\overline{X_i}, \overline{X_j}) = \|\overline{X_i} - \overline{X_j}\|_2^2$$

Algorithm 1 K-Means Clustering (Lloyd's Algorithm) *Note: written for clarity, not efficiency.*

Input: Data vectors $\{\boldsymbol{x}_n\}_{n=1}^N$, number of clusters K
for $n \leftarrow 1 \ldots N$ **do** ▷ Initialize all of the responsibilities.
  $\boldsymbol{r}_n \leftarrow [0, 0, \cdots, 0]$ ▷ Zero out the responsibilities.
  $k' \leftarrow$ RandomInteger$(1, K)$ ▷ Make one of them randomly one to initialize.
  $r_{nk'} = 1$
end for
repeat
  for $k \leftarrow 1 \ldots K$ **do** ▷ Loop over the clusters.
    $N_k \leftarrow \sum_{n=1}^N r_{nk}$ ▷ Compute the number assigned to cluster k.
    $\boldsymbol{\mu}_k \leftarrow \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^N r_{nk} \boldsymbol{x}_n$ ▷ Compute the mean of the kth cluster.
  end for
  for $n \leftarrow 1 \ldots N$ **do** ▷ Loop over the data.
    $\boldsymbol{r}_n \leftarrow [0, 0, \cdots, 0]$ ▷ Zero out the responsibilities.
    $k' \leftarrow \arg\min_k ||\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k||^2$ ▷ Find the closest mean.
    $r_{nk'} = 1$
  end for
until none of the $\boldsymbol{r}_n$ change
Return assignments $\{\boldsymbol{r}_n\}_{n=1}^N$ for each datum, and cluster means $\{\boldsymbol{\mu}_k\}_{k=1}^K$.



Thuật toán K-Means được tóm tắt như sau:

1. Chọn K điểm bất kỳ làm các tâm ban đầu.
2. Phân mỗi điểm dữ liệu vào cluster có center gần nó nhất.
3. Nếu việc gán dữ liệu vào từng cluster ở bước 2 không thay đổi so với vòng lặp trước nó thì ta dừng thuật toán.
4. Cập nhật tâm cho từng cluster bằng cách lấy trung bình cộng của tất các các điểm dữ liệu đã được gán vào cluster đó sau bước 2.
5. Quay lại bước 2.

Ví dụ: sử dụng K-means để chia dữ liệu theo sau thành 2 cụm

x_1	1	2	2	3	4	5
x_2	1	1	3	2	3	5

Bước 1: Chọn ngẫu nhiên 2 tâm cụm

$$v_1 = (2, 1) \quad v_2 = (2, 3)$$

Bước 2: Tìm khoảng cách ($Dist(\overline{X_i}, \overline{X_j}) = \|\overline{X_i} - \overline{X_j}\|_2^2$) giữa các tâm cụm và mỗi điểm dữ liệu

Điểm dữ liệu	Khoảng cách từ v_1= (2,1)	Khoảng cách từ v_2= (2,3)	Gán tâm cụm
a_1 =(1,1)	1	5	v_1
a_2 = (2,1)	0	4	v_1
a_3=(2,3)	1	0	v_2
a_4=(3,2)	2	2	v_1
a_5=(4,3)	8	4	v_2
a_6=(5,5)	25	13	v_2

Bước 3:

Cluster 1 của v_1: $\{a_1, a_2, a_4\}$

Cluster 2 của v_2: $\{a_3, a_5, a_6\}$

Bước 4: Tính lại các tâm cụm

$$v_1 = \frac{1}{3}[a_1 + a_2 + a_4] = \frac{1}{3}[(1,1) + (2,1) + (3,2)] = \frac{1}{3}(6,4) = (2, 1.33)$$

$$v_2 = \frac{1}{3}[a_3 + a_5 + a_6] = \frac{1}{3}[(2,3) + (4,3) + (5,5)] = \frac{1}{3}(11,11) = (3.67, 3.67)$$

Bước 5: Lặp lại bước 2 cho tới khi tâm cụm giống nhau hoặc số phần tử cụm giống như trong bước lặp trước

Điểm dữ liệu	Khoảng cách từ v_1=(2,1.33)	Khoảng cách từ v_2=(3.67,3.67)	Gán tâm cụm
a_1 =(1,1)	1.11	14.26	v_1
a_2 = (2,1)	0.11	9.92	v_1
a_3=(2,3)	2.79	3.24	v_1
a_4=(3,2)	1.45	3.24	v_1
a_5=(4,3)	6.79	0.56	v_2
a_6=(5,5)	22.47	3.54	v_2

Cluster 1 của v_1: $\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$

Cluster 2 của v_2: $\{a_5, a_6\}$

Tính lại các tâm cụm

$$v_1 = \frac{1}{4}[a_1 + a_2 + a_3 + a_4] = \frac{1}{4}[(1,1) + (2,1) + (2,3) + (3,2)] = \frac{1}{4}(8,7) = (2, 1.75)$$

$$v_2 = \frac{1}{2}[a_5 + a_6] = \frac{1}{2}[(4,3) + (5,5)] = \frac{1}{2}(9,8) = (4.5, 4)$$

$\Rightarrow$ Các phần tử của cụm và tâm cụm không giống như trong bước lặp trước đó.

Điểm dữ liệu	Khoảng cách từ v_1=(2,1.75)	Khoảng cách từ v_2=(4.5,4)	Gán tâm cụm
a_1 =(1,1)	1.56	21.25	v_1
a_2 = (2,1)	0.56	15.25	v_1
a_3=(2,3)	1.56	7.25	v_1
a_4=(3,2)	1.06	6.25	v_1
a_5=(4,3)	5.56	1.25	v_2
a_6=(5,5)	22.47	1.25	v_2

Cluster 1 của v_1: $\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$

Cluster 2 của v_2: $\{a_5, a_6\}$

$\Rightarrow$ Các phần tử của cụm giống như trong bước lặp trước đó.

Vậy:

Cluster 1: $\{(1,1),(2,1),(2,3),(3,2)\}$

Cluster 2: $\{(4,3),(5,5)\}$

2. Thuật toán K-medians

Trong thuật toán K-medians, khoảng cách Manhattan được sử dụng như hàm mục tiêu. Do đó, hàm khoảng cách $Dist((\overline{X_i}, \overline{X_j})$ được xác định như sau:

$$Dist((\overline{X_i}, \overline{X_j}) = \|\overline{X_i} - \overline{X_j}\|_1$$

Trong trường hợp này, biểu diễn tối ưu là median của các điểm dữ liệu dọc theo mỗi chiều trong cụm C_j. Đó là bởi vì điểm dữ liệu có tổng nhỏ nhất của các khoảng cách L_1 tới một tập các điểm được phân bố trong 1 đường là median của tập hợp đó.
Trong bước cập nhật lại tâm, median được tính lại bằng việc sử dụng median trong mỗi chiều. Median được xác định như sau:

- Sắp xếp dữ liệu theo thứ tự tăng dần hay giảm dần.
- Nếu n là số lẻ thì $median =$ số hạng thứ $(\frac{n+1}{2})$. Ví dụ: xét dãy 21, 38, 46, 49, 57, 61, 64 $\Rightarrow n = 7$ là số lẻ $\Rightarrow median = (\frac{n+1}{2}) = (\frac{7+1}{2})$ = số hạng thứ 4 =49
- Nếu n là số chẵn thì $median = \frac{\text{số hạng thứ } (\frac{n}{2}) + \text{số hạng thứ } (\frac{n}{2}+1))}{2}$. Ví dụ: xét dãy 2, 4, 4, 5, 7, 8 $\Rightarrow n = 6$ là số chẵn $\Rightarrow median = \frac{4+5}{2} = 4.5$

Ví dụ: sử dụng K-medians để chia dữ liệu theo sau thành 2 cụm

x_1	1	2	2	3	4	5
x_2	1	1	3	2	3	5

Bước 1: Chọn ngẫu nhiên 2 tâm cụm

$$med_1 = (2,1) \quad med_2 = (2,3)$$

Bước 2: Tìm khoảng cách ($Dist(\overline{X_i}, \overline{X_j}) = \|\overline{X_i} - \overline{X_j}\|_1$) giữa các tâm cụm và mỗi điểm dữ liệu

Điểm dữ liệu	Khoảng cách từ med_1= (2,1)	Khoảng cách từ med_2= (2,3)	Gán tâm cụm
a_1 =(1,1)	1	3	med_1
a_2 = (2,1)	0	2	med_1
a_3=(2,3)	1	0	med_2
a_4=(3,2)	2	2	med_1
a_5=(4,3)	4	2	med_2
a_6=(5,5)	7	5	med_2

Bước 3:

Cluster 1 của med_1: $\{a_1, a_2, a_4\}$

Cluster 2 của med_2: $\{a_3, a_5, a_6\}$

Bước 4: Tính lại các tâm cụm sử dụng trung vị (median)

Tìm med_1 của $\{a_1, a_2, a_4\}$

- Xét dãy 1, 2, 3 $\Rightarrow median = (3+1)/2$= số hạng thứ 2 = 2.

- Xét dãy 1, 1, 2 $\Rightarrow median = (3+1)/2$= số hạng thứ 2 = 1.

$\Rightarrow med_1 = (2,1)$

Tìm med_2 của $\{a_3, a_5, a_6\}$

- Xét dãy 2, 4, 5 $\Rightarrow median = (3+1)/2$= số hạng thứ 2 = 4.

- Xét dãy 3, 3, 5 $\Rightarrow median = (3+1)/2$= số hạng thứ 2 = 3.

$\Rightarrow med_2 = (4,3)$

Bước 5: Lặp lại bước 2 cho tới khi tâm cụm giống nhau hoặc số phần tử cụm giống như trong bước lặp trước

Điểm dữ liệu	Khoảng cách từ med_1 =(2,1)	Khoảng cách từ med_2 =(4, 3)	Gán tâm cụm
a_1 =(1,1)	1	5	med_1
a_2 = (2,1)	0	4	med_1
a_3=(2,3)	1	2	med_1
a_4=(3,2)	2	2	med_1
a_5=(4,3)	4	0	med_2
a_6=(5,5)	7	3	med_2

Cluster 1 của med_1: $\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$

Cluster 2 của med_2: $\{a_5, a_6\}$

Tính lại các tâm cụm sử dụng trung vị (median)

Tìm med_1 của $\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$

- Xét dãy 1, 2, 2, 3 $\Rightarrow median = \dfrac{2+2}{2} = 2.$

- Xét dãy 1, 1, 3, 2 $\Rightarrow$ sắp xếp lại dãy 1, 1, 2, 3 $\Rightarrow median = \dfrac{1+2}{2} = 1.5$

$\Rightarrow med_1 = (2, 1.5)$

Tìm med_2 của $\{a_5, a_6\}$

- Xét dãy 4, 5 $\Rightarrow median = \dfrac{4+5}{2} = 4.5.$

- Xét dãy 3, 5 $\Rightarrow median = \dfrac{3+5}{2} = 4.$

$\Rightarrow med_2 = (4.5, 4)$

$\Rightarrow$ Các phần tử của cụm và tâm cụm không giống như trong bước lặp trước đó.

Điểm dữ liệu	Khoảng cách từ med_1 =(2,1.5)	Khoảng cách từ med_2 =(4.5, 4)	Gán tâm cụm
a_1 =(1,1)	1.5	6.5	med_1
a_2 = (2,1)	0.5	5.5	med_1
a_3=(2,3)	1.5	3.5	med_1
a_4=(3,2)	1.5	3.5	med_1
a_5=(4,3)	3.5	1.5	med_2
a_6=(5,5)	6.5	1.5	med_2

Cluster 1 của med_1: $\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$

Cluster 2 của med_2: $\{a_5, a_6\}$

$\Rightarrow$ Các phần tử của cụm giống như trong bước lặp trước đó.

Vậy:

Cluster 1: $\{(1,1), (2,1), (2,3), (3,2)\}$

Cluster 2: $\{(4,3), (5,5)\}$

III. Nội dung thực hành:

1. Thuật toán K-means

- Tạo file "data.csv"

	A	B	C	D
3	1	35.19	12.189	1
4	2	26.288	41.718	2
5	3	0.376	15.506	0
6	4	26.116	3.963	1
7	5	25.893	31.515	2
8	6	23.606	15.402	1
9	7	28.026	15.47	1
10	8	26.36	34.488	2
11	9	23.013	36.213	2
12	10	27.819	41.867	2
13	11	39.634	42.23	2
14	12	35.477	35.104	2
15	13	25.768	5.967	1
16	14	-0.684	21.105	0
17	15	3.387	17.81	0
18	16	32.986	3.412	1
19	17	34.258	9.931	1
20	18	6.313	29.426	0
21	19	33.899	37.535	2
22	20	4.718	12.125	0
23	21	21.054	5.067	1
24	22	3.267	21.911	0
25	23	24.537	38.822	2
26	24	4.55	16.179	0
27	25	25.712	7.409	1
28	26	3.884	28.616	0
29	27	29.081	34.539	2
30	28	14.943	23.263	0
31	29	32.169	45.421	2
32	30	32.572	16.944	1
33	31	33.673	13.163	1
34	32	29.189	13.226	1
35	33	25.994	34.444	2
36	34	16.513	23.396	0
37	35	23.492	11.142	1
38	36	26.878	36.609	2
39	37	31.604	36.911	2
40	38	34.078	33.827	2
41	39	11.286	16.082	0
42	40	30.15	9.642	1
43	41	36.569	45.827	2
44	42	3.983	11.839	0
45	43	12.891	23.832	0
46	44	21.314	13.264	1
47	45	29.101	44.781	2
48	46	30.671	9.294	1
49	47	35.139	9.803	1
50	48	35.563	42.759	2
51	49	35.028	15.779	1
52	50	9.776	16.988	0
53	51	24.268	5.693	1
54	52	-0.36	15.319	0
55	53	33.062	47.693	2
56	54	21.034	37.463	2
57	55	31.806	4.484	1
58	56	22.493	39.466	2
59	57	29.056	46.004	2
60	58	29.822	13.83	1
61	59	35.439	14.439	1

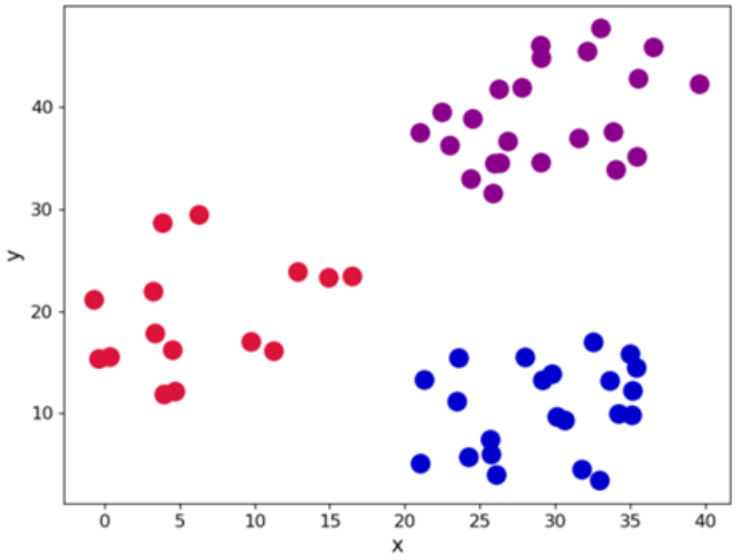
- Đọc dữ liệu từ file

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.colors import ListedColormap
#%matplotlib inline
# reading the dataset
blobs = pd.read_csv('D:\\Huynh\\DataMining_Lab\\data\\tuan6\\data.csv')
colnames = list(blobs.columns[1:-1])
print(blobs.head())
```

	ID	x	y	cluster
0	0	24.412	32.932	2
1	1	35.190	12.189	1
2	2	26.288	41.718	2
3	3	0.376	15.506	0
4	4	26.116	3.963	1

- Chúng ta sẽ sử dụng cột phân cụm để hiển thị các nhóm khác nhau được biểu diễn trong tập dữ liệu

```
customcmap = ListedColormap(["crimson", "mediumblue", "darkmagenta"])

fig, ax = plt.subplots(figsize=(8, 6))
plt.scatter(x=blobs['x'], y=blobs['y'], s=150,
            c=blobs['cluster'].astype('category'),
            cmap = customcmap)
ax.set_xlabel(r'x', fontsize=14)
ax.set_ylabel(r'y', fontsize=14)
plt.xticks(fontsize=12)
plt.yticks(fontsize=12)
plt.show()
```



- Bước 1 và 2: Xác định k và khởi tạo các tâm

```
def initiate_centroids(k, dset):
        '''
        Select k data points as centroids
        k: number of centroids
        dset: pandas dataframe
        '''
        centroids = dset.sample(k)
        return centroids

np.random.seed(42)
k=3
df = blobs[['x','y']]
centroids = initiate_centroids(k, df)
print(centroids)
```

	x	y
0	24.412	32.932
5	25.893	31.515
36	26.878	36.609

- Bước 3: tính khoảng cách

```
def rsserr(a,b):
        '''
        Calculate the root of sum of squared errors.
        a and b are numpy arrays
        '''
        return np.sum(np.square(a-b))
```

```
for i, centroid in enumerate(range(centroids.shape[0])):
    err = rsserr(centroids.iloc[centroid,:], df.iloc[36,:])
    print('Error for centroid {0}: {1:.2f}'.format(i, err))
```

```
Error for centroid 0: 19.60
Error for centroid 1: 26.92
Error for centroid 2: 0.00
```

- Bước 4: gán giá trị các tâm

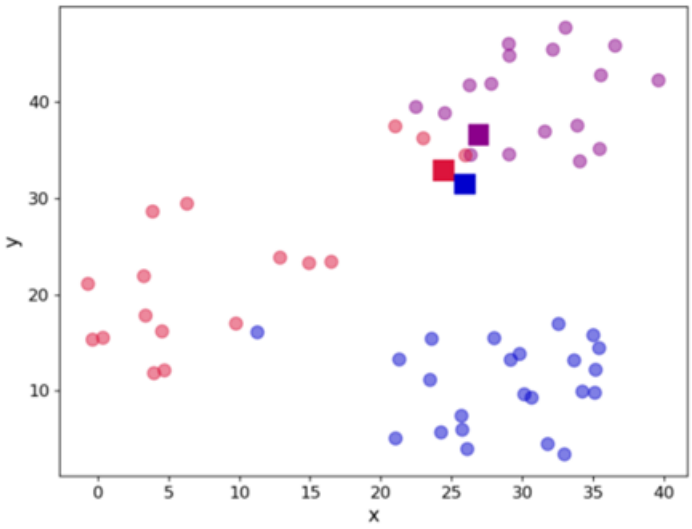
```
def centroid_assignation(dset, centroids):
    '''
    Given a dataframe `dset` and a set of `centroids`, we assign each
    data point in `dset` to a centroid.
    - dset - pandas dataframe with observations
    - centroids - pa das dataframe with centroids
    '''
    k = centroids.shape[0]
    n = dset.shape[0]
    assignation = []
    assign_errors = []

    for obs in range(n):
        # Estimate error
        all_errors = np.array([])
        for centroid in range(k):
            err = rsserr(centroids.iloc[centroid, :], dset.iloc[obs,:])
            all_errors = np.append(all_errors, err)

        # Get the nearest centroid and the error
        nearest_centroid =  np.where(all_errors==np.amin(all_errors))[0].tolist()[0]
        nearest_centroid_error = np.amin(all_errors)

        # Add values to corresponding lists
        assignation.append(nearest_centroid)
        assign_errors.append(nearest_centroid_error)

    return assignation, assign_errors
```

- Thêm cột gán tâm và sai số phát sinh để cập nhật biểu đồ phân tán biểu diễn các trọng tâm

```
df.loc[:, 'centroid'], df.loc[:, 'error']= centroid_assignation(df, centroids)
print(df.head())
```

	x	y	centroid	error
0	24.412	32.932	0	0.000000
1	35.190	12.189	1	459.928485
2	26.288	41.718	2	26.449981
3	0.376	15.506	0	881.394772
4	26.116	3.963	1	759.162433

```
fig, ax = plt.subplots(figsize=(8, 6))
plt.scatter(df.iloc[:,0], df.iloc[:,1],  marker = 'o',
            c=df['centroid'].astype('category'),
            cmap = customcmap, s=80, alpha=0.5)
plt.scatter(centroids.iloc[:,0], centroids.iloc[:,1],
            marker = 's', s=200, c=[0, 1, 2],
            cmap = customcmap)
ax.set_xlabel(r'x', fontsize=14)
ax.set_ylabel(r'y', fontsize=14)
plt.xticks(fontsize=12)
plt.yticks(fontsize=12)
plt.show()
```



- Tổng các sai số

```
print("The total error is {0:.2f}".format(df['error'].sum()))
```

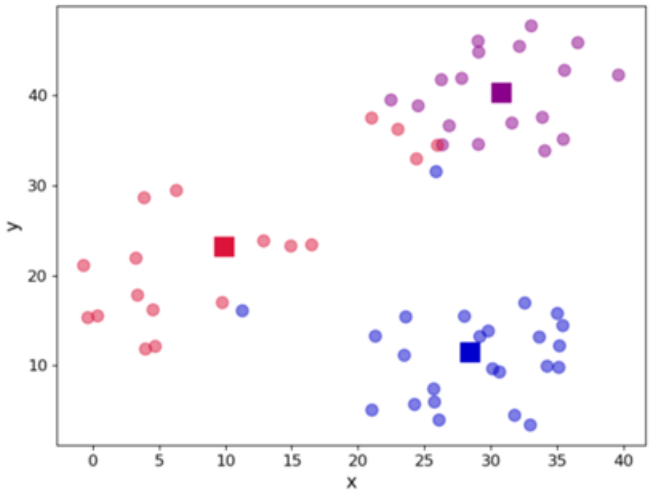
- Bước 5: cập nhật vị trí của k tâm bằng việc tính giá trị trung bình của các quan sát được gán cho mỗi tâm

```
centroids = df.groupby('centroid').agg('mean').loc[:, colnames].reset_index(drop = True)
print(centroids)
```

	x	y
0	9.889444	23.242611
1	28.435750	11.546250
2	30.759333	40.311167

- Xem lại biểu đồ phân tán với vị trí của k tâm đã được cập nhật

```
fig, ax = plt.subplots(figsize=(8, 6))
plt.scatter(df.iloc[:,0], df.iloc[:,1],  marker = 'o',
            c=df['centroid'].astype('category'),
            cmap = customcmap, s=80, alpha=0.5)
plt.scatter(centroids.iloc[:,0], centroids.iloc[:,1],
            marker = 's', s=200,
            c=[0, 1, 2], cmap = customcmap)
ax.set_xlabel(r'x', fontsize=14)
ax.set_ylabel(r'y', fontsize=14)
plt.xticks(fontsize=12)
plt.yticks(fontsize=12)
plt.show()
```



- Bước 6: lặp lại bước 3-5

```
def kmeans(dset, k=2, tol=1e-4):
    '''
    K-means implementationd for a
    `dset`:  DataFrame with observations
    `k`: number of clusters, default k=2
    `tol`: tolerance=1E-4
    '''
    # Let us work in a copy, so we don't mess the original
    working_dset = dset.copy()
    # We define some variables to hold the error, the
    # stopping signal and a counter for the iterations
    err = []
    goahead = True
    j = 0

    # Step 2: Initiate clusters by defining centroids
    centroids = initiate_centroids(k, dset)

    while(goahead):
        # Step 3 and 4 - Assign centroids and calculate error
        working_dset['centroid'], j_err = centroid_assignation(working_dset, centroids)
        err.append(sum(j_err))

        # Step 5 - Update centroid position
        centroids = working_dset.groupby('centroid').agg('mean').reset_index(drop = True)

        # Step 6 - Restart the iteration
        if j>0:
            # Is the error less than a tolerance (1E-4)
            if err[j-1]-err[j]<=tol:
                goahead = False
        j+=1

    working_dset['centroid'], j_err = centroid_assignation(working_dset, centroids)
    centroids = working_dset.groupby('centroid').agg('mean').reset_index(drop = True)
    return working_dset['centroid'], j_err, centroids
```

- Thực thi hàm trên

```
np.random.seed(42)
df['centroid'], df['error'], centroids =  kmeans(df[['x','y']], 3)
print(df.head())
```

	x	y	centroid	error
0	24.412	32.932	2	61.380524
1	35.190	12.189	1	37.415091
2	26.288	41.718	2	16.216075
3	0.376	15.506	0	51.798518
4	26.116	3.963	1	52.188602

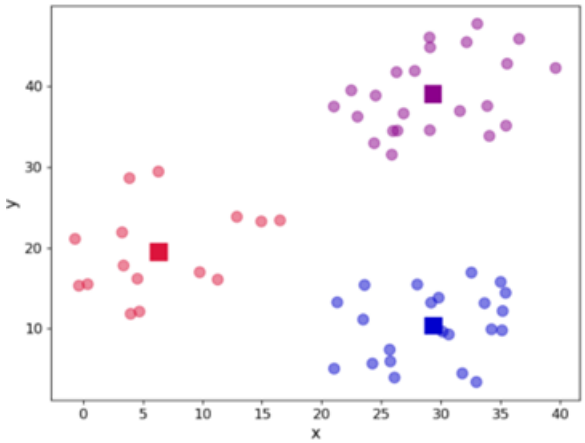
- Vị trí của các tâm cuối cùng

```
print(centroids)
```

	x	y
0	6.322867	19.559800
1	29.330864	10.432409
2	29.304957	39.050783

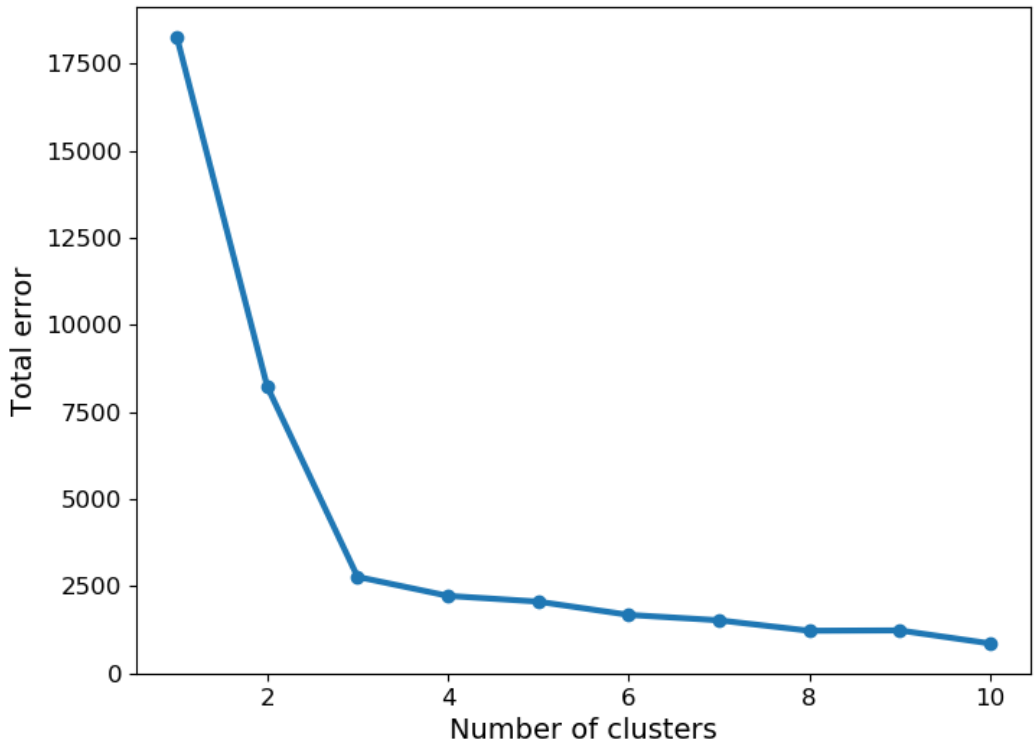
- Xem lại biểu đồ phân tán

```
fig, ax = plt.subplots(figsize=(8, 6))
plt.scatter(df.iloc[:,0], df.iloc[:,1],  marker = 'o',
            c=df['centroid'].astype('category'),
            cmap = customcmap, s=80, alpha=0.5)
plt.scatter(centroids.iloc[:,0], centroids.iloc[:,1],
            marker = 's', s=200, c=[0, 1, 2],
            cmap = customcmap)
ax.set_xlabel(r'x', fontsize=14)
ax.set_ylabel(r'y', fontsize=14)
plt.xticks(fontsize=12)
plt.yticks(fontsize=12)
plt.show()
```



- Sử dụng “elbow” để chỉ ra số cụm tối ưu

```
err_total = []
n = 10

df_elbow = blobs[['x','y']]

for i in range(n):
    _, my_errs, _ = kmeans(df_elbow, i+1)
    err_total.append(sum(my_errs))
fig, ax = plt.subplots(figsize=(8, 6))
plt.plot(range(1,n+1), err_total, linewidth=3, marker='o')
ax.set_xlabel(r'Number of clusters', fontsize=14)
ax.set_ylabel(r'Total error', fontsize=14)
plt.xticks(fontsize=12)
plt.yticks(fontsize=12)
plt.show()
```



2. Thuật toán K-medians

- Thực thi đoạn code ở mục 1 và làm tương tự với thuật toán K-medians.

- Trình bày tóm tắt lại phần code trong file báo cáo.