K-Means Kumeleme Metodu

Yapay Ogrenim (Machine Learning) alaninda onemli algoritmalardan biri k-means metodu. K-means kumelemesi icin kac tane kumenin olmasi gerektigi bastan tanimlanir (yani k parametresi), algoritma bunu kendisi bulmaz.

Metotun geri kalani basittir - bir dongu (iteration) icinde her basamakta:

1) Her nokta icin, eldeki kume merkezleri teker teker kontrol edilir ve o nokta en yakin olan kumeye atanir

2) Atamalar tamamlandiktan sonra her kume icinde hangi noktalarin oldugu bilindigi icin her kumedeki noktalarin ortalamasi alinarak yeni kume merkezi hesaplanir. Eski merkez hesaplari atilir.

3) Basa donulur

Dongu tekrar ilk adima dondugunde, bu sefer yeni kume merkezlerini kullanilarak, ayni adimlar tekrar yapilacaktir.

Fakat bir problem yok mu? Daha birinci dongu baslamadan kume merkezlerinin nerede oldugunu nereden bilecegiz? Burada bir tavuk-yumurta problemi var, kume merkezleri olmadan noktalari atayamayiz, atama olmadan kume merkezlerini hesaplayamayiz.

Bu probleme pratik bir cozum ilk basta kume merkezlerini tahmin etmektir. Yani merkezleri rasgele bir sekilde hesaplamak. Pratikte bu yontem cok iyi isliyor. Tabii bu rasgelelik yuzunden K-means'in dogru sonuca yaklasmasi (convergence) garanti degildir, ama gercek dunya uygulamalarinda cogunlukla kullanisli kumeler bulunur. Bu potansiyel problemlerden kacinmak icin k-means pek cok kez isletilebilir (her seferinde yeni rasgele baslangiclarla yani) ve ayni sonuca ulasilip ulasilmadigi kontrol edilebilir.

Pek en iyi k nasil bulunur? Burada da yapay ogrenim literaturunde pek cok yaklasim vardir [1], veriyi pek cok parcaya bolup, farkli k kume sayisi icin kumeleme yapmak ve capraz saglama (cross-validation) kullanmak, vs. Ya da Canopy Kumelemesi denen bir teknik K-Means'den once isletilerek kume sayisi k ve merkezleri bulunur (Canopy bu hesabi iyi yapan bir tekniktir), boylece rasgele merkez secmekten kurtulunur, isin geri kalani K-Means ile halledilir.

K-Means EM algoritmasinin bir turevi olarak kabul edilebilir, EM kumeleri bir Gaussian (ya da Gaussian karisimi) gibi gorur, ve her basamakta bu dagilimlarin merkezini, hem de kovaryansini hesaplar. Yani kumenin "sekli" de EM tarafindan saptanir. Ayrica EM her noktanin tum kumelere olan uyeliklerini "hafif (soft)" olarak hesaplar (bir olasilik olcutu uzerinden), fakat K-Means icin bu atama nihai (hard membership). Nokta ya bir kumeye aittir, ya da degildir.

EM'in belli sartlarda yaklasiksalligi icin matematiksel ispat var. K-Means akilli tahmin yaparak (heuristic) calisan bir algoritma olarak biliniyor. Sonuca yaklasmasi bu sebeple garanti degildir, ama daha once belirttigimiz gibi pratikte faydalidir. Bir suru alternatif kumeleme yontemi olmasina ragmen hala K-Means'den vazgecilemiyor! Burada bir etken de K-Means'in cok rahat paralelize edilebilmesi. Bu konu baska bir yazida islenecek.

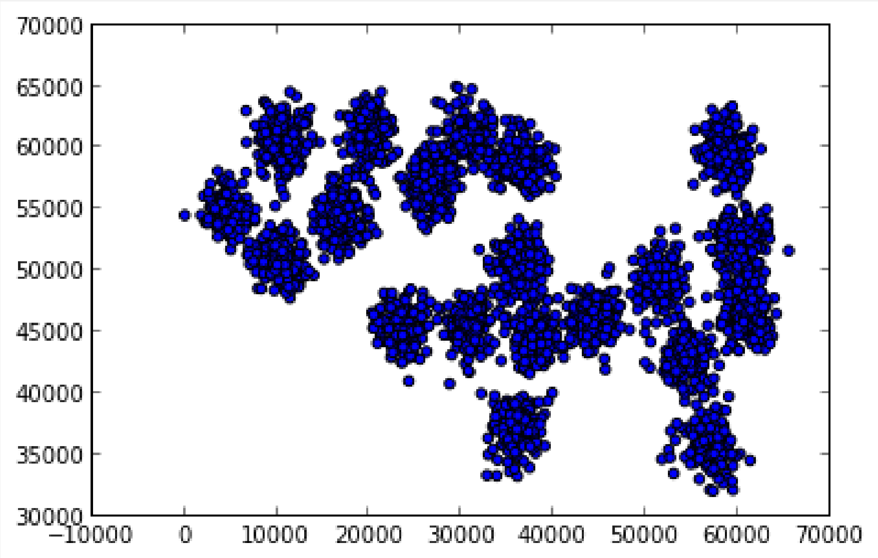
Ornek test verisi altta

```
from pandas import *
data = read_csv("synthetic.txt",names=['a','b'],sep=" ")
print data.shape
data = np.array(data)
```

```
(3000, 2)
```

```
scatter(data[:,0],data[:,1])
```

```
<matplotlib.collections.PathCollection at 0xa371b8c>
```




```
def find_nearest(X,mu):
    nexamples = X.shape[0]
    k = mu.shape[0]

    Xmu = dot(X,mu.T)
    xx = sum(X*X,axis=1)
    mm = sum(mu*mu, axis=1)

    cl = empty(nexamples,dtype=int)
    dists = inf * ones(nexamples)
    for i in range(k):
        new_dist = - 2*Xmu[:,i] + mm[i]
        change = new_dist < dists
        if sum(change)>0:
            cl[change] = [i for j in range(sum(change))]
            dists[change] = new_dist[change]
    return cl

def kmeans(X, k=5, niter=100):
```

```python
    nexamples,nfeatures = X.shape

    # intialize with a random clustering
    random.seed(1) # seed random number generator for reproducibility
    cl = random_integers(0,k,nexamples)
    cl_old = cl

    # allocate means
    mu = np.empty((k,nfeatures))

    it = 0
    while True:
        # compute means
        for i in range(k):
            mu[i,:] = np.mean(X[cl==i,:],axis=0)

        # assign examples to clusters
        cl = find_nearest(X, mu)

        # compute difference in assignments
        nchanges = sum(cl != cl_old)
        print 'it: %d, num. changes: %d' % (it, nchanges)
        if nchanges == 0 or it == niter:
            break

        cl_old = cl
        it += 1
    return cl, mu
```

```python
c = kmeans(data)
```

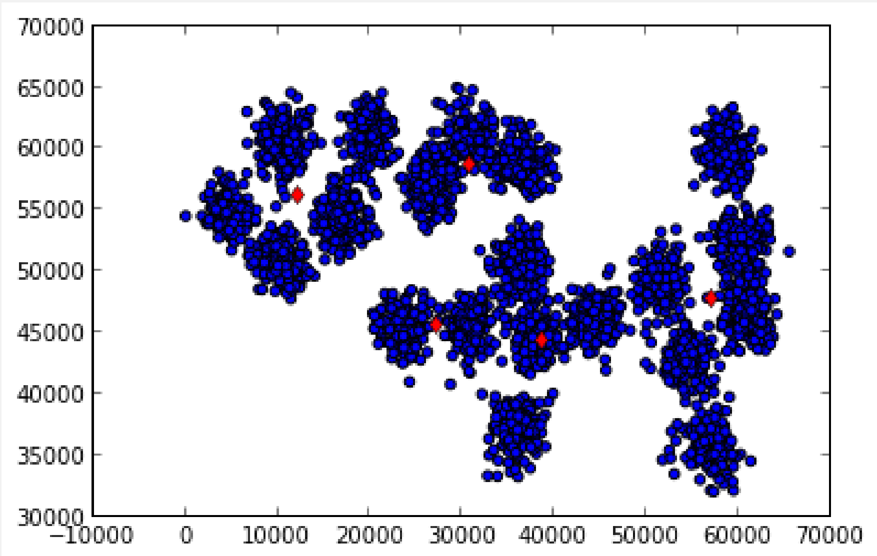
```
it: 0, num. changes: 2490
it: 1, num. changes: 561
it: 2, num. changes: 277
it: 3, num. changes: 142
it: 4, num. changes: 50
it: 5, num. changes: 32
it: 6, num. changes: 35
it: 7, num. changes: 33
it: 8, num. changes: 24
it: 9, num. changes: 13
it: 10, num. changes: 6
it: 11, num. changes: 2

it: 12, num. changes: 0
```

```python
c
```

```
(array([4, 4, 4, ..., 1, 1, 1]),
 array([[ 31006.2193159 ,  58653.75251509],
       [ 12247.38927098,  56210.74828061],
       [ 38859.46193772,  44285.88408304],
       [ 27194.63636364,  45613.61279461],
       [ 57107.29855716,  47792.74694784]]))
```

Ustteki sonucun icinde iki ana vektor var, bu vektorlerden birincisi icinde 4,1, gibi sayilar goruluyor, bu sayilar her noktaya tekabul eden kume atamalari. Ikinci vektor icinde iki boyutlu k tane vektor var, bu vektorler de her kumenin merkez noktasi. Merkez noktalarini ham veri uzerinde grafiklersek (kirmizi noktalar)

```
scatter(data[:,0],data[:,1])
plt.hold(True)
for x in c[1]: plot(x[0],x[1],'rd')
```

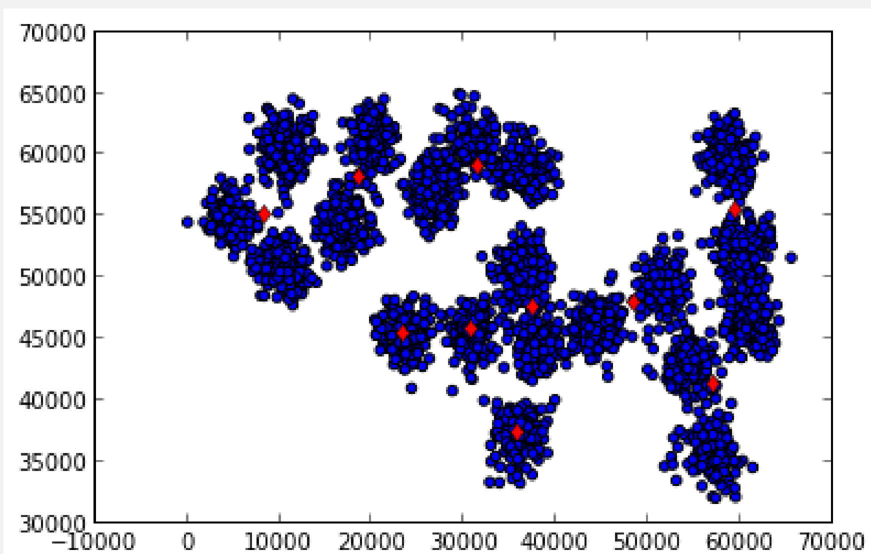


Goruldugu gibi 5 tane kume icin ustteki merkezler bulundu. Fena degil. Eger 10 dersek

```
c = kmeans(data,k=10)
scatter(data[:,0],data[:,1])
plt.hold(True)
for x in c[1]: plot(x[0],x[1],'rd')
```

```
it: 0, num. changes: 2683
it: 1, num. changes: 706
it: 2, num. changes: 648
it: 3, num. changes: 262
it: 4, num. changes: 152
```

```
it: 5, num. changes: 133
it: 6, num. changes: 132
it: 7, num. changes: 118
it: 8, num. changes: 90

it: 9, num. changes: 71
it: 10, num. changes: 40
it: 11, num. changes: 20
it: 12, num. changes: 12
it: 13, num. changes: 15
it: 14, num. changes: 11
it: 15, num. changes: 10
it: 16, num. changes: 9
it: 17, num. changes: 7

it: 18, num. changes: 6
it: 19, num. changes: 4
it: 20, num. changes: 6
it: 21, num. changes: 4
it: 22, num. changes: 0
```



Bazi ek notlar

[1] http://en.wikipedia.org/wiki/Determining_the_number_of_clusters_in_a_data_set

[2] nbviewer.ipython.org/url/cbcb.umd.edu/∼hcorrada/PML/src/kmeans.ipynb