



ĐẠI HỌC BÁCH KHOA HÀ NỘI  
VIỆN CÔNG NGHỆ THÔNG TIN VÀ TRUYỀN THÔNG

# Học máy cơ bản

## Phân cụm

Thân Quang Khoát

# Nội dung môn học

- Buổi 1: Giới thiệu về Học máy
- Buổi 2: Quy trình xây dựng hệ thống học máy
- Buổi 3: Hồi quy tuyến tính
- Buổi 4: Học dựa trên láng giềng gần nhất (KNN)
- Buổi 5: Cây quyết định và Rừng ngẫu nhiên
- Buổi 6: Naïve Bayes
- Buổi 7: Máy vector hỗ trợ (SVM)
- Buổi 8: Đánh giá hiệu quả của mô hình học máy
- **Buổi 9: Phân cụm**
- Buổi 10-11: Kiểm tra giữa kỳ và trình bày ý tưởng làm dự án cuối kỳ
- Buổi 12-20: Học sâu

# 1. Hai bài toán học

## ■ Học có giám sát (Supervised learning)

- ❑ Tập dữ liệu học (*training data*) bao gồm các quan sát (*examples, observations*), mà mỗi quan sát được *gắn kèm với một giá trị đầu ra mong muốn*.
- ❑ Ta cần học một hàm (vd: một phân lớp, một hàm hồi quy,...) phù hợp với tập dữ liệu hiện có.
- ❑ Hàm học được sau đó sẽ được dùng để dự đoán cho các quan sát mới.

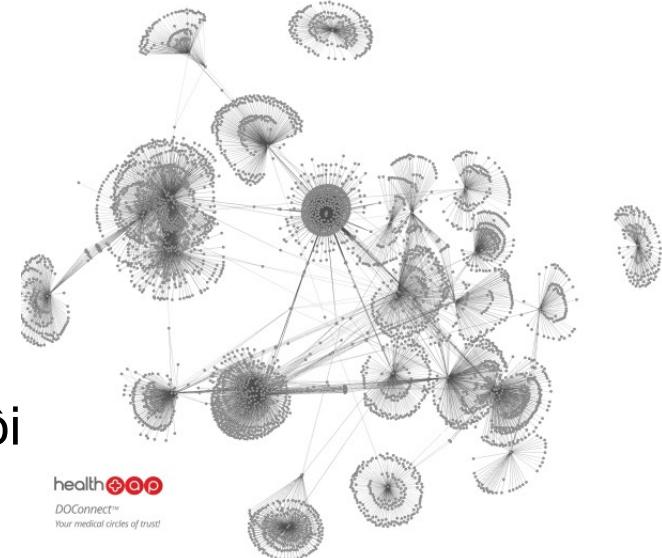
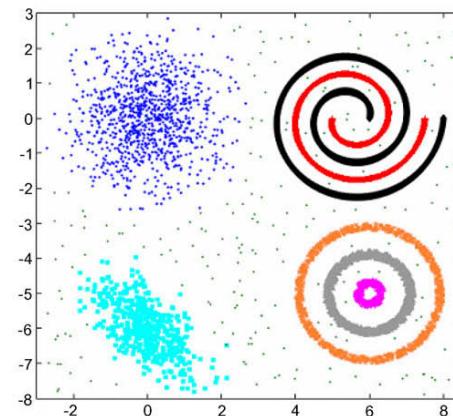
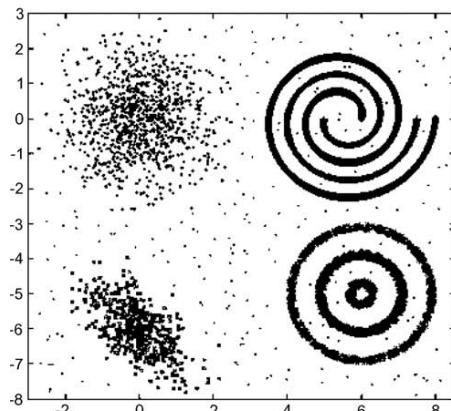
## ■ Học không giám sát (Unsupervised learning)

- ❑ Tập học (*training data*) bao gồm các quan sát, mà mỗi quan sát *không có thông tin về nhãn lớp hoặc giá trị đầu ra mong muốn*.
- ❑ Mục đích là tìm ra (học) các cụm, các cấu trúc, các quan hệ tồn tại ẩn trong tập dữ liệu hiện có.

# Ví dụ về học không giám sát (1)

## ■ Phân cụm (clustering)

- Phát hiện các cụm dữ liệu, cụm tính chất,...

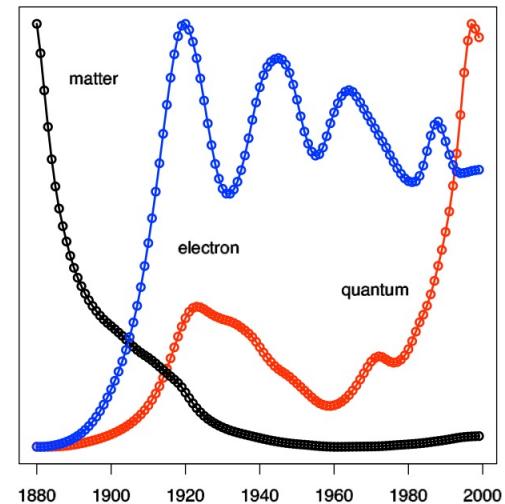


## ■ Community detection

- Phát hiện các cộng đồng trong mạng xã hội

# Ví dụ về học không giám sát (2)

- Trends detection
  - Phát hiện xu hướng, thị yếu,...



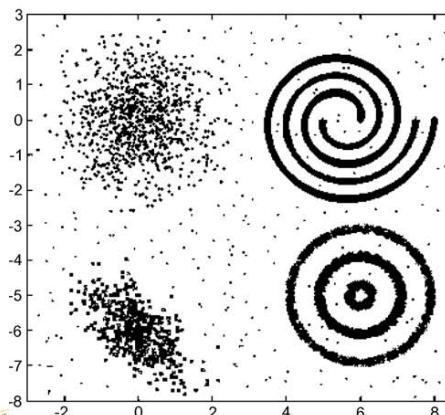
# 2. Phân cụm

## ■ Phân cụm (clustering)

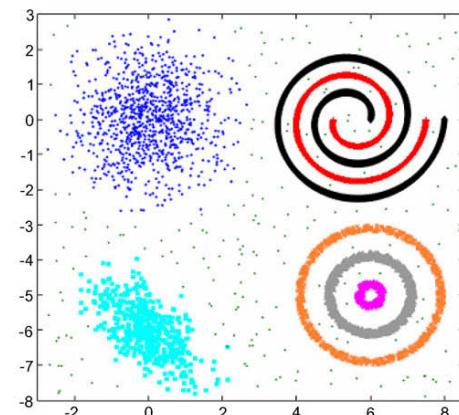
- ❑ Đầu vào: một tập dữ liệu  $\{x_1, \dots, x_M\}$  không có nhãn (hoặc giá trị đầu ra mong muốn)
- ❑ Đầu ra: các cụm (nhóm) của các quan sát

## ■ Một **cụm (cluster)** là một tập các quan sát

- ❑ Tương tự với nhau (theo một ý nghĩa, đánh giá nào đó)
- ❑ Khác biệt với các quan sát thuộc các cụm khác



Sau khi phân cụm



# Phân cụm

- Giải thuật phân cụm
  - Dựa trên phân hoạch (Partition-based clustering)
  - Dựa trên tích tụ phân cấp (Hierarchical clustering)
  - Bản đồ tự tổ thức (Self-organizing map – SOM)
  - Các mô hình hỗn hợp (Mixture models)
  - ...
- Đánh giá chất lượng phân cụm (Clustering quality)
  - Khoảng cách/sự khác biệt *giữa các cụm* → Cần được *cực đại hóa*
  - Khoảng cách/sự khác biệt *bên trong một cụm* → Cần được *cực tiểu hóa*

### 3. Phương pháp K-means

- K-means được giới thiệu đầu tiên bởi Lloyd năm 1957.
- Là phương pháp phân cụm phổ biến nhất trong các phương pháp dựa trên phân hoạch (partition-based clustering)
- Biểu diễn dữ liệu:  $D = \{x_1, x_2, \dots, x_r\}$ 
  - $x_i$  là một quan sát (một vectơ trong một không gian  $n$  chiều)
- Giải thuật K-means phân chia tập dữ liệu thành  $k$  cụm
  - Mỗi cụm (cluster) có một điểm trung tâm, được gọi là **centroid**
  - $k$  (tổng số các cụm thu được) là một giá trị được cho trước (vd: được chỉ định bởi người thiết kế hệ thống phân cụm)

# K-means: Các bước chính

**Đầu vào:** tập học  $D$ , số lượng cụm  $k$ , khoảng cách  $d(x,y)$

- **Bước 1.** Chọn ngẫu nhiên  $k$  quan sát (được gọi là **các hạt nhân – seeds**) để sử dụng làm **các điểm trung tâm ban đầu (initial centroids)** của  $k$  cụm.
- **Bước 2.** Lặp liên tục hai bước sau cho đến khi **gặp điều kiện hội tụ (convergence criterion)**:
  - **Bước 2.1.** Đối với mỗi quan sát, *gán nó vào cụm* (trong số  $k$  cụm) mà có tâm (centroid) gần nó nhất.
  - **Bước 2.2.** Đối với mỗi cụm, *tính toán lại điểm trung tâm của nó* dựa trên tất cả các quan sát thuộc vào cụm đó.

## **K-means(D, k)**

D: Tập học

k: Số lượng cụm kết quả (thu được)

Lựa chọn ngẫu nhiên  $k$  quan sát trong tập  $D$  để làm các điểm trung tâm ban đầu (initial centroids)

while not CONVERGENCE

for each  $x \in D$

Tính các khoảng cách từ  $x$  đến các điểm trung tâm (centroid)

Gán  $x$  vào cụm có điểm trung tâm (centroid) gần  $x$  nhất

end for

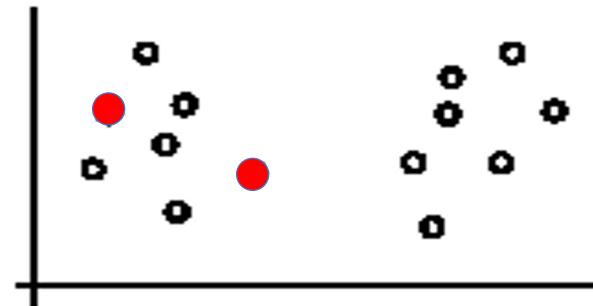
for each cụm

Tính (xác định) lại điểm trung tâm (centroid) dựa trên các quan sát hiện thời đang thuộc vào cụm này

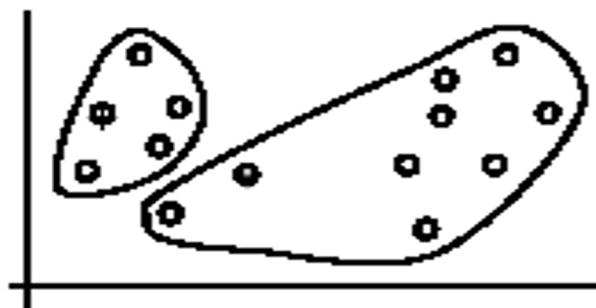
end while

return {k cụm kết quả}

# K-means: Minh họa (1)



(A). Random selection of  $k$  centers



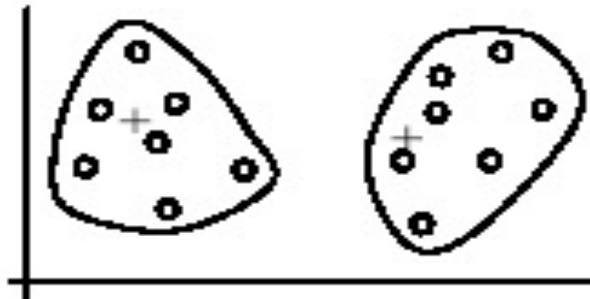
Iteration 1: (B). Cluster assignment



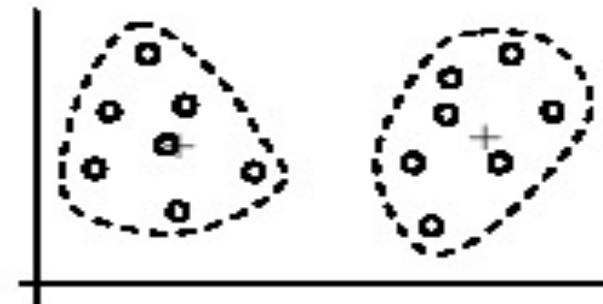
(C). Re-compute centroids

[Liu, 2006]

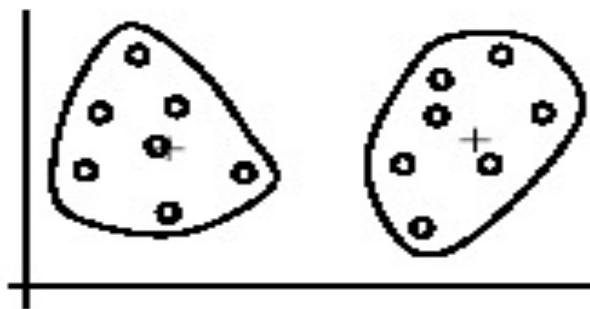
# K-means: Minh họa (2)



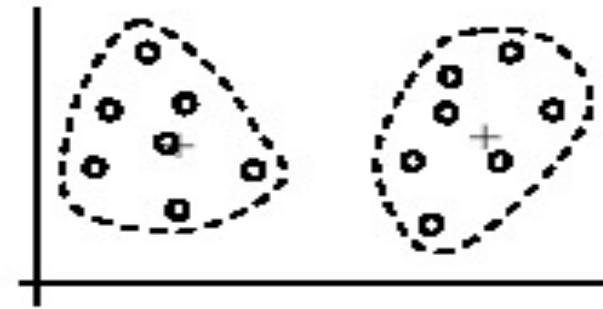
Iteration 2: (D). Cluster assignment



(E). Re-compute centroids



Iteration 3: (F). Cluster assignment



(G). Re-compute centroids

[Liu, 2006]

# K-means: Điều kiện hội tụ

Quá trình phân cụm kết thúc, nếu:

- Không có (hoặc có không đáng kể) việc gán lại các quan sát vào các cụm khác, hoặc
- Không có (hoặc có không đáng kể) thay đổi về các điểm trung tâm (centroids) của các cụm, hoặc
- Giảm không đáng kể về tổng lỗi phân cụm:

$$Error = \sum_{i=1}^k \sum_{\mathbf{x} \in C_i} d(\mathbf{x}, \mathbf{m}_i)^2$$

- $C_i$ : Cụm thứ  $i$
- $\mathbf{m}_i$ : Điểm trung tâm (centroid) của cụm  $C_i$
- $d(\mathbf{x}, \mathbf{m}_i)$ : Khoảng cách (khác biệt) giữa quan sát  $\mathbf{x}$  và điểm trung tâm  $\mathbf{m}_i$

# K-means: Điểm trung tâm, hàm khoảng cách

## ■ Xác định điểm trung tâm: Điểm trung bình (*Mean centroid*)

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{|C_i|} \sum_{\mathbf{x} \in C_i} \mathbf{x}$$

- (vectơ)  $\mathbf{m}_i$  là điểm trung tâm (centroid) của cụm  $C_i$ ,
- $|C_i|$  kích thước của cụm  $C_i$  (tổng số quan sát trong  $C_i$ )

## ■ Hàm khoảng cách: *Euclidean distance*

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{m}_i) = \|\mathbf{x} - \mathbf{m}_i\| = \sqrt{(x_1 - m_{i1})^2 + (x_2 - m_{i2})^2 + \dots + (x_n - m_{in})^2}$$

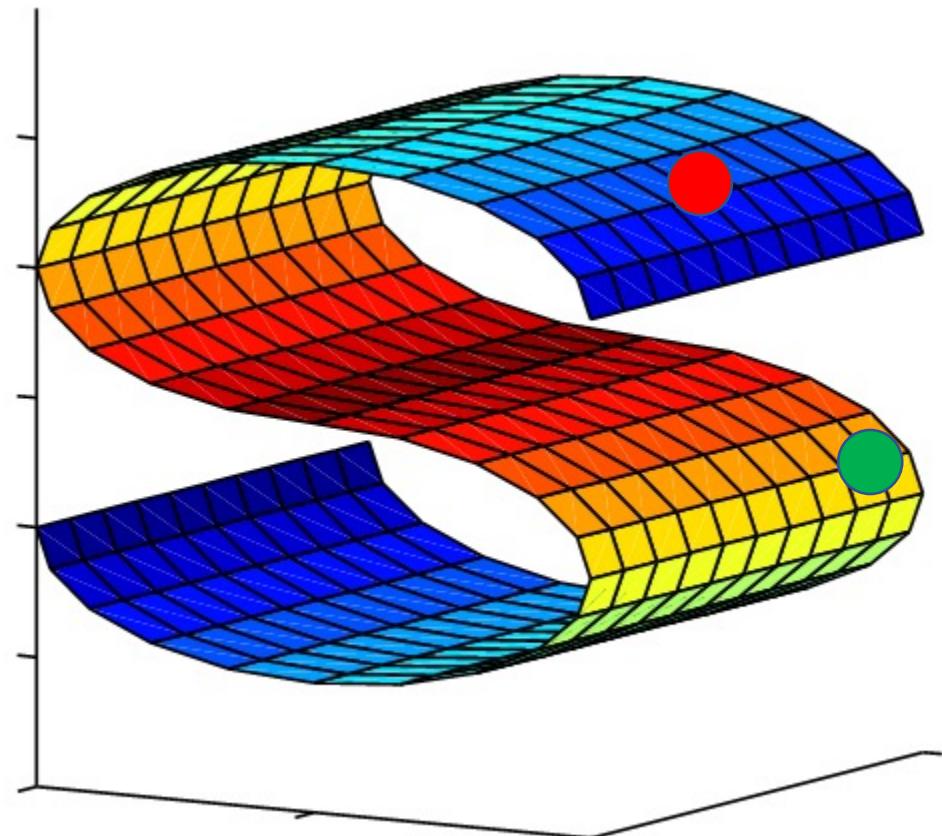
- (vectơ)  $\mathbf{m}_i$  là điểm trung tâm (centroid) của cụm  $C_i$
- $d(\mathbf{x}, \mathbf{m}_i)$  là khoảng cách giữa  $\mathbf{x}$  và điểm trung tâm  $\mathbf{m}_i$

# K-means: hàm khoảng cách

- Hàm khoảng cách

- Mỗi hàm sẽ tương ứng với một cách nhìn về dữ liệu.
  - Vô hạn hàm!!!
  - Chọn hàm nào?

- Có thể thay bằng độ đo tương đồng  
(similarity measure)



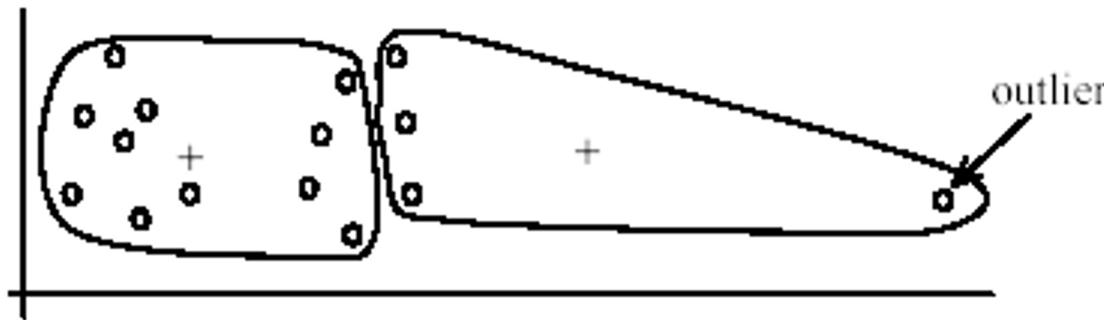
# K-means: Các ưu điểm

- **Đơn giản:** dễ cài đặt, rất dễ hiểu
- **Rất linh động:** cho phép dùng nhiều độ đo khoảng cách khác nhau → phù hợp với các loại dữ liệu khác nhau.
- **Hiệu quả (khi dùng độ đo Euclidean)**
  - Độ phức tạp tính toán tại mỗi bước  $\sim O(r \cdot k)$ 
    - $r$ : Tổng số các quan sát (kích thước của tập dữ liệu)
    - $k$ : Tổng số cụm thu được
  - Thuật toán có độ phức tạp trung bình là đa thức.
- K-means là giải thuật phân cụm được dùng phổ biến nhất

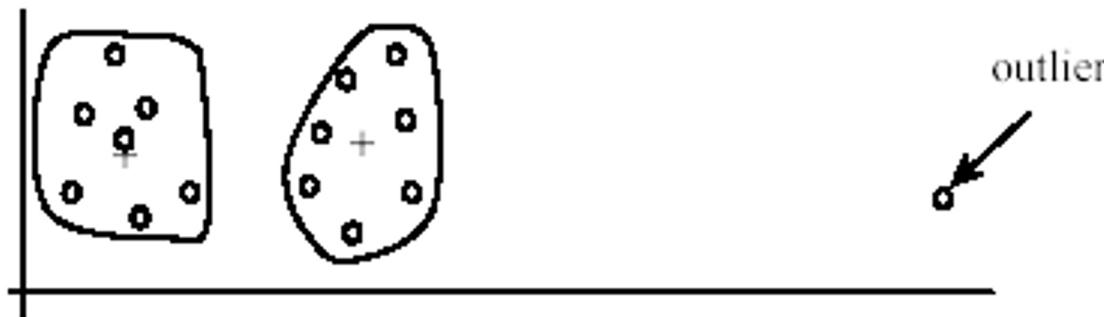
# K-means: Các nhược điểm (1)

- Số cụm  $k$  phải được xác định trước
  - Thường ta không biết chính xác !
- Giải thuật K-means nhạy cảm (gặp lỗi) với **các quan sát ngoại lai (outliers)**
  - Các quan sát ngoại lai là các quan sát (rất) khác biệt với tất cả các quan sát khác
  - Các quan sát ngoại lai có thể do lỗi trong quá trình thu thập/lưu dữ liệu
  - Các quan sát ngoại lai có các giá trị thuộc tính (rất) khác biệt với các giá trị thuộc tính của các quan sát khác

# K-means: ngoại lai



(A): Undesirable clusters



(B): Ideal clusters

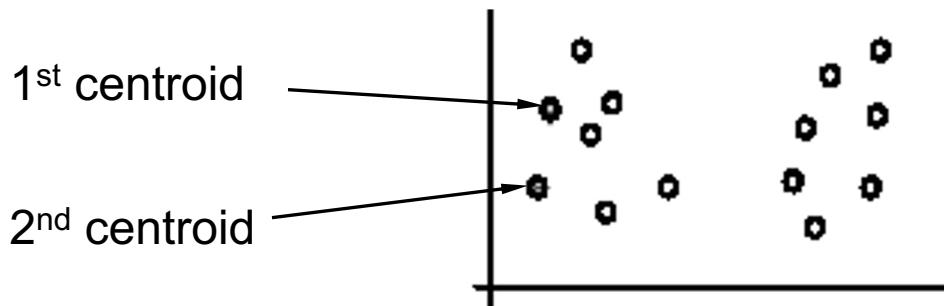
[Liu, 2006]

# Giải quyết vấn đề ngoại lai

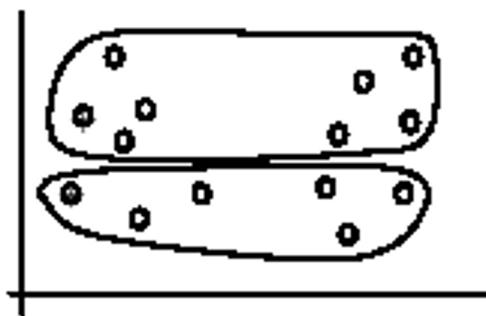
- **Giải pháp 1:** Trong quá trình phân cụm, cần loại bỏ một số các quan sát quá khác biệt với (cách xa) các điểm trung tâm (centroids) so với các quan sát khác
  - Để chắc chắn (không loại nhầm), theo dõi các quan sát ngoại lai (outliers) qua một vài (thay vì chỉ 1) bước lặp phân cụm, trước khi quyết định loại bỏ
- **Giải pháp 2:** Thực hiện việc lấy ngẫu nhiên (random sampling) một tập nhỏ từ  $\mathbf{D}$  để học K cụm
  - Do đây là tập con nhỏ của tập dữ liệu ban đầu, nên khả năng một ngoại lai (outlier) được chọn là nhỏ
  - Gán các quan sát còn lại của tập dữ liệu vào các cụm tùy theo đánh giá về khoảng cách (hoặc độ tương tự)
- Cả hai giải pháp đều không dễ làm.

# K-means: Các nhược điểm (2)

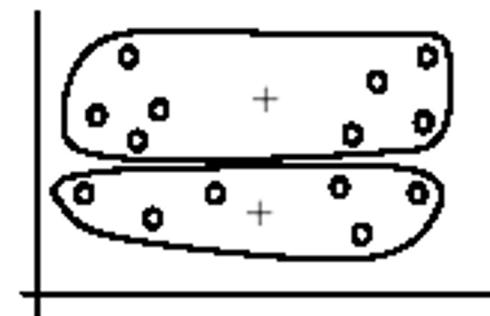
- Giải thuật K-means phụ thuộc vào việc chọn các điểm trung tâm ban đầu (initial centroids)



(A). Random selection of seeds (centroids)



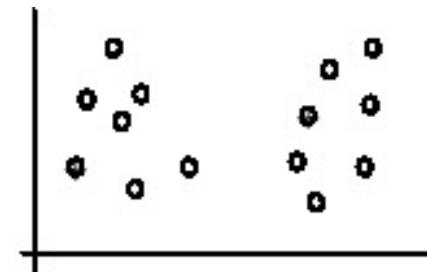
(B). Iteration 1



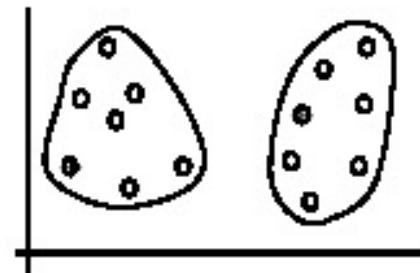
(C). Iteration 2

# K-means: Các hạt nhân ban đầu (1)

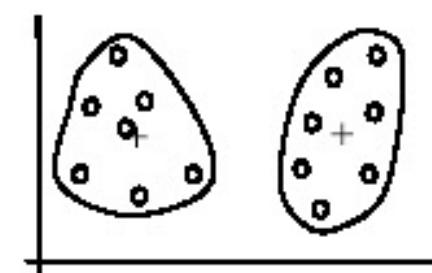
- Kết hợp nhiều kết quả phân cụm với nhau → Kết quả tốt hơn!
  - Thực hiện giải thuật K-means nhiều lần, mỗi lần bắt đầu với một tập các hạt nhân được chọn ngẫu nhiên



(A). Random selection of  $k$  seeds (centroids)



(B). Iteration 1



(C). Iteration 2

[Liu, 2006]

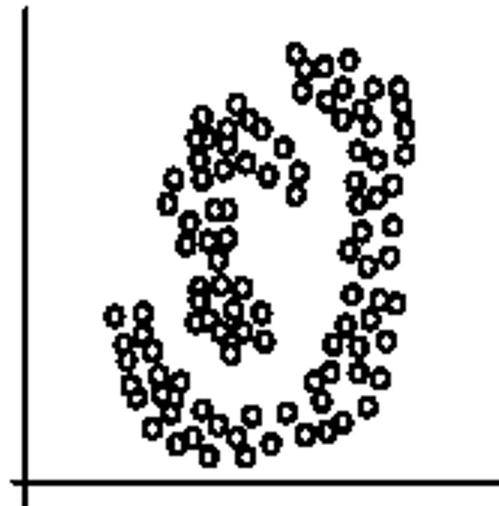
# K-means: Các hạt nhân ban đầu (2)

- Một cách chọn hạt nhân nên dùng:
  - Lựa chọn ngẫu nhiên hạt nhân thứ 1 ( $m_1$ )
  - Lựa chọn hạt nhân thứ 2 ( $m_2$ ) càng xa càng tốt so với hạt nhân thứ 1
  - ...
  - Lựa chọn hạt nhân thứ  $i$  ( $m_i$ ) càng xa càng tốt so với hạt nhân gần nhất trong số  $\{m_1, m_2, \dots, m_{i-1}\}$
  - ...
- Đây được gọi là phương pháp **K-means++**

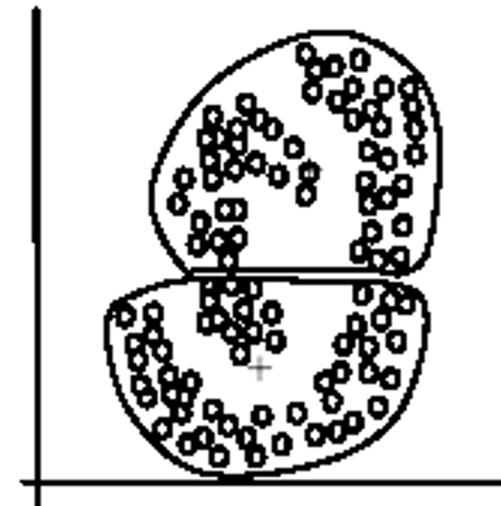
[Arthur, D.; Vassilvitskii, 2007]

# K-means: Các nhược điểm (3)

- K-means (với khoảng cách Euclid) phù hợp với các cụm hình cầu.
- *K-means không phù hợp để phát hiện các cụm (nhóm) không có dạng hình cầu.*
- Cải thiện??



(A): Two natural clusters



(B): *k*-means clusters

[Liu, 2006]

# K-means: Tổng kết

- Mặc dù có những nhược điểm như trên, K-means vẫn là giải thuật phổ biến nhất được dùng để giải quyết các bài toán phân cụm – do tính đơn giản và hiệu quả.
  - Các giải thuật phân cụm khác cũng có các nhược điểm riêng.
- So sánh hiệu năng của các giải thuật phân cụm là một nhiệm vụ khó khăn (thách thức).
  - Thường cần thêm con người đánh giá

# 4. Online K-means

- K-means:
  - Cần dùng toàn bộ dữ liệu tại mỗi bước lặp
  - Do đó không thể làm việc khi dữ liệu quá lớn (big data)
  - Không phù hợp với luồng dữ liệu (stream data, dữ liệu đến liên tục)
- *Online K-means* cải thiện nhược điểm của K-means, cho phép ta phân cụm dữ liệu rất lớn, hoặc phân cụm luồng dữ liệu.
  - Được phát triển từ K-means [Bottou, 1998].
  - Sử dụng tư tưởng học trực tuyến (online learning) và gradient ngẫu nhiên (stochastic gradient)

# Online K-means: ý tưởng

- **K-means** tìm K tâm cụm và gán các quan sát  $\{x_1, \dots, x_M\}$  vào các cụm đó bằng cách cực tiểu hóa hàm lỗi sau

$$Q(w) = \sum_{i=1}^M \|x_i - w(x_i)\|_2^2$$

- Trong đó  $w(x_i)$  là tâm gần nhất với  $x_i$ .
- **Online K-means** cực tiểu hàm Q theo phương pháp leo đồi và dùng thông tin đạo hàm (gradient) của Q.
  - Tuy nhiên tại mỗi bước lặp  $t$  ta chỉ lấy một phần thông tin gradient,
  - Phần gradient này thu được từ các quan sát tại bước  $t$ . Ví dụ:

$$x_t - w_t(x_t)$$

# Online K-means: thuật toán

- Khởi tạo K tâm ban đầu.
- Cập nhật các tâm mỗi khi một điểm dữ liệu mới đến:
  - Tại bước  $t$ , lấy một quan sát  $x_t$ .
  - Tìm tâm  $w_t$  gần nhất với  $x_t$ . Sau đó cập nhật lại  $w_t$  như sau:

$$w_{t+1} = w_t + \gamma_t(x_t - w_t)$$

- **Chú ý:** tốc độ học  $\{\gamma_1, \gamma_2, \dots\}$  là dãy hệ số dương nên được chọn thoả mãn các điều kiện sau

$$\sum_{t=1}^{\infty} \gamma_t = \infty; \sum_{t=1}^{\infty} \gamma_t^2 < \infty$$

# Online K-means: tốc độ học

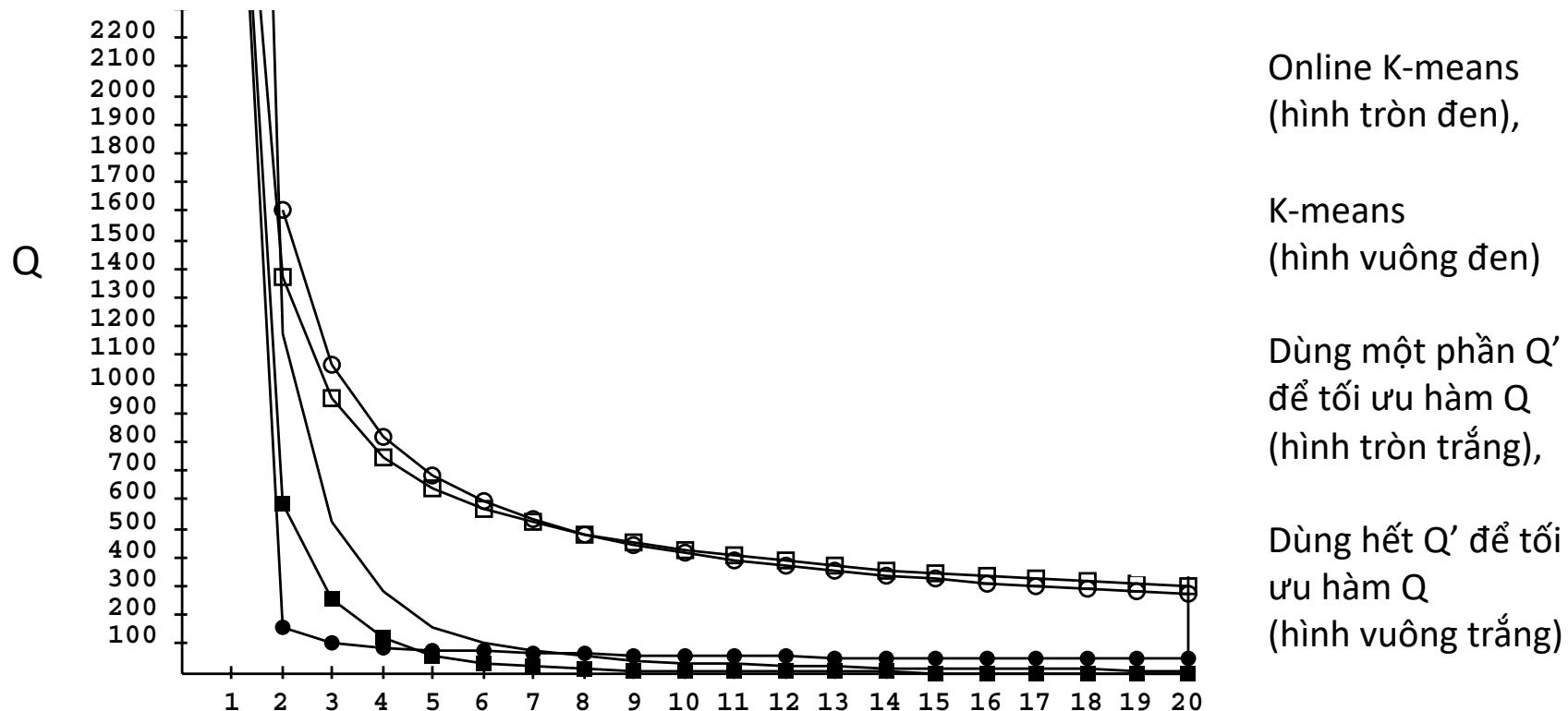
- Một cách lựa chọn tốc độ học hay dùng:

$$\gamma_t = (t + \tau)^{-\kappa}$$

- $\tau, \kappa$  là các hằng số dương.
- $\kappa \in (0.5, 1]$  là *tốc độ quên*.  $\kappa$  càng lớn thì sẽ nhớ quá khứ càng lâu; các quan sát mới càng ít đóng góp vào mô hình hơn.

# Online K-means: tốc độ hội tụ

- Hàm Q giảm khi số lần lặp tăng lên.  
(so sánh các phương pháp khác nhau)



# Tài liệu tham khảo

- Arthur, D., Manthey, B., & Röglin, H. (2011). Smoothed analysis of the k-means method. *Journal of the ACM (JACM)*, 58(5), 19.
- Bottou, Léon. Online learning and stochastic approximations. *On-line learning in neural networks* 17 (1998).
- B. Liu. *Web Data Mining: Exploring Hyperlinks, Contents, and Usage Data*. Springer, 2006.
- Lloyd, S., 1982. Least squares quantization in PCM. *IEEE Trans. Inform. Theory* 28, 129–137. Originally as an unpublished Bell laboratories Technical Note (1957).
- Jain, A. K. (2010). Data clustering: 50 years beyond K-means. *Pattern recognition letters*, 31(8), 651–666.
- Arthur, D.; Vassilvitskii, S. (2007). K-means++: the advantages of careful seeding. *Proceedings of the 18th annual ACM-SIAM symposium on Discrete algorithms*, pp. 1027–1035.



25  
YEARS ANNIVERSARY  
**SOICT**

VIỆN CÔNG NGHỆ THÔNG TIN VÀ TRUYỀN THÔNG  
SCHOOL OF INFORMATION AND COMMUNICATION TECHNOLOGY

Thank you  
for your  
attentions!

