

# Unsupervised ML part II: Hierarchical Clustering



อ.คร.ปัญญนัท อันพงษ์

ภาควิชาคอมพิวเตอร์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยศิลปากร

aonpong\_p@su.ac.th

### Outline

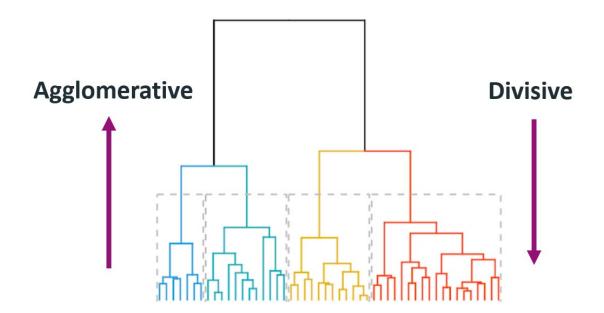


- Hierarchical Clustering
  - แนวคิดของ Hierarchical Clustering
  - Agglomerative
    - กระบวนการ
    - การอ่าน Dendrogram
  - Divisive
    - Minimum Spanning Tree
    - กระบวนการ

## Idea of Hierarchical Clustering

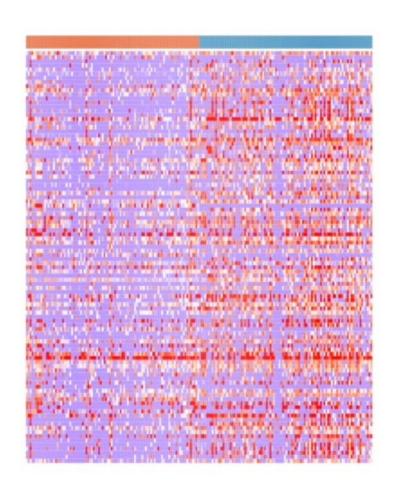


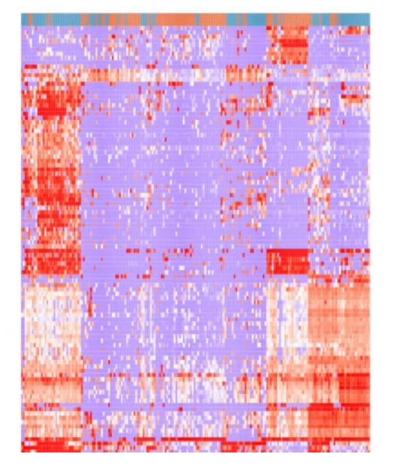
- Hierarchical Clustering มีการแบ่งทั้งแบบ Agglomerative และ Divisive แตกต่างจาก kmean ที่เป็น divisive เพียงอย่างเดียว
- เป็นการจัดกลุ่มโดยไม่ต้องมีการกำหนดจำนวนกลุ่มที่ต้องการจัดกลุ่มข้อมูลก่อน (ค่อย ๆ แบ่ง (Agnes) หรือค่อย ๆ รวม (Diana) ไปจนกว่ากลุ่มที่ได้จะเมคเซ้นส์)



### Idea of Hierarchical Clustering







### Outline



- Hierarchical Clustering
  - แนวคิดของ Hierarchical Clustering
  - Agglomerative
    - กระบวนการ
    - การอ่าน Dendrogram
  - Divisive
    - Minimum Spanning Tree
    - กระบวนการ

# Agglomerative



- มีชื่อเล่นว่า Agnes
- ทำงานโดยเริ่มจากกำหนดคลัสเตอร์จำนวนมาก (เท่าจำนวนข้อมูล) แล้วค่อย ๆ เพิ่มขนาดของคลัสเตอร์ขึ้น โดยการจับกลุ่มข้อมูลที่มีความใกล้เคียงกันมากที่สุด เข้าด้วยกัน
- เมื่อทำซ้ำไปเรื่อย ๆ คลัสเตอร์ก็จะมีขนาดใหญ่ขึ้น และมีจำนวนน้อยลง



### Hierarchical Clustering สมมติข้อมูลที่จะใช้เป็นดังนี้

	หนู 1	หนู 2	หนู 3	หนู 4	หนู 5	หนู 6
รหัสพันธุกรรม 1	10	11	8	3	2	1
รหัสพันธุกรรม 2	6	4	5	3	2.8	1
รหัสพันธุกรรม 3	12	9	10	2.5	1.3	2

และเราต้องการจับกลุ่มรหัสพันธุกรรม



### Hierarchical Clustering

1. จับคู่หาระยะห่างของรหัสพันธุกรรมแต่ละตัว โดยใช้สมการ Distance

	หนู 1	หนู 2	หนู 3	หนู 4	หนู 5	หนู 6
รหัสพันธุกรรม 1	10	11	8	3	2	1
รหัสพันธุกรรม 2	6	4	5	3	2.8	1
รหัสพันธุกรรม 3	12	9	10	2.5	1.3	2



- 1. จับคู่หาระยะห่างของรหัสพันธุกรรมแต่ละตัว โดยใช้สมการ Distance
- 2. เลือกคู่ที่มีระยะห่างต่อกันน้อยที่สุด

Gene1 <=> Gene3 จะได้ว่า 
$$(10-12)^2+(11-9)^2+(8-10)^2+(3-2.5)^2+(2-1.3)^2+(1-2)^2=13.74$$



- 1. จับคู่หาระยะห่างของรหัสพันธุกรรมแต่ละตัว โดยใช้สมการ Distance
- 2. เลือกคู่ที่มีระยะห่างต่อกันน้อยที่สุด
- 3. ย้ายสองตัวดังกล่าวมาไว้ติดกันและเขียนเส้นเชื่อมโยง (อาจเขียน Distance กำกับไว้ด้วยก็ได้)

		หนู 1	หนู 2	หนู 3	หนู 4	หนู 5	หนู 6
13.74	รหัสพันธุกรรม 1	10	11	8	3	2	1
13.74	รหัสพันธุกรรม 3	12	9	10	2.5	1.3	2
	รหัสพันธุกรรม 2	6	4	5	3	2.8	1



- 1. จับคู่หาระยะห่างของรหัสพันธุกรรมแต่ละตัว โดยใช้สมการ Distance
- 2. เลือกคู่ที่มีระยะห่างต่อกันน้อยที่สุด
- 3. ย้ายสองตัวดังกล่าวมาไว้ติดกันและเขียนเส้นเชื่อมโยง (อาจเขียน Distance กำกับไว้ด้วยก็ได้)
- 4. มองข้อมูลในคลัสเตอร์ที่เชื่อมโยงกันเป็นข้อมูลตัวเดียว จากนั้นทำข้อ 1-3 ซ้ำใหม่จนสร้างเส้น เชื่อมครบทุกข้อมูลที่มี

		หนู 1	หนู 2	หนู 3	หนู 4	หนู 5	หนู 6
ď	รหัสพันธุกรรม 1	10	11	8	3	2	1
	รหัสพันธุกรรม 3	12	9	10	2.5	1.3	2
	รหัสพันธุกรรม 2	6	4	5	3	2.8	1



### Hierarchical Clustering

**คำถาม** ถ้าต้องมองทั้งกลุ่มที่จับไปแล้วเป็นข้อมูลตัวเดียว แล้วเราจะหา Distance ยังไง?

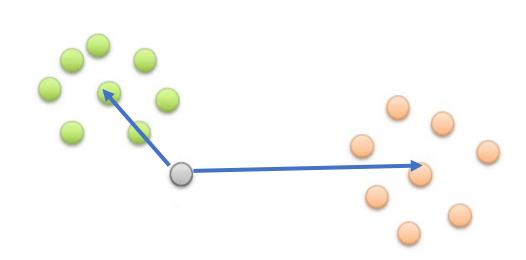
	หนู 1	หนู 2	หนู 3	หนู 4	หนู 5	หนู 6
รหัสพันธุกรรม 1	10	11	8	3	2	1
รหัสพันธุกรรม 3	? 12	9	10	2.5	1.3	2
รหัสพันธุกรรม 2	6	4	5	3	2.8	1



### Hierarchical Clustering

**คำถาม** ถ้าต้องมองทั้งกลุ่มที่จับไปแล้วเป็นข้อมูลตัวเดียว แล้วเราจะหา Distance ยังไง? คำตอบ มีวิธีดูหลายแบบ!

1. ดูค่าเฉลี่ยของทั้งคลัสเตอร์ (Centroid)



	หนู 1	หนู
รหัสพันธุกรรม 1	10	
รหัสพันธุกรรม 3	11 12	
รหัสพันธุกรรม 2	6	

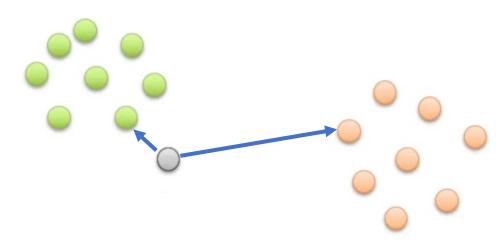


### Hierarchical Clustering

คำถาม ถ้าต้องมองทั้งกลุ่มที่จับไปแล้วเป็นข้อมูลตัวเดียว แล้วเราจะหา Distance ยังไง?

**คำตอบ** มีวิธีดูหลายแบบ!

- 1. ดูค่าเฉลี่ยของทั้งคลัสเตอร์ (Centroid)
- 2. ดูค่าใกล้ที่สุด (Single-Linkage)



	หนู 1	หนู
รหัสพันธุกรรม 1	10	
รหัสพันธุกรรม 3	12	
รหัสพันธุกรรม 2	6	

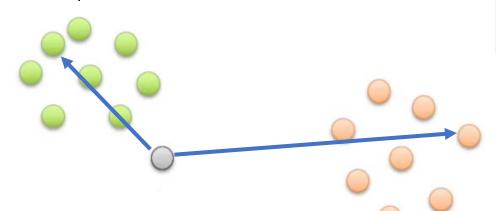


### Hierarchical Clustering

คำถาม ถ้าต้องมองทั้งกลุ่มที่จับไปแล้วเป็นข้อมูลตัวเดียว แล้วเราจะหา Distance ยังไง?

**คำตอบ** มีวิธีดูหลายแบบ!

- 1. ดูค่าเฉลี่ยของทั้งคลัสเตอร์ (Centroid)
- 2. ดูค่าใกล้ที่สุด (Single-Linkage)
- 3. ดูค่าไกลที่สุด (Complete-Linkage)



	หนู 1	หนู
รหัสพันธุกรรม 1	10	
รหัสพันธุกรรม 3	12	
รหัสพันธุกรรม 2	6	•••



**คำถาม** ถ้าต้องมองทั้งกลุ่มที่จับไปแล้วเป็นข้อมูลตัวเดียว แล้วเราจะหา Distance ยังไง? **คำตอบ** มีวิธีดูหลายแบบ!

- 1. ดูค่าเฉลี่ยของทั้งคลัสเตอร์ (Centroid)
- 2. ดูค่าใกล้ที่สุด (Single-Linkage)
- 3. ดูค่าไกลที่สุด (Complete-Linkage)
- 4. ดู Sum of square น้อยที่สุดของคลัสเตอร์ทั้งหม<mark>ด (Ward)</mark>

	หนู 1	หนู
รหัสพันธุกรรม 1	10	
รหัสพันธุกรรม 3	12	
รหัสพันธุกรรม 2	6	•••



### **คำถาม** ควรเลือกวิธีไหน?

- 1. ดูค่าเฉลี่ยของทั้งคลัสเตอร์ (Centroid)
- 2. ดูค่าใกล้ที่สุด (Single-Linkage)
- 3. ดูค่าไกลที่สุด (Complete-Linkage)
- 4. ดู Sum of square น้อยที่สุดของคลัสเตอร์ทั้งหมด (Ward)



### **คำถาม** ควรเลือกวิธีไหน?

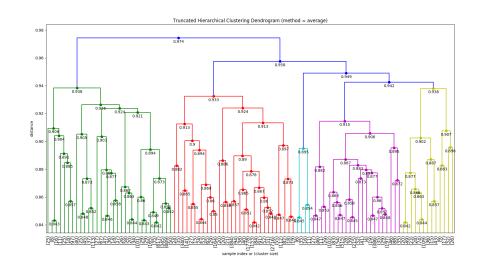
- 1. ดูค่าเฉลี่ยของทั้งคลัสเตอร์ (Centroid)
- 2. ดูค่าใกล้ที่สุด (Single-Linkage)
- 3. ดูค่าไกลที่สุด (Complete-Linkage)
- 4. ดู Sum of square น้อยที่สุดของคลัสเตอร์ทั้งหมด (Ward)

**คำตอบ** ไม่มีคำตอบที่เหมาะสมที่สุด แล้วแต่ลักษณะของการใช้งาน (เลือกโดยการทดลอง)

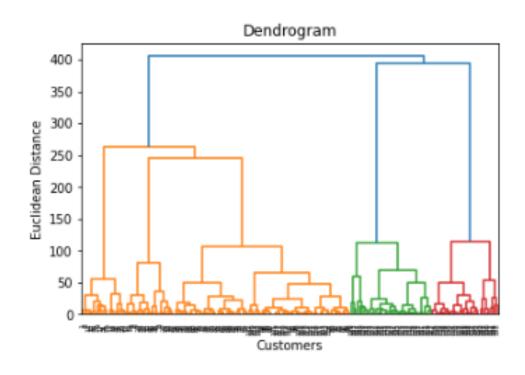


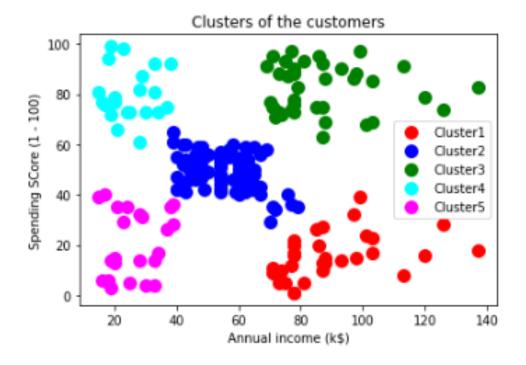
• อย่างไรก็ตามกราฟเชื่อมโยงในลักษณะนี้เรียกว่า Dendrogram มันมีหน้าที่เชื่อมต่อข้อมูลที่ คล้ายกันไว้ด้วยกัน เพื่อให้รองรับการอ่านเพื่อแบ่งคลัสเตอร์

			หนู 1	หนู 2	หนู 3	หนู 4	หนู 5	หนู 6
		รหัสพันธุกรรม 1	10	11	8	3	2	1
		รหัสพันธุกรรม 3	12	9	10	2.5	1.3	2
	รหัสพันธุกรรม 2	6	4	5	3	2.8	1	









### Outline

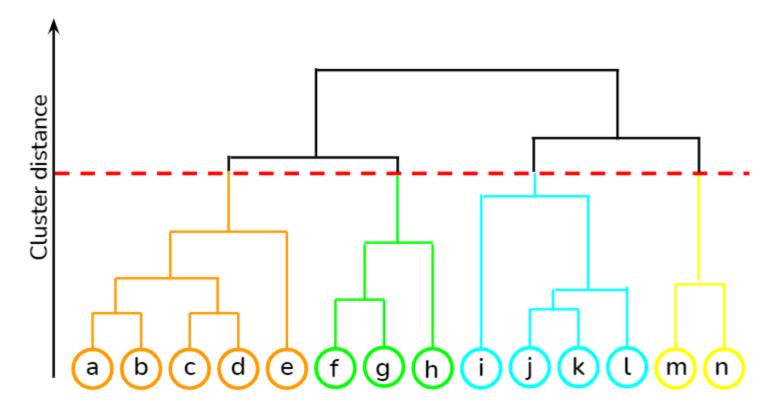


- Hierarchical Clustering
  - แนวคิดของ Hierarchical Clustering
  - Agglomerative
    - กระบวนการ
    - การอ่าน Dendrogram
  - Divisive
    - Minimum Spanning Tree
    - กระบวนการ

# การอ่าน Dendrogram



- เราสามารถเลือกกลุ่มข้อมูลตามจำนวนคลัสเตอร์ที่ต้องการได้ผ่านการอ่าน Dendrogram
  - แค่เลื่อนเส้นสีแดงขึ้นลง ให้ได้จำนวนคลัสเตอร์ที่ต้องการ ข้อมูลที่ถูกจัดกลุ่มโดยเส้นที่เชื่อมกันจะถือเป็นคลัสเตอร์เดียวกัน



### ตัวอย่างโค้ด



class sklearn.cluster.AgglomerativeClustering(n\_clusters=2, \*, affinity='euclidean', memory=None, connectivity
=None, compute\_full\_tree='auto', linkage='ward', distance\_threshold=None, compute\_distances=False)

#### Parameters::

#### n\_clusters: int or None, default=2

The number of clusters to find. It must be None if distance\_threshold is not None.

#### affinity: str or callable, default='euclidean'

Metric used to compute the linkage. Can be "euclidean", "l1", "l2", "manhattan", "cosine", or "precomputed". If linkage is "ward", only "euclidean" is accepted. If "precomputed", a distance matrix (instead of a similarity matrix) is needed as input for the fit method.

## ตัวอย่างโค้ด



class sklearn.cluster.AgglomerativeClustering(n\_clusters=2, \*, affinity='euclidean', memory=None, connectivity
=None, compute\_full\_tree='auto', linkage='ward', distance\_threshold=None, compute\_distances=False)

#### Attributes::

#### n\_clusters\_: int

The number of clusters found by the algorithm. If distance\_threshold=None, it will be equal to the given n\_clusters.

#### labels\_: ndarray of shape (n\_samples)

Cluster labels for each point.

#### n leaves : int

Number of leaves in the hierarchical tree.

#### n\_connected\_components\_: int

The estimated number of connected components in the graph.

New in version 0.21: n\_connected\_components\_ was added to replace n\_components\_.

#### n\_features\_in\_: int

Number of features seen during fit.

New in version 0.24.

### ตัวอย่างโค้ด



class sklearn.cluster.AgglomerativeClustering(n\_clusters=2, \*, affinity='euclidean', memory=None, connectivity
=None, compute\_full\_tree='auto', linkage='ward', distance\_threshold=None, compute\_distances=False)

### Outline

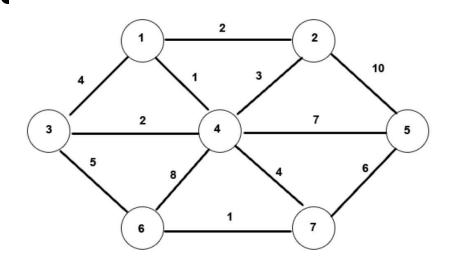


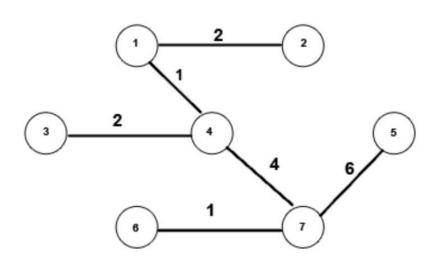
- Hierarchical Clustering
  - แนวคิดของ Hierarchical Clustering
  - Agglomerative
    - กระบวนการ
    - การอ่าน Dendrogram
  - Divisive
    - Minimum Spanning Tree (MST)
    - กระบวนการ

### Minimum Spanning Tree



- Minimum Spanning Tree หรือต้นไม้แผ่ทั่ว
- •คือการหากิ่งของต้นไม้ที่มีผลรวมน้อยที่สุด ที่สามารถเข้าถึงทุก node ได้



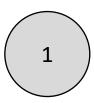




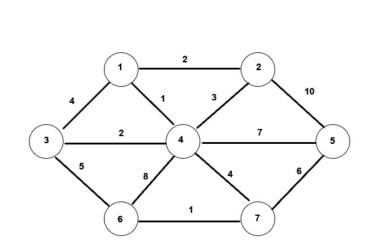
- •เป็นวิธีการที่นิยม เพราะเรียบง่ายและมีประสิทธิภาพ
- •หลักการง่ายมาก เพียงแค่ขีดเส้นที่มี cost น้อยที่สุดไปเรื่อย ๆ
- •หากเส้นใหนที่ขีดแล้วจะสร้าง loop ก็ข้ามเส้นนั้นไป
- •ทำวนไปเรื่อย ๆ จนทุก node เชื่อมต่อกัน



### 1. สร้าง node เท่าโจทย์











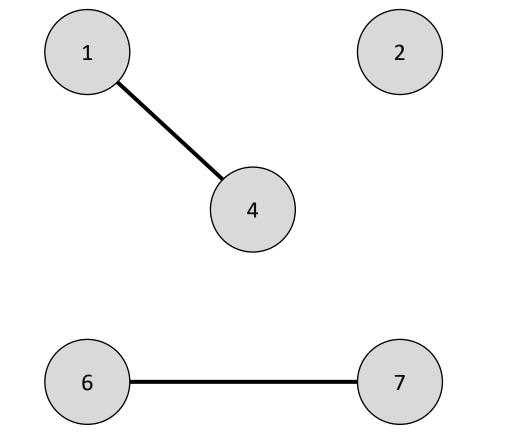


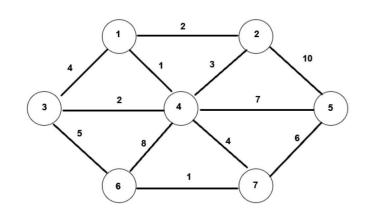






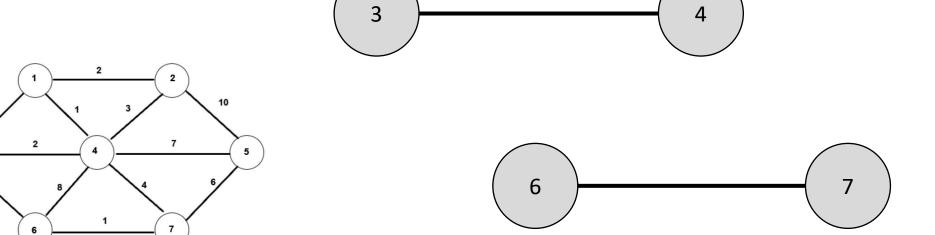
- 1. สร้าง node เท่าโจทย์
- 2. ขีดเส้นที่ cost น้อยสุด





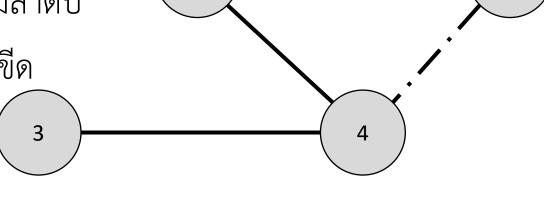


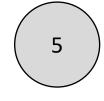
- 1. สร้าง node เท่าโจทย์
- 2. ขีดเส้นที่ cost น้อยสุด
- 3. ขีดเส้นที่ cost มากขึ้นตามลำดับ

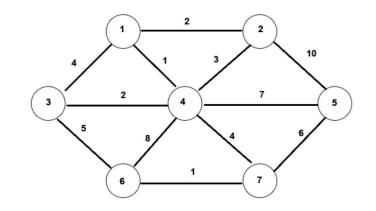


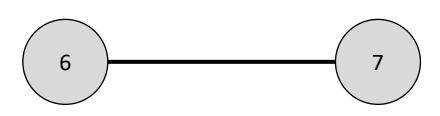


- 1. สร้าง node เท่าโจทย์
- 2. ขีดเส้นที่ cost น้อยสุด
- 3. ขีดเส้นที่ cost มากขึ้นตามลำดับ
- 4. ถ้าทำให้เกิด loop ไม่ต้องขีด







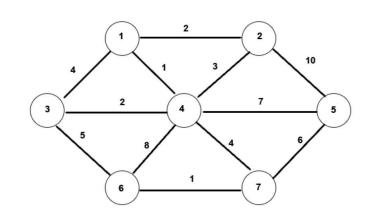


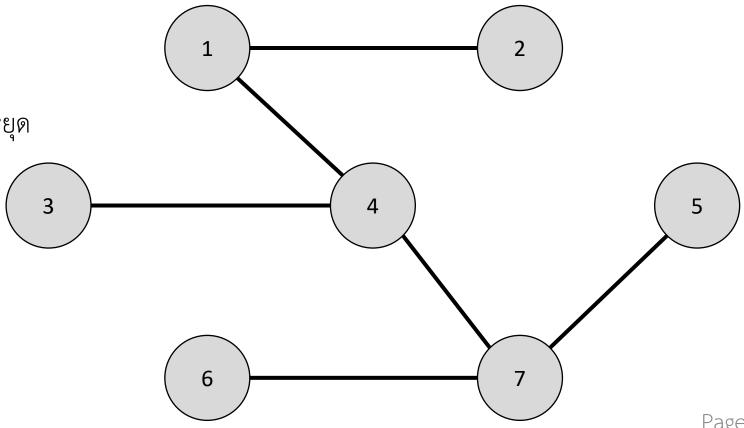


- 1. สร้าง node เท่าโจทย์
- 2. ขีดเส้นที่ cost น้อยสุด
- 3. ขีดเส้นที่ cost มากขึ้นตามลำดับ
- 4. ถ้าทำให้เกิด loop ไม่ต้องขีด
- 5. เมื่อทุก node เชื่อมกันหมดแล้วก็หยุด

สังเกตว่า มี 7 node จะมี 6 เส้นเชื่อม

MST จะมีจำนวนเส้นเชื่อม = จำนวน node - 1 เสมอ





### Outline



- Hierarchical Clustering
  - แนวคิดของ Hierarchical Clustering
  - Agglomerative
    - กระบวนการ
    - การอ่าน Dendrogram
  - Divisive
    - Minimum Spanning Tree
    - กระบวนการ

### Divisive Analysis



- มีชื่อเล่นว่า Diana
- ทำงานตรงข้ามกับ Agnes
- เริ่มจากกำหนดคลัสเตอร์จำนวนน้อย (1 คลัสเตอร์ ครอบคลุมข้อมูลทั้งหมด) แล้ว ค่อย ๆ แบ่งแยกคลัสเตอร์ที่ต่างกันมากที่สุดออกจากกัน
- เมื่อทำซ้ำไปเรื่อย ๆ คลัสเตอร์ก็จะมีขนาดเล็กลง และมีจำนวนของคลัสเตอร์จะ ค่อยๆ เพิ่มขึ้น
- •ในการแบ่งคลัสเตอร์ออกจากกัน มีวิธีที่หลากหลาย ในที่นี้จะเสนอวิธีการใช้ทฤษฎี กราฟ (Minimum spanning tree) คู่กับ Proximity (Distance)

### กระบวนการ Divisive Analysis



สมมติเรามีข้อมูลอยู่ชุดหนึ่ง มี proximity matrix ดังนี้



#### ขั้นตอนการทำงานของ Diana

1. สร้างกราฟที่มีขนาดเล็กที่สุด ที่เชื่อมต่อระหว่างข้อมูลทุกจุด (Minimum Spanning Tree)

สร้าง MST ได้ยังใง? Kruskal? ยังใง?

	A	В	C	D	Ε
Α	0				
В	1	0			
C	2	2	0		
D	2	4	1	0	
Ε	3	3	5	3	0

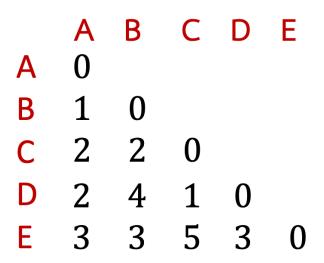


#### ขั้นตอนการทำงานของ Diana

- 1. สร้างกราฟที่มีขนาดเล็กที่สุด ที่เชื่อมต่อระหว่างข้อมูลทุกจุด (Minimum Spanning Tree)
  - เทคนิค เมทริกซ์มันดูยาก ทำให้ดูง่ายขึ้นก่อน

A -> E = 3 C -> D = 1

$$A \rightarrow B = 1$$
  $B \rightarrow C = 2$   $C \rightarrow E = 5$   $A \rightarrow C = 2$   $B \rightarrow D = 4$   $D \rightarrow E = 3$   $A \rightarrow D = 2$   $B \rightarrow E = 3$ 





- 1. สร้างกราฟที่มีขนาดเล็กที่สุด ที่เชื่อมต่อระหว่างข้อมูลทุกจุด (Minimum Spanning Tree)
  - เทคนิค เมทริกซ์มันดูยาก ทำให้ดูง่ายขึ้นก่อน
  - เรียงลำดับเลขน้อยไปมาก

$$A -> B = 1$$
  $B -> C = 2$   $B -> D = 4$ 

$$B -> C = 2$$

$$B -> D = 4$$

$$C -> D = 1$$
  $A -> E = 3$   $C -> E = 5$ 

$$A -> E = 3$$

$$C -> E = 5$$

$$A -> C = 2$$
  $D -> E = 3$ 

$$D -> E = 3$$

$$A -> D = 2$$
  $B -> E = 3$ 

$$B -> E = 3$$



- 1. สร้างกราฟที่มีขนาดเล็กที่สุด ที่เชื่อมต่อระหว่างข้อมูลทุกจุด (Minimum Spanning Tree)
  - เทคนิค เมทริกซ์มันดูยาก ทำให้ดูง่ายขึ้นก่อน
  - เรียงลำดับเลขน้อยไปมาก
  - สร้าง node ให้ครบ

$$A -> B = 1$$

$$B -> C = 2$$

$$A -> B = 1$$
  $B -> C = 2$   $B -> D = 4$ 

$$C -> D = 1$$

$$A -> E = 3$$

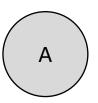
$$C -> D = 1$$
  $A -> E = 3$   $C -> E = 5$ 

$$A -> C = 2$$
  $D -> E = 3$ 

$$D -> E = 3$$

$$A -> D = 2$$
  $B -> E = 3$ 

$$B -> E = 3$$











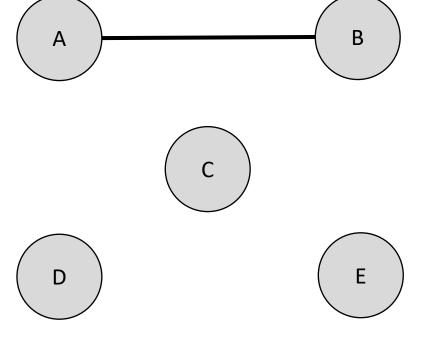


- 1. สร้างกราฟที่มีขนาดเล็กที่สุด ที่เชื่อมต่อระหว่างข้อมูลทุกจุด (Minimum Spanning Tree)
  - เทคนิค เมทริกซ์มันดุยาก ทำให้ดูง่ายขึ้นก่อน
  - เรียงลำดับเลขน้อยไปมาก
  - สร้าง node ให้ครบ
  - ขีดเส้นไล่ตามลำดับไป โดยอ้างกฎ Kruskal

$$A \rightarrow B = 1$$
  $B \rightarrow C = 2$   $B \rightarrow D = 4$   $C \rightarrow D = 1$   $A \rightarrow E = 3$   $C \rightarrow E = 5$ 

$$A -> C = 2$$
  $D -> E = 3$ 

$$A -> D = 2$$
  $B -> E = 3$ 





- 1. สร้างกราฟที่มีขนาดเล็กที่สุด ที่เชื่อมต่อระหว่างข้อมูลทุกจุด (Minimum Spanning Tree)
  - เทคนิค เมทริกซ์มันดุยาก ทำให้ดูง่ายขึ้นก่อน
  - เรียงลำดับเลขน้อยไปมาก
  - สร้าง node ให้ครบ
  - ขีดเส้นไล่ตามลำดับไป โดยอ้างกฎ Kruskal

$$A -> B = 1$$

$$B -> C = 2$$

$$A -> B = 1$$
  $B -> C = 2$   $B -> D = 4$ 

$$C -> D = 1$$

$$A -> E = 3$$

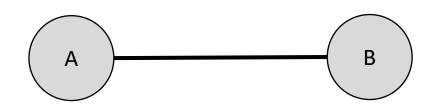
$$C -> D = 1$$
  $A -> E = 3$   $C -> E = 5$ 

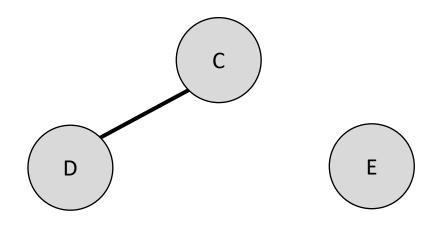
$$A -> C = 2$$
  $D -> E = 3$ 

$$D -> E = 3$$

$$A -> D = 2$$
  $B -> E = 3$ 

$$B -> E = 3$$



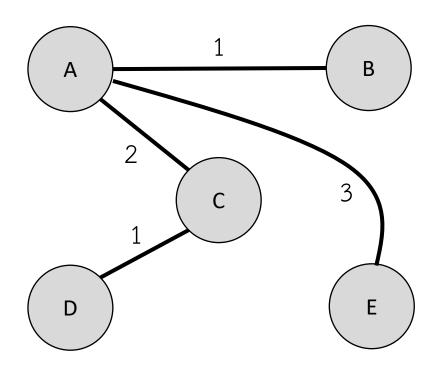




- 1. สร้างกราฟที่มีขนาดเล็กที่สุด ที่เชื่อมต่อระหว่างข้อมูลทุกจุด (Minimum Spanning Tree)
  - เทคนิค เมทริกซ์มันดูยาก ทำให้ดูง่ายขึ้นก่อน
  - เรียงลำดับเลขน้อยไปมาก
  - สร้าง node ให้ครบ
  - ขีดเส้นไล่ตามลำดับไป โดยอ้างกฎ Kruskal

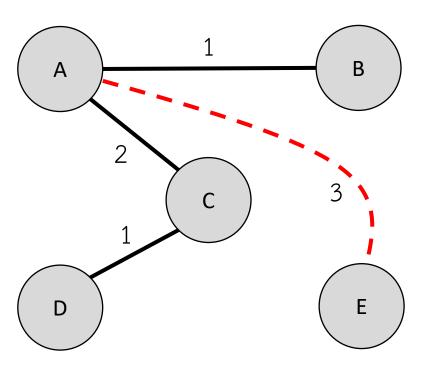
$$A \rightarrow B = 1$$
  $B \rightarrow C = 2$   $B \rightarrow D = 4$   $C \rightarrow D = 1$   $A \rightarrow E = 3$   $C \rightarrow E = 5$   $A \rightarrow C = 2$   $D \rightarrow E = 3$ 

$$A -> D = 2$$
  $B -> E = 3$ 



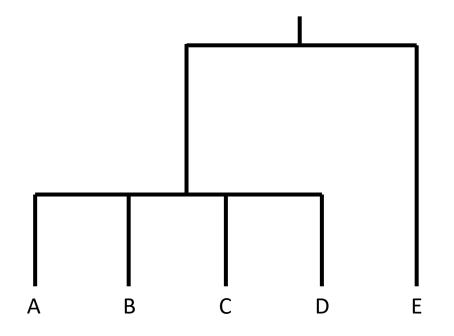


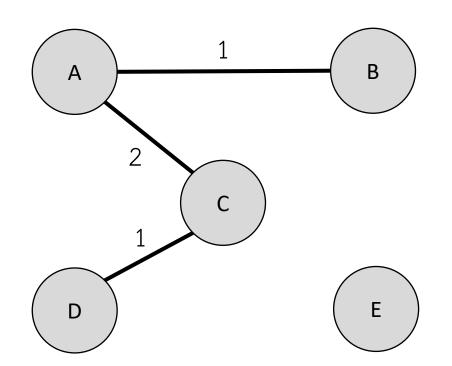
- 1. สร้างกราฟที่มีขนาดเล็กที่สุด ที่เชื่อมต่อระหว่างข้อมูลทุกจุด (Minimum Spanning Tree)
- 2. ตัดเส้นเชื่อมที่มี cost สูงสุดออก





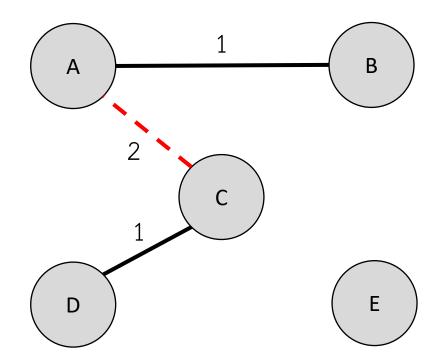
- สร้างกราฟที่มีขนาดเล็กที่สุด ที่เชื่อมต่อระหว่างข้อมูลทุกจุด (Minimum Spanning Tree)
- 2. ตัดเส้นเชื่อมที่มี cost สูงสุดออก ตอนนี้ข้อมูลจะถูกแยกเป็น 2 คลัสเตอร์ (วาด Dendrogram)





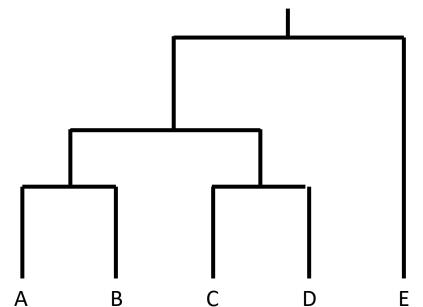


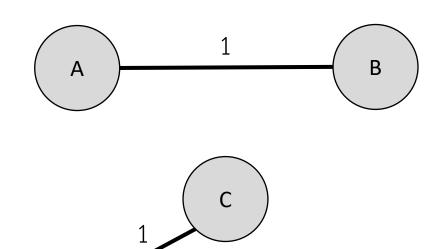
- 1. สร้างกราฟที่มีขนาดเล็กที่สุด ที่เชื่อมต่อระหว่างข้อมูลทุกจุด (Minimum Spanning Tree)
- 2. ตัดเส้นเชื่อมที่มี cost สูงสุดออก
- ทำข้อ 2 ซ้ำ จนกว่าจะได้จำนวนคลัสเตอร์ที่ต้องการ (หรือแบ่งไม่ได้อีก)





- 1. สร้างกราฟที่มีขนาดเล็กที่สุด ที่เชื่อมต่อระหว่างข้อมูลทุกจุด (Minimum Spanning Tree)
- 2. ตัดเส้นเชื่อมที่มี cost สูงสุดออก
- 3. ทำข้อ 2 ซ้ำ จนกว่าจะได้จำนวนคลัสเตอร์ที่ต้องการ (DD)





#### Conclusion



- Hierarchical Clustering
  - แนวคิดของ Hierarchical Clustering
  - Agglomerative
    - กระบวนการ
    - การอ่าน Dendrogram
  - Divisive
    - Minimum Spanning Tree
    - กระบวนการ