K-Means Kumeleme Metodu

Yapay Ogrenim (Machine Learning) alaninda populer kumeleme algoritmalarindan biri k-means algoritmasidir. K-means kumelemesinde kac tane kumenin olmasi gerektigi bastan tanimlanir (k parametresi ile), algoritma bunu kendisi bulmaz. Metotun geri kalani basit - 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 (ya da kume atamalarini) rasgele bir sekilde secmektir. 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, SVD kullanarak grafige bakmak (bu yazinin sonunda anlatiliyor), vs.

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.

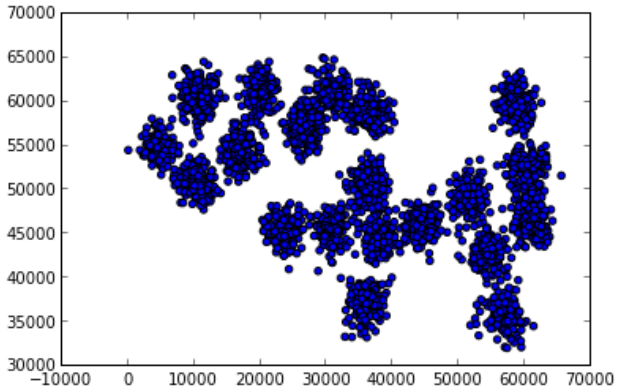
EM'in belli sartlarda yaklasiksalligi icin matematiksel ispat var. K-Means akilli tahmin yaparak (heuristic) calisan bir algoritma olarak biliniyor. Sonuca yaklasmasi bu sebeple garanti degildir, ama daha once belirttigimiz gibi pratikte faydalidir. Bir suru alternatif kumeleme yontemi olmasina ragmen 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

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

```
(3000, 2)
```

```
plt.scatter(data[:,0],data[:,1])
plt.savefig('kmeans_1.png')
```



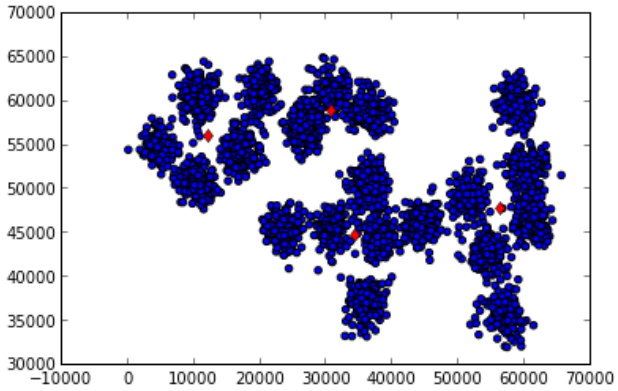

```
def euc_to_clusters(x,y):
    return np.sqrt(np.sum((x-y)**2, axis=1))

class KMeans():
    def __init__(self,n_clusters,n_iter=10):
        self.k = n_clusters
        self.iter = n_iter
    def fit(self,X):
        # her veri noktasi icin rasgele kume merkezi ata
        labels = [random.randint(0,self.k-1) for i in range(X.shape[0])]
        self.labels_ = np.array(labels)
        self.centers_ = np.zeros((self.k,X.shape[1]))
        for i in range(self.iter):
            # yeni kume merkezleri uret
            for j in range(self.k):
                # eger kume j icinde hic nokta yoksa, ortalama (mean)
                # hesabi yapma, cunku o zaman nan degeri geliyor, ve
                # hesabin geri kalani bozuluyor.
                if len(X[self.labels_ == j]) == 0: continue
                center = np.mean(X[self.labels_ == j],axis=0)
                self.centers_[j,:] = center
            # her nokta icin kume merkezlerine gore kume atamasi yap
            self.labels_ = []
            for point in X:
                c = np.argmin(euc_to_clusters(self.centers_, point))
                self.labels_.append(int(c))

            self.labels_ = np.array(self.labels_)
```

```
cf = KMeans(k=5,iter=20)
cf.fit(data)
print cf.labels_
```

```
[3 3 3 ..., 2 2 2]
```

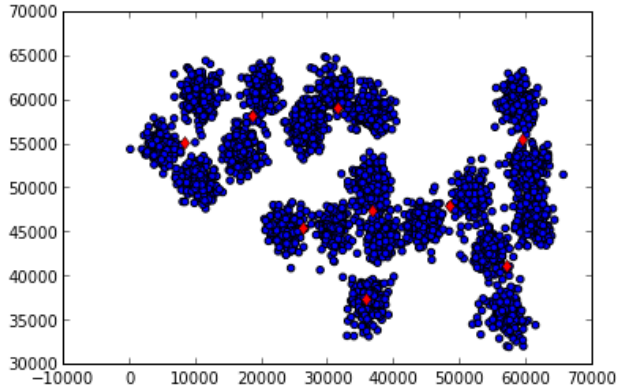
Ustteki sonucun icinde iki ana vektor var, bu vektorlerden birincisi icinde 2,0, gibi sayilar goruluyor, bu sayilar her noktaya tekabul eden kume atamalari. Ikinci vektor icinde iki boyutlu k tane vektor var, bu vektorler de her kumenin merkez noktasi. Merkez noktalarini ham veri uzerinde grafiklersek (kirmizi noktalar)

```
plt.scatter(data[:,0],data[:,1])
plt.hold(True)
plt.ylim([30000,70000])
for x in cf.centers_: plt.plot(x[0],x[1],'rd')
plt.savefig('kmeans_2.png')
```



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

```
cf = KMeans(k=10,iter=30)
cf.fit(data)
plt.scatter(data[:,0],data[:,1])
plt.ylim([30000,70000])
plt.hold(True)
for x in cf.centers_: plt.plot(x[0],x[1],'rd')
plt.savefig('kmeans_3.png')
```



Kategorik ve Numerik Iceren Karisik Veriler

Bazen verimiz hem kategorik hem de numerik degerler iceriyor olabilir, KMeans yeni kume merkezlerini hesaplarken ortalama operasyonu kullandigi icin sadece numerik veriler uzerinde calisabilir (kategorik verilerin nasil ortalamasini alalim ki?). Bu durumda ne yapacagiz?

Bir secenek su olabilir, kategorik her kolonu her degisik degeri bir yeni kolona tekabul edecek sekilde saga dogru acariz, ve o degerin yeni kolonuna 1 degeri digerlerine 0 degeri veririz. Bu kodlamaya 1-in-q kodlamasi, 1-in-n kodlamasi, ya da Ingilizce one-hot encoding ismi veriliyor.

Ornek olarak UCI veri bankasindan Avustralya Kredi Verisine bakalim:

```
import pandas as pd
df = pd.read_csv("crx.csv")
print df[:2]
```

```
  A1     A2    A3 A4 A5 A6 A7    A8 A9 A10  A11 A12 A13    A14  A15 A16
0  b  30.83  0.00  u  g  w  v  1.25  t   t    1   f   g  00202    0   +
1  a  58.67  4.46  u  g  q  h  3.04  t   t    6   f   g  00043  560   +
```

Bu veride A1, A2, gibi kolon isimleri var, kategorik olanlarda 'g','w' gibi degerler goruluyor. Bu kolonlari degistirmek icin

```
from sklearn.feature_extraction import DictVectorizer
def one_hot_dataframe(data, cols):
    vec = DictVectorizer()
    mkdict = lambda row: dict((col, row[col]) for col in cols)
    vecData = pd.DataFrame(vec.fit_transform(data[cols].to_dict(outtype='records')).to
    vecData.columns = vec.get_feature_names()
    vecData.index = data.index
    data = data.drop(cols, axis=1)
    data = data.join(vecData)
    return data

df2 = one_hot_dataframe(df,['A1','A4','A5','A6','A7','A9','A10','A12','A13'])
print df2.ix[0]
```

```
A2       30.83
A3           0
A8        1.25
A11          1
A14      00202
A15          0
A16          +
A10=f        0
A10=t        1
A12=f        1
A12=t        0
A13=g        1
A13=p        0
A13=s        0
A1=?         0
A1=a         0
A1=b         1
A4=?         0
A4=l         0
A4=u         1
A4=y         0
A5=?         0
A5=g         1
A5=gg        0
A5=p         0
A6=?         0
A6=aa        0
A6=c         0
A6=cc        0
A6=d         0
A6=e         0
A6=ff        0
A6=i         0
A6=j         0
A6=k         0
A6=m         0
A6=q         0
A6=r         0
A6=w         1
A6=x         0
A7=?         0
A7=bb        0
A7=dd        0
A7=ff        0
A7=h         0
A7=j         0
A7=n         0
A7=o         0
A7=v         1
A7=z         0
A9=f         0
A9=t         1
Name: 0, Length: 52, dtype: object
```

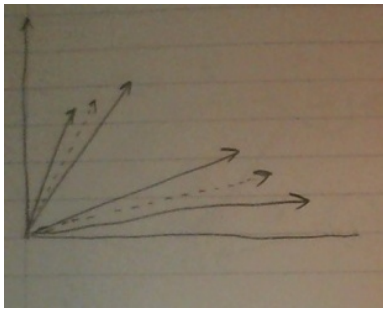
Islem sonucunda A12=f mesela icin 1 verilmis, ama A12=t (ve diger her mumkun

deger icin yani) 0 degeri verilmis (sadece bu tek satir icin). Boylece kategorik veriyi sayisal hale cevirmis olduk.

Fakat isimiz bitti mi? Hayir. Simdi KMeans bu tur veriyle acaba duzgun calisir miydi onu kendimize soralim. Icinde pek cok 0, bazen 1 iceren veri satirlari arasinda uzaklik hesabi yapmak ise yarar mi?

Yapay Ogrenim literaturunde bu tur veriler uzerinde kosinus benzerligi (cosine similarity) kullanmak daha yaygindir. Bu konuyu *SVD, Toplu Tavsiye* yazisinda daha iyi gorebilirsiniz. Kosinus benzerligi bize 0 ile 1 arasinda bir deger dondurur. Benzerligi uzakliga cevirmek icin basit bir sekilde 1-benzerlik formulunu kullanabiliriz.

Bir cozum su olabilir: normal numerik degerler icin Oklitsel, kategorik 1-hot kodlanmis kolonlar icin Kosinus uzakligi kullanilir, bu uzakliklar bazi agirliklar uzerinden birlestirilir, ve KMeans bunun ile is yapar. Teknik olarak imkansiz degil; KMeans merkez bulmak icin ortalama alir ve Kosinus uzakliginin verdigi aradaki aci, ortalama alma islemi ile uyumludur. Problem sudur, iki uzakligi birlestiren agirliklar ne olmalidir? Bu yontemi denedigimizde bu agirliklarin ne secildiginin cok onemli oldugunu farkettik, ve kumeleme gibi izlenmeyen (unsupervised) bir yontemde bu hiperparametreleri deneme / yanilma yontemi ile bulma sansimiz yoktur.



Bu durumda SVD kullanarak tum matrisi azaltmak ve onun uzerinde pur Oklitsel uzakliklar kullanmak bir secenektir.

Numerik ve kategorik karisik verileri iceren veriyi kumelemek icin tavsiye edilen yontem sudur:

1) Kategorik veriler uzerinde 1-hot kodlama yap.

2) hem kolonlari hem de satirlari normalize et

3) Tum matris uzerinde cok kucuk olmayan bir k ile SVD al (mesela alttaki veri seti icin once 10)

4) S vektorune bak, ortalamadan buyuk olan kac tane hucre oldugunu gor

5) Bu sayi yeni k olacak, SVD'yi tekrar bu k ile islet.

6) Elde edilen U uzerinde kumeleme yap

```
from sklearn.preprocessing import normalize
import scipy.sparse.linalg as slin
import scipy.linalg as lin
import pandas as pd

df = pd.read_csv("crx.csv",sep=',',na_values=['?'])
df = df.dropna()

df['A16'] = df['A16'].str.replace('+','1')
df['A16'] = df['A16'].str.replace('-','0')
df['A16'] = df['A16'].astype(int)

df2 = one_hot_dataframe(df,['A1','A4','A5','A6','A7','A9','A10','A12','A13'])
df2 = df2.drop('A16',axis=1)
df2 = np.array(df2)
df3 = df2.copy()
df3 = normalize(df3, norm='l2', axis=0)
df3 = normalize(df3, norm='l2', axis=1)

u,s,v=slin.svds(df3,k=10)
print s
```

```
[  4.45826083   4.49654025   4.68382638   4.93391665   4.98604314
   5.153349     5.63521289   5.70490968   6.68558115  14.81145675]
```

Bakiyoruz, averajdan yuksek olan en buyuk sadece iki kolon var. SVD literaturunde bu kolonlarin matrisin "enerjisini" icerdigi soylenir, hakikaten eger SVD ayristirma sonrasi bu ilk kolona bu kadar onem verdiyse, onlar onemli olmalidirlar. Simdi SVD'yi $k = 2$ ile tekrar isletiyoruz,

```
u,s,v=slin.svds(df3,k=2)
print s
```

```
[  6.68558115  14.81145675]
```

Simdi kontrol icin kenara koydugumuz bilinen etiketler uzerinden kumeleme basarimizi olcecegiz,

```
clf = KMeans(n_clusters=2)
clf.fit(u)
labels_true = np.array(df['A16'])
labels_pred = clf.labels_
match = np.sum((labels_true == labels_pred).astype(int))
print float(match)/len(df), 1-float(match)/len(df)
```

```
0.217457886677 0.782542113323
```

Basari yuzde %78. Cok iyi. Ustteki ornek kume sayisinin (dikkat SVD k'sinden farkli) bilindigini farz etti. Kume sayisinin bilinmedigi durumlarda bile isleyen bir kumeleme algoritmasini baska bir yazida gorecegiz.

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

[3] https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Statlog+%28Australian+Credit+Approval%29