Факултет техничких наука, Универзитет у Новом Саду

Мастер академске студије Рачунарство и аутоматика

Рачунарство високих перформанси у информационом инжењерингу

Основи кластеризације

(материјали за предавања)

Садржај

- 1. Кластеризација
- 2. Метод средина̂
- 3. Хијерархијска кластеризација
- 4. Густинска кластеризација
- 5. Извори и литература

Кластеризација

кластер

група међусобно сличних (блиских) ентитета клика, грозд, рој, јато

ентитети из истог кластера начелно су међусобно сличнији (блискији) него што су слични (блиски) ентитетима из других кластера

кластеризација

поступак распоређивања посматраних ентитета у кластере распоређивање ентитета на основу њихових карактеристика

Кластеризација

```
дескриптивни поступак
ненадгледано учење
истражна анализа података
кластеризација по врсти ентитета
кластеризација појава
```

формирање група појава на основу вредности обележја тих појава кластеризација обележја

Скупови података коришћени у примерима

```
скуп података abalon
  подаци о абалонима с Тасманије (Аустралија)
  4177 записа
  9 обележја
     пол, дужина, пречник, висина, различите тежине и број прстенова
  датотека abalone.data
     Abalone Data Set (од 1. 12. 1995)
        https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Abalone
          (преузето 13. 4. 2021)
     UCI Machine Learning Repository
        Dua, D. and Graff, C. (2019). UCI Machine Learning Repository
        [http://archive.ics.uci.edu/ml]. Irvine, CA: University of California, School of
        Information and Computer Science.
```

Скупови података коришћени у примерима

скуп података abalon – припрема

```
# install.packages("tidyverse")
   library(readr)
   library(dplyr)
   library(magrittr)
 5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
                                                                                  УЛАЗ
```

Скупови података коришћени у примерима

скуп података abalon – припрема

```
abalon <- read csv("abalone.data",</pre>
 1
2
3
                         col names=c("sex", "length", "diameter",
                                       "height", "weight_whole",
 4
5
6
7
                                       "weight_shucked", "weight_viscera",
                                       "weight_shell", "rings"),
                         col_types="fdddddddi")
   abalon %<>%
 9
     mutate(id=1:nrow(abalon), age=rings + 1.5) %>%
10
     select(id, everything())
11
12
   set.seed(4)
13
14
15
16
17
18
19
20
                                                                            УЛА3
```

Садржај

- 1. Кластеризација
- 2. Метод средина̂
- 3. Хијерархијска кластеризација
- 4. Густинска кластеризација
- 5. Извори и литература

Метод средина̂

```
метод k средина енгл. k-Means
```

формирање партиције скупа ентитета која обухвата k подскупова сваки подскуп представља један кластер

сваки подскуп је представљен једном средином (центроидом) ентитет је члан кластера чијој је средини најсличнији (најближи)

k је параметар чију вредност треба унапред задати k одговара броју кластера

Метод средина̂

метод *k* средина̂

разноликост унутар кластера треба да буде што мања унутаркластерска варијабилност за кластер C

$$W(C) = \frac{1}{|C|} \sum_{i,j \in C} \sum_{l=1}^{p} (x_{il} - x_{jl})^{2}$$

р је број карактеристика (број обележја у случају кластеризације појава)

укупна унутаркластерска варијабилност за скуп кластера K

$$\sum_{C \in K} \frac{1}{|C|} \sum_{i, i \in C} \sum_{l=1}^{p} (x_{il} - x_{jl})^{2}$$

Метод средина̂

метод k средина — формирање кластера насумично распоредити ентитете у k почетних кластера побољшавати квалитет k кластера за сваки кластер одредити средину (центроид) ентитете распоредити у оне кластере чије су им средине најсличније (најближе) еуклидска удаљеност као мера различитости понављати одређивање средина и распоређивање ентитета докле год долази до смањења укупне унутаркластерске варијабилности за k кластера

Метод средина̂

```
метод k средина — мањкавости могућа конвергенција према локалном оптимуму осетљивост на почетни распоред по кластерима могуће размотрити већи број почетних стања осетљивост на скале карактеристика могуће спровести центрирање и скалирање потребно одредити број кластера k постоје помоћни поступци за испитивање погодности одређеног броја кластера могуће је увести кориговани критеријум завршетка ограничити број итерација
```

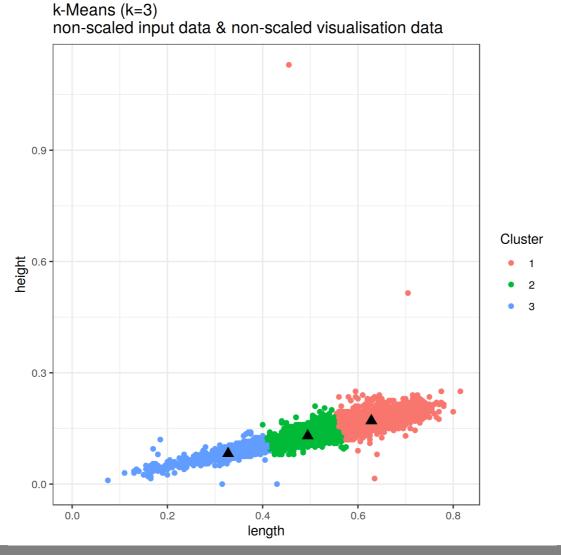
Метод средина̂

```
abalon.km <- abalon %>%
 1
2
3
     select(length, height)
 4
5
6
   k < -3
   km <- abalon.km %>%
     select(length, height) %>%
 8
        kmeans(centers=k)
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
                                                                              УЛАЗ
```

Метод средина̂

```
> tail(km$cluster, 20)
 > km$centers
    length
            height
 0.6281112 0.17082029
 0.4945503 0.12985117
 0.3274228 0.08214094
> km$withinss
[1] 5.960992 3.350221 3.563362
```

Метод средина̂



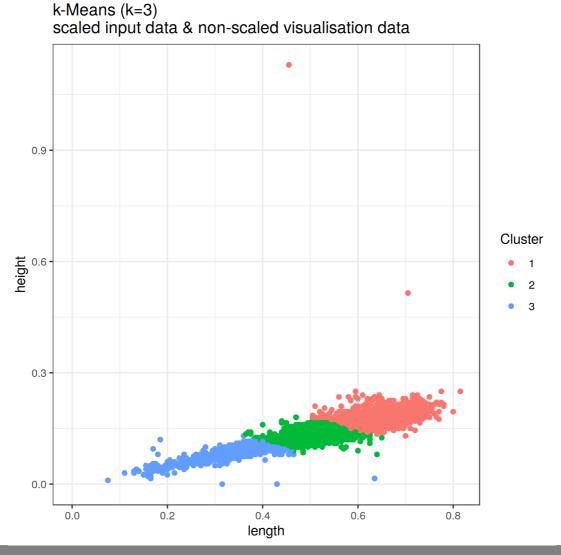
Метод средина̂

```
abalon.km <- abalon %>%
 2
3
     select(length, height)
   k < -3
   km.skal <- abalon.km %>%
     select(length, height) %>%
 8
     scale(center=T, scale=T) %>%
 9
     kmeans(centers=k)
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
                                                                          УЛАЗ
```

Метод средина̂

```
> tail(km.skal$cluster, 20)
 [1] 2 2 2 1 1 3 3 3 3 2 2 2 2 2 2 1 2 1 1 1
> km.skal$centers
                height
     length
  0.9000298 0.8700491
 -0.1245050 -0.1909469
 -1.5508725 -1.3529666
> km.skal$withinss
[1] 1209.4235 519.2548 464.3167
                                                                  КОНЗОЛА
```

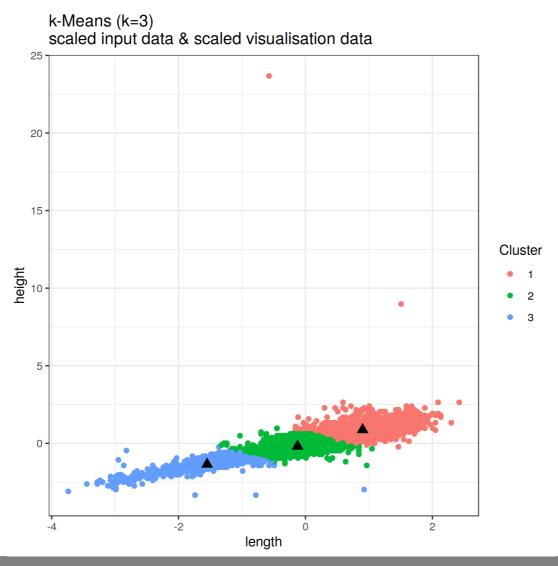
Метод средина̂



Метод срединâ

```
abalon.km.skal <- abalon.km %>%
     select(length, height) %>%
     scale(center=T, scale=T) %>%
     as.data.frame()
 5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
                                                                              УЛАЗ
```

Метод средина̂



Садржај

- 1. Кластеризација
- 2. Метод средина̂
- 3. Хијерархијска кластеризација
- 4. Густинска кластеризација
- 5. Извори и литература

Хијерархијска кластеризација

```
формирање кластера који су хијерархијски организовани кластер на дну хијерархије обухвата један ентитет кластер који није на дну хијерархије обухвата све ентитете својих подређених кластера
```

из хијерархије начелно могуће издвајати различите бројеве кластера

за формирање хијерархије кластера није неопходно задати број кластера представа хијерархије кластера кроз дендограм две варијанте хијерархијске кластеризације

```
кроз поступак спајања (енгл. agglomerative) agnes (agglomerative nesting) кроз поступак дељења (енгл. divisive) diana (divisive analysis)
```

Хијерархијска кластеризација

хијерархијска кластеризација кроз спајање – формирање кластера

за сваки ентитет формирати засебан кластер спојити два најсличнија (најближа) кластера

сличност (блискост) утврдити на основу изабране мере различитости спајање најсличнијих кластера понављати док се не оствари постојање само једног кластера

на основу извршених спајања могуће је формирати одговарајуће стабло и представити га кроз дендограм

сваки чвор одговара једном кластеру формираном током кластеризације корен одговара кластеру са свим ентитетима лист одговара неком од могућих кластера са једним ентитетом

Хијерархијска кластеризација

хијерархијска кластеризација кроз спајање – формирање кластера

```
повезаност (енгл. linkage)
мера различитости између две групе ентитета
често коришћене врсте повезаности
појединачна (енгл. single)
одговара најмањој вредности различитости уоченој између нека два ентитета из различитих група
средња (енгл. average)
одговара средњој вредности различитости уочених између ентитета из различитих група
потпуна (енгл. complete)
одговара највећој вредности различитости уоченој између нека два ентитета из различитих група
```

Хијерархијска кластеризација

хијерархијска кластеризација кроз спајање – формирање кластера

```
мере различитости између ентитета
мере засноване на удаљености
еуклидска удаљеност
Менхетн удаљеност
Махаланобисова удаљеност
...
```

мере засноване на корелацији

Хијерархијска кластеризација

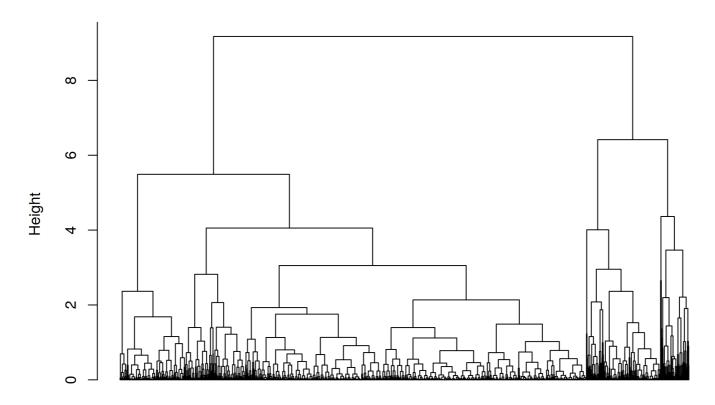
```
abalon.hc <- abalon %>%
 2
3
      filter(sex=="M") %>%
      select(weight_whole, rings)
 4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
                                                                                    УЛАЗ
```

Хијерархијска кластеризација

```
hc.cmp.euc <- hclust(dist(scale(abalon.hc, center=T, scale=T),</pre>
 1
2
3
                              method="euclidean"), method="complete")
   hc.cmp.euc.clust <- cutree(hc.cmp.euc, k=3)</pre>
 5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
                                                                                   УЛАЗ
```

Хијерархијска кластеризација пример

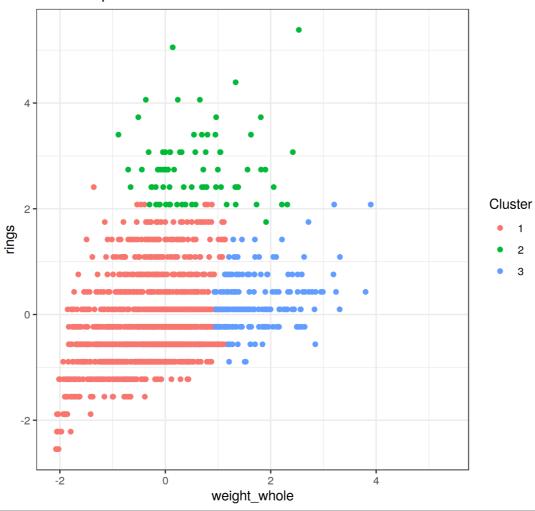
Cluster Dendrogram



dist(scale(abalon.hc, center = T, scale = T), method = "euclidean") hclust (*, "complete")

Хијерархијска кластеризација пример

Hierarchical (link=complete, dist=Euclidean) scaled input data & scaled visualisation data

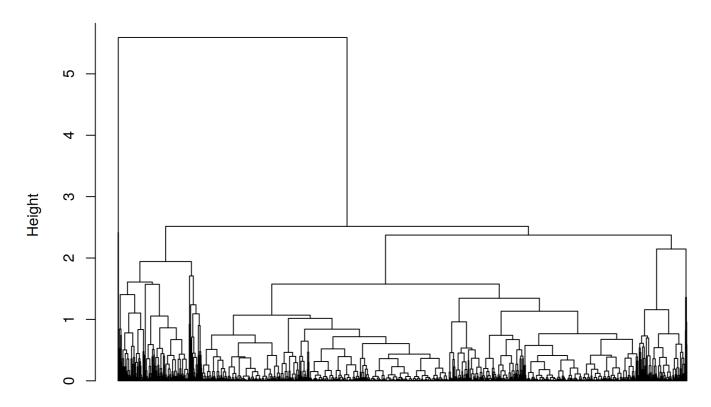


Хијерархијска кластеризација

```
hc.avg.euc <- hclust(dist(scale(abalon.hc, center=T, scale=T),</pre>
 1
2
3
                              method="euclidean"), method="average")
   hc.avg.euc.clust <- cutree(hc.avg.euc, k=3)</pre>
 5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
                                                                                   УЛАЗ
```

Хијерархијска кластеризација пример

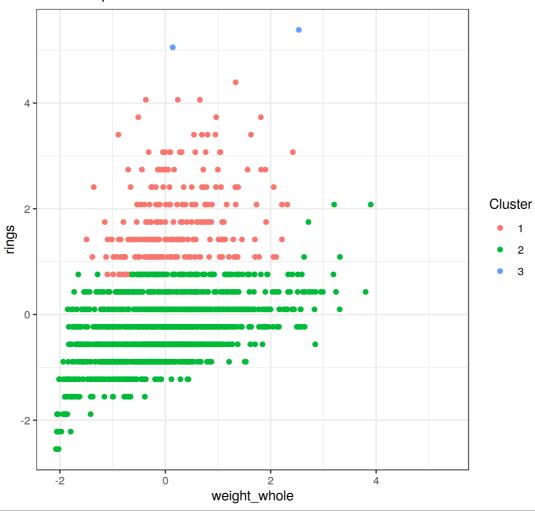
Cluster Dendrogram



dist(scale(abalon.hc, center = T, scale = T), method = "euclidean") hclust (*, "average")

Хијерархијска кластеризација пример

Hierarchical (link=average, dist=Euclidean) scaled input data & scaled visualisation data

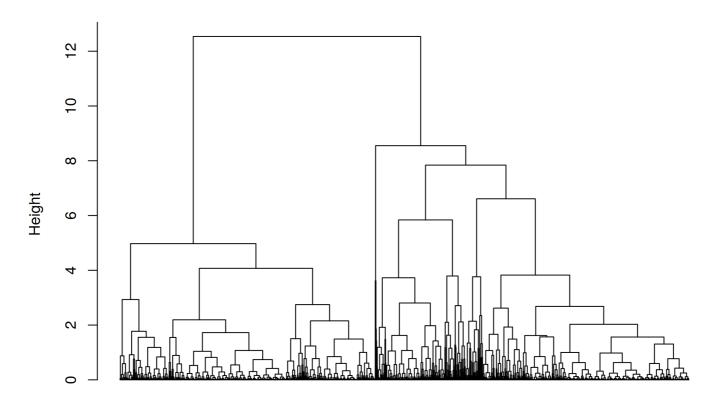


Хијерархијска кластеризација

```
hc.cmp.man <- hclust(dist(scale(abalon.hc, center=T, scale=T),</pre>
 1
2
3
                                   method="manhattan"), method="complete")
   hc.cmp.man.clust <- cutree(hc.cmp.man, k=3)</pre>
 5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
                                                                                   УЛАЗ
```

Хијерархијска кластеризација пример

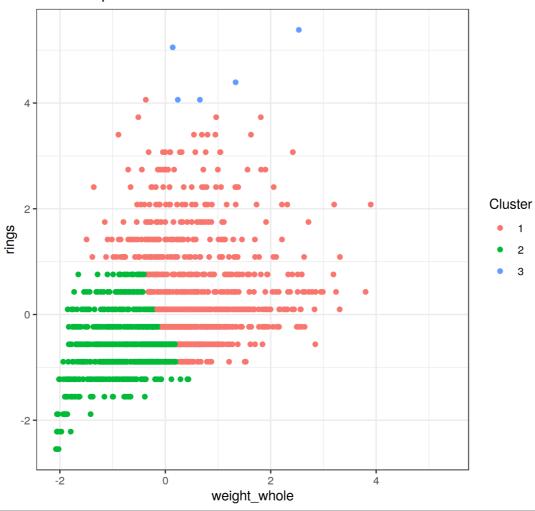
Cluster Dendrogram



dist(scale(abalon.hc, center = T, scale = T), method = "manhattan") hclust (*, "complete")

Хијерархијска кластеризација пример

Hierarchical (link=complete, dist=Manhattan) scaled input data & scaled visualisation data



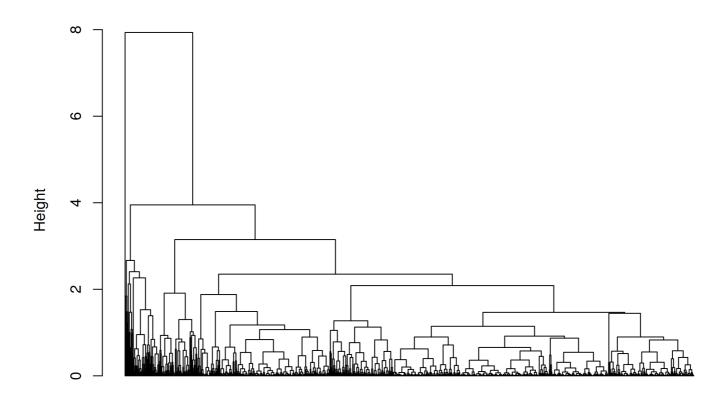
Хијерархијска кластеризација

```
hc.avg.man <- hclust(dist(scale(abalon.hc, center=T, scale=T),</pre>
 1
2
3
                                   method="manhattan"), method="average")
   hc.avg.man.clust <- cutree(hc.avg.man, k=3)</pre>
 5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
                                                                                   УЛАЗ
```

Хијерархијска кластеризација

Хијерархијска кластеризација пример

Cluster Dendrogram

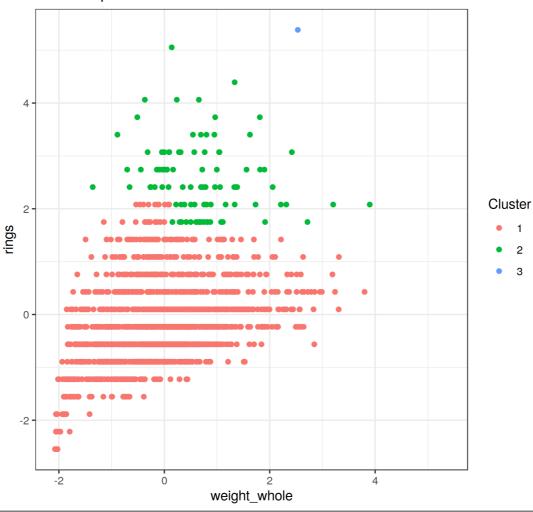


dist(scale(abalon.hc, center = T, scale = T), method = "manhattan") hclust (*, "average")

Хијерархијска кластеризација

Хијерархијска кластеризација пример

Hierarchical (link=average, dist=Manhattan) scaled input data & scaled visualisation data



Садржај

- 1. Кластеризација
- 2. Метод средина̂
- 3. Хијерархијска кластеризација
- 4. Густинска кластеризација
- 5. Извори и литература

Густинска кластеризација

```
кластер као густо попуњен повезани део простора
алгоритам DBSCAN (Density-based spatial clustering of applications
with noise)
  ентитети су у истом кластеру ако су међусобно густински достижни
     густина се посматра у є околини неког ентитета
     битно је да ли у постоји одређени минимални број ентитета у є околини
     посматраног ентитета
     три врсте ентитета
       основни ентитет
          ентитет у чијој се є околини налази барем минимални број ентитета
       гранични ентитет
          није основни ентитет али јесте у є околини основног ентитета
       ШУМ
          није ни основни ни гранични ентитет
  параметри
     ε као величина околине (позитиван реалан број)
     минимални број ентитета за ε околину (позитиван цео број)
```

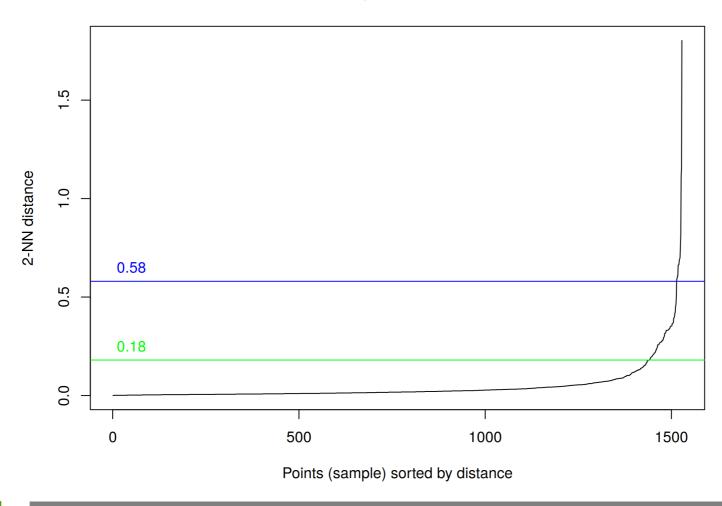
Густинска кластеризација

пример

```
library(dbscan)
   abalon.dbs <- abalon %>%
      filter(sex=="M") %>%
      select(weight_whole, rings)
 5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
                                                                                УЛАЗ
```

Густинска кластеризација пример

k-Nearest Neighbour Distances Plot



Густинска кластеризација

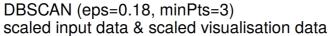
пример

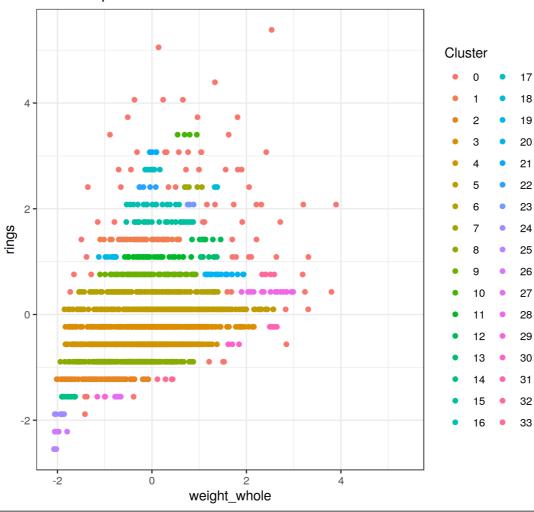
```
dbs.low <- dbscan(scale(abalon.dbs, center=T, scale=T),</pre>
 1
2
3
                           eps=0.18, minPts=3)
 4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
                                                                                        УЛАЗ
```

2022/2023

Густинска кластеризација

пример





Густинска кластеризација

пример

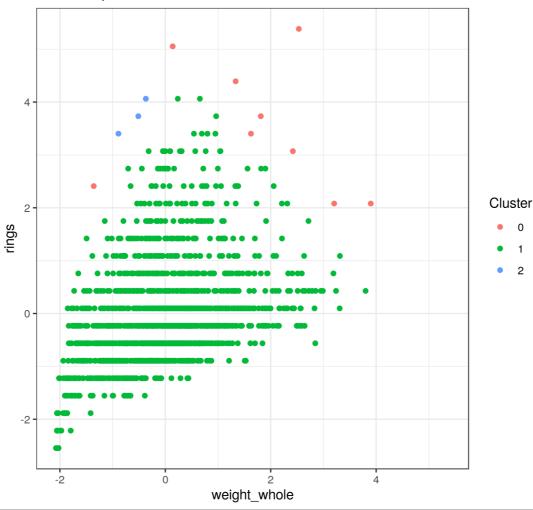
```
dbs.high <- dbscan(scale(abalon.dbs, center=T, scale=T),</pre>
 1
2
3
                            eps=0.58, minPts=3)
 4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
                                                                                        УЛАЗ
```

2022/2023

Густинска кластеризација

пример

DBSCAN (eps=0.58, minPts=3) scaled input data & scaled visualisation data



Садржај

- 1. Кластеризација
- 2. Метод средина̂
- 3. Хијерархијска кластеризација
- 4. Густинска кластеризација
- 5. Извори и литература

Извори и литература

Основни извори и литература

- ◆ James G, Witten D, Hastie T, Tibshirani R. An introduction to statistical learning: With applications in R. Springer; 2013.
- ◆ R: A language and environment for statistical computing Reference index The R core team Version 4.2.3 (2023-03-15). Internet:
 - https://cran.r-project.org/doc/manuals/r-release/fullrefman.pdf
- CRAN Package dbscan. Internet: https://cran.r-project.org/web/packages/dbscan/index.html

Извори и литература

Основни извори података

- скуп података abalon
 - UCI Machine Learning Repository
 - Dua, D. and Graff, C. (2019). UCI Machine Learning Repository [http://archive.ics.uci.edu/ml]. Irvine, CA: University of California, School of Information and Computer Science.
 - Подаци о абалонима с Тасманије (Аустралија)
 - датотека abalone.data
 - ◆ Abalone Data Set (од 1. 12. 1995)
 - https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Abalone (πреузето 13. 4. 2021)

Факултет техничких наука, Универзитет у Новом Саду

Мастер академске студије Рачунарство и аутоматика

Рачунарство високих перформанси у информационом инжењерингу

Основи кластеризације

(материјали за предавања)