خوشه‌بندی ترکیبی مبتنی بر زیرمجموعه‌ای از خوشه‌های اولیه

حسین علیزاده، محسن مشکی، حمید پروین و بهروز مینایی بیدگلی
دانشکده مهندسی کامپیوتر، دانشگاه علم و صنعت ایران

چکیده

اکثر مطالعات اخیر در حوزه خوشه‌بندی ترکیبی سعی می‌کنند ابتدا خوشه‌بندی‌های اولیه‌ای تولید کنند که تا حد ممکن دارای پراکندگی باشند، سپس با اعمال یک تابع توافقی همه این نتایج را با هم ترکیب می‌کنند. در این مقاله یک روش جدید خوشه‌بندی ترکیبی ارائه شده است که در آن به جای استفاده از تمام نتایج اولیه، تنها از زیرمجموعه‌ای از خوشه‌های اولیه استفاده می‌شود. ایده اصلی در این روش استفاده از خوشه‌های پایدار در ترکیب نهایی است. برای ترکیب خوشه‌های انتخابی، از تابع توافقی مبتنی بر ماتریس همبستگی استفاده شده است. از آن جایی که ساخت ماتریس همبستگی با در دسترس بودن تنها تعدادی از خوشه‌ها، با روش‌های موجود امکان‌پذیر نمی‌باشد، در این مقاله یک روش جدید به نام خوشه‌بندی انباشت مدارک توسعه یافته، برای ساخت ماتریس همبستگی از زیرمجموعه‌ای از خوشه‌ها پیشنهاد شده است. برای ارزیابی خوشه‌ها، از پایداری مبتنی بر اطلاعات متقابل استفاده شده است. نتایج تجربی روی چندین مجموعه داده استاندارد نشان می‌دهد که روش پیشنهادی به طور موثری نتایج خوشه‌بندی‌های اولیه را بهبود می‌دهد. همچنین، مقایسه نتایج در مقایسه با سایر روش‌های خوشه‌بندی ترکیبی نشان از کارایی بالای روش پیشنهادی دارد.

کلیدواژه‌ها: **خوشه‌بندی ترکیبی، پایداری خوشه، اطلاعات متقابل، ماتریس همبستگی.**

۱. مقدمه

ایده اصلی خوشه‌بندی اطلاعات، جداکردن نمونه‌ها از یکدیگر و قرار دادن آنها در گروه‌های شبیه به هم می‌باشد. به این معنی که نمونه‌های شبیه به هم باید در یک گروه قرار بگیرند و با نمونه‌های گروه‌های دیگر حداکثر تفاوت را دارا باشند [۱،۲]. از آنجا که اکثر روش‌های خوشه‌بندی پایه روی جنبه‌های خاصی از داده‌ها تاکید می‌کنند، در نتیجه روی مجموعه داده‌های خاصی کارآمد می‌باشند. به همین دلیل، نیاز به روش‌هایی است که بتواند با استفاده از ترکیب این الگوریتم‌ها و گرفتن نقاط قوت هر یک، نتایج بهینه‌تری را تولید کند. در واقع هدف اصلی خوشه‌بندی ترکیبی جستجوی نتایج بهتر و مستحکم‌تر، با استفاده از ترکیب اطلاعات و نتایج حاصل از چندین خوشه‌بندی اولیه است [۳،۴،۵]. تحقیقات اخیر در این زمینه نشان داده‌اند که خوشه‌بندی داده‌ها می‌تواند به طور چشمگیری از ترکیب چندین افراز داده سود ببرد. خوشه‌بندی ترکیبی می‌تواند جواب‌های بهتری از نظر استحکام[۱]، نو بودن[۲]، پایداری[۳] و انعطاف‌پذیری[۴] نسبت به روش‌های پایه ارایه دهد[۳،۵،۶،۷].

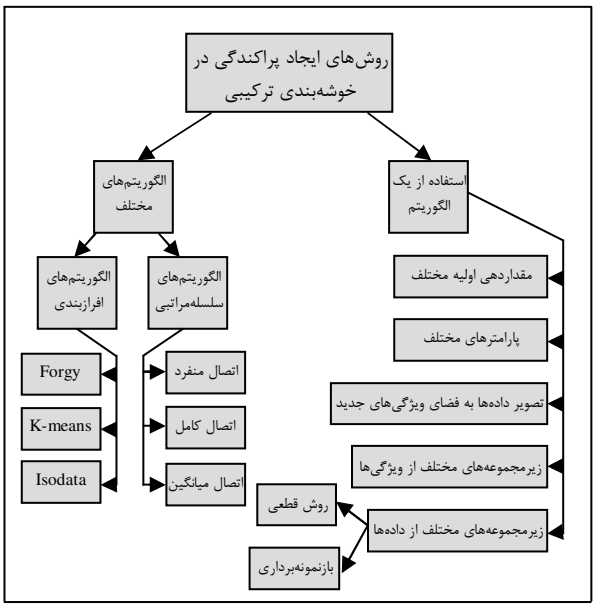
۱-۱ ایجاد پراکندگی در خوشه‌بندی ترکیبی

به طور خلاصه خوشه‌بندی ترکیبی شامل دو مرحله اصلی الف)تولید نتایج اولیه و ب)ترکیب نتایج برای استخراج خوشه‌های نهایی می‌باشد [۳]. در مرحله اول تعدادی خوشه‌بندی اولیه ایجاد می‌شود که هر کدام بر ویژگی خاصی از داده‌ها تاکید دارند. اولین و ساده‌ترین روش برای ایجاد نتایج مختلف و پراکنده از یک مجموعه داده، استفاده از الگوریتم‌های مختلف خوشه‌بندی است. با توجه به اینکه هر الگوریتم خوشه‌بندی از یک جنبه خاصی به مسئله نگاه می‌کند، بنابراین خطاهای موجود در روش‌های مختلف، می‌تواند با هم متفاوت باشد. این امر می‌تواند موجب ایجاد پراکندگی در نتایج الگوریتم‌های پایه خوشه‌بندی گردد. از جمله مهم‌ترین الگوریتم‌های خوشه‌بندی پایه که معمولا در خوشه‌بندی ترکیبی استفاده می‌شوند شامل الگوریتم‌های خوشه‌بندی سلسله‌مراتبی[۵] [۱،۷،۸] و الگوریتم‌های خوشه‌بندی افرازبندی[۶] [۸،۹،۱۰،۱۱] می‌باشند. الگوریتم K-means، به دلیل سادگی و توانایی مناسب در خوشه‌بندی، معمولا در بیشتر روش‌های خوشه‌بندی ترکیبی به عنوان الگوریتم خوشه‌بندی پایه، استفاده می‌شود[۱۲،۱۳،۱۴].

رویکرد دیگر برای ایجاد پراکندگی، به دست آوردن نتایج متنوع از یک الگوریتم خوشه‌بندی پایه با استفاده از یکی از روش‌های زیر می‌باشد.

- تغییر مقادیر اولیه[۷] الگوریتم خوشه‌بندی انتخاب شده [۴]
- تغییر پارامترهای الگوریتم خوشه‌بندی انتخاب شده [۱۵]
- استفاده از زیرمجموعه‌های مختلف از ویژگی‌ها[۸] [۳،۵]
- نگاشت داده‌ها به فضاهای ویژگی دیگر [۵،۱۶]
- تقسیم‌بندی داده‌های اصلی به زیر مجموعه‌هایی متفاوت و مجزا (بازنمونه‌برداری[۹]) [۳،۱۲،۱۷]

طبقه‌بندی مهم‌ترین روش‌های به دست آوردن پراکندگی در نتایج اولیه، در شکل (۱) ارایه شده است.



شکل ۱: طبقه‌بندی روش‌های ایجاد پراکندگی در خوشه‌بندی ترکیبی

در این مقاله با استفاده از چندین روش سعی در ایجاد تنوع در خوشه‌بندی‌های اولیه شده است. بازنمونه‌برداری و ایجاد زیرمجموعه‌های متفاوت از داده‌ها، الگوریتم‌های مختلف و پارامترهای مختلف از جمله روش‌های مورد استفاده در این مقاله برای ایجاد پراکندگی لازم در نتایج اولیه می‌باشد.

۱-۲ تابع توافقی

× نویسنده مسئول: تلفن: ۰۹۱۱۲۲۲۴۳۴۱، فاکس: ۲۱۸۸۸۳۹۸۹۴،
Email: halizadeh@iust.ac.ir

پس از اینکه نتایج اولیه‌ای تولید شدند که تا حد ممکن پراکنده بودند، معمولا با استفاده از یک تابع ترکیب کننده این نتایج ترکیب می‌شوند. یکی از متداول‌ترین روش‌های ترکیب نتایج استفاده از ماتریس همبستگی است که در بخش‌های بعدی به طور مفصل تشریح خواهد شد. روش خوشه‌بندی ترکیبی انباشت مدارک (EAC[10]) که مبتنی بر ماتریس همبستگی است اولین بار توسط فرد و جین در [۴] مطرح شد و خیلی زود به صورت یک روش متداول درآمد. امروزه روش‌های دیگری نیز مبتنی بر ماتریس همبستگی ارایه شده‌اند [۶].

در این مقاله از یک روش مبتنی بر ماتریس همبستگی برای ترکیب نتایج استفاده شده است. از آن جایی که در روش پیشنهادی تعدادی از خوشه‌های اولیه که پایداری لازم را به دست نیاورده‌اند، در این فرآیند حذف می‌شوند، روش معمول ساخت ماتریس همبستگی نمی‌تواند به درستی ماتریس همبستگی را تشکیل دهد. در اینجا یک روش جدید برای ساخت ماتریس همبستگی از زیرمجموعه‌ای از خوشه‌های اولیه پیشنهاد شده است. در نهایت از یک الگوریتم سلسله‌مراتبی برای استخراج نتایج از ماتریس همبستگی استفاده می‌شود.

۲. کارهای مرتبط

روش‌های خوشه‌بندی ترکیبی سعی می‌کنند تا با ترکیب افرازهای[11] مختلف تولید شده از روش‌های خوشه‌بندی پایه، یک افراز مستحکم[12] از داده‌ها را تولید کنند [۳،۱۸،۱۹،۲۰]. در اکثر مطالعات اخیر، همه افرازها با وزن برابر در ترکیب نهایی حاضر می‌شوند و همه خوشه‌های موجود در همه افرازها نیز با وزن برابر در ترکیب نهایی شرکت می‌کنند [۲۱]. استرل و گاش در [۳] یک معیار برای انتخاب از میان ترکیبات ممکن ارایه کرده‌اند که مبتنی بر کیفیت کلی یک خوشه‌بندی است. برای این کار، آنها میزان ثبات بین افراز ترکیبی و افرازهای پایه را در نظر گرفته‌اند و با استفاده از یک قاعده ترکیبی ثابت، یک معیار شباهت دو به دو[13] را روی فضای ویژگی‌های d-بعدی به کار برده‌اند.

در اکثر الگوریتم‌های پایه برای خوشه‌بندی ترکیبی از نمونه‌برداری داده‌ها استفاده می‌شود. مسئله اصلی در این روش‌ها چگونگی ارزیابی خوشه و خوشه‌بندی (افراز) است. بامگارتنر و همکاران در [۲۲] یک روش مبتنی بر بازنمونه‌برداری را برای بررسی اعتبارسنجی نتایج خوشه‌بندی فازی ارایه کرده‌اند. در چند سال اخیر، پایداری خوشه به عنوان یک معیار ارزیابی خوشه مورد توجه زیادی قرار گرفته است[۲۱،۲۳،۲۴،۲۵]. ایده‌های اولیه برای اعتبارسنجی خوشه با استفاده از بازنمونه‌برداری در [۲۶] ارایه شده و بعدها در [۲۷،۲۸] کامل‌تر شده است. راس و همکاران نیز در [۲۹،۳۰] یک روش مبتنی بر بازنمونه‌برداری برای اعتبارسنجی خوشه ارایه کرده‌اند. عنصر اصلی در این روش، که در واقع کامل‌شده‌ی روش‌های پیشین می‌باشد، پایداری خوشه است. معیار پایداری، میزان همبستگی افرازهای به دست آمده از دو نمونه‌برداری مستقل از مجموعه داده را اندازه‌گیری می‌کند. هر چه میزان پایداری برای یک خوشه‌بندی بیشتر باشد، به این معنی است که اگر الگوریتم خوشه‌بندی چندین مرتبه دیگر روی آن نمونه‌ها به کار رود، نتایج مشابهی حاصل می‌شود [۳۱،۳۲]. همچنین، راس و لانژ در [۳۳] یک الگوریتم جدید برای خوشه‌بندی ارایه کرده‌اند که مبتنی بر انتخاب ویژگی می‌باشد. در این روش از معیار پایداری مبتنی بر بازنمونه‌برداری داده‌ها، برای انتخاب پارامترهای الگوریتم خوشه‌بندی استفاده شده است. چندین روش اعتبارسنجی خوشه[14] مبتنی بر ایده استفاده از پایداری پیشنهاد شده است [۳۴]. بن هور و همکاران نیز در [۳۵] روشی برای محاسبه پایداری ارایه کرده‌اند که بر مبنای شباهت بین نمونه‌ها در خوشه‌بندی‌های متفاوت عمل می‌کند. در این روش، ابتدا ماتریس همبستگی با استفاده از روش بازنمونه‌برداری به دست می‌آید. سپس ضریب جاکارد[15] به عنوان معیار پایداری بر اساس این ماتریس محاسبه می‌شود. همچنین، کاسترو و یانگ در [۳۶] روشی برای ارزیابی افرازهای نهایی خوشه‌بندی ارایه کرده‌اند که از ماشین بردار پشتیبان[16] استفاده می‌کند. این روش با شناسایی نویزها و داده‌های دورافتاده[17] به نتایج خوشه‌بندی دارای استحکام دست یافته است. مولر و رادک در [۳۷] از بازنمونه‌برداری نزدیک‌ترین همسایه (NNR[18]) برای اعتبارسنجی نتایج خوشه‌بندی استفاده کرده‌اند. این روش بازنمونه‌برداری اولین بار در تحلیل سری‌های زمانی به کار رفته است [۳۸]. اینوکوچی و همکاران در [۳۹] معیار اعتبارسنجی هسته-محور[19] پیشنهاد کرده‌اند. هسته در این روش به معنی تابع مرکزی استفاده شده در ماشین بردار پشتیبان می‌باشد. در این روش، دو شاخص مورد توجه قرار گرفته است: اولی مجموع

مقادیر کواریانس فازی داخل خوشه‌هاست و دومی شاخص مبتنی بر هسته ژی-بن [۴۰]. در این روش از این دو شاخص برای ارزیابی نتایج خوشه‌بندی و همچنین، تعیین تعداد خوشه‌ها با مرزهای غیر خطی استفاده شده است. داس و سیل در [۴۱] روشی برای تعیین تعداد خوشه‌ها ارایه کرده‌اند که از اعتبارسنجی خوشه‌ها برای تقسیم و ادغام آنها بهره می‌برد. فرن و لین در [۴۲] روشی برای خوشه‌بندی ترکیبی پیشنهاد کرده‌اند که از زیرمجموعه‌ی موثرتری از افرازهای اولیه در ترکیب نهایی استفاده می‌کند. در این روش اگر چه تعداد اعضای شرکت کننده در ترکیب نهایی کمتر از یک خوشه‌بندی ترکیبی کامل[۲۰] است، به دلیل انتخاب افرازهای با کارایی بالاتر، نتایج نهایی بهبود می‌یابند. پارامترهایی که در این روش مورد توجه قرار گرفته‌اند، عبارتند از: کیفیت و پراکندگی. این روش سعی می‌کند تا زیرمجموعه‌ای از افرازهایی از نتایج اولیه را وارد ترکیب نهایی کند که از بالاترین میزان کیفیت برخوردار بوده و در عین حال نسبت به هم بیشترین پراکندگی را دارا باشند. در این روش از معیار مجموع اطلاعات متقابل هنجارسازی‌شده (SNMI[۲۱]) (برای یک افراز در مقایسه با افرازهای دیگر ترکیب) برای اندازه‌گیری کیفیت یک افراز استفاده شده است. همچنین، معیار اطلاعات متقابل هنجارسازی‌شده (NMI[۲۲]) (بین تمام افرازهای موجود در ترکیب) برای اندازه‌گیری پراکندگی لازم برای ترکیب به کار رفته است. فرن و لین در [۴۲] نشان می‌دهند که روش آنها نسبت به خوشه‌بندی ترکیبی کامل و یا روش انتخاب تصادفی از کارایی بهتری برخوردار است. لاو و بقیه در [۲۳] یک روش خوشه‌بندی چندهدفی[۲۳] ارایه کرده‌اند که مبتنی بر انتخاب خوشه‌های اولیه تولید شده توسط الگوریتم‌های مختلف خوشه‌بندی، در طی یک روال بهینه‌سازی می‌باشد. در این روش، بهترین مجموعه از توابع هدف برای بخش‌های مختلف از فضای ویژگی انتخاب شده است. فرد و جین در [۲۱] یک روش خوشه‌بندی ترکیبی ارایه کرده‌اند که در آن با استفاده از معیار پایداری خوشه، شباهت دو به دو آموزش داده می‌شود. در این روش، به جای استفاده از معیارهای ارزیابی مبتنی بر افراز نهایی، افرازهای حاصل از الگوریتم‌های پایه در نواحی مختلف از فضای ویژگی d-بعدی مورد ارزیابی قرار گرفته است.

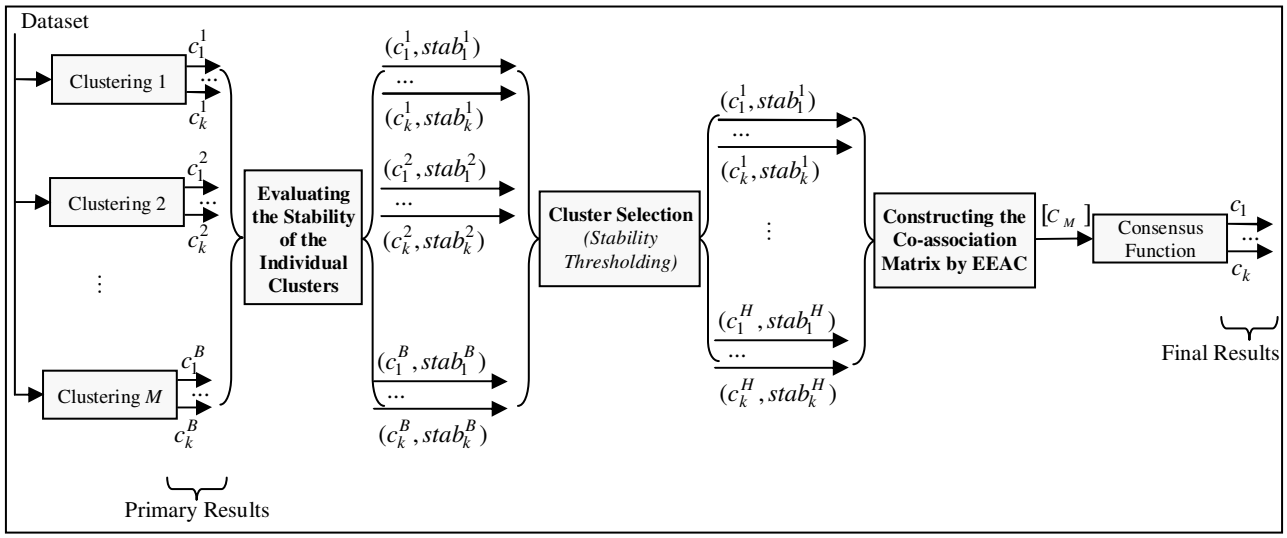
۳. روش پیشنهادی

ایده اصلی در این روش استفاده از زیرمجموعه‌ای از خوشه‌های اولیه به جای کل خوشه‌ها در خوشه‌بندی ترکیبی است. از آن جایی که به نظر می‌رسد تمام خوشه‌های حاصل از الگوریتم‌های خوشه‌بندی اولیه از پایداری بالایی برخوردار نباشند، در این روش تنها از خوشه‌های با مقدار پایداری بالا در ماتریس همبستگی و در نتیجه در ترکیب نهایی استفاده شده است. انتخاب خوشه‌ها بر اساس معیار پایداری خوشه مبتنی بر اطلاعات متقابل هنجارسازی شده (NMI) صورت می‌گیرد. نمای کلی از روش پیشنهادی در شکل (۲) نشان داده شده است.

در این روش ابتدا با استفاده از روش‌های ایجاد پراکندگی تعداد B خوشه‌بندی اولیه انجام می‌شود. این کار می‌تواند با استفاده از نمونه‌برداری از داده‌ها، استفاده از الگوریتم‌های مختلف خوشه‌بندی، استفاده از زیرمجموعه‌ای از ویژگی‌ها و یا انتخاب پارامترهای مختلف برای یک الگوریتم خوشه‌بندی انجام شود. در اینجا از الگوریتم K-means و الگوریتم‌های سلسله‌مراتبی برای تولید نتایج اولیه استفاده شده است. پراکندگی لازم در نتایج اولیه برای الگوریتم K-means نیز، با انتخاب تصادفی نقاط اولیه مراکز خوشه‌ها و همچنین با نمونه‌برداری فراهم شده است.

در مرحله بعد خوشه‌های به دست آمده مورد ارزیابی قرار می‌گیرند تا کیفیت هر خوشه مشخص شود. برای ارزیابی خوشه از معیار پایداری خوشه استفاده شده است. چگونگی ارزیابی خوشه‌ها در بخش بعدی به طور مفصل تشریح شده است. پس از اینکه پایداری هر خوشه محاسبه شد، در گام بعد، عمل انتخاب خوشه‌ها با توجه به مقدار پایداری خوشه انجام می‌شود. برای این کار خوشه‌هایی که از مقدار آستانه th فراتر باشند برای شرکت در خوشه‌بندی نهایی انتخاب می‌شوند. در گام بعدی خوشه‌های انتخاب شده با هم ترکیب شده و خوشه‌های نهایی از آنها به دست می‌آید. روش‌های مختلفی برای ترکیب خوشه‌بندی‌های اولیه و به دست آوردن خوشه‌های نهایی وجود دارد. تفاوتی که در اینجا وجود دارد این است که در این روش ممکن است که از هر خوشه‌بندی اولیه، تنها تعدادی از خوشه‌ها موجود باشند. از آن جایی که استفاده از روش انباشت مدارک (EAC) نمی‌تواند شباهت بین جفت نمونه‌ها را در حضور تنها تعدادی از خوشه‌ها

به درستی تشخیص دهد، در این مقاله یک روش جدید برای ترکیب نتایج پیشنهاد شده است که آن را انباشت مدارک توسعه



شکل ۲: روال الگوریتم پیشنهادی برای خوشه‌بندی ترکیبی

یافته (EEAC[۲۴]) نامیده‌ایم. این روش که توانایی استخراج ماتریس همبستگی برای نمونه‌ها -در شرایطی که تنها تعدادی از خوشه‌ها موجود هستند- را دارد، در بخش‌های بعدی تشریح شده است. پس از ساخت ماتریس همبستگی، می‌توان با استفاده از یکی از الگوریتم‌های سلسله‌مراتبی نظیر اتصال منفرد یا اتصال میانگین[۲۵]، خوشه‌های نهایی را استخراج کرد.

۳-۱ ارزیابی خوشه

از آن جایی که میزان برازندگی[۲۶] یک خوشه در میان کل نقاط داده معنی‌دار است، تابع برازندگی خوشه یعنی $g_f(C_i,D)$ علاوه بر پارامتر اول خود یعنی خوشه C_i به مجموعه داده D نیز وابسته است. یک تابع برازندگی باید خصوصیات زیر را داشته باشد [۲۳]:

- باید با تابع f_j که توسط الگوریتم خوشه‌بندی خاص A_j بهینه می‌شود، ارتباط منطقی داشته باشد. به عبارت دیگر، مقدار بیشتر برای $g_f(C_i,D)$ به این معنی باشد که خوشه C_i نسبت به تابع f_j و متناظرا نسبت به الگوریتم خوشه‌بندی خاص A_j ، برازنده‌تر (بهینه‌تر) است.
- باید نسبت به توابع خوشه‌بندی مختلف قابل مقایسه باشد. به عبارت دیگر، اگر $g_l(C_i,D) > g_f(C_i,D)$، آنگاه باید نتیجه گرفت که کیفیت خوشه C_i با توجه به تابع f_j از تابع f_l بهتر است. یعنی کیفیت خوشه C_i در خوشه‌بندی j-ام از کیفیت خوشه C_i در خوشه‌بندی l-ام بهتر می‌باشد.
- در نهایت مقدار تابع برازندگی خوشه باید نسبت به خوشه‌های مختلف قابل مقایسه باشد. به عبارت دیگر، $g_f(C_i,D) = g_f(C_l,D)$، باید نتیجه بدهد که خوشه‌های C_i و C_l نسبت به تابع f_j میزان برازندگی برابری دارند. یعنی این دو خوشه در خوشه‌بندی j-ام از کیفیت برابری برخوردارند.

یکی از معیارهایی که می‌تواند به عنوان تابع برازندگی خوشه در نظر گرفته شود، معیار پایداری خوشه [۲۵] است. پایداری خوشه, اثر آشفتگی[۲۷] در نتایج خوشه‌بندی‌های مختلف را انعکاس می‌دهد. یکی از مهم‌ترین روش‌های ایجاد آشفتگی در خوشه‌بندی استفاده از بازنمونه‌برداری است که می‌تواند به دو شکل رایج با جایگذاری و یا بدون جایگذاری انجام شود.

در این روش خوشه‌های پایدارتر از خوشه‌بندی‌های اولیه شناسایی می‌شوند و ماتریس همبستگی نهایی، تنها از این خوشه‌های پایدار تشکیل می‌شود. یک خوشه پایدار، خوشه‌ای است که اگر آن روش خوشه‌بندی را چند بار دیگر هم، روی آن مجموعه داده (یا روی مجموعه‌های مختلف حاصل از نمونه‌برداری از آن مجموعه داده) اجرا کنیم، با احتمال زیاد این

خوشه باز هم دیده خواهد شد. به عبارت دیگر، خوشه‌های پایدار به خوشه‌هایی اطلاق می‌شود که در خوشه‌بندی‌های مختلف روی زیرمجموعه‌های به دست آمده از نمونه‌برداری‌های مختلف بیشترین تکرار را داشته باشند. یعنی با تغییرات جزیی در مجموعه داده، آن خوشه‌ها باز هم تکرار شوند. برای شناسایی خوشه‌های پایدارتر نیاز به مکانیزمی است تا بتواند پایداری را برای هر خوشه از یک خوشه‌بندی، مستقل از خوشه‌های دیگر به دست آمده از آن خوشه‌بندی، حساب کند. برای این کار، فرض کنید که می‌خواهیم پایداری خوشه C_i را محاسبه کنیم. در این روش ابتدا با نمونه‌برداری مجموعه داده‌های جدیدی درست می‌شود و خوشه‌بندی‌های مختلفی روی آن صورت می‌گیرد. سپس، سعی می‌شود تا به این سوال که "آیا این خوشه، در این خوشه‌بندی‌ها هم ظاهر شده است یا نه؟" پاسخ داده شود. برای این کار یک معیار شباهت بین آن خوشه (C_i) و خوشه‌بندی اولیه ($P(D)$) پیشنهاد می‌شود که با $sim(C_i,P(D))$ نشان داده می‌شود. با استفاده از این معیار، شباهت آن خوشه را با خوشه‌بندی‌های مختلف حاصل از نمونه‌برداری محاسبه می‌شود. سپس میانگین این معیارهای شباهت، به عنوان میزان پایداری این خوشه $g_i(C_i,D)$ برگردانده می‌شود. در واقع $sim(C_i,P(D))$ میزان اعتبار خوشه C_i را درخوشه‌بندی P روی مجموعه داده D مشخص می‌کند. الگوریتم این روال در شکل (۳) نشان داده شده است.

For l:=1 to M do
  Resample D to obtain the perturbed data set D';
  Run k-means over D' to obtain $P(D')$;
  Re-labeling $P(D')$ to $P(D)$;
  Compute $score[l] = sim(C_i,P(D))$;
End
$g_i(C_i,D)$:= *average* of $score[l]$;

شکل ۳: الگوریتم محاسبه پایداری خوشه C_i به عنوان تابع برازندگی

برای محاسبه $sim(C_i,P(D))$ که میزان شباهت بین خوشه C_i و نتیجه خوشه‌بندی $P(D)$ است، به صورت زیر عمل می‌شود. ابتدا تمام نمونه‌های دیگر متعلق به مجموعه داده D که در خوشه C_i قرار ندارند، به صورت یک خوشه مستقل D/C_i نمایش داده می‌شود. حال یک خوشه‌بندی شامل دو خوشه C_i و D/C_i ایجاد شده است که آن را P_1 می‌نامیم $P_1=\{C_i, D/C_i\}$.

اکنون خوشه‌بندی $P(D)$ که روی داده‌های نمونه‌برداری شده اعمال شده است، نیز باید به صورت دو خوشه‌ای ارایه شود تا در نهایت نتایج حاصل از این دو خوشه‌بندی طی فرآیندی با هم منطبق شوند. برای این منظور همه خوشه‌ها در $P(D)$ به دو خوشه C^* و D/C^* تقسیم می‌شوند. خوشه C^* از اجتماع همه خوشه‌هایی که بیش از ۵۰٪ از نمونه‌هایشان در خوشه C_i وجود دارند، تشکیل می‌شود و مابقی خوشه‌ها نیز در خوشه D/C^* قرار می‌گیرند. این خوشه‌بندی را P_2 می‌نامیم $P_2=\{C^*, D/C^*\}$. حال از اطلاعات متقابل[۲۸] هنجارسازی شده (NMI) [۳،۴،۱۷] که معیار متداول برای ارزیابی شباهت بین دو افراز (نتیجه خوشه‌بندی) است، برای اندازه‌گیری شباهت بین دو خوشه‌بندی P_1 و P_2 استفاده می‌شود. از آن جایی که معیار اطلاعات متقابل هنجارسازی نشده (MI)، وابسته به اندازه خوشه‌هاست، معمولا از معیار NMI استفاده می‌شود. رابطه NMI بین دو خوشه‌بندی P_1 و P_2 به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$NMI(P_1,P_2)=\frac{MI(P_1,P_2)}{\frac{-1}{2m}\left(\sum_{i=0}^{1} p_{i.}\log\frac{p_{i.}}{m}+\sum_{j=0}^{1} p_{.j}\log\frac{p_{.j}}{m}\right)} \quad (۱)$$

که اطلاعات متقابل، $MI(P_1,P_2)$ از رابطه (۲) به دست می‌آید.

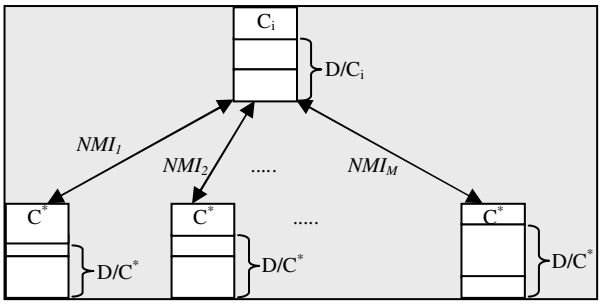
$$MI(P_1,P_2)=\sum_{i=0}^{1}\sum_{j=0}^{1}\frac{r_{ij}}{m^2}\log\frac{mp_{ij}}{r_{ij}} \quad (۲)$$

$$r_{ij}=p_{i.}p_{.j}\,,\quad p_{i.}=p_{i0}+p_{i1}\quad,\quad p_{.j}=p_{0j}+p_{1j}$$

که در این رابطه، p_{11} نشان‌دهنده تعداد نمونه‌های مشترک موجود در C^* و C_i است. p_{10} نشان‌دهنده تعداد نمونه‌های مشترک موجود در D/C^* و C_i است. p_{01} نشان‌دهنده تعداد نمونه‌های مشترک موجود در C^* و D/C_i است. p_{00} نشان‌دهنده تعداد نمونه‌های مشترک موجود در D/C^* و D/C_i است. همچنین m تعداد کل نمونه‌هاست. در واقع $p_{i.}$ و $p_{.j}$ به ترتیب بیانگر کل نمونه‌های موجود در C_i و C^* هستند. شکل (۴) نمای کلی از این روش محاسبه پایداری خوشه را نشان می‌دهد.

با توجه به شکل (۴)، NMI_i نشان‌دهنده میزان شباهت خوشه‌بندی P_1 و P_2 می‌باشد. همچنین بیانگر میزان پایداری خوشه C_i در خوشه‌بندی i-ام نیز می‌باشد. این مقدار با توجه به

الگـــوریتم شـــکل (۳) در $sim(C_i,P(D))$ و ســـپس در $score[i]$ ذخیره می‌گردد. پایداری کـل از میـانگین کـل ایـن پایـداری‌هـا تشکیل می‌شود.



شکل ۴: محاسبه پایداری خوشه C_i با روش مبتنی بر *NMI*

$$Stability(C_i) = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} NMI_i \qquad (۳)$$

که M تعداد خوشه‌بندی‌ها در مجموعه مرجع مـی‌باشـد. ایـن روش، در واقـع خوشـه‌هـایی را کـه بیشـترین تکـرار را در خوشه‌بندی‌های مختلف دارند، بـه عنـوان خوشـه‌هـای پایـدارتر معرفی می‌کند. پس از این مرحله خوشه‌های بـا بـالاترین مقـدار پایداری انتخاب شده و وارد مرحله بعد می‌شوند تا خوشـه‌بنـدی نهایی را شکل دهند. پـارامتر th ایـن مقـدار آسـتانه را مشـخص می‌کند.

۳-۲ ترکیب نتایج اولیه با روش انباشت مدارک توسعه یافته

در این مرحله، خوشه‌های انتخاب شده ماتریس همبستگی را تشکیل می‌دهند. در روش انباشت مدارک (EAC) نتایج m خوشه‌بندی روی داده‌های نمونه‌برداری شده در ماتریس همبستگی $n\times n$ ذخیره می‌شوند. هر داده ورودی از این ماتریس در روش انباشت مدارک (EAC)، به صورت رابطه (۴) محاسبه می‌شود.

$$C(i,j) = \frac{n_{i,j}}{m_{i,j}} \qquad (۴)$$

که $n_{i,j}$ تعداد دفعاتی است که جفت نمونه‌های i و j با هم در یک خوشه گروه‌بندی شده‌اند و $m_{i,j}$ تعداد نمونه‌برداری‌هایی است که هر دوی این جفت نمونه‌ها به طور همزمان در آن ظاهر شده‌اند.

از آن جایی که پس از آستانه‌گیری در روش پیشنهادی، تنها تعدادی از خوشه‌های اولیه در دسترس می‌باشند، روش EAC نمی‌تواند روابط بین جفت‌نمونه‌ها را تشخیص دهد. بنابراین برای ترکیب نتایج با استفاده از ماتریس همبستگی باید یک معیاری برای نشان‌دادن همبستگی نمونه‌ها تعریف شود که بتواند شباهت بین نمونه‌ها را با حضور تنها زیرمجموعه‌ای از خوشه‌های اولیه به درستی استخراج و محاسبه کند. ما روش خود را برای ساخت ماتریس همبستگی در شرایطی که تعدادی از خوشه‌ها حذف شده‌اند، انباشت مدارک توسعه یافته (EEAC) می‌نامیم. هر داده ورودی از ماتریس همبستگی در روش EEAC به صورت رابطه (۵) تعریف می‌شود.

$$C(i,j) = \frac{n_{i,j}}{\max(n_i, nj)} \qquad (۵)$$

n_i تعداد دفعاتی است که نمونه i در خوشه‌های انتخاب شده ظاهر شده است. به طور مشابه n_j نیز، تعداد دفعاتی است که نمونه j در خوشه‌های انتخاب شده ظاهر شده است. همچنین، $n_{i,j}$ تعداد دفعاتی است که جفت نمونه‌های i و j با هم در یک خوشه از خوشه‌های انتخاب شده ظاهر شده‌اند. بدیهی است که با در نظر گرفتن تعداد خوشه‌های ثابت در خوشه‌بندی‌های اولیه همواره n_i و n_j کمتر از تعداد کل افرازهای اولیه و همچنین، تعداد کل خوشه‌های ممکن می‌باشد. یعنی $n_i, n_j \le B \le k \times B$.

برای روشن‌تر شدن بحث، مثال زیر را در نظر بگیرید. فرض کنید ۵ نمونه مطابق شکل ۵ (قسمت A) وجود دارند که چهار خوشه‌بندی اولیه P_1 تا P_4 به عنوان خوشه‌بندی‌های اولیه روی آن صورت گرفته است (شکل ۵ قسمت B). همچنین، فرض کنید که مقادیر پایداری خوشه‌های تولید شده به صورت زیر باشند:

$$Stability(c_2^1) = Stability(c_2^3) = 1$$
$$Stability(c_1^2) = Stability(c_1^4) = 1$$
$$Stability(c_2^2) = Stability(c_2^4) = 0.82$$
$$Stability(c_1^1) = Stability(c_1^3) = 0.55$$

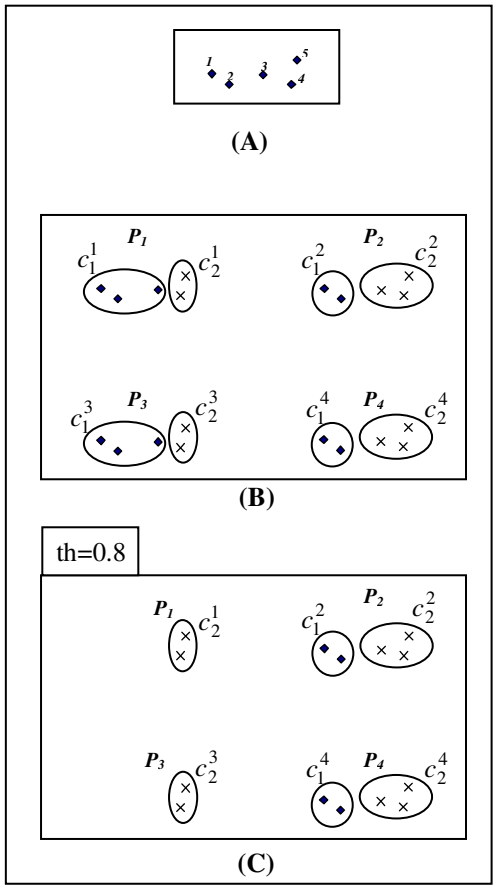
اگر مقدار آستانه برای انتخاب خوشه‌ها برابر با ۰٫۸ باشد، خوشه‌های اول از افرازهای اول و سوم حذف می‌شوند. اکنون ماتریس همبستگی باید با استفاده از بقیه خوشه‌ها درست شود. یعنی شکل ۵ قسمت C.

$$C(1,2)=\frac{2}{\max(2,2)}=\frac{2}{2}=1$$

$$C(1,3)=C(2,3)=\frac{0}{\max(2,2)}=\frac{0}{2}=0$$

$$C(3,4)=C(3,5)=\frac{2}{\max(2,4)}=\frac{2}{4}=0.5$$

$$C(4,5)=\frac{4}{\max(4,4)}=\frac{4}{4}=1$$



شکل ۵: ساخت ماتریس همبستگی با روش *EEAC*
A) مجموعه داده شامل ۵ نمونه، B) نتایج چهار خوشه‌بندی اولیه C) خوشه‌های باقیمانده پس از آستانه‌گیری

ماتریس همبستگی قبل و بعد از آستانه‌گیری به ترتیب، به صورت روابط (۶) و (۷) خواهد بود:

$$C_{before}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 0.5 & 0 & 0\\ 1 & 1 & 0.5 & 0 & 0\\ 0.5 & 0.5 & 1 & 0.5 & 0.5\\ 0 & 0 & 0.5 & 1 & 1\\ 0 & 0 & 0.5 & 1 & 1\end{bmatrix} \quad (۶)$$

در این ماتریس نمونه سوم می‌تواند با احتمال ۵۰٪ به هر کدام از دو خوشه بچسبد. اگر بتوان اطلاعات اضافه‌تری به این ماتریس اضافه کرد، به گونه‌ای که خوشه پایدارتر دارای وزن بیشتری در مقادیر همبستگی بین نمونه‌هایش شود، می‌توان به عملکرد بهتر خوشه‌بندی ترکیبی امیدوار بود.

$$C_{after}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 0 & 0 & 0\\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0.5 & 0.5\\ 0 & 0 & 0.5 & 1 & 1\\ 0 & 0 & 0.5 & 1 & 1\end{bmatrix} \quad (۷)$$

با مشاهده این دو ماتریس می‌توان دریافت که چگونه حذف خوشه‌های ناپایدار می‌تواند باعث بهبود ماتریس همبستگی شود. از آن جایی که خوشه مربوط به نمونه‌های {۱،۲،۳} دارای مقدار پایداری پایینی می‌باشند، حذف آنها موجب روشن‌تر شدن ماتریس همبستگی می‌شود. اکنون یک الگوریتم سلسله‌مراتبی ساده نیز می‌تواند خوشه‌های موجود در ماتریس همبستگی (بعد از انتخاب) را استخراج کند.

پس از اینکه ماتریس همبستگی با روش EEAC ساخته شد، در مرحله بعد از یک تابع توافقی برای استخراج خوشه‌های نهایی از این ماتریس استفاده می‌شود. معمولا از یکی از الگوریتم‌های سلسله‌مراتبی برای استخراج خوشه‌های نهایی از ماتریس همبستگی استفاده می‌شود. در این مقاله از الگوریتم سلسله‌مراتبی اتصال منفرد[۲۹] استفاده شده است.

۴. نتایج تجربی

در این بخش نتایج به کارگیری روش پیشنهادی روی مجموعه داده‌های مختلف و پارامترهای مورد استفاده گزارش شده است.

۴-۱ مجموعه داده‌ها

روش پیشنهادی بر روی ۵ مجموعه داده استاندارد مورد آزمایش قرار گرفته است. برای انجام آزمایش‌ها سعی شده است تا مجموعه داده‌ها از لحاظ تعداد کلاس‌ها، تعداد ویژگی‌ها و همچنین تعداد نمونه‌ها از حداکثر تنوع برخوردار باشند تا نتایج آزمایش‌ها تا حد ممکن دارای استحکام و قابل تعمیم باشد. جدول (۱) اطلاعات مختصری از این مجموعه داده‌ها در اختیار

می‌گذارد. برای اطلاعات بیشتر در مورد هر کدام از این مجموعه داده‌ها می‌توان به [۴۳] رجوع کرد.

جدول ۱: مجموعه داده‌ها

	Class	Features	Samples
Glass	6	9	214
Breast-C	2	9	683
Wine	3	13	178
Bupa	2	6	345
Yeast	10	8	1484

نتایج آزمایش‌ها بر روی ویژگی‌های هنجارسازی شده از این مجموعه داده‌ها گزارش شده است. به عبارت دیگر هر کدام از ویژگی‌های این مجموعه داده‌ها با میانگین صفر و واریانس یک، N(0,1)، هنجارسازی شده‌اند.

۴-۲ نتایج آزمایش‌ها

روش پیشنهادی در محیط MATLAB (ver 7.1) پیاده‌سازی و مورد آزمایش قرار گرفته است. نتایج آزمایش‌ها روی میانگین ۱۰ بار اجرای مستقل برنامه گزارش شده است. عملکرد روش‌های مختلف خوشه‌بندی با استفاده از فرایند بازبرچسب‌گذاری[۳۰] بین خوشه‌های به دست آمده و کلاس‌های واقعی و مقایسه آنها محاسبه شده است. جدول (۲) عملکرد روش‌های مختلف را در مقایسه با روش پیشنهادی نشان می‌دهد. مقادیر موجود در این جدول درصد خوشه‌بندی درست نمونه‌ها را بیان می‌کند. چهار سطر اول از این جدول نتایج عملکرد الگوریتم‌های پایه روی مجموعه داده‌های مختلف آمده است. نتایج آزمایش‌ها نشان می‌دهند که اگرچه هر کدام از این الگوریتم‌ها می‌توانند روی مجموعه داده خاصی نتایج قابل قبولی ارایه کنند، ولی روی مجموعه داده‌های دیگر کارایی پایینی از خود نشان می‌دهند. به عنوان مثال، الگوریتم Kmeans روی مجموعه Wine نتیجه نسبتا خوبی نسبت به روش‌های سلسله مراتبی اتصالی (Linkage) به دست می‌آورد. اما روی مجموعه داده‌های Bupa از بقیه ضعیف‌تر عمل می‌کند. همچنین، روش اتصال کامل (Complete-Linkage) روی مجموعه داده Breast-Cancer نیز به همین شکل عمل می‌کند.

یکی از دلایل این امر شکل‌های متنوع مجموعه‌های داده است که با توجه به اینکه هر کدام از روش‌های خوشه‌بندی پایه برای شکل‌های خاصی از داده‌ها طراحی شده‌اند، کارایی آنها نیز روی داده‌های مختلف متفاوت است. به عنوان مثال الگوریتم Kmeans روی مجموعه داده Breast-Cancer به خوبی عمل می‌کند، اما روی مجموعه داده Bupa کارایی ضعیف‌تری از خود نشان می‌دهد (سطر اول از جدول ۲) که این نتایج نشان می‌دهند که شکل داده‌ها Breast-Cancer نسبتا کروی است در حالی که در Bupa با داده‌های غیر کروی مواجه هستیم. نتایج االگوریتم‌های Linkage روی این مجموعه داده‌ها (سطرهای دوم و سوم از جدول ۲) نیز صحت این گفته را تایید می‌کند.

جدول ۲: نتایج آزمایش‌ها روی میانگین ۱۰ بار اجرای مستقل

			Glass %	Breast-C %	Wine %	Bupa %	Yeast %
Simple Methods [1,7,8,9,10,11]	Kmeans		45.65	95.13	96.63	54.55	40.20
	Single Linkage		36.45	65.15	37.64	57.68	34.38
	Average Linkage		37.85	70.13	38.76	57.10	35.11
	Complete Linkage		40.65	94.73	83.71	55.94	38.91
Ensemble Methods	EAC [4,19]	Kmeans Ensemble	47.76	95.46	96.63	54.49	45.46
		Full Ensemble	47.83	95.10	97.08	56.78	**47.17**
	EEAC	**Proposed Ensemble**	**48.88**	**98.33**	**98.31**	**58.39**	**47.17**

سه سطر آخر از جدول (۲) عملکرد روش‌های ترکیبی را در برابر مجموعه داده‌های مختلف نشان می‌دهد. با یک نگاه کلی به نتایج این سه سطر در مقایسه با چهار سطر فوق، بر این ادعا که "روش‌های ترکیبی منجر به تولید نتایج مستحکم‌تری نسبت به روش‌های غیر ترکیبی می‌شوند" صحه می‌گذارد. در اولین سطر از روش‌های ترکیبی، نتیجه ترکیب ۱۰۰ بار K-means با استفاده از روش EAC گزارش شده است. برای ایجاد پراکندگی در نتایج اولیه این روش ترکیبی، از نمونه‌برداری ۹۰٪ از داده‌ها به روش زیرنمونه‌برداری[۳۱] (بدون جایگذاری) و مقداردهی اولیه تصادفی استفاده شده است. همچنین، الگوریتم اتصال منفرد SL به عنوان تابع توافقی برای به دست آوردن خوشه‌های نهایی از ماتریس همبستگی به کار رفته است.

سطر دوم از روش‌های ترکیبی، خوشه‌بندی ترکیبی کامل است که در آن از الگوریتم‌های مختلفی به عنوان الگوریتم پایه استفاده شده است. در این روش تعداد اعضای شرکت‌کننده در ماتریس همبستگی و در نتیجه در ترکیب نهایی برابر با ۱۰۰ می‌باشد. از آن جایی که الگوریتم K-means در مورد خوشه‌های کروی خوب عمل می‌کند و در برابر خوشه‌های غیر کروی عملکرد پایینی دارد، در این روش تعداد ۷۰ تا از نتایج اولیه حاصل از اجراهای مستقل الگوریتم K-means (با همان پارامترهای ذکر شده) است. ۳۰ نتیجه باقیمانده از اجرای الگوریتم‌های سلسله‌مراتبی به دست آمده است. از آن جایی که نتایج حاصل از اجرای الگوریتم‌های سلسله‌مراتبی تحت شرایط ثابت همواره به جواب‌های کاملا مشابهی منجر می‌شود، از این الگوریتم‌ها به تعداد محدودی می‌توان در تولید نتایج اولیه استفاده کرد. در این آزمایش‌ها از پارامتر تعداد خوشه‌ها برای ایجاد پراکندگی در نتایج استفاده شده است. برای این کار، تعداد خوشه‌های از پیش تعیین شده برای الگوریتم‌های سلسله‌مراتبی مورد استفاده برابر با $k\pm2$ انتخاب شده است که k تعداد واقعی خوشه‌ها می‌باشد. الگوریتم‌های مورد استفاده برای خوشه‌بندی سلسله‌مراتبی اولیه و فاصله مورد استفاده توسط هر کدام از این الگوریتم‌ها در جدول (۳) آمده است [۸].

سطر آخر از جدول (۲) نتایج روش پیشنهادی را روی این مجموعه داده‌ها نشان می‌دهد. نتایج اولیه برای روش پیشنهادی دقیقا همان نتایج روش ترکیب کامل (سطر دوم از روش‌های ترکیبی) می‌باشد. تفاوت روش پیشنهادی با روش ترکیب کامل در تعداد خوشه‌های اولیه‌ای است که در ترکیب نهایی شرکت می‌کنند. در واقع در روش پیشنهادی تنها خوشه‌های با مقدار پایداری بالا در ماتریس همبستگی و در نتیجه در ترکیب نهایی ظاهر شده‌اند. مقدار آستانه برای حضور یا عدم حضور یک خوشه در ترکیب نهایی به صورت تطبیقی[۳۲] انتخاب شده است. به این معنی که ابتدا مقدار ۰,۹۵ به عنوان مقدار اولیه انتخاب شده است. اگر خوشه‌های انتخاب شده با این مقدار آستانه، کمتر از ۹۰٪ داده‌ها را شامل شوند، مقدار آستانه به اندازه ۰,۰۵٪ کاهش می‌یابد. این کار تا جایی ادامه می‌یابد که بیش از ۹۰٪ از داده‌ها توسط خوشه‌های انتخاب شده خوشه‌بندی شده باشند. نتایج آزمایش‌ها نشان‌دهنده کارایی روش پیشنهادی نسبت به سایر روش‌های پایه و همچنین ترکیبی است.

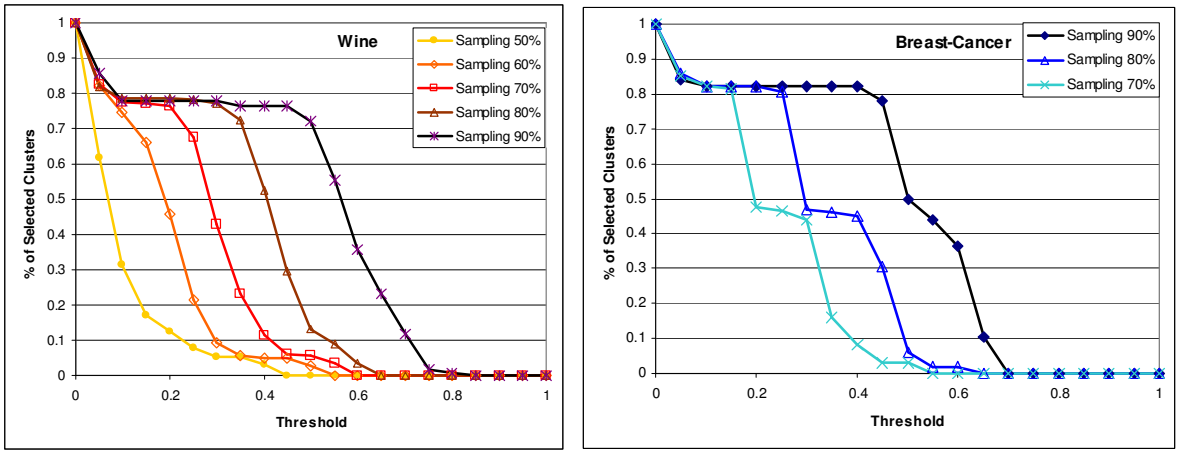
جدول ۳: الگوریتم‌های سلسله‌مراتبی مورد استفاده

Linkage Methods	Used Distance Measure
Single Linkage	کمترین فاصله بین نمونه‌ها
Average Linkage	بیشترین فاصله بین نمونه‌ها
Complete Linkage	میانگین فاصله بین همه جفت نمونه‌ها در دو خوشه
Weighted Linkage	میانگین فاصله وزن‌دار
Ward Linkage	مجموع افزایشی مربعات به عنوان نتیجه اتصال دو خوشه

شکل (۶) اثر مقدار آستانه را روی درصد خوشه‌های انتخابی در دو مجموعه داده Wine و Breast-Cancer نشان می‌دهد. با توجه به این شکل هر چه نرخ نمونه‌برداری افزایش یابد، میانگین پایداری خوشه‌های به دست آمده نیز افزایش خواهد یافت. به عنوان مثال در مجموعه داده Breast-Cancer با مقدار آستانه ۰,۴، تنها حدود ۸٪ از خوشه‌های با نرخ نمونه‌برداری ۷۰٪ انتخاب می‌شوند؛ در حالی که حدود ۸۲٪ از خوشه‌های با نرخ نمونه‌برداری ۹۰٪، با همین مقدار آستانه انتخاب می‌شوند. شکل (۷) اثر مقدار آستانه را روی کارایی روش پیشنهادی در دو مجموعه داده Wine و Breast-Cancer نشان می‌دهد. وقتی که مقدار آستانه از ماکزیمم مقدار پایداری خوشه‌ها بیشتر باشد، هیچ خوشه‌ای انتخاب نمی‌شود و بنابراین تمام درایه‌های ماتریس همبستگی برابر با صفر خواهند شد، در چنین حالتی الگوریتم SL که وظیفه استخراج خوشه‌های نهایی

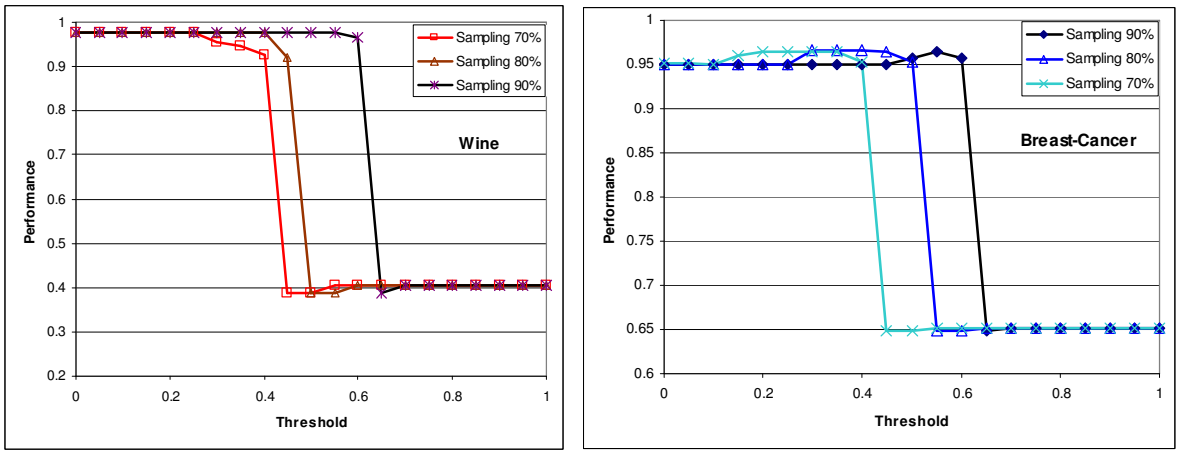
را از روی ماتریس همبستگی بر عهده دارد، به طور تصادفی یک نمونه را به هر یک از k-1 خوشه اختصاص می‌دهد و بقیه نمونه‌ها را به خوشه k-ام تخصیص می‌دهد. طی فرآیند بازبرچسب‌گذاری، خوشه k-ام به بزرگترین کلاس اختصاص داده می‌شود. به همین دلیل در شکل (۷)، وقتی هیچ خوشه‌ای انتخاب نشود، نرخ خوشه‌بندی از 1/k کمتر نمی‌شود. نتیجه دیگری که از شکل (۷) برمی‌آید این است که با استفاده از روش پیشنهادی می‌توان تنها در حضور زیرمجموعه کوچکی از خوشه‌های اولیه به جواب بالاتری از روش ترکیب کامل دست یافت. با توجه به شکل (۷) با روش نمونه‌برداری ۹۰٪، اگر مقدار آستانه برابر با ۰٫۶ در نظر گرفته شود، روش پیشنهادی در هر دو مجموعه داده به جواب نسبتا بهینه‌ای دست می‌یابد. اگر این مقدار آستانه در شکل (۶) مورد توجه قرار گیرد، مشاهده می‌شود که در هر دو مجموعه داده، تنها ۳۵٪ از کل خوشه‌های اولیه برای ترکیب نهایی مورد استفاده قرار می‌گیرند.

شایان ذکر است روش پیشنهادی می‌تواند روی انواع مجموعه داده‌های بزرگ یا کوچک مورد استفاده قرار گیرد. با توجه به اینکه روش پیشنهادی اندازه مجمع خوشه‌های اولیه را به طور چشمگیری کاهش می‌دهد، استفاده از آن برای مجموعه داده‌های بزرگ می‌تواند به بهبود پیچیدگی زمانی و سرعت بالاتر مسئله کمک کند.



(A) **(B)**

شکل ۶: اثر مقدار آستانه روی درصد خوشه‌های انتخابی در مجموعه داده‌های: A) Wine B)Breast-Cancer



(A) **(B)**

شکل ۷: اثر مقدار آستانه روی کارایی روش پیشنهادی در مجموعه داده‌های: A) Wine B)Breast-Cancer

۵. نتیجه‌گیری

در این مقاله یک روش جدید برای خوشه‌بندی ترکیبی پیشنهاد شده است که مبتنی بر زیرمجموعه‌ای از خوشه‌های اولیه می‌باشد. از آن جایی که کیفیت خوشه‌های حاصل از الگوریتم‌های پایه برابر نیست و حتی حضور تعدادی از آنها می‌تواند منجر به بدتر شدن نتیجه خوشه‌بندی ترکیبی شود، در این مقاله روشی برای انتخاب زیرمجموعه بهینه‌تر و موثرتر از خوشه‌های اولیه برای شرکت در ترکیب نهایی پیشنهاد شد. با توجه به این که روش‌های پیشین مبتنی بر ماتریس همبستگی برای ترکیب نتایج اولیه، توانایی لازم برای استخراج خوشه‌های نهایی از زیرمجموعه‌ای از خوشه‌های اولیه را ندارند، در این مقاله یک روش جدید برای انباشت نتایج در ماتریس همبستگی نیز پیشنهاد شده است که آن را روش انباشت مدارک توسعه یافته نامیده‌ایم. نتایج تجربی روش پیشنهادی خوشه‌بندی ترکیبی بر روی پنج مجموعه داده مختلف و متنوع نشان می‌دهد که این روش نسبت به روش‌های متداول و همچنین سایر روش‌های ترکیبی برتری قابل ملاحظه‌ای دارد. نتایج آزمایش‌ها نشان می‌دهند که استفاده از به طور متوسط ۳۵٪ از خوشه‌های اولیه می‌تواند نتایج خوشه‌بندی ترکیبی را به طور موثری بهبود بخشد. همچنین، بررسی‌ها نشان می‌دهند که اگرچه روش پیشنهادی از زیرمجموعه کوچکی از نتایج خوشه‌های اولیه استفاده می‌کند، به خاطر موثر بودن این زیرمجموعه، و همچنین، حذف خوشه‌های با کیفیت پایین که تاثیر منفی روی میزان همبستگی واقعی نمونه‌ها می‌گذارند، نتایج نهایی حتی از ترکیب کامل هم بهتر می‌شود.

مراجع

1-JainA., Murty M. N., and Flynn P. (1999), *Data clustering: A review.* ACM Computing Surveys, 31(3):264–323.

2 - Faceli K., Marcilio C.P. Souto d. (2006), *Multi-objective Clustering Ensemble*, Proceedings of the Sixth International Conference on Hybrid Intelligent Systems (HIS'06).

3 - Strehl A. and Ghosh J. (2002), Cluster ensembles - a knowledge reuse framework for combining multiple partitions. *Journal of Machine Learning Research*, 3(Dec):583–617.

4 - Fred, A.L.N. and Jain, A. K. (2002). "*Data Clustering Using Evidence Accumulation*", Proc. of the 16th Intl. Conf. on Pattern Recognition, ICPR02, Quebec City, pp. 276 – 280.

5 - Fred A. and Lourenco A. (2008), *Cluster Ensemble Methods: from Single Clusterings to Combined Solutions*, Studies in Computational Intelligence (SCI), 126, 3–30.

6 - Ayad H.G. and Kamel M.S. (2008), *Cumulative Voting Consensus Method for Partitions with a Variable Number of Clusters*, IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence, VOL. 30, NO. 1, 160-173.

7 - Topchy, A., Jain, A.K. and Punch, W.F. (2003), "*Combining Multiple Weak Clusterings*", Proc. 3d IEEE Intl. Conf. on Data Mining, pp. 331-338.

8 - Duda R.O., Hart P.E., and Stork D.G. (2001), *Pattern Classification*, second ed. Wiley, 2001.

9 - Jain A.K. and Dubes R.C. (1988), *Algorithms for Clustering Data*. Prentice Hall.

10 - Kaufman L. and Rosseeuw P.J. (1990), *Finding Groups in Data: An Introduction to Cluster Analysis*. John Wiley & Sons, Inc.

11 - Man Y. and Gath I. (1994), "*Detection and Separation of Ring-Shaped Clusters Using Fuzzy Clusters*" IEEE Trans. Pattern Analysis and Machine Intelligence, vol. 16, no. 8, pp. 855-861.

12 - Minaei-Bidgoli B., Topchy A. and Punch W.F. (2004), "*Ensembles of Partitions via Data Resampling*", in Proc. Intl. Conf. on Information Technology, ITCC 04, Las Vegas.

13 - Alizadeh H., Amirgholipour S.K., Seyedaghaee N.R. and Minaei-Bidgoli B. (2009), *Nearest Cluster Ensemble (NCE): Clustering Ensemble Based Approach for Improving the performance of K-Nearest Neighbor Algorithm*, 11th Conf. of the International Federation of Classification Societies, IFCS09, March 13–18. (in press).

14 - Mohammadi M., Alizadeh H. and Minaei-Bidgoli B. (2008), "*Neural Network Ensembles using Clustering Ensemble and Genetic Algorithm*", 2008 Intl. Conf. on Convergence and hybrid Information Technology, ICCIT08, Nov. 11-13, IEEE CS, Korea.

15 - Barthelemy J.-P. and Leclerc, B. (1995). The median procedure for partition, In *Partitioning Data Sets, AMS DIMACS Series in Discrete Mathematics*, Cox, I. J. et al eds., 19, pp. 3-34.

16 - Fern, X. and Brodley, C. E. (2003). Random Projection for High Dimensional Data Clustering: A Cluster Ensemble Approach, In Proc. *20th Int. conf. on Machine Learning*, *ICML 2003*.

17 - Dudoit S. and Fridlyand, J. (2003), "*Bagging to improve the accuracy of a clustering procedure*", Bioinformatics, 19 (9), pp. 1090-1099.

18 - Ayad H. and Kamel M. (2005), *Cluster-based cumulative ensembles*. In N. Oza and R. Polikar, editors, Proc. the 6th Intl. Workshop on Multiple Classifier Systems, pages 236–245. LCNS 3541.

19 - Fred A.L. and Jain A.K. (2005). *Combining Multiple Clusterings Using Evidence Accumulation*. IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 27(6):835–850.

20 - Kuncheva L.I. and Hadjitodorov S. (2004). *Using diversity in cluster ensembles*. In Proc. of IEEE Intl. Conference on Systems, Man and Cybernetics, pages 1214–1219.

21 - Fred A.L., Jain A.K. (2006), *Learning Pairwise Similarity for Data Clustering*, In Proc. of the 18th Int. Conf. on Pattern Recognition (ICPR'06).

22 - Baumgartner R., Somorjai R., Summers R., Richter W., Ryner L., and Jarmasz M. (2000), Resampling as a Cluster Validation Technique in fMRI, JOURNAL OF MAGNETIC RESONANCE IMAGING 11: pp. 228–231.

23 - Law M.H.C., Topchy A.P., and Jain A.K. (2004). Multiobjective data clustering. In *Proc. of IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, volume 2, pages 424–430, Washington D.C.

24 - Shamiry O., Tishby N. (2007), *Cluster Stability for Finite Samples*, 21st Annual Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS07).

25 - Lange T., Braun M.L., Roth V., and Buhmann J.M. (2003). *Stability-based model selection*. In Advances in Neural Information Processing Systems 15. MIT Press.

26 - Breckenridge J. (1989), *Replicating cluster analysis: Method, consistency and validity*, Multivariate Behavioral research.

27 - Fridlyand J. and Dudoit S. (2001). Applications of resampling methods to estimate the number of clusters and to improve the accuracy of a clustering method. Stat. Berkeley Tech Report. No. 600.

28 - Levine E., Domany E. (2001), *Resampling Method for Unsupervised Estimation of Cluster Validity*. Neural Computation 13: 2573-2593.

29 - Roth V., Lange T., Braun M., and Buhmann J. (2002), *A Resampling Approach to Cluster Validation*, Intl. Conf. on Computational Statistics, COMPSTAT.

30 - Roth V., Braun M.L., Lange T., and Buhmann J.M. (2002), *Stability-Based Model Order Selection in Clustering with Applications to Gene Expression Data*, ICANN 2002, LNCS 2415, pp. 607–612.

31 - Rakhlin A. and Caponnetto A. (2007), *Stability of k-means clustering*, In Advances in Neural Information Processing Systems 19, MIT Press, Cambridge, MA.

32 - Luxburg U.V. and Ben-David S. (2005), *Towards a statistical theory of clustering*, Technical report, PASCAL workshop on clustering, London.

33 - Roth V. and Lange T. (2004), *Feature Selection in Clustering Problems*, In Advances in Neural Information Processing Systems, NIPS04.

34 - Lange T., Roth V., Braun M.L., and Buhmann J.M. (2004). Stability-based validation of clustering solutions. *Neural Computation*, 16(6):1299–1323.

35 - Ben-Hur A., Elisseeff A. and Guyon I. (2002), *A stability based method for discovering structure in clustered data*, in Pasific Symposium on Biocomputing, vol. 7, pp. 6-17.

36 - Estivill-Castro V. and Yang J. (2003), *Cluster Validity Using Support Vector Machines*, DaWaK 2003, LNCS 2737, pp. 244–256.

37 - Moller U., Radke D. (2006), *A Cluster Validity Approach based on Nearest-Neighbor Resampling*, In Proc. of the 18th Int. Conf. on Pattern Recognition (ICPR'06).

38 - Brandsma T. and Buishand T.A. (1998), "*Simulation of extreme precipitation in the Rhine basin by nearest-neighbour resampling*", *Hydrology and Earth System Sciences 2*, pp. 195-209.

39 - Inokuchi R., Nakamura T. and Miyamoto S. (2006), *Kernelized Cluster Validity Measures and Application to Evaluation of Different Clustering Algorithms*, in proc. of the IEEE Int. Conf. on Fuzzy Systems, Canada, July 16-21.

40 - Xie X.L., Beni G. (1991), *A Validity measure for Fuzzy Clustering*, IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence, Vol.13, No.4, pp. 841–846.

41 - Das A.K. and Sil J. (2007), *Cluster Validation using Splitting and Merging Technique*, in proc. of Int. Conf. on Computational Intelligence and Multimedia Applications, ICCIMA.

42 - Fern X.Z. and Lin W. (2008), Cluster Ensemble Selection, SIAM International Conference on Data Mining (SDM08).

43 - Newman C.B.D.J., Hettich S. and Merz C. (1998), *UCI repository of machine learning databases,* http://www.ics.uci.edu/~mlearn/MLSummary.html

Abstract: Most of the recent studies have tried to create diversity in primary results and then applied a consensus function over all the obtained results to combine the weak partitions. In this paper a clustering ensemble method is proposed which is based on a subset of primary clusters. The main idea behind this method is using more stable clusters in the ensemble. The stability is applied as a goodness measure of the clusters. The clusters which satisfy a threshold of this measure are selected to participate in the ensemble. For combining the chosen clusters, a co-association based consensus function is applied. A new EAC based method which is called Extended Evidence Accumulation Clustering, EEAC, is proposed for constructing the Co-association Matrix from the subset of clusters. The proposed method is evaluated on five different UCI repository data sets. The empirical studies show the significant improvement of the proposed method in comparison with other ones.
Key words: Clustering Ensemble, Cluster Stability, Mutual Information, Co-association Matrix

واژه‌های انگلیسی به ترتیب استفاده در متن

[1] Robustness
[2] Novelty
[3] Stability
[4] Flexibility
[5] Hierarchical
[6] Partitional
[7] Initialization
[8] Features
[9] Resampling
[10] Evidence Accumulation Clustering
[11] Partitions
[12] Robust
[13] Pairwise
[14] Cluster Validity
[15] Jaccard Coefficient
[16] Support Vector Machine
[17] Outliers
[18] Nearest Neighbor Resampling
[19] Kernelized Validity Measure
[20] Full Ensemble
[21] Sum of Normalized Mutual Information
[22] Normalized Mutual Information
[23] Multiobjective
[24] Extended EAC (EEAC)
[25] Single Linkage(SL) or Average Linkage(AL)
[26] Goodness
[27] Perturbation
[28] Mutual Information (MI)
[29] Single Linkage
[30] Relabling
[31] Subsampling
[32] Adaptive