

DATA SCIENCE 2

VORLESUNG 4 - CLUSTERING

PROF. DR. CHRISTIAN BOCKERMANN

HOCHSCHULE BOCHUM

SOMMERSEMESTER 2025

- 1 Clustering – Gruppieren von Daten
- 2 Überblick Clustering-Verfahren
- 3 Der ***k***-Means Algorithmus
- 4 Clustering von Dokumenten

Clustering sucht Aufteilung von Daten in ähnliche Gruppen

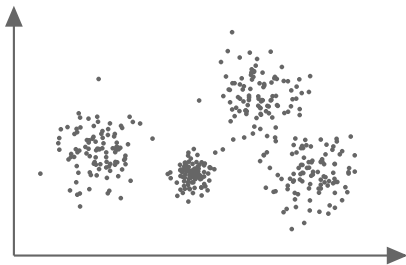
- Datenmenge $\mathbf{X}$ von Beispielen (keine Klassen gegeben!)
- Parameter k zu findender Gruppen
- Abstandsmaß $d : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$
- Qualitätsfunktion q

Ziel:

- Abstand *innerhalb* der Gruppen soll minimiert, Abstand *zwischen* den Gruppen soll maximiert werden

Beispiel: Clustering

Sei $\mathbf{C} = C_1, \dots, C_k$ eine Aufteilung der Daten $\mathbf{X}$ (ein *Clustering*)

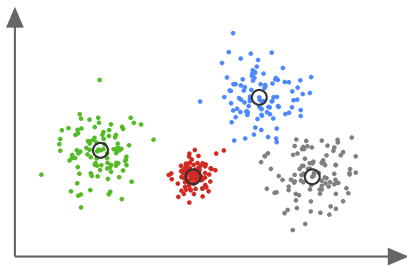


Qualitätsfunktion: (Innere Abstände)

$$q_{inner}(\mathbf{C}) = \sum_{i=1}^k \sum_{x \in C_i} d(x, \bar{\mathbf{c}}_i) \quad , \text{ mit } \bar{\mathbf{c}}_i \text{ Zentrum von } C_i$$

Beispiel: Clustering

Sei $\mathbf{C} = C_1, \dots, C_k$ eine Aufteilung der Daten $\mathbf{X}$ (ein *Clustering*)



Clustering auf Datenpunkten mit $k = 4$. Die schwarzen Kreise markieren jeweils das Zentrum $\bar{\mathbf{c}}_i$ des jeweiligen Cluster C_i .

Qualitätsfunktion: (Innere Abstände)

$$q_{inner}(\mathbf{C}) = \sum_{i=1}^k \sum_{x \in C_i} d(x, \bar{\mathbf{c}}_i) \quad , \text{ mit } \bar{\mathbf{c}}_i \text{ Zentrum von } C_i$$

Beispiel: Clustering

- Clustering unter mehreren Qualitätsaspekten:

$$q_{inner}(\mathbf{C}) = \sum_{i=1}^k \sum_{x \in C_i} d(x, \bar{\mathbf{c}}_i) \quad \rightarrow \text{Minimieren}$$

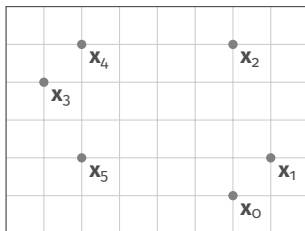
$$q_{outer}(\mathbf{C}) = \sum_{i=1}^k \sum_{x \in C_j, j \neq i} d(x, \bar{\mathbf{c}}_i) \quad \rightarrow \text{Maximieren}$$

Überblick Clustering-Verfahren

Einordnung von Clustering-Verfahren

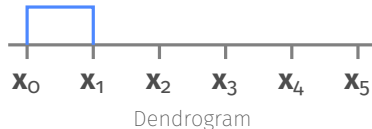
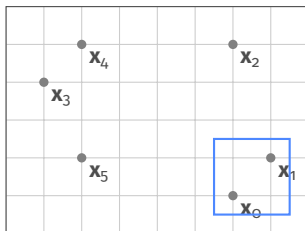
- Hierarchisches Clustering, agglomerativ/divisiv
- Iterative Verfahren (z.B. [k-Means](#))
- Dichte-basiertes Clustering (z.B. DBScan)
- Stochastische Verfahren
- Meta-Daten Basierte Verfahren

Hierarchisches Clustering (agglomerativ)



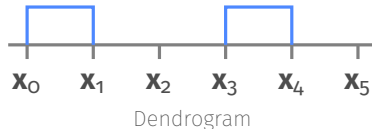
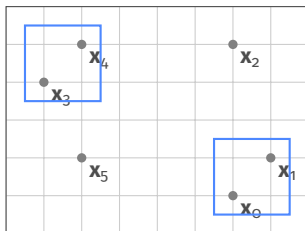
- Jeder Datenpunkt ist anfangs ein Cluster
- In jedem Schritt werden die **nächstgelegenen Cluster** zusammengefasst
- Erzeugt Hierarchie von Aufteilungen der Daten

Hierarchisches Clustering (agglomerativ)



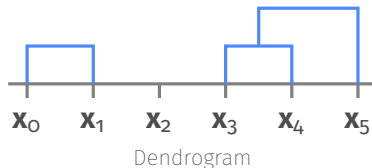
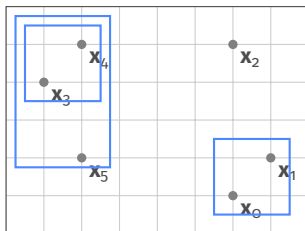
- Jeder Datenpunkt ist anfangs ein Cluster
- In jedem Schritt werden die **nächstgelegenen Cluster** zusammengefasst
- Erzeugt Hierarchie von Aufteilungen der Daten

Hierarchisches Clustering (agglomerativ)



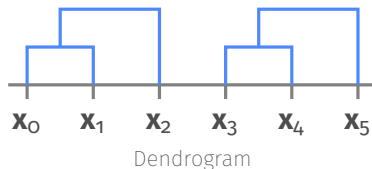
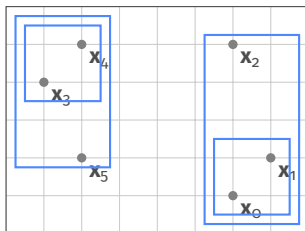
- Jeder Datenpunkt ist anfangs ein Cluster
- In jedem Schritt werden die **nächstgelegenen Cluster** zusammengefasst
- Erzeugt Hierarchie von Aufteilungen der Daten

Hierarchisches Clustering (agglomerativ)



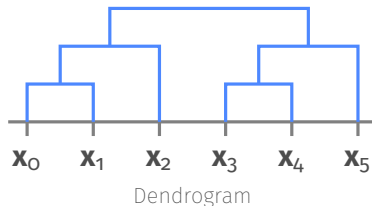
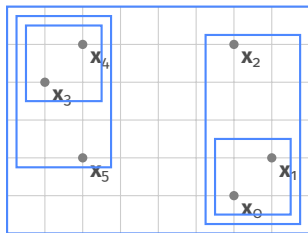
- Jeder Datenpunkt ist anfangs ein Cluster
- In jedem Schritt werden die **nächstgelegenen Cluster** zusammengefasst
- Erzeugt Hierarchie von Aufteilungen der Daten

Hierarchisches Clustering (agglomerativ)



- Jeder Datenpunkt ist anfangs ein Cluster
- In jedem Schritt werden die **nächstgelegenen Cluster** zusammengefasst
- Erzeugt Hierarchie von Aufteilungen der Daten

Hierarchisches Clustering (agglomerativ)



- Jeder Datenpunkt ist anfangs ein Cluster
- In jedem Schritt werden die **nächstgelegenen Cluster** zusammengefasst
- Erzeugt Hierarchie von Aufteilungen der Daten

Hierarchisches Clustering - nächstgelegene Cluster

Wir müssen in jedem Schritt die beiden **nächstgelegenen Cluster** **G** und **H** bestimmen, die zusammengefasst werden.

Hierarchisches Clustering - nächstgelegene Cluster

Wir müssen in jedem Schritt die beiden **nächstgelegenen Cluster** **G** und **H** bestimmen, die zusammengefasst werden.

Beim **single linkage** wird der Abstand von **G** und **H** definiert als

$$D(\mathbf{G}, \mathbf{H}) = \min_{\mathbf{p} \in \mathbf{G}, \mathbf{q} \in \mathbf{H}} d(\mathbf{p}, \mathbf{q})$$

⇒ minimaler Abstand zweier Punkte aus **G** und **H**.

Hierarchisches Clustering - nächstgelegene Cluster

Beim **complete linkage** wird der **maximale** Abstand zweier Punkte aus **G** und **H** als Abstand der Cluster benutzt:

$$D(\mathbf{G}, \mathbf{H}) = \max_{\mathbf{p} \in \mathbf{G}, \mathbf{q} \in \mathbf{H}} d(\mathbf{p}, \mathbf{q})$$

Die Cluster **G**, **H** mit kleinstem **$D(\mathbf{G}, \mathbf{H})$** werden zusammengefasst.

Der k -Means Algorithmus

k-Means Algorithmus

- Distanz-basiertes, iteratives Clustering-Verfahren
- Erzeugt k disjunkte Teilmengen von $\mathbf{X}$
- k ist Benutzer-Parameter
- Distanzfunktion wird auch von Benutzer gewählt

Algorithmus: k-Means

1. Wähle k zufällige Clusterpunkte $\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_k$ aus $\mathbf{X}$
2. Ordne jedes $\mathbf{x} \in \mathbf{X}$ dem nächstgelegenen $\mathbf{c}_i$ zu, d.h.

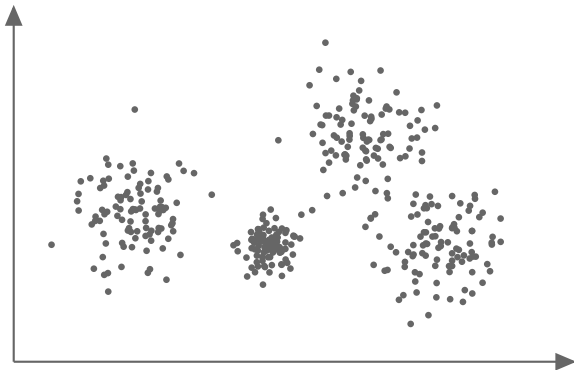
$$\mathbf{C}_i = \{ \mathbf{x} \in \mathbf{X} \mid \mathbf{x} \text{ am nächsten an } \mathbf{c}_i \}$$

3. Berechne neue Clusterpunkte

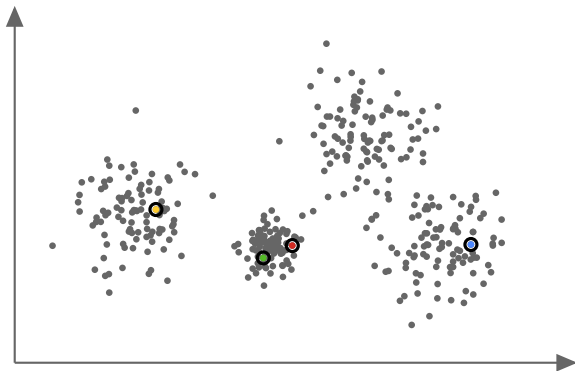
$$\bar{\mathbf{c}}_i = \frac{1}{|\mathbf{C}_i|} \sum_{\mathbf{x}_j \in \mathbf{C}_i} \mathbf{x}_j$$

Wenn $\bar{\mathbf{c}}_1, \dots, \bar{\mathbf{c}}_k \simeq \mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_k$, dann STOP, sonst springe zu 2. mit den neuen Punkten $\bar{\mathbf{c}}_1, \dots, \bar{\mathbf{c}}_k$

Beispiel: k-Means

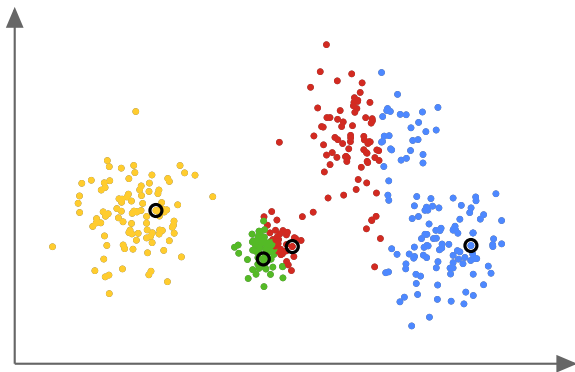


Beispiel: k-Means



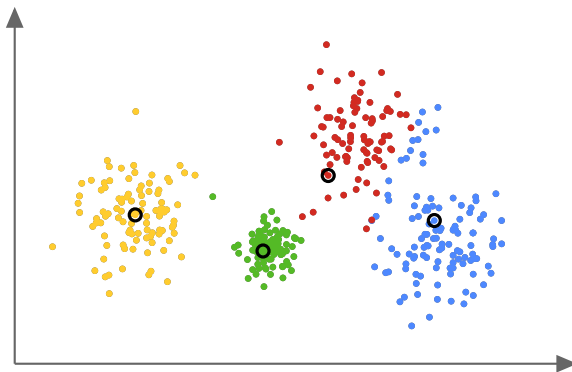
1. Wähle k zufällige Cluster-Mittelpunkte $\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_k$

Beispiel: k-Means



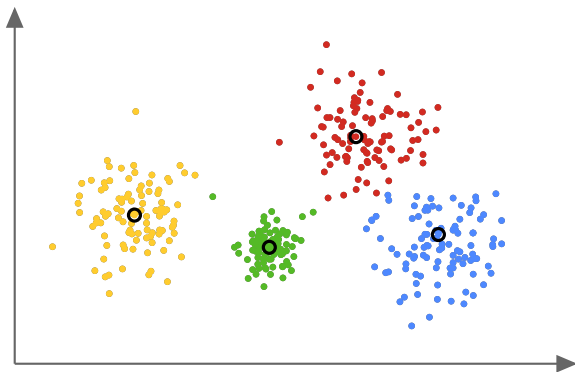
2. Ordne jedem Punkt seinen nächsten Cluster-Mittelpunkt zu

Beispiel: k-Means



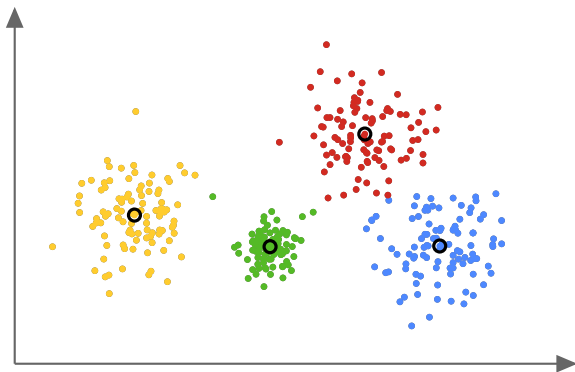
3. Für die Cluster neue Mittelpunkte berechnen, Punkte zuordnen

Beispiel: k-Means



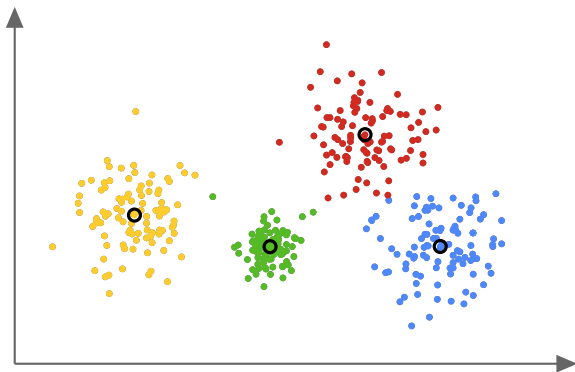
Schritte 2. und 3. wiederholen bis Cluster-Mittelpunkte stabil

Beispiel: k-Means



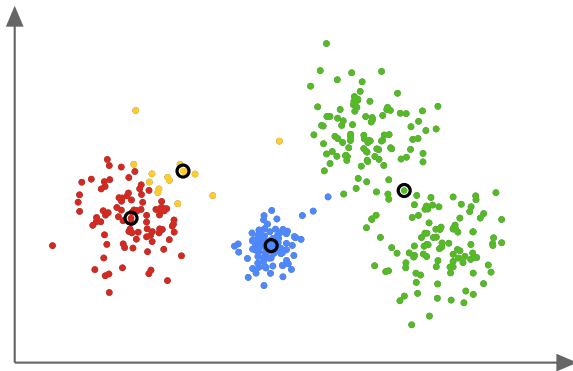
Schritte 2. und 3. wiederholen bis Cluster-Mittelpunkte stabil

Beispiel: k-Means



Schritte 2. und 3. wiederholen bis Cluster-Mittelpunkte stabil

Beispiel: Ergebnis hängt von zufälligen Startpunkten ab



k-Means Parameter

- Unterschiedliche Heuristiken bzgl. der Wahl der Startpunkte
- ggf. mehrfach Starten und Ergebnisse vergleichen

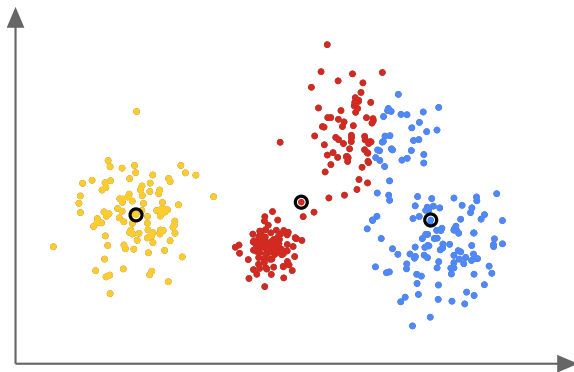
k-Means Parameter

- Unterschiedliche Heuristiken bzgl. der Wahl der Startpunkte
- ggf. mehrfach Starten und Ergebnisse vergleichen

Wie wählen wir Parameter k ?

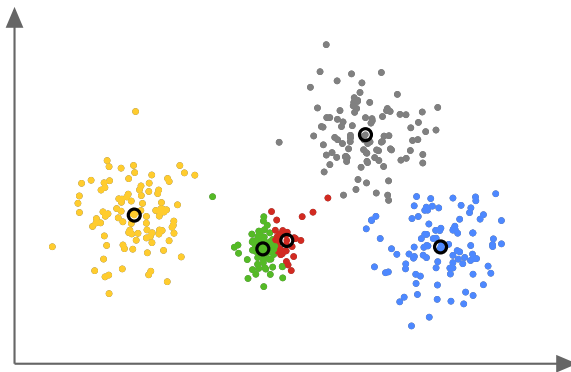
- Keine “So wird’s gemacht Lösung”
- Vorwissen über Daten nutzen
- k aus der Fragestellung ableiten?

Beispiel: k-Means mit verschiedenem k , gleiche Daten



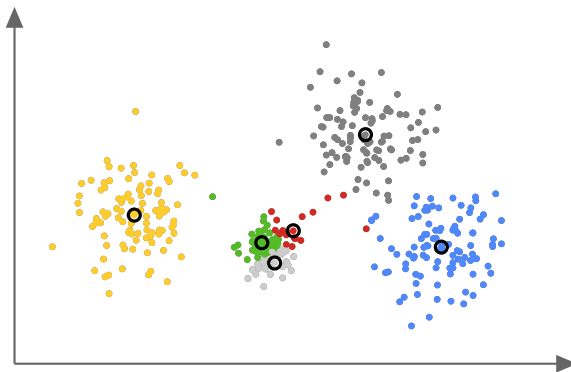
k-Means mit $k = 3$

Beispiel: k-Means mit verschiedenem k , gleiche Daten



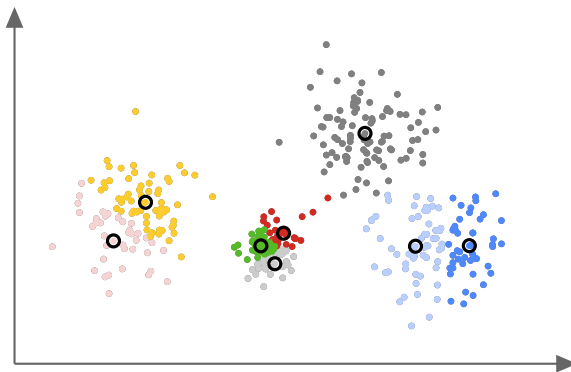
k-Means mit $k = 5$

Beispiel: k-Means mit verschiedenem k , gleiche Daten



k-Means mit $k = 6$

Beispiel: k-Means mit verschiedenem k , gleiche Daten



k-Means mit $k = 8$

k-Means Ergebnis

- k -Means liefert disjunkte Aufteilung der Daten $\mathbf{X}$
- Keine "Interpretation" durch Algorithmus

k-Means Ergebnis

- k -Means liefert disjunkte Aufteilung der Daten **X**
- Keine "Interpretation" durch Algorithmus
- Cluster nachfolgend manuell inspizieren?

a1	a2	cluster
3.750	3.500	3
4.075	3.411	5
3.628	3.745	3
3.644	3.581	3

k-Means basiert auf Distanz-Funktion

- Standard: Euklidische Distanz
(vgl. Data Science 1, Foliensatz 6, Folie 6+)
- Funktioniert nur auf **numerischen Attributen**

Daten einlesen, numerische Spalten auswählen

Wähle **number** Spalten mit `select_dtypes(..)`:

```
df = pd.read_csv('data/cluster-data.csv')  
  
# Selektiere alle numerischen Spalten:  
X = df.select_dtypes(include=['number'])
```

kMeans in Python

```
from sklearn.cluster import KMeans

# Parameter 'k' = 4
kmeans = KMeans(n_clusters=4)

# Clustering berechnen:
kmeans.fit(X)

# pro Datenpunkt nr des Clusters
clusters = kmeans.predict(X)
```

Clustering Ergebnis ist Liste der Cluster-Nummern:

```
clusters = kmeans.predict(X)  
  
# als Spalte in den DataFrame einfuegen:  
df['cluster'] = clusters
```

Bei $k = 4$ enthält `df['cluster']` die Werte `0, ..., 3`

Clustering plotten

Berechne für jedes $i = 0, \dots, 3$ eine Farbe zum Plotten

```
# Farb-Zuordnung:  
mapping = { 0: 'red', 1: 'blue', 2: 'green', 3: 'yellow'}  
  
# Neue Spalte 'color' mit den Farben berechnen:  
df['color'] = df['cluster'].replace(mapping)  
  
# Plotten von 'a1', 'a2' mit Farbe 'color'  
df.plot.scatter(x='a1', y='a2', c='color')
```



Probieren Sie es im Notebook aus!

Notebook: [Kurse/DataScience2/V11-kMeans.ipynb](#)

Clustering von Dokumenten

Beispiel: Gruppierung von Produkten

A bloomy Eau de
Parfume for men
by ProfumoInCasa.

A earthy Eau de
Parfume for men
by HappyScent,
now vegan!

A intense Eau de
Toilette for women
by Flavair. Organic
and vegan!

Beispiel: Gruppierung von Produkten

A bloomy Eau de
Parfume for men
by ProfumoInCasa.

A earthy Eau de
Parfume for men
by HappyScent,
now vegan!

A intense Eau de
Toilette for women
by Flavair. Organic
and vegan!

Als Text-Spalten im DataFrame:

ID	Produkt-Beschreibung
0	A bloomy Eau de Parfume for men by ProfumoInCasa.
1	A earthy Eau de Parfume for men by HappyScent, now vegan!
2	A intense Eau de Toilette for women by Flavair. Organic and vegan!

Repräsentation von Texten als **Bag of Words**

- Ein Attribut für jedes Wort
- Ein Dokument ist Vektor mit Anzahl der enthaltenen Worte

Beispiel:

A bloomy Eau de Parfume for women.

A	bloomy	earthy	Eau	de	Parfume	Toilette	for	men	women
1	1	0	1	1	1	0	1	0	1

Repräsentation von Texten als **Bag of Words**

- Ein Attribut für jedes Wort
- Ein Dokument ist Vektor mit Anzahl der enthaltenen Worte

Beispiel:

A bloomy Eau de Parfume for women.

A earthy Eau de Toilette for men.

A	bloomy	earthy	Eau	de	Parfume	Toilette	for	men	women
1	1	0	1	1	1	0	1	0	1
1	0	1	1	1	0	1	1	1	0

Wort-Vektoren mit Python/sklearn

```
from sklearn.feature_extraction.text import  
                                CountVectorizer  
  
vectorizer = CountVectorizer()  
  
# Lerne Worte und Anzahlen pro Dokument  
X = vectorizer.fit(df['text'])  
  
# Die Liste der Woerter:  
words = vectorizer.get_feature_names()  
  
# Erzeuge einen DataFrame mit Wort-Spalten  
wf = pd.DataFrame(X.toarray(), columns=words)
```

Bag of Words: Jedes Wort gleich wichtig?

Term Frequency (TF) – Anzahl der Vorkommen eines Wortes (*term*) in Dokument *d*:

$tf(t, d)$ = Häufigkeit von *t* in *d*

A	bloomy	earthy	Eau	de	Parfume	Toilette	for	men	women
1	1	0	1	1	1	0	1	0	1
1	0	1	1	1	0	1	1	1	0

Bag of Words: Jedes Wort gleich wichtig?

Term Frequency (TF) – Anzahl der Vorkommen eines Wortes (*term*) in Dokument *d*:

$tf(t, d)$ = Häufigkeit von *t* in *d*

A	bloomy	earthy	Eau	de	Parfume	Toilette	for	men	women
1	1	0	1	1	1	0	1	0	1
1	0	1	1	1	0	1	1	1	0

Idee: Ein Wort, das in nahezu allen Dokumenten vorkommt hat kaum Aussagekraft!

Bag of Words – TF/IDF Darstellung

Sei $\mathcal{D}$ die Menge aller Texte aus dem Datensatz:

- **document frequency** – in wie vielen Dokumenten ist das Wort t enthalten?

$$df(t) = |\{d \in \mathcal{D} \mid t \in d\}|$$

- **inverse document frequency** – logarithmierter Anteil der Dokumente, die t enthalten:

$$idf(t) = -\log \frac{df(t)}{|\mathcal{D}|} = \log \frac{|\mathcal{D}|}{df(t)}$$

TF/IDF Darstellung

TF/IDF Wert für Wort t in Dokument d :

$$tfidf(t, d) = tf(t, d) \cdot idf(t)$$

TF/IDF nimmt Gewichtung der vorherigen [Bag of Words](#) Darstellung vor:

A	bloomy	earthy	Eau	de	Parfume	Toilette	for	men	women
0.334	0.470	0	0.334	0.334	0.470	0	0.334	0	0.470
0.334	0	0.470	0.334	0.334	0	0.470	0.334	0.470	0

(Obiger Datensatz besteht nur aus 2 Dokumenten)

TF/IDF mit Python

```
from sklearn.feature_extraction.text
    import CountVectorizer, TfidfTransformer

vec = CountVectorizer()
tfidf = TfidfTransformer()

# erst zaehlen, dann tf/idf gewichten:
x = vec.fit_transform(df['text'])
x = tfidf.fit_transform(x)

words = vec.get_feature_names()

# DataFrame mit Wort-Spalten nach tf/idf
X = pd.DataFrame(x, columns=words)
```

Clustering von Dokumenten

- Vektor-Darstellung von Dokumenten (TF/IDF)
- Clustering z.B. mit k-Means
- Wie bewerten wir die Cluster?

Clustering von Dokumenten

- Vektor-Darstellung von Dokumenten (TF/IDF)
- Clustering z.B. mit k-Means
- Wie bewerten wir die Cluster?
- Exploration z.B. über WordCloud

WordCloud Erzeugung mit Python

```
from wordcloud import WordCloud
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline

# cluster auswaehlen:
cluster0 = X[X['cluster'] == 0].sum()

wc = WordCloud()
wc.generate_from_weights( cluster0 )

plt.imshow(wc, interpolation='bilinear')
plt.axis("off")
plt.show()
```

WordCloud Darstellung für Text-Cluster

