به نام خدا

تمرین سوّم مبانی داده کاوی

انواع روشهای خوشهبندی و ارزیابی داخلی

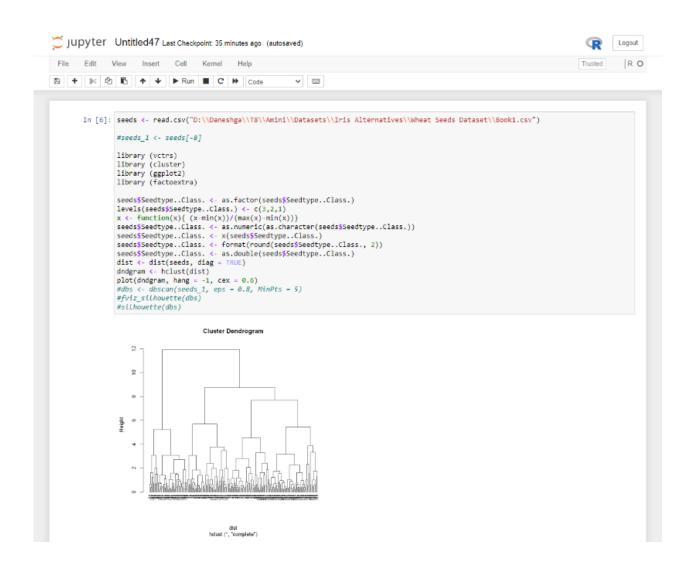
نام و نام خانوادگی: علی رضائی نژاد

شماره دانشجویی: ۹۶۰۱۸۴۱۵۶

مشخصه درس: ۹۱۳۵۱

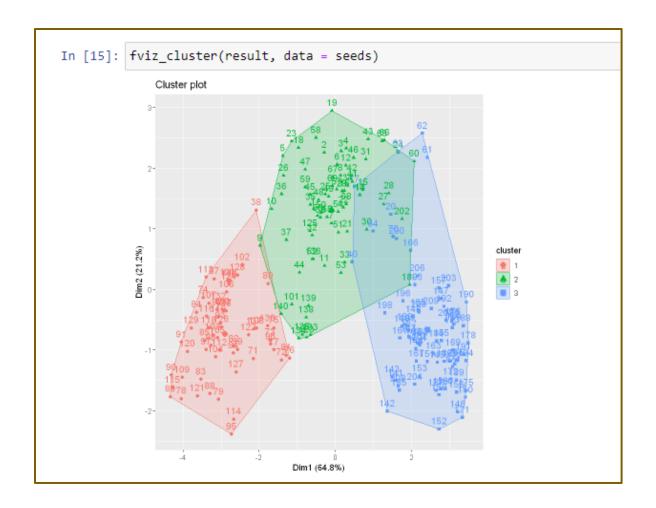
نام استاد: خانم امینه امینی

در تصاویر زیر خوشهبندی سلسلهمراتبی و K-Means برای داده اعمال شدهاند، با تابع clusGap تعداد ایدهآل خوشهها برای آنان مشخص و با روش سیلوئت با یکدیگر مقایسه شدهاند. برای تفکیک بهتر به دلیل شلوغی گزارش کار، جزییات و روشهای اضافه خوشهبندی (اَگنس و مبتنی بر چگالی (DBSCAN)) در صفحات بعدی ِ آن قابل ملاحظه هستند.



```
In [8]: gap_stat <- clusGap(seeds, FUN = hcut, nstart = 25, K.max = 10, B = 60)</pre>
          print(gap_stat)
          Clustering Gap statistic ["clusGap"] from call:
          clusGap(x = seeds, FUNcluster = hcut, K.max = 10, B = 60, nstart = 25)
          B=60 simulated reference sets, k = 1..10; spaceH0="scaledPCA"
           --> Number of clusters (method 'firstSEmax', SE.factor=1): 3
                     logW E.logW
                                          gap
                                                   SE.sim
           [1,] 5.456081 5.604181 0.1481000 0.02393523
           [2,] 4.998009 5.276138 0.2781290 0.03065482
           [3,] 4.739087 5.121138 0.3820507 0.02465629
           [4,] 4.633549 4.987034 0.3534855 0.02287228
           [5,] 4.530358 4.874390 0.3440322 0.02411007
           [6,] 4.452203 4.781621 0.3294178 0.02131340 [7,] 4.387688 4.710028 0.3223398 0.02018014
           [8,] 4.321201 4.649102 0.3279019 0.01879069
           [9,] 4.270001 4.596604 0.3266034 0.01881373
          [10,] 4.209305 4.549946 0.3406407 0.01940048
 In [9]: fviz_gap_stat(gap_stat)
               Optimal number of clusters
             0.4
             0.3
           Gap statistic
             0.2
                                   Number of clusters k
In [10]: plot(dndgram, hang = -1, cex = 0.6)
          rect.hclust(dndgram, k = 3, border = 2:5)
                                 Cluster Dendrogram
              5
              10
          Height
```

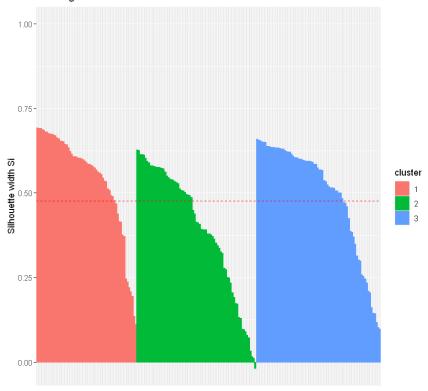
```
In [12]: gap_stat <- clusGap(seeds, FUN = kmeans, nstart = 25, K.max = 10, B = 50)</pre>
       print(gap_stat, method = "firstmax")
       Clustering Gap statistic ["clusGap"] from call:
       clusGap(x = seeds, FUNcluster = kmeans, K.max = 10, B = 50, nstart = 25)
       B=50 simulated reference sets, k = 1..10; spaceH0="scaledPCA"
        --> Number of clusters (method 'firstmax'): 3
               logW E.logW
                                     SE.sim
                               gap
        [1,] 5.456081 5.606971 0.1508900 0.02486115
        [2,] 4.992403 5.251690 0.2592878 0.02218211
        [3,] 4.711451 5.092371 0.3809196 0.01921845
        [4,] 4.603905 4.945422 0.3415161 0.02074357
        [5,] 4.502382 4.827443 0.3250612 0.01817300
        [6,] 4.421860 4.733605 0.3117454 0.02004306
        [7,] 4.351476 4.666000 0.3145236 0.02035093
        [8,] 4.278530 4.608974 0.3304437 0.01984516
        [9,] 4.225917 4.557995 0.3320784 0.01910565
       [10,] 4.173362 4.513025 0.3396633 0.01732672
In [13]: fviz_gap_stat(gap_stat)
           Optimal number of clusters
         0.4
        statistic
        Gap 9
         0.2
                                    7 8 9 10
In [14]: result <- kmeans( seeds, 3 , nstart = 25)</pre>
       K-means clustering with 3 clusters of sizes 61, 73, 76
       Cluster means:
            Area Perimeter Compactness Length.of.Kernel Width.of.Kernel
       1 18.72180 16.29738 0.8850869
                                        6.208934
                                                     3.722672
                         0.8789603
       2 14.62616 14.45082
                                        5.561466
       3 11.95053 13.26842 0.8520434
                                        5.227105
                                                     2.870908
         {\tt Asymmetry.Coefficient\ Length.of.Kernel.Groove\ Seedtype..Class.}
                                       6.066098
       1
                   3.603590
                                                   0.5081967
       2
                   2.658852
                                       5.187288
                                                   0.9041096
       3
                   4.777987
                                       5.091987
                                                   0.1052632
       Clustering vector:
         Within cluster sum of squares by cluster:
       [1] 184.3545 215.1341 199.4653
        (between_SS / total_SS = 78.3 %)
       Available components:
       [1] "cluster"
[6] "betweenss"
                       "centers"
                                   "totss"
                                               "withinss"
                                                           "tot.withinss"
                       "size"
                                   "iter"
                                               "ifault"
```



اندازهگیری کیفیت خوشهبندی

```
In [18]: s <- silhouette(result$cluster, dist)</pre>
         fviz_silhouette(s)
          s <- silhouette(cutree(dndgram, 3), dist)</pre>
          fviz_silhouette(s)
            cluster size ave.sil.width
          1
                  1
                       61
                                    0.54
          2
                       73
                                    0.40
                       76
                                    0.50
            cluster size ave.sil.width
          1
                  1
                       54
                                    0.30
          2
                  2
                     109
                                    0.36
          3
                       47
                                    0.53
```

Clusters silhouette plot Average silhouette width: 0.48



Clusters silhouette plot Average silhouette width: 0.39



ابتدا از علاوه بر بزرگتر بودن ضریب سیلوئت در حاصل خوشه بندی K-Means، میزان کمترِ سیلوئت منفی در نمودار آن نسبت به خوشه بندی سلسله مراتبی نیز بیانگر برتری این روش برای داده ی ما است.

Hierarchical Clustering

خوشهبندي سلسلهمراتبي

ابتدا از روش خوشهبندی سلسلهمراتبی را با روش پیشفرض (متد Agglomerative Nesting (AGNES) به عنوان کتابخانه ی stats و سپس از روش (AGNES) به عنوان یک روش برای خوشهبندی سلسلهمراتبی تجمعی (AHC) استفاده می کنیم. کتابخانههای stats و cluster هر دو توابعی برای رسم دندو گرام در اختیار ما قرار می دهند. از توابع plot برای این منظور استفاده شده است.

در آغاز، (همانگونه که در کامنتهای کد مشخص شده) ماتریس عدم شباهت را با فاصله ی اقلیدسی محاسبه کردم زیرا به عنوان ورودی برای الگوریتمهای خوشهبندی ضروری میباشد. گرچه در قسمت بعدی (AGNES) خواهیم دید که R به ما قابلیت ترسیم ماتریس عدم شباهت را از روی داده ی خام و در دستور خوشهبندی را میدهد. (نیاز به استفاده از لایبرری factoextra در ادامه توضیح داده شده است.)

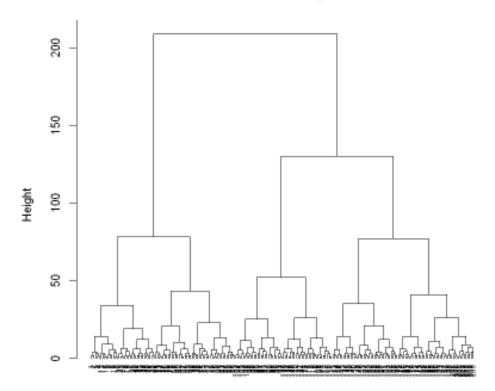
```
In [1]:
    seeds <- read.csv("D:\\Daneshga\\T8\\Amini\\Datasets\\Iris Alternatives\\Wheat Seeds Dataset\\Final Refined CSV.csv")
    library(cluster)
    library(gpurr)
    library(ggplot2)
    library(stats)

Welcome! Want to learn more? See two factoextra-related books at https://goo.gl/ve3WBa

In [2]: # Dissimilarity matrix
    d <- dist(seeds, method = "euclidean")
    # Hierarchical clustering using Complete Linkage
    hc1 <- hclust(d, method = "complete")

# Plot the obtained dendrogram
    plot(hc1, cex = 0.6, hang = -1)</pre>
```

Cluster Dendrogram



d hclust (*, "complete") کتابخانه کلاستر برای خوشهبندی AGNES چهار روش متفاوت را در اختیار ما قرار می دهد، در ادامه با محاسبه ضریب Agglomerative، بهترین روش (ward) را انتخاب کردم. همانطور که مشاهده می شود این مقدار را برای هر روش بررسی کردم که در نهایت روش ward منجر به بهترین نتیجه بود.

برای رجوع به داکیومنتیشنِ این کتابخانه از لینک استفاده شد.

cluster.pdf (r-project.org)

- برای استفاده از تابع map_dbl نیاز به کتابخانه ی purrr نیز بود که آن را در ابتدا (عکس اول) ایمپورت کردم.

```
In [19]: # Compute with agnes
hc2 <- agnes(seeds, method = "complete")

# Agglomerative coefficient
hc2$ac

0.990771966520607

In [4]: # methods to assess
m <- c( "average", "single", "complete", "ward")
names(m) <- c( "average", "single", "complete", "ward")

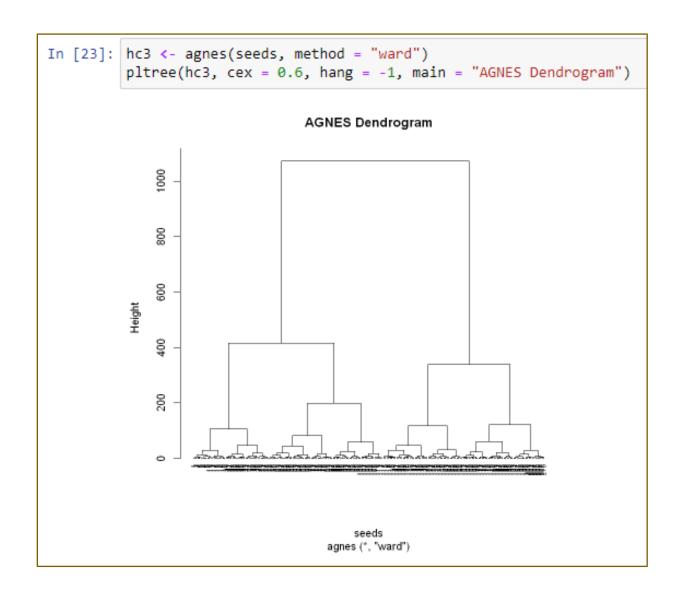
# function to compute coefficient
ac <- function(x) {
    agnes(seeds, method = x)$ac
}

map_dbl(m, ac)</pre>
```

average: 0.982241531667919 single: 0.665399341125739 complete: 0.990771966520607 ward: 0.998179129705023

در اولین cell، مقدار ضریب Agglomerative، به تنهایی و برای روش complete محاسبه شد و در قسمت دوّم هر چهار مقدار برای مقایسه راحت تر در یک بخش مشخص شدهاند.

در نهایت، نتیجه خوشهبندی تحت عنوان hc3 ذخیره، و نمودار درختی آن با تابع pltree (صفحه که ایکار کابخانه cluster) رسم شد.



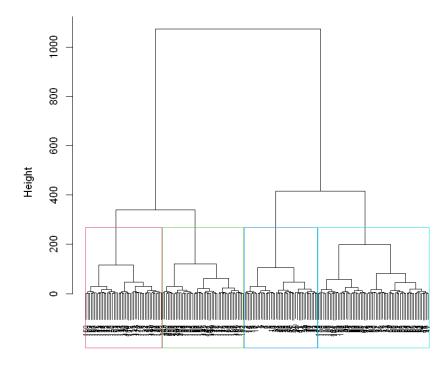
برای مشخص کردن واضح تر خوشه ها بر روی دندوگرام به طریق زیر میتوان آنان را مشخص کرد. تعداد خوشه ها (k) برابر چهار در نظر گرفته شده است. از آرگیومنت border برای تخصیص رنگ هر مستطیل استفاده می شود.

```
In [7]: # Ward's method
hc5 <- hclust(d, method = "ward.D2" )

# Cut tree into 4 groups
sub_grp <- cutree(hc5, k = 4)

In [9]: plot(hc5, cex = 0.6)
rect.hclust(hc5, k = 4, border = 2:5)</pre>
```

Cluster Dendrogram

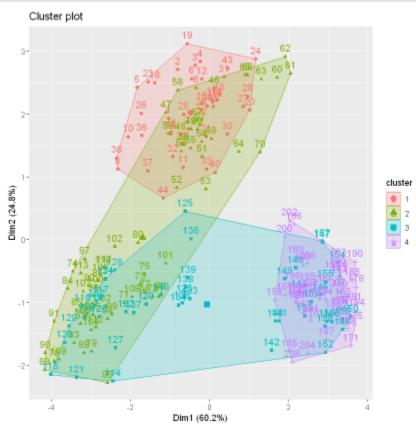


d hclust (*, "ward.D2")

برای نمایش خوشهها (در اینجا چهار خوشه) در قالب اسکتررپلات و در یک دستگاه دکارتی از تابع fviz_cluster که در کتابخانهی factoextra تعریف شده استفاده شد.

(برای نصب کتابخانه factoextra از فرمان زیر در ترمینال مامبا استفاده شد.)
mamba install -c conda-forge r-factoextra

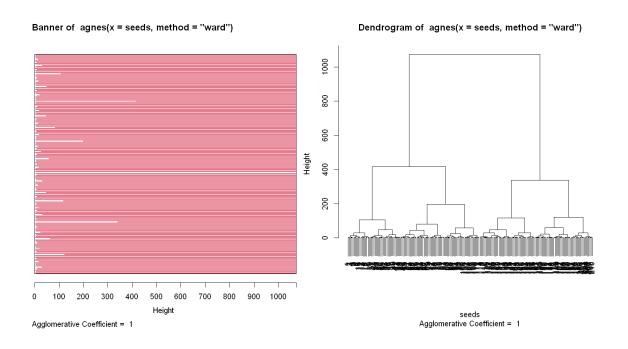




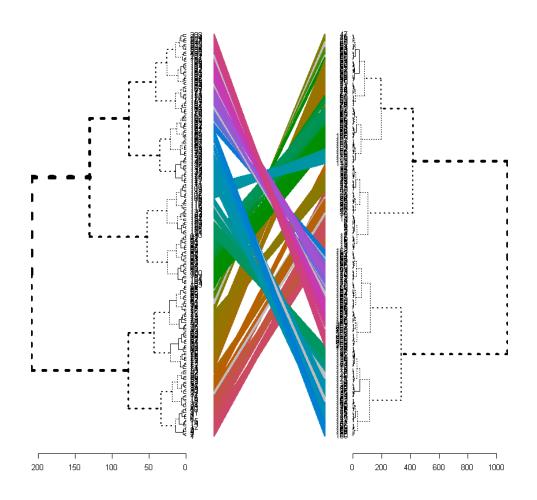
با تابع cutree نیز می توان خوشه هر یک از ۲۱۰ دانه گندم سنجیده شده را مشاهده کرد:

اجرای تابع plot برای hc3 (حاصل خوشهبندی AGNES):

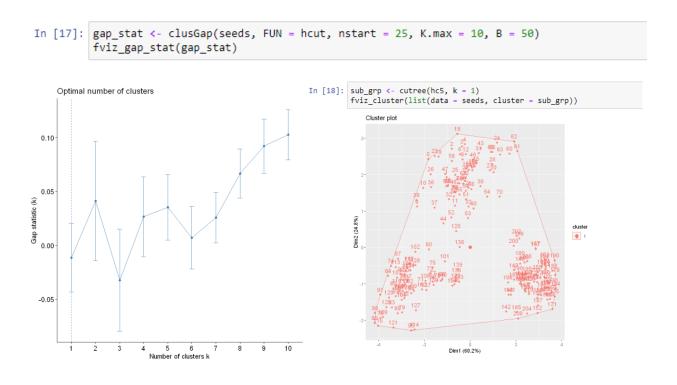
```
In [12]: plot(hc3)
```



برای مقایسه دو درخت با تابع tanglegram کتابخانه dendextend را به طریق زیر نصب و استفاده کردم.



همانطور که از میزان درهم پیچیدگی نمودار صفحه گذشته و همپوشانی خوشه ها نمایان بود «چهار» خوشه تعداد مناسبی نبود. تعداد ایده آل خوشه ها را به طریق زیر با clusGap و تعیین شیوه خوشه بندی به صورت سلسه مراتبی با hcut، بدست می آوریم.



بدین ترتیب خوشهبندی را دوباره و فقط با یک خوشه عملی کردم.

DBSCAN

خوشهبندی مبتنی بر چگالی

دو کتابخانهی کاربردی برای خوشهبندی DBSCAN در DBSCAN و fpc نام دارند. سالتفاده از این دو، خوشهبندی را برای دیتابیس خود و دیتای multishapes در ادامه با استفاده از این دو، خوشهبندی را برای دیتابیس خود و دیتای که در کتابخانه factoextra برای آشنایی با DBSCAN وجود داشت، اعمال کردم.

مروری بر ساختار مجموعه داده

```
In [3]: seeds <- read.csv("D:\\Daneshga\\T8\\Amini\\Datasets\\Iris Alternatives\\Wheat Seeds Dataset\\Final Refined CSV.csv")
    str(seeds)
    head(seeds)
#data(seeds)</pre>
```

```
'data.frame': 210 obs. of 9 variables:
$ Instance
                         : int 12345678910..
$ Area
                         : num 15.3 14.9 14.3 13.8 16.1 ...
$ Perimeter
                         : num 14.8 14.6 14.1 13.9 15 ...
: num 0.871 0.881 0.905 0.895 0.903 ...
$ Compactness
$ Length.of.Kernel
                         : num 5.76 5.55 5.29 5.32 5.66 ...
                         : num 3.31 3.33 3.34 3.38 3.56 ...
$ Width.of.Kernel
$ Asymmetry.Coefficient : num 2.22 1.02 2.7 2.26 1.35 ...
$ Length.of.Kernel.Groove: num 5.22 4.96 4.83 4.8 5.17 ...
$ Seedtype..Class.
                         : int 111111111...
```

A data.frame: 6 × 9

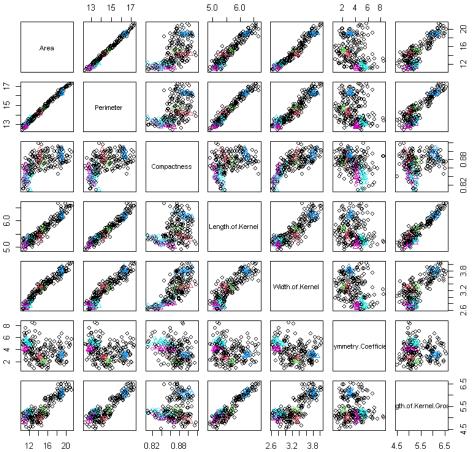
	Instance	Area	Perimeter	Compactness	Length.of.Kernel	Width.of.Kernel	Asymmetry.Coefficient	Length.of.Kernel.Groove	SeedtypeClass.
	<int></int>	<dbl></dbl>	<dbl></dbl>	<dbl></dbl>	<dbl></dbl>	<dbl></dbl>	<dbl></dbl>	<dbl></dbl>	<int></int>
1	1	15.26	14.84	0.8710	5.763	3.312	2.221	5.220	1
2	2	14.88	14.57	0.8811	5.554	3.333	1.018	4.956	1
3	3	14.29	14.09	0.9050	5.291	3.337	2.699	4.825	1
4	4	13.84	13.94	0.8955	5.324	3.379	2.259	4.805	1
5	5	16.14	14.99	0.9034	5.658	3.562	1.355	5.175	1
6	6	14.38	14.21	0.8951	5.386	3.312	2.462	4.956	1

برای ادامهی کار، دو فیلد instance و برچسب را از در محاسبات لحاظ نمی کنیم.

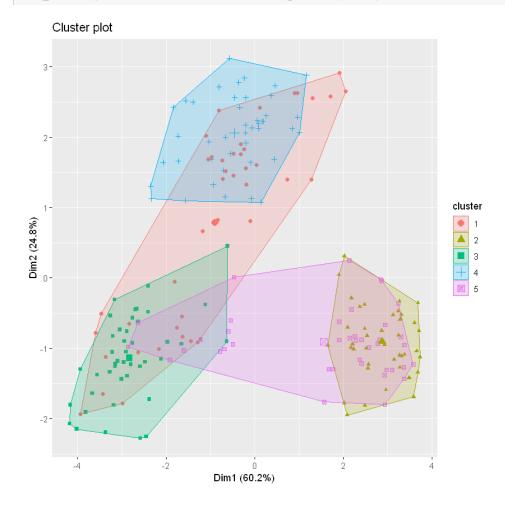
```
In [5]: # Installing Packages
        install.packages("fpc")
        # Loading package
        library(fpc)
        # Remove label form dataset
        seeds_1 <- seeds[-9]
        seeds_2 <- seeds_1[-1]
        # Fitting DBScan clustering Model
        # to training dataset
        set.seed(220) # Setting seed
        Dbscan_cl <- dbscan(seeds_2, eps = 0.45, MinPts = 5)</pre>
        Dbscan_cl
        # Checking cluster
        Dbscan_cl$cluster
        # Table
        table(Dbscan_cl$cluster, seeds$Seedtype..Class.)
        # Plotting Cluster
        plot(Dbscan_cl, seeds_2, main = "DBScan")
```

dbscan Pts=210 MinPts=5 eps=0.45 0 1 2 3 4 5 border 163 3 4 5 7 1 seed 051687 total 163 8 5 11 15 8 $0 \cdot 0 \cdot$ 0 -0 -3 -3 -0 -0 · $0 \cdot \ 0 \cdot \ 0 \cdot \ 0 \cdot \ 5 \cdot \ 0 \cdot \ 0 \cdot \ 0 \cdot \ 5 \cdot \ 0 \cdot \ 0 \cdot \ 0$ 1 2 3 0 57 59 47 1 8 0 0 2 5 0 0 3 0 11 0 4 0 0 15 5 0 0 8

DBScan 5.0 6.0

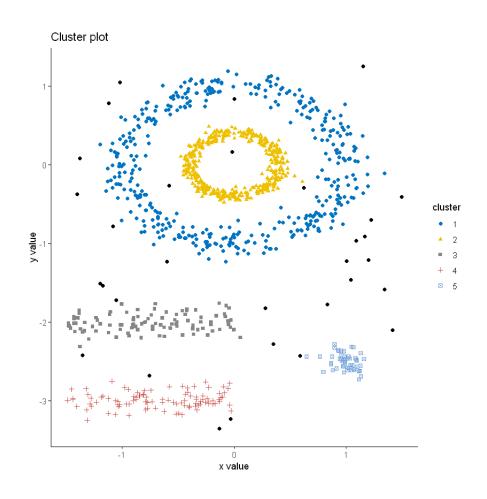


خوشهبندی K-Means برای مقایسه، با پنج خوشه و پس از حذف دو ستون زائد (۲ از ۹) انجام شده است:

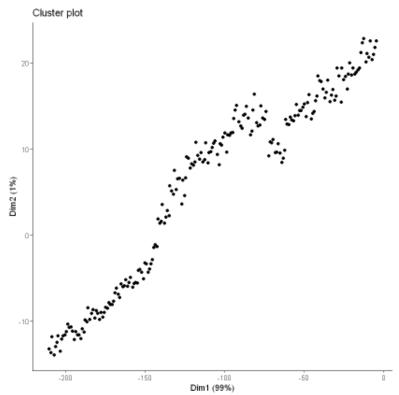


اجرای DBSCAN

نست:







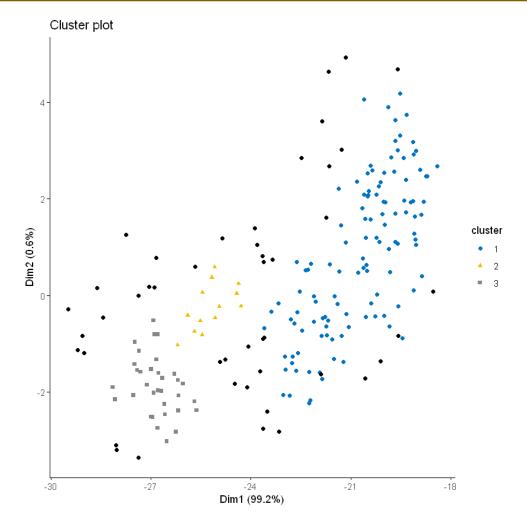
این خوشهبندی به دو دلیلِ کوچکی بیش از حد حداکثر شعاع همسایگی و حساب کردن فیلد شمارش و کلاس، اشتباه است. تمامی دادهها با نقطههای مشکی رنگ نمایش داده شده اند که نشانگر آن است که با این شعاع کوچک همه دادهها نویز محسوب میشوند.

در صفحه بعد، با اصلاح این اشکالات، خوشهبندی DBSCAN با هردو لایبرری نام برده شده اجرا شده و به دو صورت آماری (تعداد و وضعیت کلاسترها) و بصری نمایش داده شده است. مشاهده می شود که هر دو روش با شعاع ۰/۸ و حداقل تعداد نقاط در همسایگی (MinPts) برابر با ۵، سه خوشه تشکیل دادند. تصویر صفحه زیرین بیانگر موقعیت این خوشه ها در فضای دو بعدی است.

```
File Edit View Insert Cell Kernel Help

Trusted R O

Trus
```

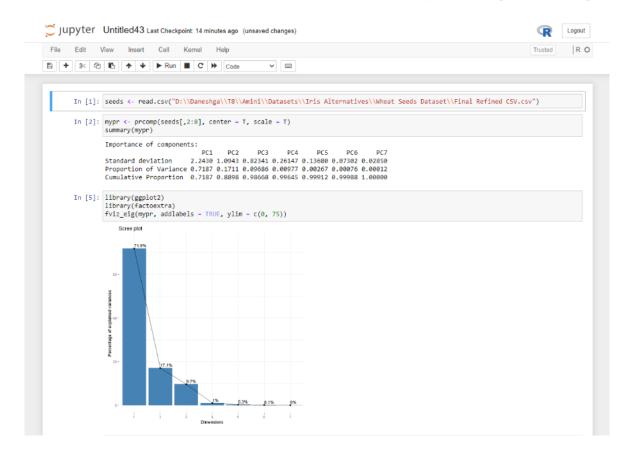


اندازه گیری کیفیت خوشهبندی کیفیت خوشهبندی

برای اندازه گیری کیفیت خوشهبندی های صورت گرفته از متد داخلی سیلوئت که با مقایسه میزان نزدیکی عناصر دادهای در یک خوشه و میزان تمایز یک خوشه از خوشههای دیگر عمل می کند، استفاده می کنیم. این سنجش کیفیت در صفحه ی ۵ و ۶ قابل ملاحظه است.

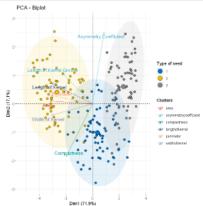
$$s(oldsymbol{o}) = rac{b(oldsymbol{o}) - a(oldsymbol{o})}{\max\{a(oldsymbol{o}), b(oldsymbol{o})\}}$$

آنالیزهای متفرقه با خوشهبندی K-Means:



```
In [6]: var <- get_pca_var(mypr)
var</pre>
           Principal Component Analysis Results for variables
           Name Description
"Scoord" "Coordinates for the variables"
2 "$cor" "Correlations between variables and dimensions"
3 "$cos2" "Cos2 for the variables"
4 "$contrib" "contributions of the variables"
 In [7]: head(var$cos2, 4)
           A matrix: 4 × 7 of type dbl
                                  Dim.1
                                                 Dim.2
                                                                Dim.3
                                                                              Dim.4
                                                                                             Dim.5
                                                                                                            Dim.6
                                                                                                                          Dim.7
            Area 0.9939475 0.0008450341 0.0004537914 0.002563424 0.0007819319 0.0009696239 4.386450e-04
                   Perimeter 0.9810106 0.0084506414 0.0024277403 0.005967849 0.0005683714 0.0012093247 3.655035e-04
            Compactness 0.3860875 0.3353216539 0.2688363174 0.007572511 0.0020708334 0.0001059541 4.276371e-06
             Length.of.Kernel 0.9026272 0.0508079572 0.0304376025 0.004743335 0.0109831433 0.0003990721 1.739726e-06
 In [9]: install.packages('corrplot')
            package 'corrplot' successfully unpacked and MD5 sums checked
           The downloaded binary packages are in C:\Users\Ali\AppData\Local\Temp\Rtmp8Y51EI\downloaded_packages
In [11]: library(corrplot)
  corrplot(var$cos2, is.corr=FALSE)
           corrplot 0.89 loaded
```





```
In [14]: comp <- data.frame(mypr$x[,1:3])</pre>
In [15]: fviz_nbclust(comp, kmeans, method - "silhouette") + theme_classic()
In [17]: install.packages("RColorBrewer")
              package 'RColorBrewer' successfully unpacked and MD5 sums checked
              The downloaded binary packages are in C:\Users\Ali\AppData\Local\Temp\Rtmp8Y51EI\downloaded_packages
In [18]: library(RColorBrewer)
k < - kmeans(comp, 2, nstart-25, iter.max-1800)
palette(alpha(brewer.pal(9, 'Sett'), 0.5))
plot(comp, col=k$clust, pch=16)</pre>
                                                                           PC3
package 'scatterplot3d' successfully unpacked and MD5 sums checked
              The downloaded binary packages are in C: \verb|Visers|Ali|AppData|Local|Temp|Rtmp8Y51EI|downloaded_packages|
In [21]: summary(k)
                                 Length Class Mode
210 -none numeric
6 -none numeric
1 -none numeric
2 -none numeric
1 -none numeric
             cluster
centers
totss
withinss
tot.withinss
betweenss
slze
iter
ifault
In [22]: table(k$cluster)
               1 2
77 133
```

خلاصهای از فرم دیتاست و مفهوم Compactness:

	Α	Р	С	L	W	AC	LG	Class
1	15.26	14.84	0.871	5.763	3.312	2.221	5.22	1
2	14.88	14.57	0.8811	5.554	3.333	1.018	4.956	1
3	14.29	14.09	0.905	5.291	3.337	2.699	4.825	1
				•	•			
	-			-	-	-	-	
			•	•	•			
210	12.3	13.34	0.8684	5.243	2.974	5.637	5.063	3

مساحت 1. A = Area

2. P = Perimeter

3. C = Compactness دنسیتی اچگالی کل دانه

طول هسته طول هسته

عرض هسته عرض هسته

6. AC = Asymmetry Coefficient ضریب عدم تقارن

Compactness به این صورت تعریف شده است:

$$C=rac{4\pi A}{P^2}$$
 p = perimeter محیط a = Area مساحت π = 3.14 (میلی متر مربع)