# Задание по реализации алгоритма k-means

Выполнил: ***Амир Валеев 213 группа***

In [101…
```
import numpy as np

%matplotlib inline
import matplotlib.pyplot as plt
```

# 1. Реализация k-means

In [154…
```
class K_means:

    def train(self, X, k, mode = 'random', step_by_step = False):
        self.iter_count = 0
        self.X = X
        if mode == 'random':
            self.centroids = X[np.random.choice(len(X), k)]
        elif mode == 'km++':
            self.init_further(X, k)
        else:
            raise ValueError('Wrong mode type!')

        if step_by_step:
            self.history = {'centroids': [self.centroids], 'clusters': []}
        else:
            self.history = None

        self.complete = False

        while not self.complete:
            self.clusters_assignment = self.assign_clusters(X)
            new_centroids = self.change_centroids(X, k, self.clusters_assignment);
            self.complete = np.linalg.norm(new_centroids - self.centroids) < 1e-3
            self.centroids = new_centroids        #обучаем пока отклонение новых центров не достигает 10^-3
            if step_by_step:
                self.history['centroids'].append(self.centroids)
                self.history['clusters'].append(self.clusters_assignment)

            self.iter_count += 1
            if self.iter_count > 1000:
                break


    def init_further(self, X, k):              #Инициализация с выбором самого дальнего
        self.centroids = [X[np.random.randint(0, len(X) - 1)]]
        for i in range(1, k):
            dist = np.array([np.linalg.norm(self.centroids - x, axis=1).min() for x in X])
            index = np.argmax(dist)
            self.centroids.append(X[index])


    def assign_clusters(self, X):
        return np.array([np.argmin(np.linalg.norm(self.centroids - x, axis=1)) for x in X])


    def change_centroids(self, X, k, clusters_assignment):
        new_centroids = np.zeros_like(self.centroids)

        for i in range(k):
            cluster = X[clusters_assignment == i]
            if not len(cluster):
                continue
            new_centroids[i] = np.mean(cluster, axis=0)

        return new_centroids


    def silhouette_ratio(self):
        ratio = []
        for k in range(len(self.centroids)):
            dist_inside = np.array(list(map(np.linalg.norm, self.X[self.clusters_assignment == k]
                                                             - self.centroids[k])))
            average_inside = sum(dist_inside)/len(dist_inside)
            centroids_without = np.delete(self.centroids, k, axis=0)
            closest_cluster = np.argmin(np.linalg.norm(centroids_without - self.centroids[k], axis=1))
            average_to_nearest = np.linalg.norm(centroids_without[closest_cluster] - self.centroids[k])
            ratio.append((-average_inside + average_to_nearest) / max(average_inside, average_to_nearest))
        return (np.std(ratio), np.mean(ratio))


    def group_by_clusters(self):
        clusters_sorted = list(range(len(self.centroids)))
```

```
        clusters_sorted.sort(key = lambda x: len(self.X[self.clusters_assignment == x]))
        new_set = sort_obj_in_cluster(self.X[self.clusters_assignment == clusters_sorted[0]],
                                      self.centroids[clusters_sorted[0]])
        for k in range(1, len(self.centroids)):
            new_set = np.array(np.append(new_set,
                                          sort_obj_in_cluster(self.X[self.clusters_assignment == clusters_sorted[k
                                                              self.centroids[clusters_sorted[k]]), axis = 0))
        return new_set


    def __str__(self):
        if self.complete:
            print('Finished after {} iterations'.format(self.iter_count))
            if self.history:                      # Можно вывести пошаговую информацию о том как сработал алгоритм

                fig, axs = plt.subplots(self.iter_count - 1)
                fig.set_figheight(6 * (self.iter_count - 1))
                fig.set_figwidth(6)

                for i in range(self.iter_count-1):
                    axs[i].scatter(self.X[:, 0], self.X[:, 1], c=self.history['clusters'][i-1])
                    for k in range((len(self.centroids))):
                        axs[i].scatter([self.history['centroids'][i][k][0]],
                                       [self.history['centroids'][i][k][1]], s=400, marker='*')

            else:

                fig, axs = plt.subplots()
                axs.scatter(self.X[:, 0], self.X[:, 1], c=self.clusters_assignment)
                for k in range((len(self.centroids))):
                    axs.scatter([self.centroids[k][0]], [self.centroids[k][1]], s=400, marker = "*")
               # axs.scatter(km_1.centroids[1][0],km_1.centroids[1][1], color = "blue", s = 200)

        else:
            print('Still uncomplete!')
        return ""
```

## 2. Зависимость от начальной инициализации

### Посмотрим за сколько итераций в среднем производится кластеризация в двух вариантах инициализации

- Произвольная инициализация ( стоит изначально )
- Метод взятия дальнего соседа ( в параметре *mode* указать ***further*** )

In [278…

```
sets = [np.random.uniform(-100, 100, size=(200,2)) for x in range(100)]
```

### Генирируем 100 произвольных датасетов

In [279…

```
km = K_means()
iter_rand = []
iter_further = []
for i in range(100):
    km.train(sets[i], 4)
    iter_rand.append(km.iter_count)
    km.train(sets[i], 4, mode = 'km++')
    iter_further.append(km.iter_count)
```

### Построим график количеста итераций в зависимости от метода

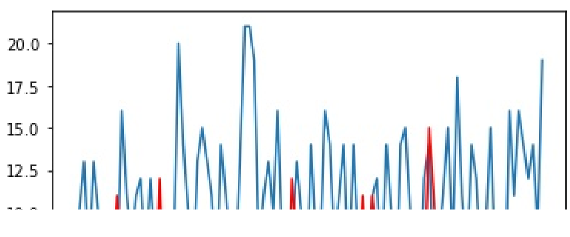
***blue*** - рандом, ***red*** - метод K-means++

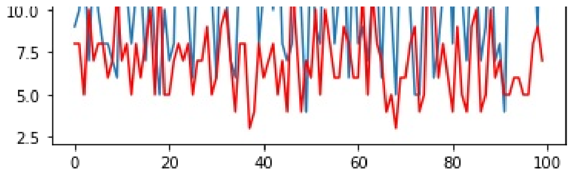
Видим, что K-means++ сходится быстрее

In [280…

```
fig, axs = plt.subplots()

axs.plot(range(100), iter_rand)
axs.plot(range(100), iter_further, color = "red")
```

Out[280… [<matplotlib.lines.Line2D at 0x7f9374dcfe80>]






Среднее число итераций при рандомном выборе

In [281…
```
sum(iter_rand)/100
```

Out[281… 10.76

Среднее число итераций в методе k-means++

In [282…
```
sum(iter_further)/100
```

Out[282… 7.02

В среднем сходится быстрее

## 3. В каких задачах применим K-means

# Рассмотрим сеты на которых метод k-means работает ***хорошо***

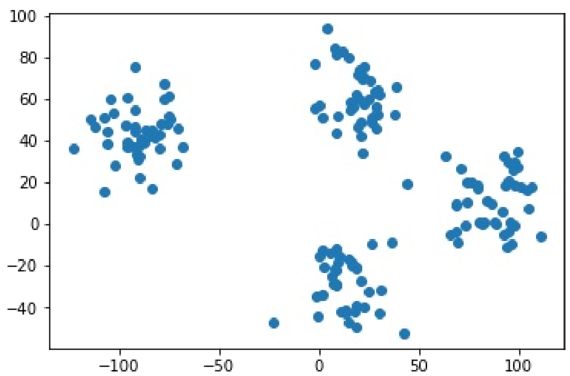
Из алгоритма подбора очередного центроида и использования **2-ой Гёльдеровской нормы** понятно, что метод пытается разделить все данные **на сферы**, поэтому логичнее работает на данных состоящий из таких сфер

In [170…
```
def make_gauss_classes(k, scale = 0):
    if not scale:
        scale = np.random.uniform(5, 15)
    dataset = np.random.normal(loc = np.random.uniform(-100,100, size=(1,2)),
                               scale = scale, size = (np.random.randint(10, 100),2))
    for i in range(k-1):
        dataset = np.append(dataset, np.random.normal(loc = np.random.uniform(-100,100, size=(1,2)),
                                                      scale = scale, size = (np.random.randint(10,100),2)), axis
    np.random.shuffle(dataset)
    return dataset
```

Реализуем функцию для создания гауссовых распределений на плоскости

In [867…
```
set_1 = make_gauss_classes(4)

fig, axs = plt.subplots()
axs.scatter(set_1[:, 0], set_1[:, 1])
```

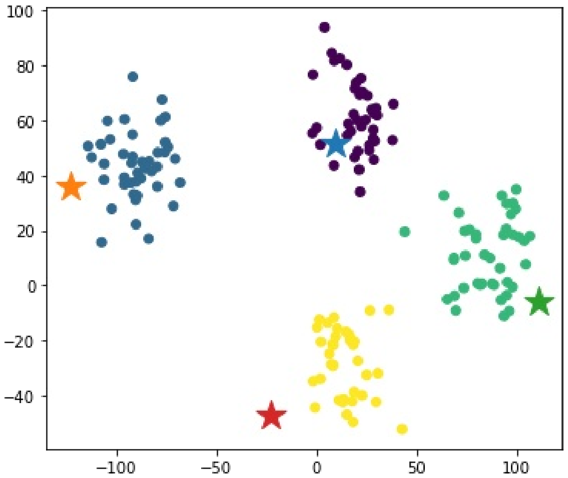
Out[867… <matplotlib.collections.PathCollection at 0x7f936a9e5700>

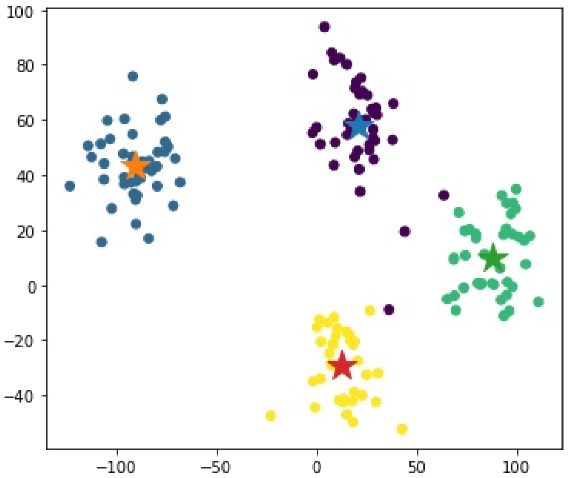


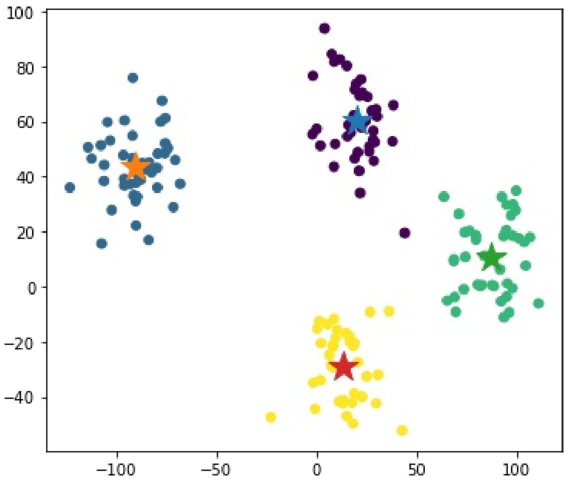

In [870…
```
km_1 = K_means()
km_1.train(set_1, 4, mode = "km++", step_by_step = True)
```

```
print(km_1)
```

Finished after 4 iterations



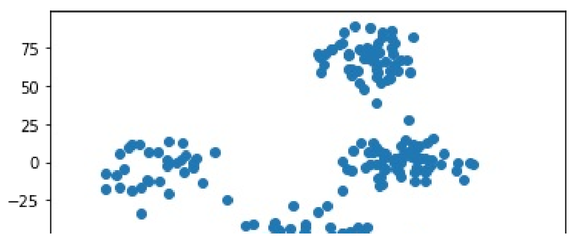



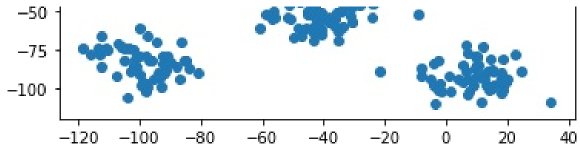




In [304…

```
set_2 = make_gauss_classes(6, scale = 10)

fig, axs = plt.subplots()
axs.scatter(set_2[:, 0], set_2[:, 1])
```

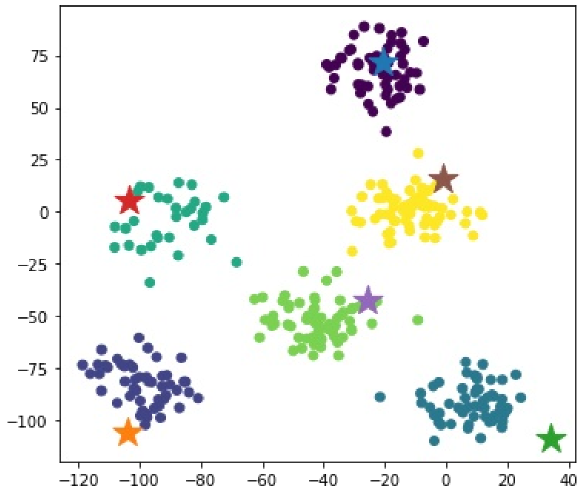
Out[304… <matplotlib.collections.PathCollection at 0x7f937474bc70>

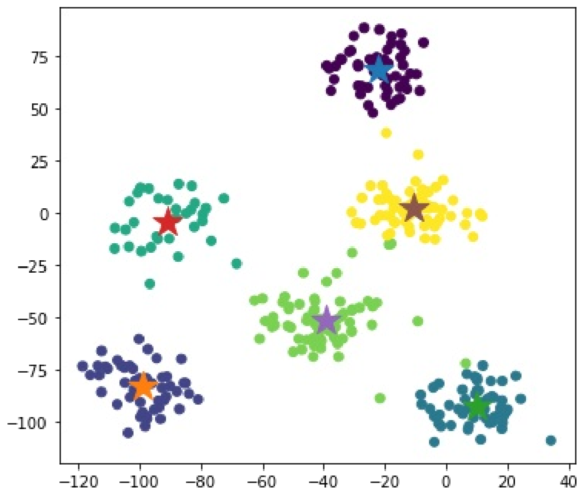




In [839…
```
km_2 = K_means()
km_2.train(set_2, 6, mode = "km++", step_by_step = True)
print(km_2)
```

```
Finished after 3 iterations
```





Видим что, метод быстро сходится и логично кластеры

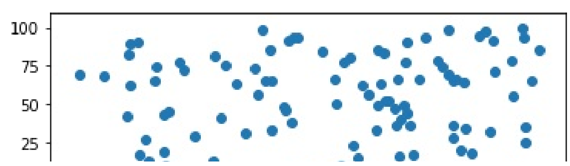
## Понятно, что на других типах данных такой алгоритм ***лучше не применять***, он теряет смысл на

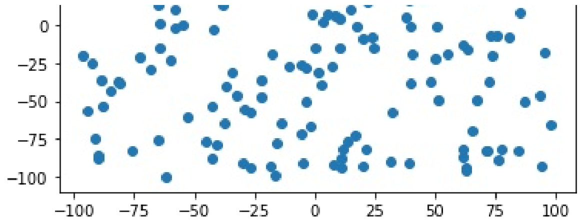
In [311…
```
bad_set_1 = np.random.uniform(-100, 100, size=(200,2))
```

Любом более-менее равномерном распределении

In [312…
```
fig, axs = plt.subplots()
axs.scatter(bad_set_1[:, 0], bad_set_1[:, 1])
```

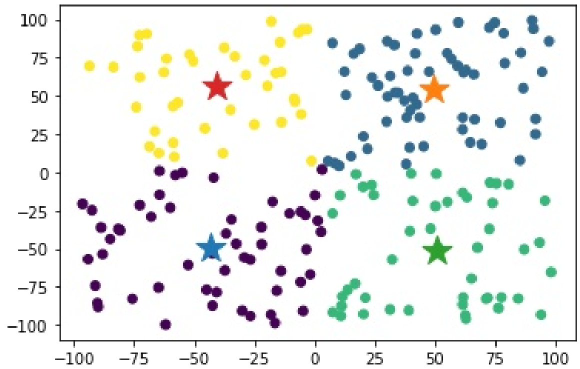
Out[312…
```
<matplotlib.collections.PathCollection at 0x7f937447bfa0>
```






In [841…
```
bad_km_1 = K_means()
bad_km_1.train(bad_set_1, 4, mode = "km++")
print(bad_km_1)
```

```
Finished after 7 iterations
```

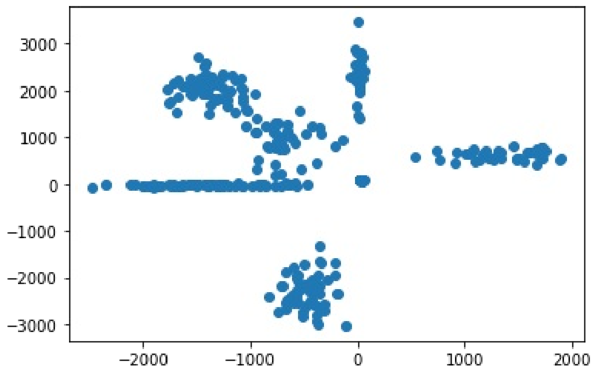



## Любых данных без четко выраженной структуры

Возьмем то же Нормальное распределение, но растянем каждую каплю вдоль осей на произвольный скаляр ***a*** из интервала (1, 40)

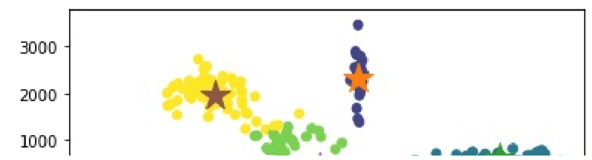
In [739…
```
bad_set_2 = np.random.normal(loc = np.random.uniform(-100,100, size=(1,2)),
                             scale = scale, size = (np.random.randint(30, 70),2))
for i in range(6):
    bad_set_2 = np.append(bad_set_2, np.random.normal(loc = np.random.uniform(-100,100, size=(1,2)),
                                                       scale = scale, size = (np.random.randint(30,70),2))
                          * [np.random.uniform(1,40),np.random.uniform(1,40)], axis = 0)

fig, axs = plt.subplots()
axs.scatter(bad_set_2[:, 0], bad_set_2[:, 1])
```

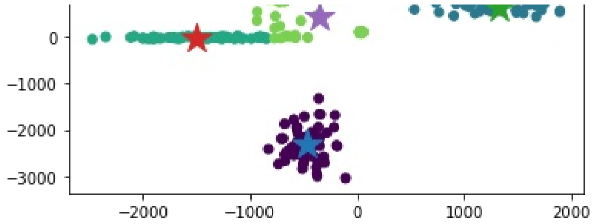
Out[739… `<matplotlib.collections.PathCollection at 0x7f936b4b5850>`




In [845…
```
bad_km_2 = K_means()
bad_km_2.train(bad_set_2, 6, mode = "km++")
print(bad_km_2)
```

```
Finished after 6 iterations
```





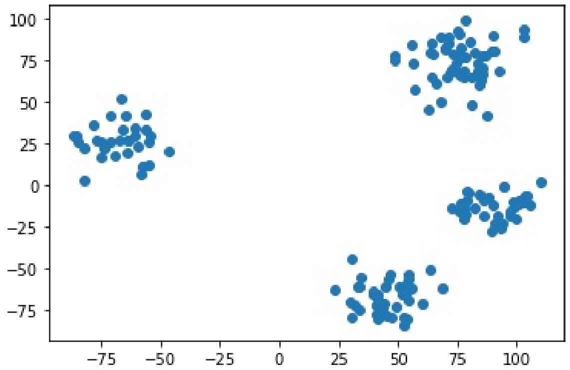

## K-means чувствителен к **нормировке** данных (если не нормированы, начинает разделять по полосам)

Например, растянем нормальное распределение по первой координате X

In [858…

```
set_not_normed = make_gauss_classes(4)

fig, axs = plt.subplots()
axs.scatter(set_not_normed[:, 0], set_not_normed[:, 1])
```

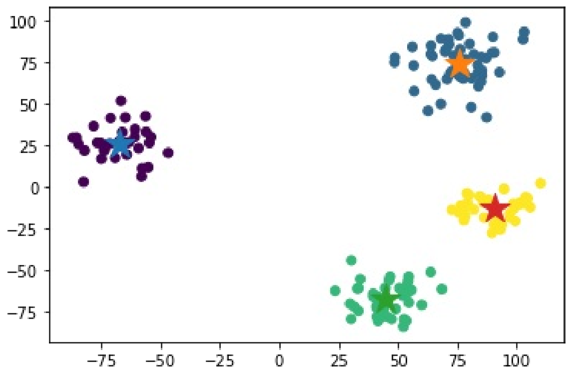
Out[858… <matplotlib.collections.PathCollection at 0x7f936a476490>




In [859…

```
km_norm = K_means()
km_norm.train(set_not_normed, 4, mode = "km++")
print(km_norm)
```

```
Finished after 3 iterations
```




## Растягиваем

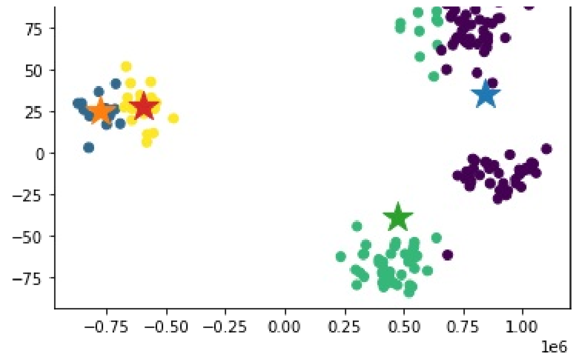
In [861…

```
set_not_normed = set_not_normed * [10000, 1]
```

In [862…

```
km_norm = K_means()
km_norm.train(set_not_normed, 4, mode = "km++")
print(km_norm)
```

```
Finished after 4 iterations
```

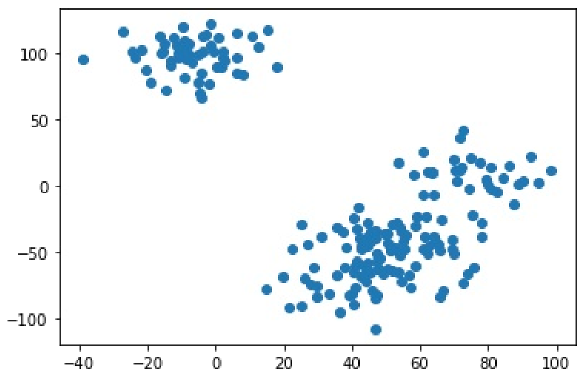



## Также K-means **чувствителен к выбросам**

Добавим произвольный выброс, тогда один из классов будет всегда занят им и состоять лишь из него одного

In [863...
```
set_blowout = make_gauss_classes(4)

fig, axs = plt.subplots()
axs.scatter(set_blowout[:, 0], set_blowout[:, 1])
```

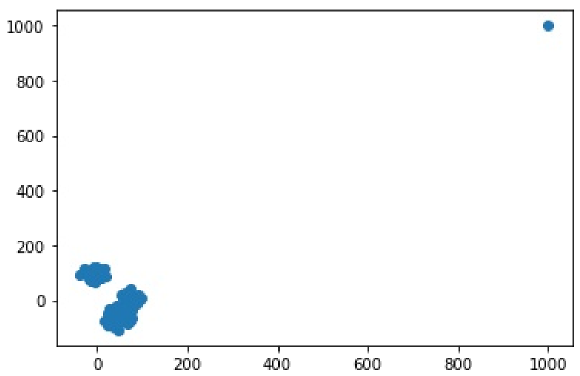
Out[863... <matplotlib.collections.PathCollection at 0x7f936aa570a0>




In [864...
```
set_blowout = np.append(set_blowout, [[1e3, 1e3]], axis = 0)
```

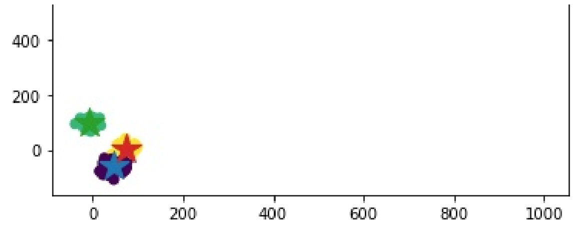
In [865...
```
fig, axs = plt.subplots()
axs.scatter(set_blowout[:, 0], set_blowout[:, 1])
```

Out[865... <matplotlib.collections.PathCollection at 0x7f936a8d6ca0>




In [866...
```
km_blowout = K_means()
km_blowout.train(set_blowout, 4, mode = "km++")
print(km_blowout)
```

```
Finished after 8 iterations
```




## 4. Подбор числа кластеров

Будем использовать **коэффициент силуета**, который вычисляется по такой формуле

где ***b*** - среднее расстояние объекта до всех объектов из ближайшего кластера, ***a*** - среднее внутрикластверное расстояние данного объекта

#### ***Таким образом нам небходимо, чтобы среднеквадратичное отклонение коэффициента силуета было как можно меньше и чтобы он был как можно ближе к 1***

In [834…

```
def define_cluster_amount(km, X):
    sigma = 1
    average = -1
    k = 0
    for i in range(2, len(X) // 5):
        km.train(X, i, "km++")
        new = km.silhouette_ratio()
        if new[0] < sigma:
            if new[1] > average:
                sigma, average = new
                k = i
    km.train(X, k, "km++")
    return (sigma, average, k)
```

Функция возвращает кортеж из среднеквадратичного отклонения, среднего коэфф. силуета и приемлимого числа кластеров

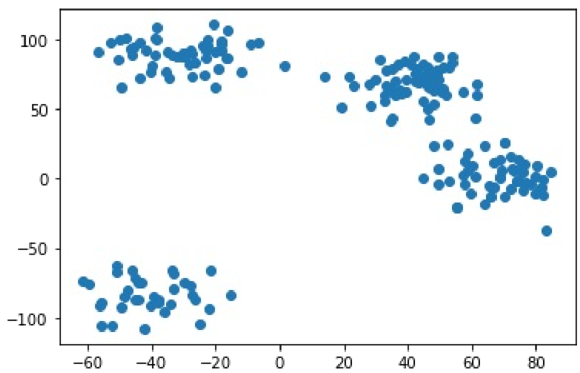
### Проверим на примерах

In [878…

```
set_test_1 = make_gauss_classes(4)

fig, axs = plt.subplots()
axs.scatter(set_test_1[:, 0], set_test_1[:, 1])
```

Out[878…

```
<matplotlib.collections.PathCollection at 0x7f936bd8dc40>
```




In [879…

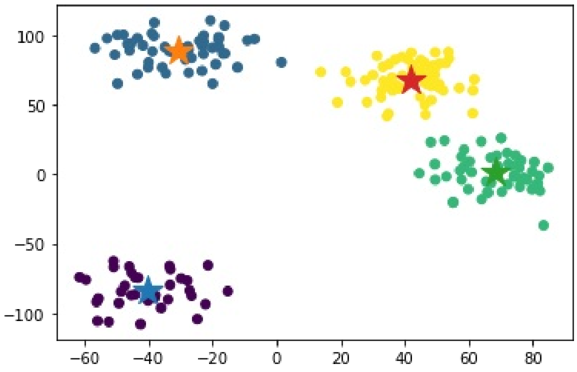
```
km_t1 = K_means()

define_cluster_amount(km_t1, set_test_1)
```

Out[879… (0.035878260589242865, 0.8289991492911027, 4)

Видим, что функция верно определила число кластеров, среднеквадратичное отклонение достаточно мало и коэффициент силуета тоже в пределах допустимого

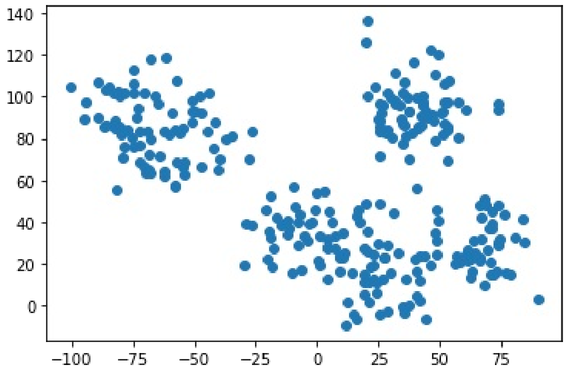
In [880…
```
print(km_t1)
```

```
Finished after 2 iterations
```




In [882…
```
set_test_2 = make_gauss_classes(6)

fig, axs = plt.subplots()
axs.scatter(set_test_2[:, 0], set_test_2[:, 1])
```

Out[882… <matplotlib.collections.PathCollection at 0x7f937054d670>



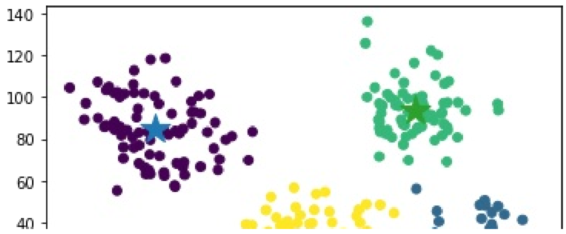

In [885…
```
km_t2 = K_means()

define_cluster_amount(km_t2, set_test_2)
```

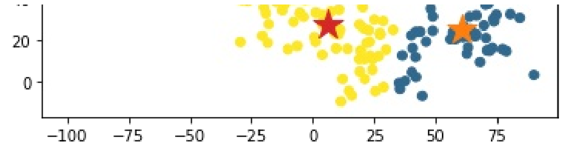
Out[885… (0.06962741562636993, 0.7176116085032338, 4)

Видим, что хотя изначально мы и запросили гауссово распределение с **6 кластерами**, оно получилось такое, что больше похоже, что в нём лишь **4 кластера**. И алгоритм правильно это определил

In [887…
```
print(km_t2)
```

```
Finished after 4 iterations
```

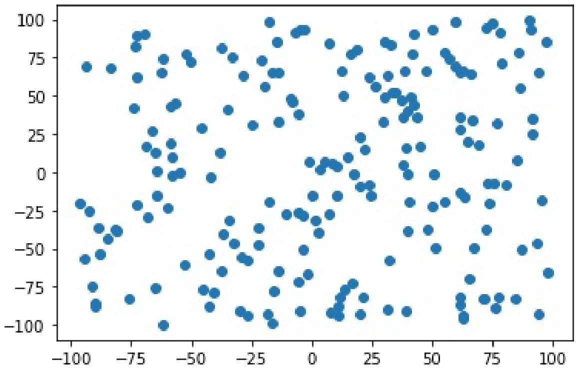





Попробуем датасет с нормальным распределением

In [888…
```
fig, axs = plt.subplots()
axs.scatter(bad_set_1[:, 0], bad_set_1[:, 1])
```

Out[888…
```
<matplotlib.collections.PathCollection at 0x7f9370beea90>
```




In [891…
```
define_cluster_amount(bad_km_1, bad_set_1)
```

Out[891…
```
(0.016256614173205397, 0.4766107886188163, 2)
```

In [892…
```
define_cluster_amount(bad_km_1, bad_set_1)
```

Out[892…
```
(0.00990215221509538, 0.5648462002443524, 3)
```

In [895…
```
define_cluster_amount(bad_km_1, bad_set_1)
```

Out[895…
```
(0.008222181947372481, 0.5876539235215643, 4)
```

***В данном случае получаем всегда разный результат и низкий средний коэффициент силуета***

Таким образом можно **програмно** определять поддаются данные классификации с помощью K-means или нет, проблема лишь в том, что работает долго

## 5. Зависимость времени работы алгоритма определения числа кластеров от объема данных

In [904…
```
from time import time
```

In [175…
```
def make_gauss_classes_2(k, amount, scale = 0):
    if not scale:
        scale = np.random.uniform(10, 15)
    dataset = np.random.normal(loc = np.random.uniform(-100,100, size=(1,2)), scale = scale, size = (amount,2))
    for i in range(k-1):
        dataset = np.append(dataset, np.random.normal(loc = np.random.uniform(-100,100, size=(1,2)),
        scale = scale, size = (amount,2)), axis = 0)
    return dataset
```

In [923…
```
sets = [make_gauss_classes_2(4, x) for x in range(5, 100)]
```

Создадим 95 сетов с Гауссовым распределением и линейно увеличивающимся числом объектов

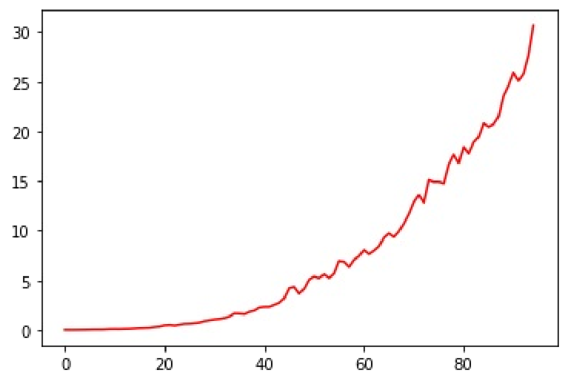
In [158…
```
time_exec = []
```

```
km_time = K_means()
for i in range(0, 95):
    start_time = time()
    define_cluster_amount(km_time, sets[i])
    time_exec.append(time() - start_time)
```

In [158…

```
fig, axs = plt.subplots()

axs.plot(range(95), time_exec, color = "red")
```

Out[158… [<matplotlib.lines.Line2D at 0x7f93694d2ca0>]



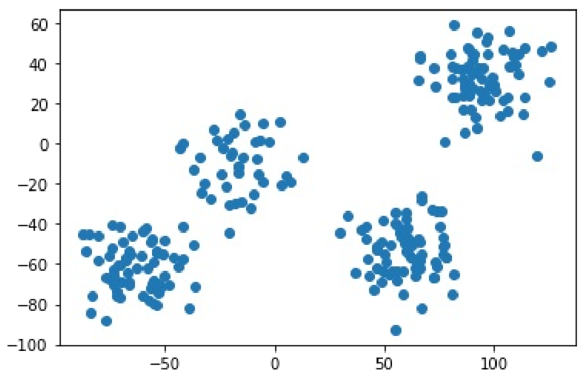

Тогда график зависимости времени выполнения от числа элементов выглядит так, видим что сложность растет **экспоненциально** при увеличении объектов

## 6. Матрица попарных расстояний и её визуализация

In [170…

```
set_new = make_gauss_classes(4)

fig, axs = plt.subplots()
axs.scatter(set_new[:, 0], set_new[:, 1])
```

Out[170… <matplotlib.collections.PathCollection at 0x7f9367496e80>

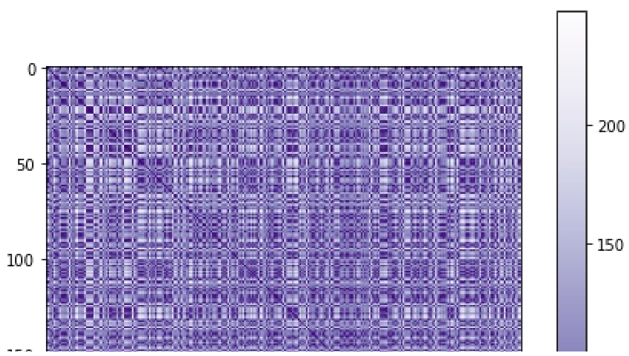


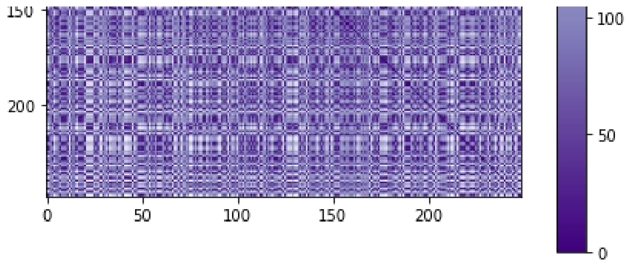

In [170…

```
D = (set_new[:,0][:, np.newaxis] - set_new[:,0]) ** 2
D += (set_new[:,1][:, np.newaxis] - set_new[:,1]) ** 2
D = np.sqrt(D)
```

In [171…

```
plt.figure(figsize=(7, 7))
plt.imshow(D, cmap='Purples_r')
plt.colorbar(orientation='vertical', pad=0.06);
```






В неотсортированном виде выглядит так

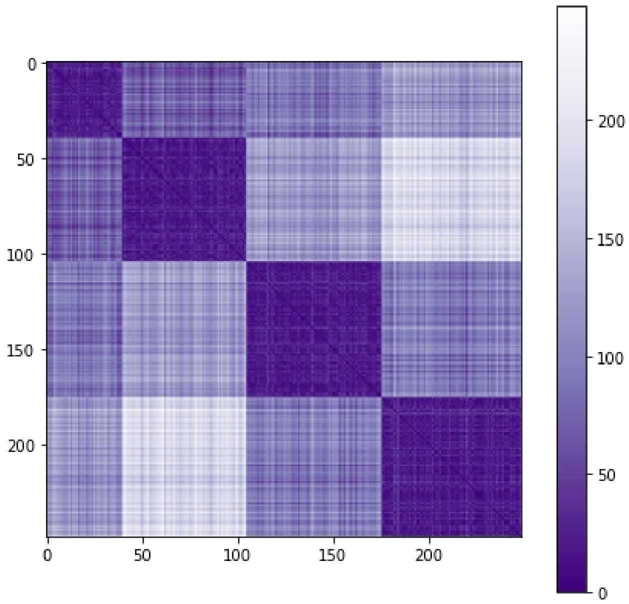
Сгруппируем объекты по класетрам и будем упорядочивать кластеры по **возрастанию числа элементов** в нём - метод **group_by_clasters()**

In [171…

```
km_new = K_means()
km_new.train(set_new, 4, mode = "km++")

set_new2 = km_new.group_by_clusters()
```

In [171…

```
D = (set_new2[:,0][:, np.newaxis] - set_new2[:,0]) ** 2
D += (set_new2[:,1][:, np.newaxis] - set_new2[:,1]) ** 2
D = np.sqrt(D)

plt.figure(figsize=(7, 7))
plt.imshow(D, cmap='Purples_r')
plt.colorbar(orientation='vertical', pad=0.06);
```




Получаем на диагонали увеличиващиеся квадраты

И еще мы можем избавится от **сеточки внутри центральных квадратов**, упорядочив элементы **внутри кластеров**, так, чтобы сначала шли элементы находящиеся ближе всего к элементам своего кластера

In [175…

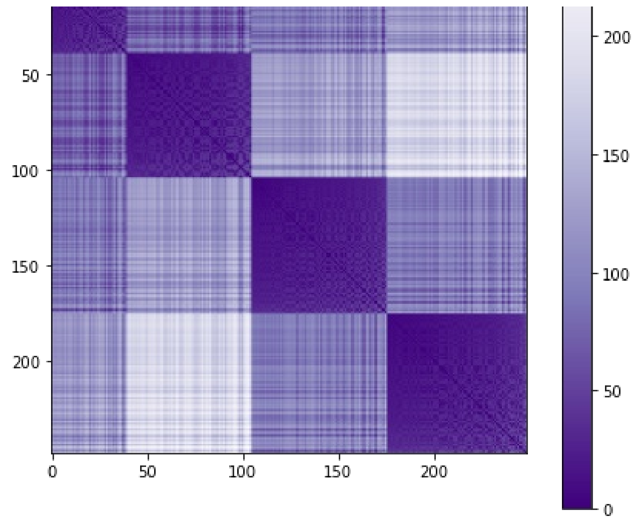
```
def sort_obj_in_cluster(X, centroid):
    return X[np.linalg.norm(X-centroid, axis = 1).argsort()]
```

In [171…

```
set_new2 = km_new.group_by_clusters()
```

In [171…

```
D = (set_new2[:,0][:, np.newaxis] - set_new2[:,0]) ** 2
D += (set_new2[:,1][:, np.newaxis] - set_new2[:,1]) ** 2
D = np.sqrt(D)

plt.figure(figsize=(7, 7))
plt.imshow(D, cmap='Purples_r')
plt.colorbar(orientation='vertical', pad=0.06);
```

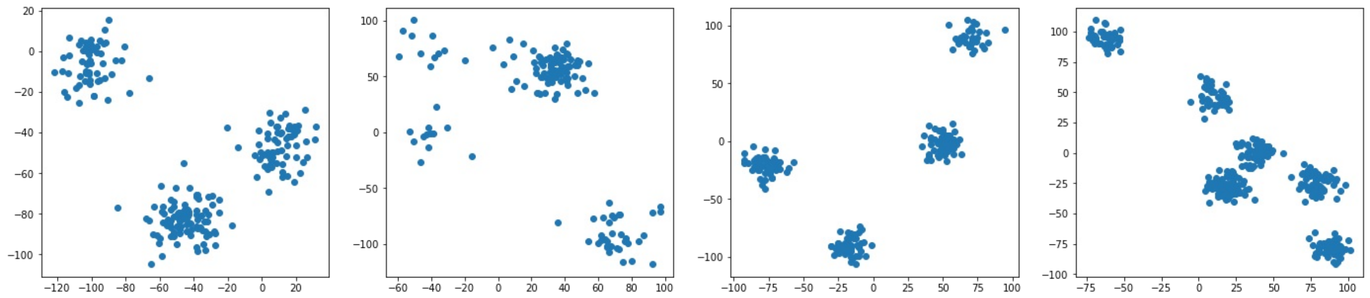



В итоге получили более приятный **градиент** внутри квадратов

## Примеры

In [174…

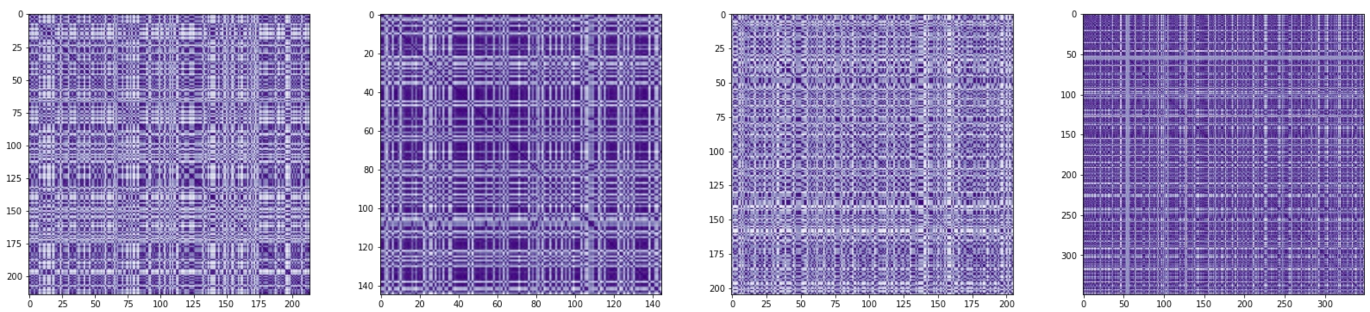
```
sets_new = [make_gauss_classes(x) for x in range(3,7)]

fig, axs = plt.subplots(1,4)
fig.set_figheight(5)
fig.set_figwidth(6 * 4)

for i in range(4):
    axs[i].scatter(sets_new[i][:, 0], sets_new[i][:, 1])
```



Создали 4 датасета с числом кластеров от 3 до 6

In [175…

```
fig, axs = plt.subplots(1,4)
fig.set_figheight(6)
fig.set_figwidth(7 * 4)

for i in range(len(sets_new)):
    D = (sets_new[i][:,0][:, np.newaxis] - sets_new[i][:,0]) ** 2
    D += (sets_new[i][:,1][:, np.newaxis] - sets_new[i][:,1]) ** 2
    D = np.sqrt(D)
    axs[i].imshow(D, cmap='Purples_r')
```

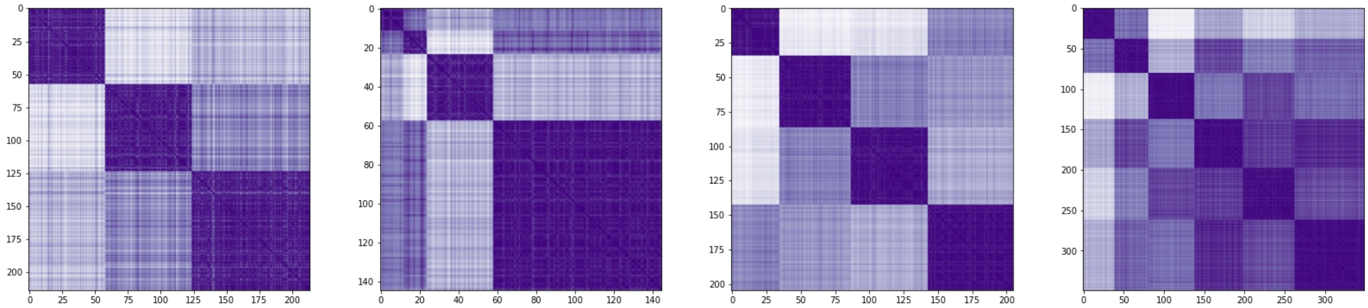


Без какого-либо упорядочивания

In [175

```
fig, axs = plt.subplots(1,4)
```

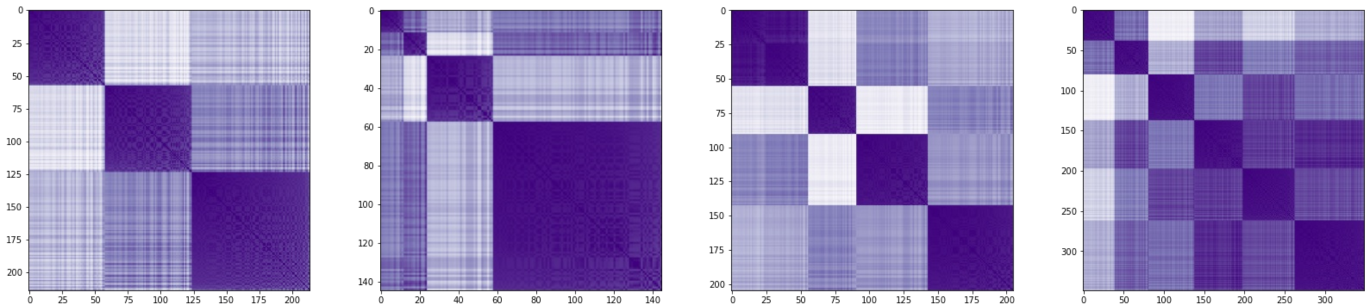
```
fig, axs = plt.subplots(1,4)
fig.set_figheight(6)
fig.set_figwidth(7 * 4)

km = K_means()

for i in range(3,7):
    km.train(sets_new[i-3], i, mode = "km++")
    set_new = km.group_by_clusters()
    D = (set_new[:,0][:, np.newaxis] - set_new[:,0]) ** 2
    D += (set_new[:,1][:, np.newaxis] - set_new[:,1]) ** 2
    D = np.sqrt(D)
    axs[i-3].imshow(D, cmap='Purples_r')
```



## Без упорядочивания внутри кластеров

In [175…

```
fig, axs = plt.subplots(1,4)
fig.set_figheight(6)
fig.set_figwidth(7 * 4)

km = K_means()

for i in range(3,7):
    km.train(sets_new[i-3], i, mode = "km++")
    set_new = km.group_by_clusters()
    D = (set_new[:,0][:, np.newaxis] - set_new[:,0]) ** 2
    D += (set_new[:,1][:, np.newaxis] - set_new[:,1]) ** 2
    D = np.sqrt(D)
    axs[i-3].imshow(D, cmap='Purples_r')
```



## Финальный вариант