# Лабораторна робота №3. Кластеризація засобами бібліотеки Scikit-Learn Python

# Недашківська Н.І.

Для отримання максимальної оцінки потрібно виконати ВСІ етапи Ходу виконання роботи та оформити звіт. Звітом може бути, наприклад, файл јируter notebook з кодом програми і текстовими поясненнями отриманих цифр відповідно до Ходу виконання роботи.

#### Звіт має містити:

- результати по кожному пункту Ходу виконання роботи, в тому числі порівняльний аналіз декількох моделей,
- опис методу кластеризації, який використовувався,
- опис метрик якості кластеризації, за якими порівнювалися моделі.

Бажано опрацювати матеріал https://scikit-learn.org/stable/modules/clustering.html. За цим посиланням є описи методів кластеризації, які не увійшли до лекцій, приклади використання методів, опис метрик якості.

**УВАГА!** Задані за варіантом набори даних розглядати **без еталонних значень цільової змінної**. Еталонні значення цільової змінної можуть бути використані при розрахунку окремих метрик якості кластеризації.

#### Захист роботи:

- Усно: демонстрація коду програми, яка реалізує завдання згідно з варіантом і Ходом виконання роботи. Відповіді на питання щодо коду програми, отриманих результатів та методу кластеризації, який використовувався.
- Відповідь на теоретичне питання, розв'язання задачі, написання коду в редакторі пайтон за темою "Методи і алгоритми кластеризації".

# 1 Хід виконання роботи:

- 1. Представити початкові дані графічно.
- 2. Побудувати модель кластеризації згідно з варіантом.
- 3. Виконати кластеризацію даних на основі моделі.

- 4. Представити розбиття на кластери графічно, наприклад, різними кольорами.
- 5. Розрахувати додаткові результати кластеризації (згідно з варіантом).
- 6. Побудувати декілька альтернативних моделей:
  - шляхом зміни значень параметрів основної моделі,
  - використати різні функції відстані в алгоритмах, де це можна зробити,
  - задати різні значення кількості кластерів, в алгоритмах де кількість кластерів параметр.
- 7. Для кожної альтернативної моделі розрахувати метрики якості кластеризації, що реалізовані в модулі sklearn.metrics (тільки метрики згідно з варіантом):
  - Estimated Number of Clusters.
  - Adjusted Rand Index.
  - Adjusted Mutual Information.
  - Homogeneity.
  - Completeness.
  - V-measure.
  - Silhouette Coefficient.
  - Calinski-Harabasz Index.
  - Davies-Bouldin index.
  - Contingency Matrix.
- 8. Виконати аналіз результатів кластеризації одним з неформальних методів (тільки методом згідно з варіантом):
  - чи є розбиття стабільним на підвибірках даних,
  - чи є розбиття стабільним після видалення окремих об'єктів,
  - чи є розбиття стабільним після зміни порядку об'єктів у множині об'єктів,
  - чи існує взаємозв'язок між результатами кластеризації і змінними, які не враховувалися при кластеризації,
  - чи можна інтерпретувати результати кластеризації.
- 9. Зробити висновки про якість роботи моделей на досліджених даних. Дослідити різні значення параметрів основної моделі, різні функції відстані та різну кількість кластерів в алгоритмах, де кількість кластерів слугує параметром.

10. Оцінити результати кластеризації на основі метрик якості та на основі неформальних методів. У кожному варіанті задано два набори даних. Для кожного набору даних обрати найкращу модель.

# 2 Варіанти завдань

1. Агломеративний алгоритм AgglomerativeClustering. Дослідити методи розрахунку відстані між кластерами: ward, single, average, complete. Побудувати матриці відстаней між кластерами, використовуючи metrics.pairwise\_distances.

Чи є розбиття стабільним після вилучення окремих об'єктів?

Метрики якості: Estimated number of clusters, Homogeneity, Completeness, V-measure.

#### Початкові дані:

- (a) sklearn.datasets.make\_moons
- 2. Алгоритм розділу суміші expectation-maximization (EM), GaussianMixture та BayesianGaussianMixture модулю sklearn.mixture.

Метрики якості: Homogeneity, Completeness, V-measure.

Чи є розбиття стабільним на підвибірках даних?

#### Початкові дані:

- (a) import numpy as np
   np.random.seed(0)
   X = np.random.randn(30000, 2)
   Y = np.logical\_xor(X[:, 0] > 0, X[:, 1] > 0)
- (6) from sklearn.datasets import make\_blobs centers = [[1, 1], [-1, -1], [1, -1]] X, labels\_true = make\_blobs(n\_samples=30000, centers=centers, cluster std=0.5, random state=0)
- 3. Алгоритм Mean Shift. Відобразити графічно центри кластерів.

Метрики якості: Estimated number of clusters, Adjusted Rand Index, Adjusted Mutual Information, Silhouette Coefficient.

Чи є розбиття стабільним після зміни порядку об'єктів у множині об'єктів?

```
(a) from sklearn.datasets.samples_generator import make_blobs X, y_true = make_blobs(n_samples=400, centers=4, cluster_std=0.60, random_state=0) rng = np.random.RandomState(13) X_stretched = np.dot(X, rng.randn(2, 2))
```

```
(6) from sklearn.datasets import make_blobs X, y = make\_blobs(n\_samples=500, n\_features=2, centers=4, cluster\_std=1, center\_box=(-10.0, 10.0), shuffle=True, random state=1)
```

4. Алгоритм Spectral clustering.

Метрики якості: Homogeneity, Completeness, V-measure.

Чи є розбиття стабільним на підвибірках даних?

#### Початкові дані:

- (6) from sklearn.datasets.samples\_generator import make\_blobs X, y\_true = make\_blobs(n\_samples=400, centers=4, cluster\_std=0.60, random\_state=0) rng = np.random.RandomState(13) X stretched = np.dot(X, rng.randn(2, 2))
- 5. Алгоритм DBSCAN. Розрахувати додатковий результат кластеризації: estimated number of noise points.

Метрики якості: Estimated number of clusters, Adjusted Rand Index, Adjusted Mutual Information, Silhouette Coefficient.

Чи є розбиття стабільним після зміни порядку об'єктів у множині об'єктів,

(a) import numpy as np  $\begin{array}{l} \text{np.random.seed} \, (0) \\ X = \text{np.random.randn} \, (300\,,\,\, 2) \\ Y = \text{np.logical\_xor} \, (X[:\,,\,\, 0] \, > \, 0\,,\,\, X[:\,,\,\,\, 1] \, > \, 0) \end{array}$ 

6. Алгоритм Affinity propagation. Відобразити графічно центри кластерів.

Метрики якості: Estimated number of clusters, Calinski-Harabasz Index, Davies-Bouldin index, Contingency Matrix.

Чи є розбиття стабільним після вилучення окремих об'єктів?

# Початкові дані:

- (a) sklearn.datasets.make\_moons
- (6) from sklearn.datasets import make\_blobs  $X, y = make\_blobs(n\_samples=500, n\_features=2, centers=4, cluster\_std=1, center\_box=(-10.0, 10.0), shuffle=True, random state=1)$
- 7. Алгоритм DBSCAN. Розрахувати додатковий результат кластеризації: estimated number of noise points.

Метрики якості: Estimated number of clusters, Homogeneity, Completeness, V-measure.

Чи є розбиття стабільним на підвибірках даних?

- (a) sklearn.datasets.make\_moons
- (6) sklearn.datasets.load\_digits

8. Алгоритм Birch. Метрики якості: Estimated number of clusters, Homogeneity, Completeness, V-measure.

Чи є розбиття стабільним на підвибірках даних?

#### Початкові дані:

- (a) import numpy as np  $\begin{array}{l} \text{np.random.seed} \left( 0 \right) \\ X = \text{np.random.randn} \left( 300 \,, \, \, 2 \right) \\ Y = \text{np.logical\_xor} \left( X[: \,, \, \, 0] \, > \, 0 \,, \, \, X[: \,, \, \, 1] \, > \, 0 \right) \end{array}$
- (6) from sklearn.datasets.samples\_generator import make\_blobs X, y\_true = make\_blobs(n\_samples=400, centers=4, cluster\_std=0.60, random\_state=0) rng = np.random.RandomState(13) X\_stretched = np.dot(X, rng.randn(2, 2))
- 9. Алгоритм Mean Shift. Відобразити графічно центри кластерів.

Метрики якості: Estimated number of clusters, Adjusted Rand Index, Adjusted Mutual Information, Silhouette Coefficient.

Чи є розбиття стабільним після вилучення окремих об'єктів?

#### Початкові дані:

- (a) sklearn.datasets.make\_moons
- (6) from sklearn.datasets import make\_blobs from sklearn.preprocessing import StandardScaler centers = [[1, 1], [-1, -1], [1, -1]] X, labels\_true = make\_blobs(n\_samples=750, centers=centers, cluster\_std=0.4, random\_state=0)

 $X = StandardScaler().fit_transform(X)$ 

10. Алгоритм OPTICS.

Метрики якості: Estimated number of clusters, Adjusted Rand Index, Adjusted Mutual Information, Silhouette Coefficient.

Чи є розбиття стабільним після зміни порядку об'єктів у множині об'єктів?

#### Початкові дані:

(a) sklearn.datasets.samples\_generator.make\_circles

$$X, y = make\_circles(500, factor = .1, noise = .1)$$

```
(6) from sklearn.datasets import make_blobs

n_samples_1 = 1000

n_samples_2 = 100

centers = [[0.0, 0.0], [2.0, 2.0]]

clusters_std = [1.5, 0.5]

X, y = make_blobs(n_samples=[n_samples_1, n_samples_2],

centers=centers,

cluster_std=clusters_std,

random_state=0, shuffle=False)
```

11. Алгоритм Spectral clustering.

Метрики якості: Estimated number of clusters, Adjusted Rand Index, Silhouette Coefficient, Davies-Bouldin index.

Чи є розбиття стабільним після вилучення окремих об'єктів?

#### Початкові дані:

- (a) sklearn.datasets.load\_digits
- (6) sklearn.datasets.make\_moons
- 12. Алгоритм Birch.

Метрики якості: Estimated number of clusters, Adjusted Rand Index, Adjusted Mutual Information, Silhouette Coefficient.

Чи є розбиття стабільним після зміни порядку об'єктів у множині об'єктів?

### Початкові дані:

- (a) sklearn.datasets.samples\_generator.make\_circles
- (δ) sklearn.datasets.load\_iris
- 13. Алгоритм OPTICS.

Метрики якості: Estimated number of clusters, Homogeneity, Completeness, V-measure.

Чи є розбиття стабільним на підвибірках даних?

- (a) sklearn.datasets.make\_moons
- (6) from sklearn.datasets.samples\_generator import make\_blobs X, y\_true = make\_blobs(n\_samples=400, centers=4, cluster\_std=0.60, random\_state=0) rng = np.random.RandomState(13) X stretched = np.dot(X, rng.randn(2, 2))

14. Агломеративний алгоритм AgglomerativeClustering. Дослідити методи розрахунку відстані між кластерами: ward, single, average, complete.

Метрики якості: Estimated number of clusters, Adjusted Rand Index, V-measure. Побудувати матриці відстаней між кластерами, використовуючи metrics.pairwise\_distances.

Чи є розбиття стабільним після вилучення окремих об'єктів?

#### Початкові дані:

- (a) sklearn.datasets.load\_iris
- (6) from sklearn.datasets.samples\_generator import make\_blobs X, y\_true = make\_blobs(n\_samples=400, centers=4, cluster\_std=0.60, random\_state=0) rng = np.random.RandomState(13) X stretched = np.dot(X, rng.randn(2, 2))
- 15. Алгоритм DBSCAN. Розрахувати додатковий результат кластеризації: estimated number of noise points.

Метрики якості: Adjusted Mutual Information, Silhouette Coefficient, Calinski-Harabasz Index.

Чи є розбиття стабільним після зміни порядку об'єктів у множині об'єктів?

- (a) from sklearn.datasets import make\_blobs  $\begin{array}{lll} n\_samples\_1 &=& 1000 \\ n\_samples\_2 &=& 100 \\ centers &=& \left[ \left[ 0.0 \;,\; 0.0 \right],\; \left[ -2.0 \;,\; -2.0 \right] \right] \\ clusters\_std &=& \left[ 2.0 \;,\; 1.0 \right] \\ X,\;\; y &=& make\_blobs (n\_samples=[n\_samples\_1 \;,\; n\_samples\_2] \;,\; \\ centers=centers \;,\; \\ cluster\_std=clusters\_std \;,\; \\ random\;\; state=0,\;\; shuffle=False) \end{array}$
- (6) import numpy as np
   np.random.seed(0)
   n\_points\_per\_cluster = 300
   C1 = [-6, -2] + 0.7 \* np.random.randn(n\_points\_per\_cluster, 2)
   C2 = [-2, 2] + 0.3 \* np.random.randn(n\_points\_per\_cluster, 2)
   C3 = [1, -2] + 0.2 \* np.random.randn(n\_points\_per\_cluster, 2)
   C4 = [4, -4] + 0.1 \* np.random.randn(n\_points\_per\_cluster, 2)
   C5 = [5, 0] + 1.4 \* np.random.randn(n\_points\_per\_cluster, 2)
   C6 = [5, 6] + 2.0 \* np.random.randn(n\_points\_per\_cluster, 2)
   X = np.vstack((C1, C2, C3, C4, C5, C6))

16. Алгоритм розділу суміші expectation-maximization (EM), GaussianMixture та BayesianGaussianMixture модулю sklearn.mixture.

Метрики якості: Homogeneity, Completeness, V-measure.

Чи є розбиття стабільним на підвибірках даних?

# Початкові дані:

- (a) sklearn.datasets.make\_moons
- (6) from sklearn.datasets.samples\_generator import make\_blobs X, y\_true = make\_blobs(n\_samples=400, centers=4, cluster\_std=0.60, random\_state=0) rng = np.random.RandomState(13) X stretched = np.dot(X, rng.randn(2, 2))
- 17. Алгоритм OPTICS.

Метрики якості: Estimated number of clusters, Adjusted Rand Index, Adjusted Mutual Information, Silhouette Coefficient.

Чи є розбиття стабільним після зміни порядку об'єктів у множині об'єктів?

# Початкові дані:

- (6) import numpy as np
   np.random.seed(0)
   n\_points\_per\_cluster = 300
   C1 = [-6, -2] + 0.7 \* np.random.randn(n\_points\_per\_cluster, 2)
   C2 = [-2, 2] + 0.3 \* np.random.randn(n\_points\_per\_cluster, 2)
   C3 = [1, -2] + 0.2 \* np.random.randn(n\_points\_per\_cluster, 2)
   C4 = [4, -4] + 0.1 \* np.random.randn(n\_points\_per\_cluster, 2)
   C5 = [5, 0] + 1.4 \* np.random.randn(n\_points\_per\_cluster, 2)
   C6 = [5, 6] + 2.0 \* np.random.randn(n\_points\_per\_cluster, 2)
   X = np.vstack((C1, C2, C3, C4, C5, C6))
- 18. Алгоритм k-середніх, використати cluster. KMeans і cluster. MiniBatch KMeans. Відобразити графічно центри кластерів.

Метрики якості: Adjusted Rand Index, Calinski-Harabasz Index, Davies-Bouldin index.

Чи є розбиття стабільним на підвибірках даних?

19. Алгоритм розділу суміші expectation-maximization (EM), GaussianMixture та BayesianGaussianMixture модулю sklearn.mixture.

Метрики якості: Homogeneity, Completeness, V-measure.

Чи є розбиття стабільним на підвибірках даних?

# Початкові дані:

- (a) sklearn.datasets.samples\_generator.make\_circles
- (6) from sklearn.datasets import make\_blobs  $X, y = make\_blobs(n\_samples=500, n\_features=2, centers=4, cluster\_std=1, center\_box=(-10.0, 10.0), shuffle=True, random\_state=1)$
- 20. Алгоритм Affinity propagation. Відобразити графічно центри кластерів. Метрики якості: Adjusted Rand Index, Adjusted Mutual Information, Si-

Чи є розбиття стабільним після вилучення окремих об'єктів?

# Початкові дані:

lhouette Coefficient.

```
(a) import numpy as np  \begin{array}{l} \text{np.random.seed} \, (0) \\ X = \text{np.random.randn} \, (300\,,\,\, 2) \\ Y = \text{np.logical\_xor} \, (X[:\,,\,\, 0] \, > \, 0\,,\,\, X[:\,,\,\, 1] \, > \, 0) \end{array}
```

(6) from sklearn.datasets import make\_blobs

n\_samples\_1 = 1000

n\_samples\_2 = 100

centers = [[0.0, 0.0], [2.0, 2.0]]

clusters\_std = [2.0, 1.0]

X, y = make\_blobs(n\_samples=[n\_samples\_1, n\_samples\_2],

centers=centers,

cluster\_std=clusters\_std,

random\_state=0, shuffle=False)

21. Агломеративний алгоритм AgglomerativeClustering. Дослідити методи розрахунку відстані між кластерами: ward, single, average, complete. Побудувати матриці відстаней між кластерами, використовуючи

metrics.pairwise\_distances.

Метрики якості: Estimated number of clusters, Homogeneity, Completeness, V-measure.

Чи є розбиття стабільним після зміни порядку об'єктів у множині об'єктів?

# Початкові дані:

- (a) sklearn.datasets.samples\_generator.make\_circles
- (6) from sklearn.datasets import make\_blobs  $X, y = make\_blobs(n\_samples=500, n\_features=2, centers=4, cluster\_std=1, center\_box=(-10.0, 10.0), shuffle=True, random state=1)$
- 22. Алгоритм k-середніх, використати cluster.KMeans і cluster.MiniBatchKMeans. Відобразити графічно центри кластерів.

Mетрики якості: Adjusted Rand Index, Calinski-Harabasz Index, Davies-Bouldin index.

Чи є розбиття стабільним після вилучення окремих об'єктів?

# Початкові дані:

(a) sklearn.datasets.load\_iris

(6) sklearn.datasets.samples\_generator.make\_circles  $X, y = make \ circles (500, factor = .1, noise = .1)$ 

23. Алгоритм Spectral clustering.

Метрики якості: Estimated number of clusters, Adjusted Rand Index, Silhouette Coefficient, Davies-Bouldin index.

Чи є розбиття стабільним після вилучення окремих об'єктів?

# Початкові дані:

- (a) sklearn.datasets.load\_digits
- (6) sklearn.datasets.samples\_generator.make\_circles

$$X, y = make\_circles(500, factor = .1, noise = .1)$$

24. Алгоритм k-середніх, використати cluster.KMeans і cluster.MiniBatchKMeans. Відобразити графічно центри кластерів.

Метрики якості: Adjusted Rand Index, Calinski-Harabasz Index, Davies-Bouldin index.

Чи є розбиття стабільним на підвибірках даних?

# Початкові дані:

- (a) sklearn.datasets.make\_moons
- (6) from sklearn.datasets import make\_blobs  $X, y = make\_blobs(n\_samples=500, n\_features=2, centers=4, cluster\_std=1, center\_box=(-10.0, 10.0), shuffle=True, random state=1)$
- 25. Агломеративний алгоритм AgglomerativeClustering. Дослідити методи розрахунку відстані між кластерами: ward, single, average, complete.

Метрики якості: Estimated number of clusters, Adjusted Rand Index, V-measure. Побудувати матриці відстаней між кластерами, використовуючи metrics.pairwise\_distances.

Чи є розбиття стабільним після вилучення окремих об'єктів?

- (a) sklearn.datasets.make\_moons
- (б) sklearn.datasets.fetch\_covtype, використати для побудови моделі лише частину даних

26. Алгоритм k-середніх, sklearn.cluster.KMeans і sklearn.cluster.MiniBatchKMeans. Відобразити графічно центри кластерів.

Метрики якості: Adjusted Rand Index, Calinski-Harabasz Index, Davies-Bouldin index.

Чи є розбиття стабільним після зміни порядку об'єктів у множині об'єктів?

# Початкові дані:

- (a) sklearn.datasets.load\_digits
- (6) sklearn.datasets.samples\_generator.make\_circles  $X, y = make \ circles(50000, factor = .1, noise = .1)$
- 27. Алгоритм k-середніх, sklearn.cluster.KMeans і sklearn.cluster.MiniBatchKMeans. Відобразити графічно центри кластерів.

Метрики якості: Estimated number of clusters, Adjusted Rand Index, V-measure.

Чи є розбиття стабільним після вилучення окремих об'єктів?

# Початкові дані:

- (a) sklearn.datasets.load\_iris
- (6)  $\begin{array}{l} \textbf{import} \ \text{numpy as np} \\ \text{np.random.seed} (0) \\ X = \text{np.random.randn} (300, 2) \\ Y = \text{np.logical\_xor} (X[:, 0] > 0, X[:, 1] > 0) \end{array}$

# 3 Контрольні питання для захисту роботи

- 1. Загальна постановка задачі кластеризації. Функції відстані в задачах кластеризації.
- 2. Агломеративний ієрархічний алгоритм найближчого сусіда. Як можна визначати відстань між кластерами?
- 3. Kлаc sklearn.cluster.AgglomerativeClustering.
- 4. Розділяючий ієрархічний алгоритм DIANA.
- 5. Етапи алгоритму k-середніх. Переваги і недоліки алгоритму k-середніх.
- 6. Kлаc sklearn.cluster.KMeans.
- 7. Kлаc sklearn.cluster.MiniBatchKMeans.
- 8. Етапи алгоритму нечітких к-середніх. Переваги і недоліки.

- 9. Алгоритм G-середніх.
- 10. Постановка задачі розділу суміші. Базовий алгоритм Expectation-Maximization (EM): ідея та етапи.
- 11. Алгоритм ЕМ з фіксованою кількістю компонент. Недоліки алгоритму.
- 12. Алгоритм ЕМ з послідовним додаванням компонент.
- 13. Класи sklearn.mixture.GaussianMixture та sklearn.mixture.BayesianGaussianMixture.
- 14. Алгоритм знаходження зв'язних компонент. Переваги і недоліки.
- 15. Поняття мінімального покриваючого дерева (МПД). «Жадібний» алгоритм побудови МПД.
- 16. Алгоритми Крускала і Прима побудови мінімального покриваючого дерева.
- 17. Алгоритм Борувки побудови мінімального покриваючого дерева.
- 18. Алгоритм Mean Shift.
- 19. Kлаc sklearn.cluster.MeanShift.
- 20. Алгоритми DBSCAN та OPTICS.
- 21. Kлаc sklearn.cluster.DBSCAN.
- 22. Kлаc sklearn.cluster.OPTICS.
- 23. Алгоритм Spectral clustering.
- 24. Kлаc sklearn.cluster.SpectralClustering.
- 25. Алгоритми Affinity propagation та Birch.
- 26. Kлаc sklearn.cluster.AffinityPropagation.
- 27. Kлаc sklearn.cluster.Birch.
- 28. Ідея базового алгоритму FOREL. Етапи базового алгоритму FOREL. Переваги і недоліки.
- 29. FOREL-3 i FOREL-4.
- 30. Постановка задачі кластеризації на основі мережі Кохонена. Використання методу стохастичного градієнта.
- 31. Опис мережі Кохонена.

- 32. Алгоритм стохастичного градієнта для розрахунку центрів кластерів в мережі Кохонена.
- 33. Поняття карти Кохонена. Метрики на карті.
- 34. Алгоритм навчання карти Кохонена.
- 35. Візуалізація карт Кохонена, типи карт. Переваги і недоліки методу карт Кохонена.
- 36. Метрики якості кластеризації: Adjusted Rand Index, Adjusted Mutual Information.
- 37. Метрики якості кластеризації: Homogeneity, Completeness, V-measure.
- 38. Метрика якості кластеризації коефіцієнт силуету Silhouette Coefficient.
- 39. Метрики якості кластеризації: Calinski-Harabasz Index, Davies-Bouldin index.