Spectral clustering - raport

Przemysław Kaleta

January 25, 2019

Zapisanie wyników benchmarkowych

Poniżej kod skryptu, w którym przetestowałem algorytmy na wszystkich zbiorach benchamrkowych i zapisałem wyniki do pliku `results.csv`.

```
library(mclust)
library(dendextend)
library(genie)
library(dbscan)
library(stringi)

source("spectral.R")

read_data <- function(benchmark, dataset){
  matrix_file_name <- paste(dataset, ".data.gz", sep="")
  labels_file_name <- paste(dataset, ".labels0.gz", sep="")
  matrix_path <- file.path("..", "benchmarks", benchmark, matrix_file_name)
  labels_path <- file.path("..", "benchmarks", benchmark, labels_file_name)
  X <- as.matrix(read.table(matrix_path))
  Y <- as.matrix(read.table(labels_path))
  return(list(X=X, Y=Y))
}

plot_data <- function(X, Y, title=""){
  plot(X[, 1], X[, 2], col=unlist(Y), pch=20)
  title(title)
}
```

```
result_spectral <- function(benchmark, dataset, M=20, k=NULL, scale=FALSE, plot=FALSE){
  data <- read_data(benchmark, dataset)
  X <- data$X
  if(scale){
    X <- scale(X)
  }
  Y <- data$Y
  if(is.null(k)){
    k <- length(unique(unlist(Y)))
  }
  set.seed(42)  # because kmeans in spectral clustering randomly initializes centers
  Y_pred <- spectral_clustering(X, k, M)
  if(plot){
    plot_data(X, Y_pred, paste(paste(benchmark, dataset, sep="/"), ": spectral ", sep=""))
  }
  algorithm <- "spectral"

  return(list(benchmark=benchmark,
              dataset=dataset,
```

```
              algorithm=algorithm,
              FM=FM_index(Y, Y_pred),
              AR=adjustedRandIndex(Y, Y_pred)))
}


result_hclust <- function(benchmark, dataset, method="complete", k=NULL, scale=FALSE, plot=FALSE){
  data <- read_data(benchmark, dataset)
  X <- data$X
  if(scale){
    X <- scale(X)
  }
  Y <- data$Y
  if(is.null(k)){
    k = length(unique(unlist(Y)))
  }

  hc <- hclust(dist(X), method)
  Y_pred <- cutree(hc, k=k)

  if(plot){
    plot_data(X, Y_pred, paste(paste(benchmark, dataset, sep="/"), ": hclust ", method, sep=""))
  }

  algorithm <- paste("hclust", method, sep="_")
  return(list(benchmark=benchmark,
              dataset=dataset,
              algorithm=algorithm,
              FM=FM_index(Y, Y_pred),
              AR=adjustedRandIndex(Y, Y_pred)))
}

result_dbscan <- function(benchmark, dataset, k=NULL, scale=FALSE){
  data <- read_data(benchmark, dataset)
  X <- data$X
  if(scale){
    X <- scale(X)
  }
  Y <- data$Y
  if(is.null(k)){
    k = length(unique(unlist(Y)))
  }

  Y_pred <- hdbscan(dist(X), minPts=k)$cluster

  algorithm <- "hdbscan"

  return(list(benchmark=benchmark,
              dataset=dataset,
              algorithm=algorithm,
              FM=FM_index(Y, Y_pred),
              AR=adjustedRandIndex(Y, Y_pred)))
}
```

```
result_kmeans <- function(benchmark, dataset, k=NULL, scale=FALSE){
  data <- read_data(benchmark, dataset)
  X <- data$X
  if(scale){
    X <- scale(X)
  }
  Y <- data$Y
  if(is.null(k)){
    k = length(unique(unlist(Y)))
  }

  Y_pred <- dbscan(X)$cluster

  algorithm <- "kmeans"

  return(list(benchmark=benchmark,
              dataset=dataset,
              algorithm=algorithm,
              FM=FM_index(Y, Y_pred),
              AR=adjustedRandIndex(Y, Y_pred)))
}

result_genie <- function(benchmark, dataset, k=NULL, scale=FALSE){
  data <- read_data(benchmark, dataset)
  X <- data$X
  if(scale){
    X <- scale(X)
  }
  Y <- data$Y
  if(is.null(k)){
    k = length(unique(unlist(Y)))
  }

  hc <- hclust2(dist(X))
  Y_pred <- cutree(hc, k=k)

  algorithm <- "genie"

  return(list(benchmark=benchmark,
              dataset=dataset,
              algorithm=algorithm,
              FM=FM_index(Y, Y_pred),
              AR=adjustedRandIndex(Y, Y_pred)))
}

result <- list()
benchmarks <- c("fcps", "graves", "other", "sipu", "wut")
for(benchmark in benchmarks){
  matrix_ending <- "data.gz"
  labels_ending <- "labels0.gz"
  benchmark_path <- file.path("..", "benchmarks", benchmark)
  datasets <- list.files(benchmark_path)
  for(dataset in datasets){
```

```
    if(endsWith(dataset, ".txt")){
      dataset <- stri_sub(dataset, 0, -5)
      print(paste("Currently processing", benchmark, dataset))
      data <- read_data(benchmark, dataset)
      X <- data$X
      Y <- data$Y

      # testing hclust methods
      hclust_methods <- c("complete", "average", "mcquitty", "median", "centroid")
      for(method in hclust_methods){
        result <- rbind(result, result_hclust(benchmark, dataset, method=method))
      }

      # testing other methods
      result <- rbind(result,
                      result_genie(benchmark, dataset),
                      result_spectral(benchmark, dataset),
                      result_dbscan(benchmark, dataset),
                      result_kmeans(benchmark, dataset))
    }
  }
  write.csv(result, "results.csv")
}

write.csv(result, "results.csv")
```

Analiza wyników

```
result <- read.csv("results.csv")
```

Ktory algorytm jest najlepszy?

```
result %>% select(algorithm, FM, AR) %>%
  group_by(algorithm) %>% summarise(mean_FM = mean(FM), mean_AR = mean(AR)) %>%
  arrange(desc(mean_FM))
```

```
## # A tibble: 9 x 3
##   algorithm       mean_FM mean_AR
##   <fct>             <dbl>   <dbl>
## 1 genie             0.867   0.809
## 2 hclust_average    0.777   0.582
## 3 hclust_centroid   0.767   0.531
## 4 hclust_complete   0.734   0.521
## 5 kmeans            0.729   0.553
## 6 hclust_mcquitty   0.720   0.510
## 7 spectral          0.716   0.546
## 8 hclust_median     0.702   0.483
## 9 hdbscan           0.504   0.376
```

Cieszymy się patrząc na te wyniki, bo widzimy że spectral clustering nie jest na końcu. Nie odstaje tak bardzo od metod funkcji `hclust`. Jedynie `genie` znacząco wyprzedza je wszystkie, zarówno dla miary FM

jak i (zwłaszcza) AR.

Czy genie rzeczywiście jest najlepszy?

Nie ufamy za bardzo tym wynikom. Któryś z algorytmów musiał mieć największy wynik FM, ale być może było to całkiem przypadkowe. Dlatego sprawdźmy czy możemy mówić o statystycznej istotności tego wyniku.

```
genie_result <- unlist(result %>% filter(algorithm == "genie") %>% select(FM))
hclust_result <- unlist(result %>% filter(algorithm == "hclust_average") %>% select(FM))

wilcox.test(genie_result, hclust_result, alternative = "greater")
```

```
##
##  Wilcoxon rank sum test with continuity correction
##
## data:  genie_result and hclust_result
## W = 1217, p-value = 0.005612
## alternative hypothesis: true location shift is greater than 0
```

Wynik, który otrzymujemy jest przybliżony. Genie okazuje się najlepszy i to mimo (być może) nie do końca poprawnej metodologii - porównywaliśmy go z najlepszym z pozostałych algorytmów.

Sprawdźmy wynik porównań wszystkich algorytmów. Musimy tutaj uważać na problem wielokrotnego testowania, ale twórcy funkcji `pairwise.wilcox.test` pomyśleli o tym. Co ciekawe radzą sobie z tym metodą Holma, ale mamy też do wyboru inne metody.

```
pairwise.wilcox.test(result$FM, result$algorithm)
```

```
##
##  Pairwise comparisons using Wilcoxon rank sum test
##
## data:  result$FM and result$algorithm
##
##                 genie   hclust_average hclust_centroid hclust_complete
## hclust_average  0.2469  -              -               -
## hclust_centroid 0.1024  1.0000         -               -
## hclust_complete 0.0066  1.0000         1.0000          -
## hclust_mcquitty 0.0062  1.0000         1.0000          1.0000
## hclust_median   0.0016  1.0000         1.0000          1.0000
## hdbscan         1.6e-05 0.0095         0.0142          0.0807
## kmeans          0.0067  1.0000         1.0000          1.0000
## spectral        0.0045  1.0000         1.0000          1.0000
##                 hclust_mcquitty hclust_median hdbscan kmeans
## hclust_average  -               -             -       -
## hclust_centroid -               -             -       -
## hclust_complete -               -             -       -
## hclust_mcquitty -               -             -       -
## hclust_median   1.0000          -             -       -
## hdbscan         0.1032          0.2064        -       -
## kmeans          1.0000          1.0000        0.0945  -
## spectral        1.0000          1.0000        0.1061  1.0000
##
## P value adjustment method: holm
```

Testując wielokrotnie nie ma podstaw do odrzucenia hipotezy że nasz algorytm jest tak samo dobry jak hclust_average, ale wydaje mi się, ze nie ma się czym cieszyć. Nie mamy podstaw do powiedzenia, że wyniki

hdbscanu są gorsze niż hclust_complete, a gołym okiem widać że gorsze są.

Okazuje się jednak, że nawet robiąc test jednokrotny nie ma podstaw do odrzucenia hipotezy, że nasz algorytm jest tak samo dobry jak hclust_average.

```
spectral_result <- unlist(result %>% filter(algorithm == "spectral") %>% select(FM))
hclust_result <- unlist(result %>% filter(algorithm == "hclust_average") %>% select(FM))

wilcox.test(spectral_result, hclust_result, alternative = "less")
```

```
##
##  Wilcoxon rank sum test with continuity correction
##
## data:  spectral_result and hclust_result
## W = 783.5, p-value = 0.1124
## alternative hypothesis: true location shift is less than 0
```

Na koniec porównamy nasz algorytm z hdbscanem.

```
spectral_result <- unlist(result %>% filter(algorithm == "spectral") %>% select(FM))
hdbscan_result <- unlist(result %>% filter(algorithm == "hdbscan") %>% select(FM))

wilcox.test(spectral_result, hdbscan_result, alternative = "greater")
```

```
##
##  Wilcoxon rank sum test with continuity correction
##
## data:  spectral_result and hdbscan_result
## W = 1254.5, p-value = 0.002211
## alternative hypothesis: true location shift is greater than 0
```

Należy jednak pamiętać, że hdbscan nie wie o prawdziwej liczbie skupień - jesteśmy zatem nie fair w stosunku do niego.

Jakie zbiory sprawiały najwięcej problemów analizie skupień?

```
result %>% select(benchmark, dataset, FM, AR) %>%
  group_by(benchmark, dataset) %>%
  summarize(FM_mean=mean(FM), AR_mean=mean(AR)) %>%
  arrange(FM_mean)
```

```
## # A tibble: 43 x 4
## # Groups:   benchmark [5]
##    benchmark dataset   FM_mean AR_mean
##    <fct>     <fct>       <dbl>   <dbl>
##  1 wut       z1          0.471   0.185
##  2 wut       cross       0.475   0.140
##  3 sipu      s4          0.507   0.444
##  4 sipu      spiral      0.537   0.290
##  5 graves    zigzag      0.566   0.268
##  6 sipu      s3          0.567   0.515
##  7 graves    fuzzyx      0.601   0.471
##  8 sipu      pathbased   0.607   0.392
##  9 wut       x2          0.611   0.296
## 10 graves    line        0.614   0.116
## # ... with 33 more rows
```

Wygląda na to, że studenci WUTu byli dość złośliwi dobierając zbiory danych.

Analiza działania spectral clustering

Jak parametr M wpływa na działanie algorytmu?

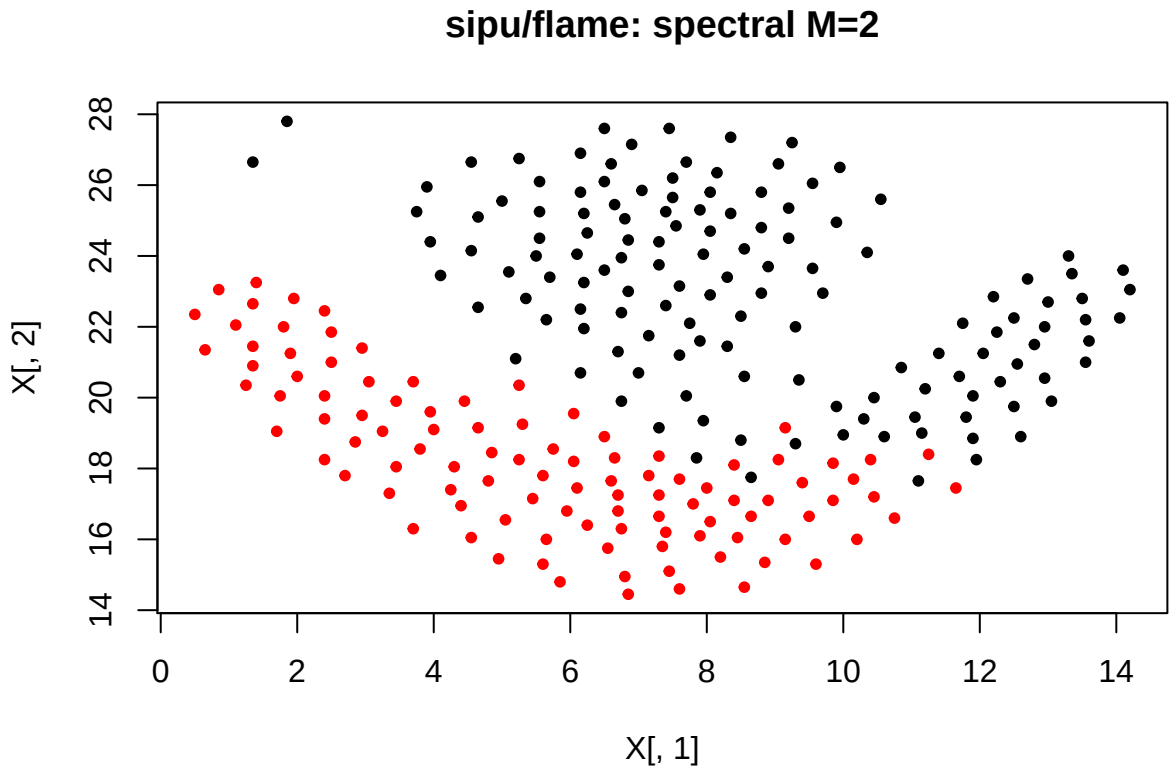
Zbadamy teraz jak wybór hiperparametru M wpływa na działanie algorytmu. Posłuzymy się w tym celu poniższą funkcją:

```
test_spectral_single <- function(benchmark, dataset, M=20, k=NULL, scale=FALSE, plot=TRUE){
  data <- read_data(benchmark, dataset)
  X <- data$X
  if(scale){
    X <- scale(X)
  }
  Y <- data$Y
  if(is.null(k)){
    k = length(unique(unlist(Y)))
  }
  set.seed(42)  # because kmeans in spectral clustering randomly initializes centers
  Y_pred <- spectral_clustering(X, k, M)
  if(plot){
    plot_data(X, Y_pred, paste(paste(benchmark, dataset, sep="/"), ": spectral ", "M=", M, sep=""))
  }
  print(paste("FM:", FM_index(Y, Y_pred), " AR:", adjustedRandIndex(Y, Y_pred), sep=" "))
}
```

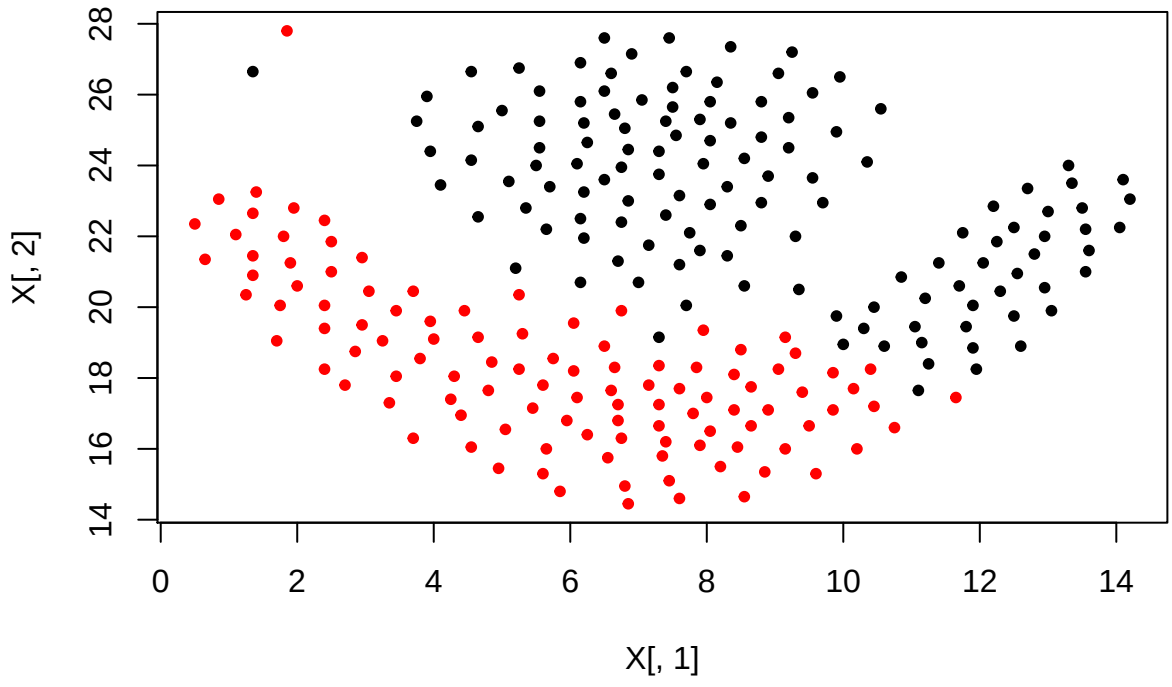
Spójrzmy teraz jak zadziała nasz algorytm dla różnych M. Zwróćmy uwagę, że wyeliminowaliśmy losowość wynikającą z losowego przyporzadkowywania początkowych wartości dla centrowych punktów w algorytmie kmeans.

```
Ms <- c(2, 10, 20, 50)
benchmark <- "sipu"; dataset <- "flame"
for(m in Ms){
  print(m)
  test_spectral_single(benchmark, dataset, M=m)
}
```

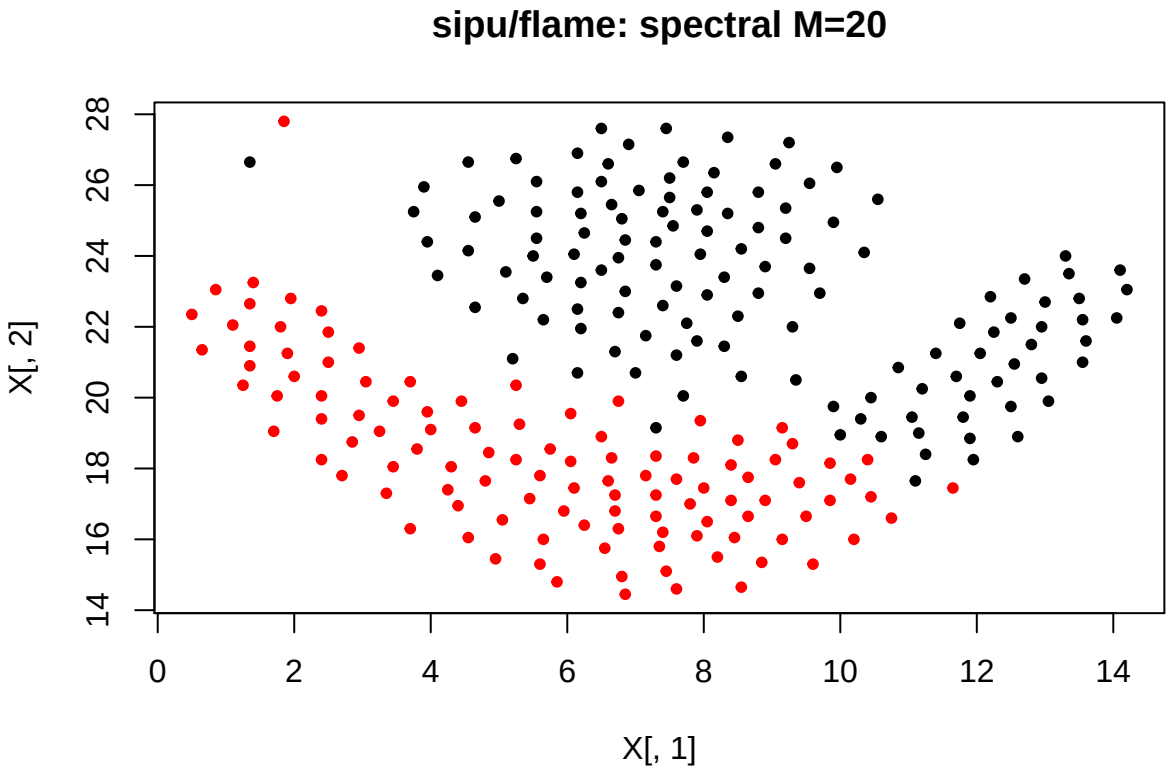
```
## [1] 2
```



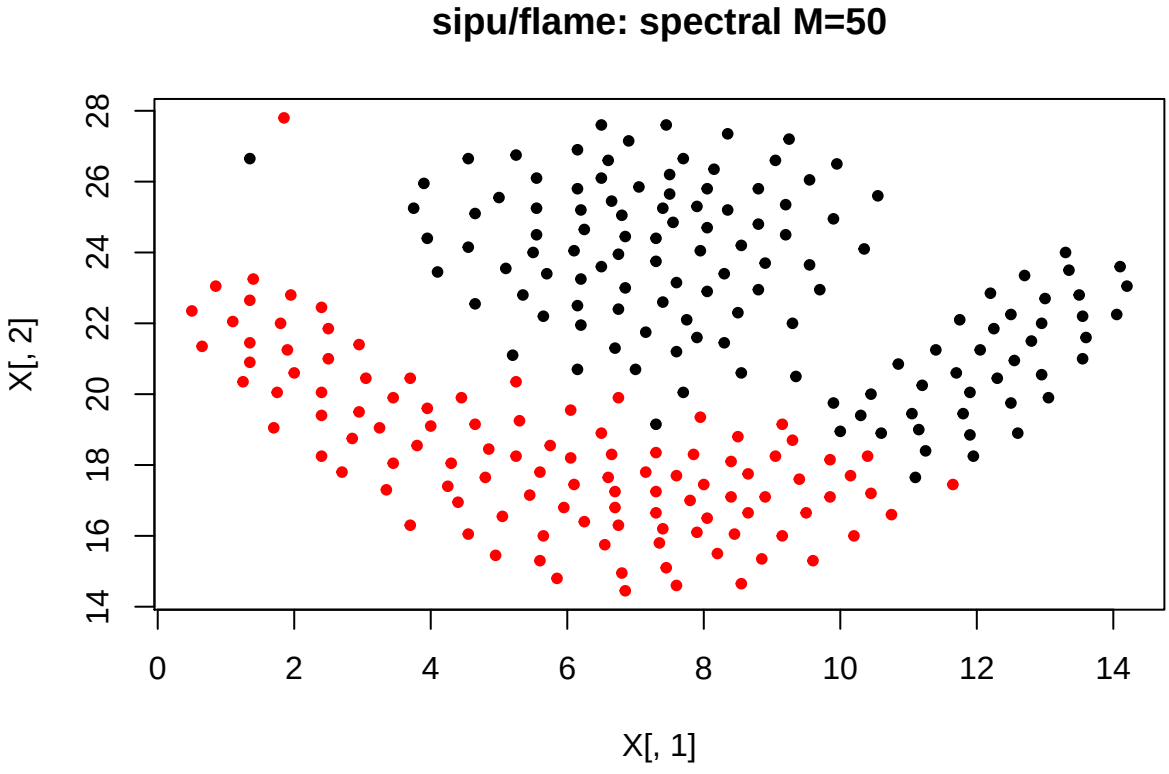

```
## [1] "FM: 0.687308991818585  AR: 0.346709333039244"
## [1] 10
```




```
## [1] "FM: 0.705422032154052  AR: 0.387952806505857"
## [1] 20
```




```
## [1] "FM: 0.705422032154052  AR: 0.387952806505857"
## [1] 50
```




```
## [1] "FM: 0.705422032154052  AR: 0.387952806505857"
```

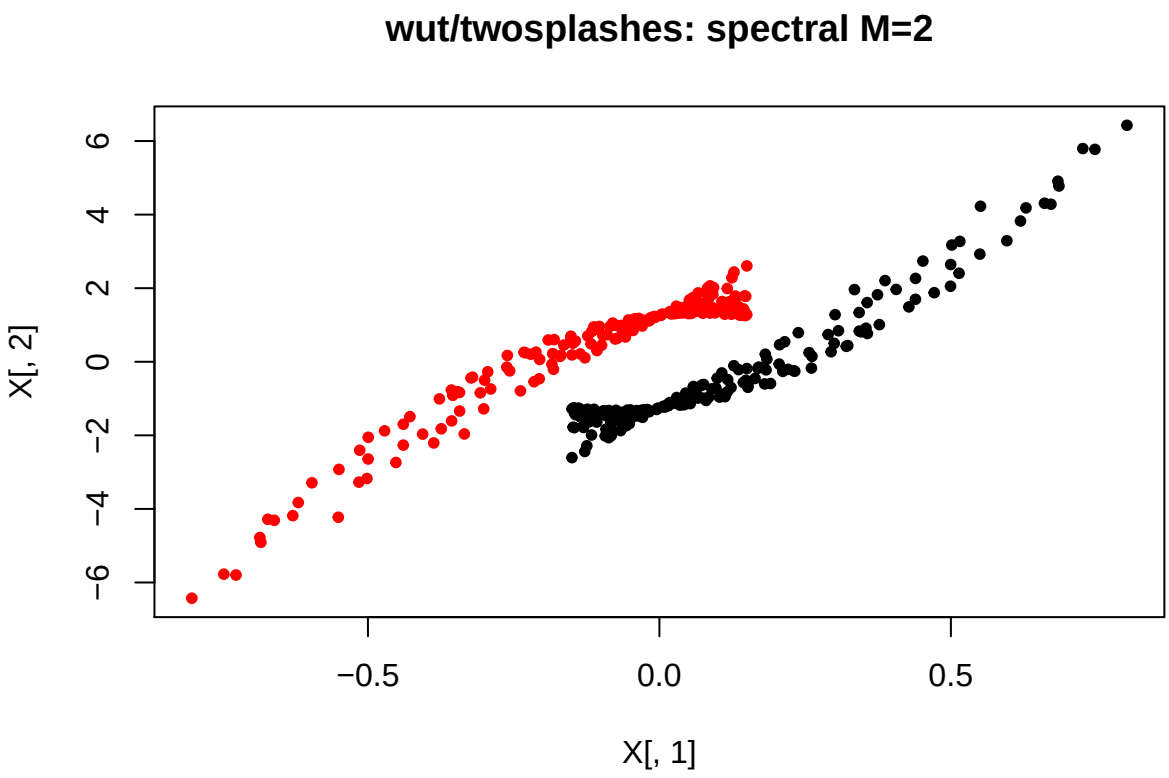
Jak widzimy dla małego `M` algorytm działa trochę gorzej, natomiast dla wyższych zwiększanie `M` nie zmienia

tego jak algorytm przyporządkowuje punkty.

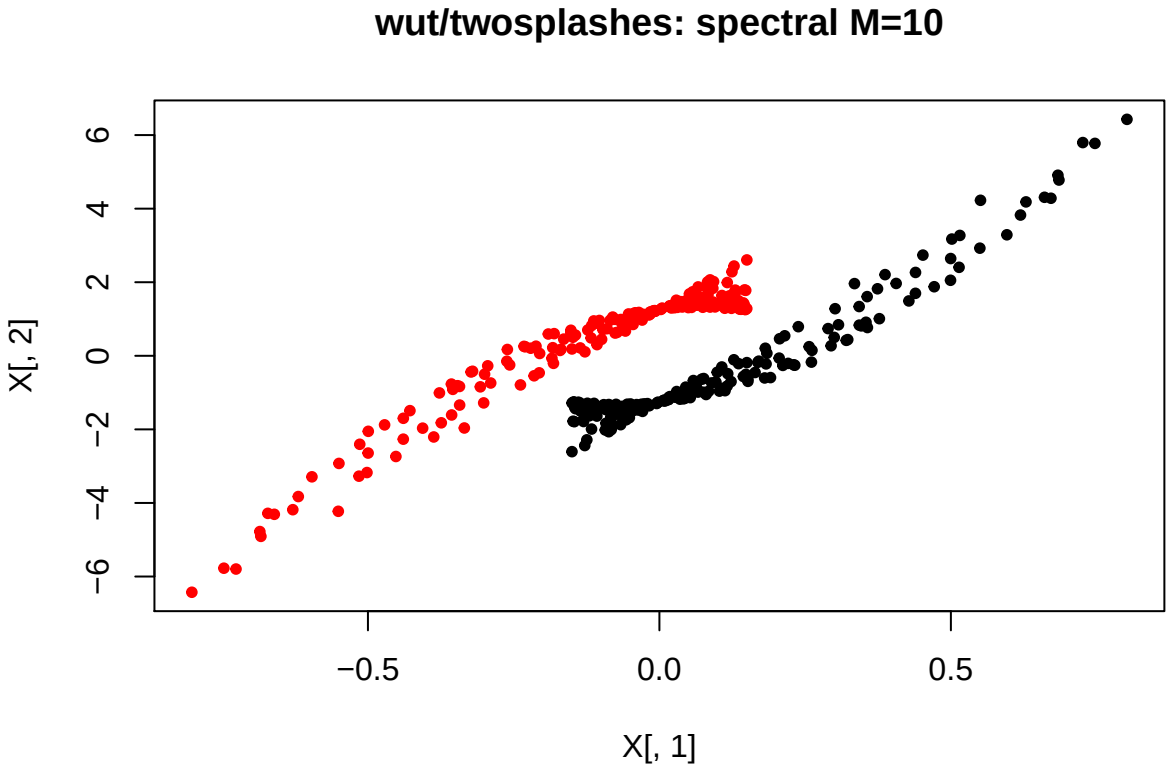
Sprawdźmy jeszcze na to samo dla innych danych:

```
Ms <- c(2, 10, 20, 50)
benchmark <- "wut"; dataset <- "twosplashes"
for(m in Ms){
  print(m)
  test_spectral_single(benchmark, dataset, M=m)
}
```

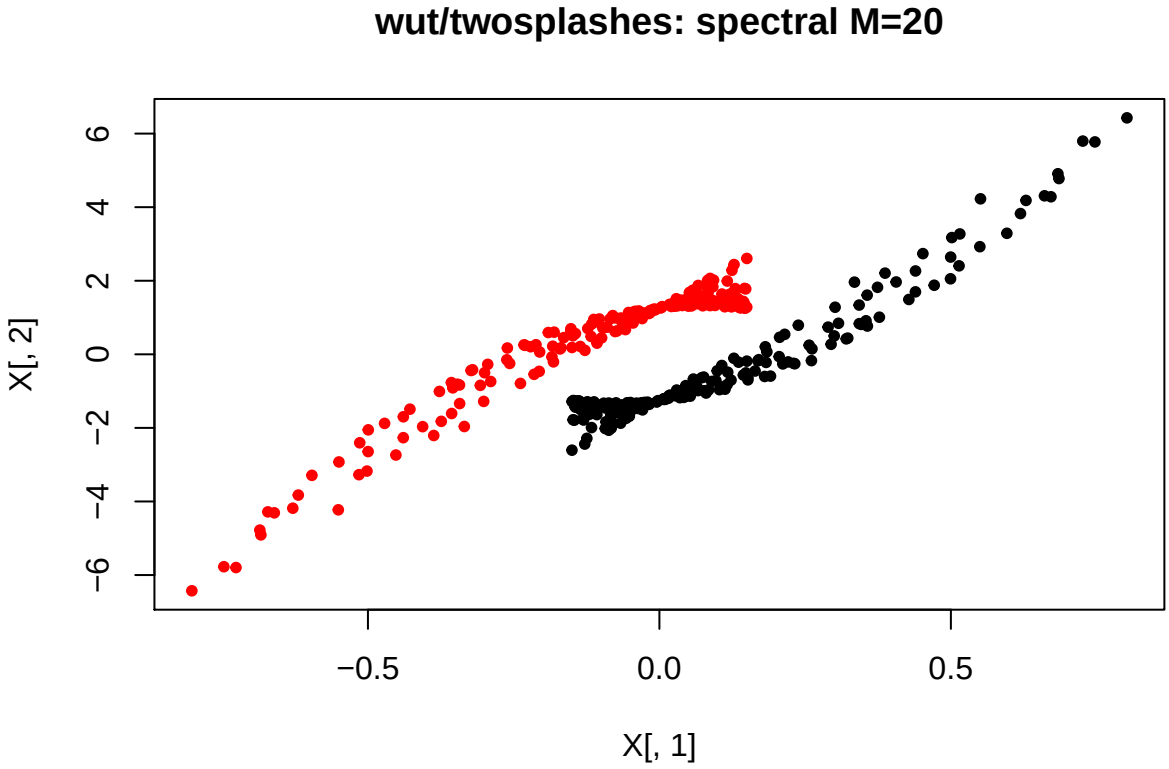
```
## [1] 2
```



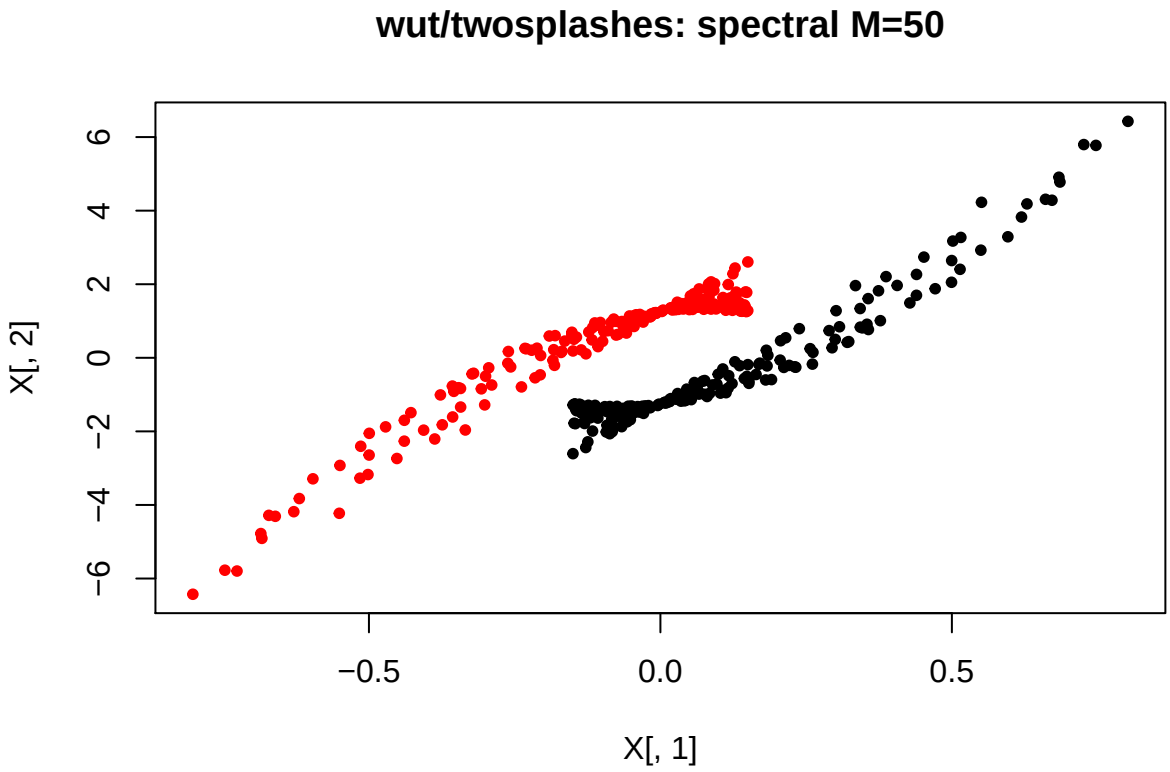

```
## [1] "FM: 1  AR: 1"
## [1] 10
```




```
## [1] "FM: 1  AR: 1"
## [1] 20
```




```
## [1] "FM: 1  AR: 1"
## [1] 50
```

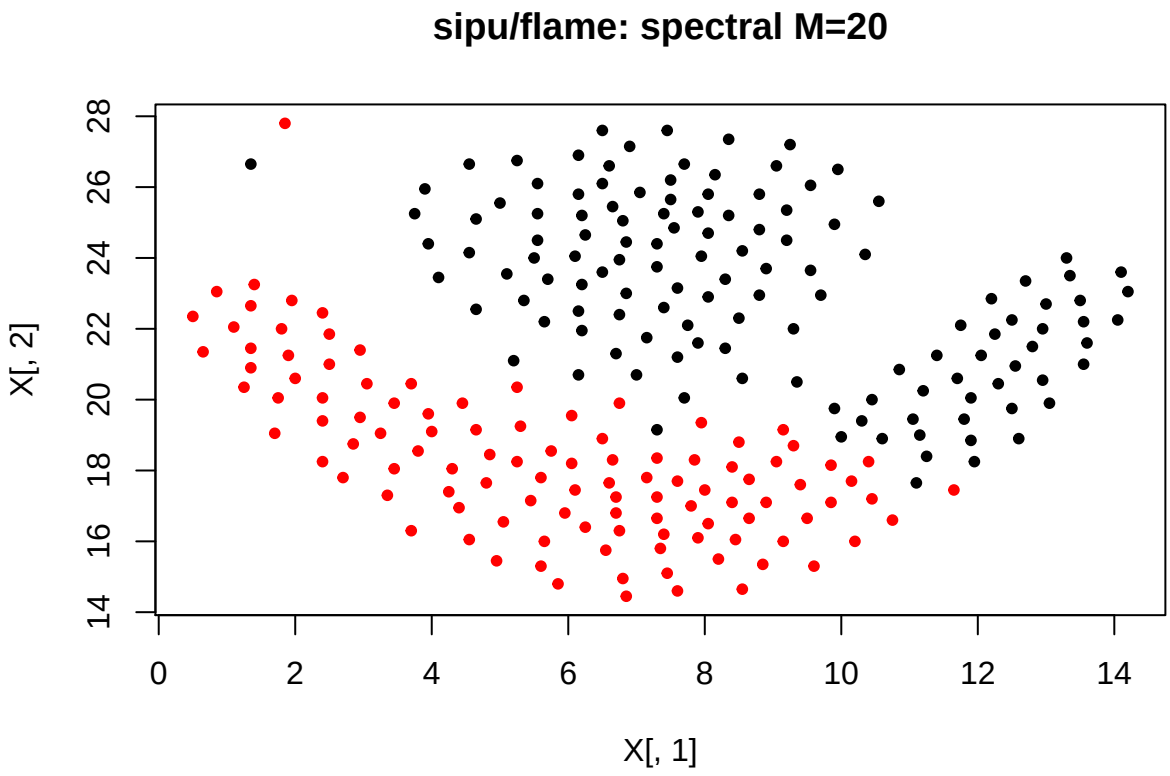



```
## [1] "FM: 1  AR: 1"
```

Wyniki potwierdzają naszą tezę, że działanie algorytmu nie zmienia się wraz ze zmianą M o ile M nie jest zbyt małe. Dlatego jako domyślny parametr można przyjąć na przykład M=10.

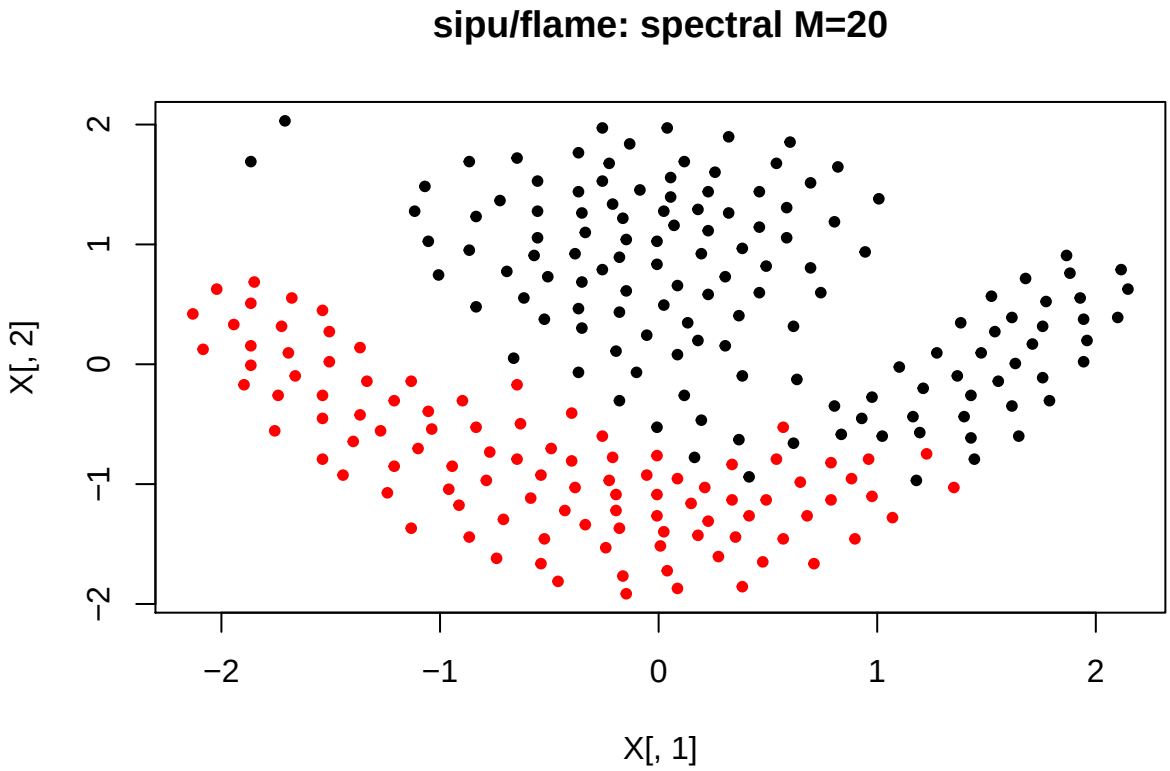
Jak skalowanie wpływa na wyniki?

```
benchmark <- "sipu"; dataset <- "flame"
test_spectral_single(benchmark, dataset, scale=FALSE)
```




```
## [1] "FM: 0.705422032154052  AR: 0.387952806505857"
```

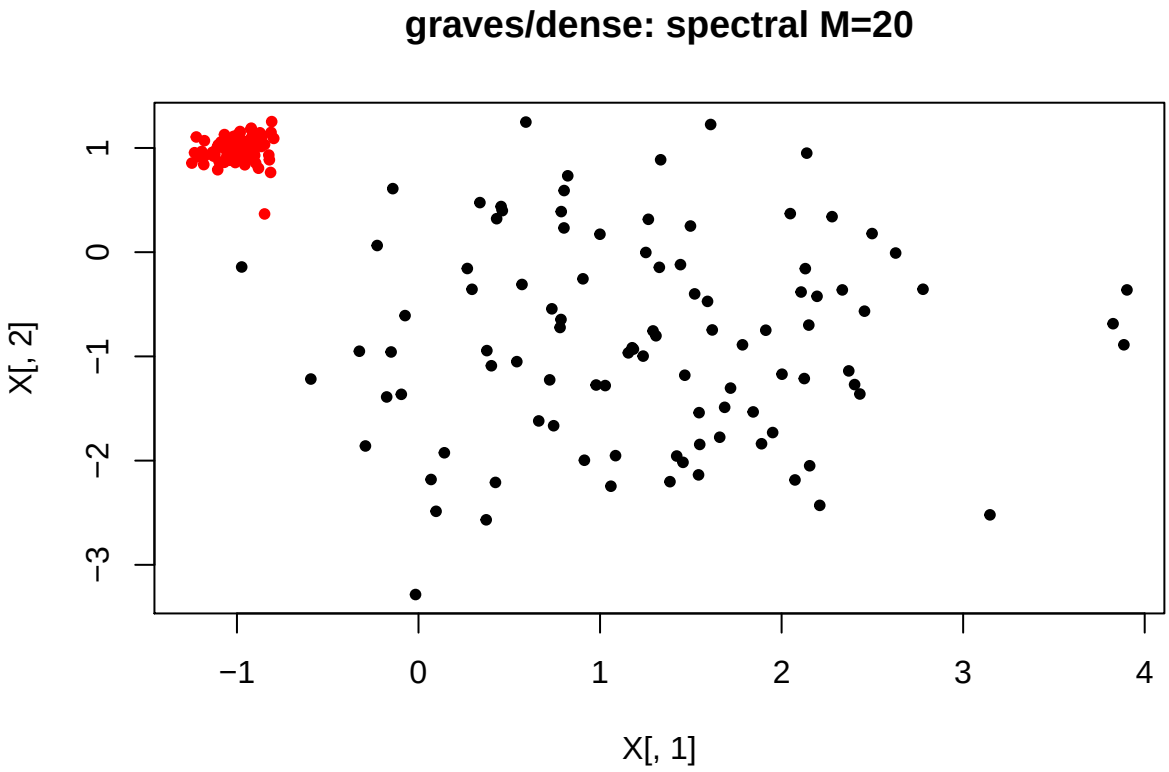
```
test_spectral_single(benchmark, dataset, scale=TRUE)
```




```
## [1] "FM: 0.687308991818585  AR: 0.346709333039244"
```

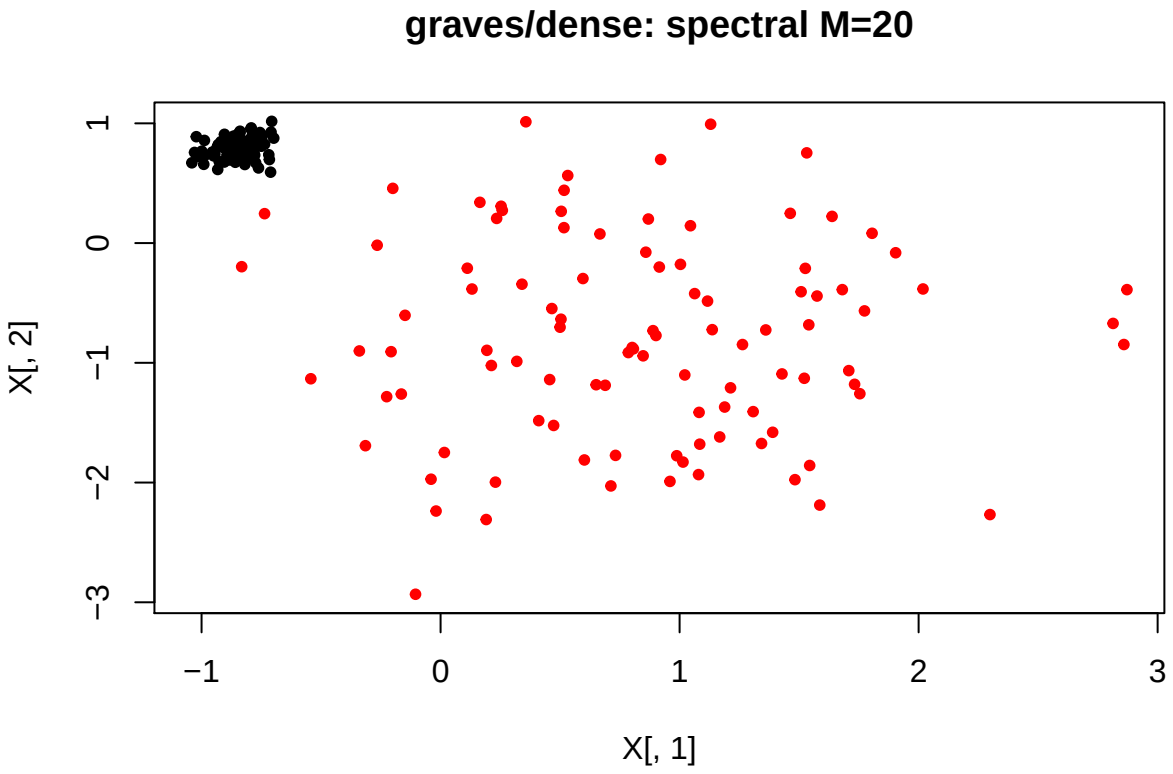
W tym przypadku skalowanie trochę pogorszyło działanie algorytmu. Natomiast dla innych zbiorów działanie może być różne:

```
test_spectral_single("graves", "dense", M=20)
```



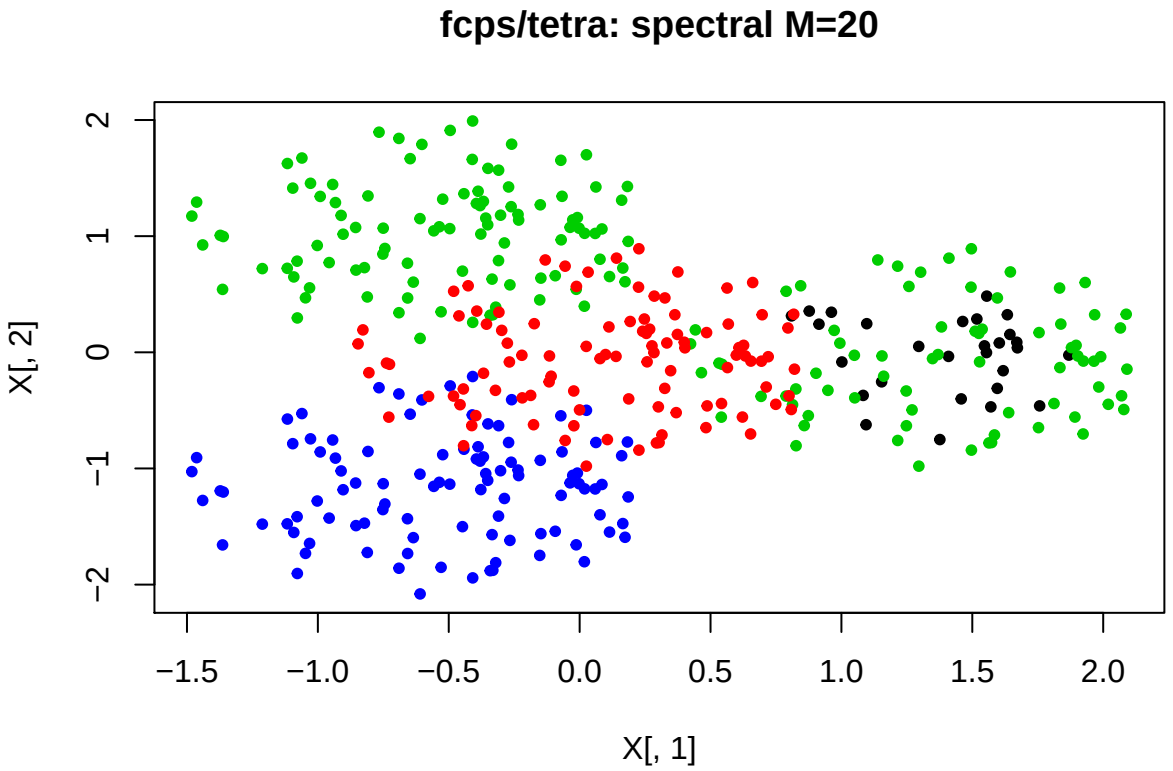

```
## [1] "FM: 0.98995000378756  AR: 0.979999505050755"
```

```
test_spectral_single("graves", "dense", M=20, scale=TRUE)
```



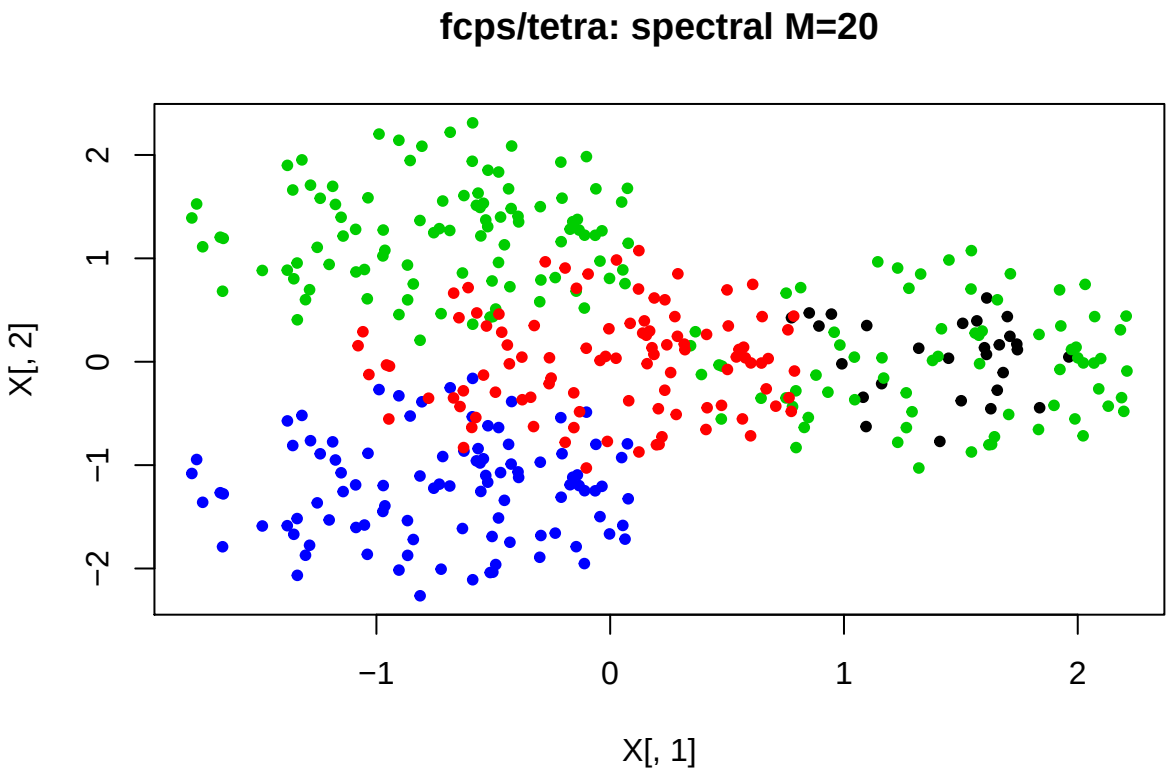

```
## [1] "FM: 1  AR: 1"
```

```
test_spectral_single("fcps", "tetra", M=20)
```




```
## [1] "FM: 0.799587265813454  AR: 0.715431933672105"
```

```
test_spectral_single("fcps", "tetra", M=20, scale=TRUE)
```




```
## [1] "FM: 0.799587265813454  AR: 0.715431933672105"
```

Wynika stąd, że skalowanie nie ma wielkiego wpływu na jakość naszego algorytmu. Już podczas testów zauważyliśmy, że algorytm nie przywiązuje dużej uwagi do bliskości punktów i był w stanie łączyć punkty odległe do siebie. Zatem i skalowanie niewiele zmienia w jego działaniu. Intuicja jest taka, że w tej metodzie wykorzystujemy tylko indeksy najbliższych punktów, a zatem konkretne wielkości nie mają takiego znaczenia.

Wnioski

Nasz algorytm `spectral clustering` działa całkiem nieźle nawet w porównaniu do różnych algorytmów R-owych. Charakteryzuje się tym, że w przeciwieństwie do na przykład `kmeans` nie przywiązuje uwagi do skupisk które są blisko siebie i udaje mu się wychwycić "podobieństwa"" między punktami leżącymi daleko od siebie. Zaobserwowaliśmy, że hiperparametr `M` nie ma dużego wpływu na jakość wykonywanej analizy skupień. Ogólnie `spectral_clustering` nie działa najszybciej, dlatego zaimplementowaliśmy go w Rcpp, co trochę poprawiło czas wykonywania analizy skupień.