**ВМК**

# Задание 8. Кластеризация. Методы снижения размерности. Частичное обучение.

**Курс по методам машинного обучения, 2021-2022, Находнов Максим**

## 1 Характеристики задания

- **Длительность:** 2 недели (до жесткого дедлайна)
- **Кросс-проверка:** 30 баллов; в течение 1 недели после жесткого дедлайна; нельзя сдавать после жесткого дедлайна
- **Юнит-тестирование:** 15 баллов; можно сдавать после жесткого дедлайна; публичная и приватная часть
- **Почта:** ml.cmc@mail.ru
- **Темы для писем на почту:** ВМК.ML[Задание 8][peer-review], ВМК.ML[Задание 8][unit-tests]

**Кросс-проверка:** После окончания срока сдачи, у вас будет еще неделя на проверку решений как минимум **3х других студентов** — это **необходимое** условие для получения оценки за вашу работу. Если вы считаете, что вас оценили неправильно или есть какие-то вопросы, можете писать на почту с соответствующей темой письма

## 2 Описание задания

В данной работе вам предстоит познакомится с методами машинного обучения без учителя — кластеризацией и алгоритмами снижения размерности. Также будет предложено применить кластеризацию и снижение размерности в задачах Частичного Обучения (Semi-Supervised learning).

Оценка работы складывается из двух частей — **оценки за кросс-проверку (**30 **баллов)** и **оценки за юнит-тестирование трёх функций (**15 **баллов)**.

В рамках юнит-тестирования Вам необходимо будет реализовать следующие три функции:

1. Функция для расчёта коэффициента силуэта
2. Функция для расчёта метрики B-Cubed
3. Функция для классификации по результатам кластеризации с использованием размеченных объектов

## 3 Кросс-проверка

Подробное описание заданий для кросспроверки и соответствующая разбалловка находится в ноутбуке.

Обратите внимание, что для ускорения выполнения работы в шаблоне решения прилагается файл `cifar10_deep_features.npy`. Не забудьте положить его в ту же директорию, что и сам ноутбук. Выполненный ноутбук `Clusterization.ipynb` необходимо сдать в тестирующую систему во вкладку `Кластеризация (ноутбук)`.

**Замечание:** После отправки ноутбука убедитесь, что все графики сохранены корректно и правильно отображаются в системе.

**Замечание:** Перед сдачей проверьте, пожалуйста, что не оставили в ноутбуке где-либо свои ФИО, группу и так далее — кросс-рецензирование проводится анонимно.

# 4 Юнит-тестирование. Локальные тесты

Решение задач на юнит-тестирование сдаётся во вкладку `Кластеризация (unit-tests)` одним файлом `solution.py`. Шаблон данного файла (`solution_template.zip/template.py`) можно скачать в тестирующей системе.

При тестировании баллы за каждую из функций начисляются независимо — 5 баллов за каждую задачу (4.5 **балла за прохождение всех приватных тестов и** 0.5 **балла за прохождение всех публичных тестов**). Порядок тестов можно определить с помощью файла `run.py` из тестирующей системы.

Для проверки своего решения на открытых тестах необходимо скачать архив `public_tests.zip` и скрипт для запуска `run.py` из тестирующей системы, а затем расположить все файлы в соответствии с диаграммой 1.

```
./ ..................................................... Корневая директория
├── solution.py ..................................... Файл с решением
├── run.py .......................................... Скрипт для тестирования
└── public_tests ..................................... Папка с публичными тестами
    ├── 00_test_*_gt
    ├── 00_test_*_input
    ├── ...
    ├── xx_test_*_gt
    └── xx_test_*_input
```

Рис. 1: Требуемая структура для локального тестирования на публичных тестах

Тестирование запускается следующей командой из корневой директории:

```
python ./run.py ./public_tests
# В случае успешного прохождения тестов вывод будет следующим:
>> Ok
>> ...
>> Ok
>> Mark: 1.5 1.500/1.500
```

# 5 Спецификация функций

Несколько важных замечаний:

**Замечание:** Запрещается пользоваться библиотеками, импорт которых не объявлен в файле с шаблонами функций.

**Замечание:** Задания, в которых есть решения, содержащие в каком-либо виде взлом тестов, дополнительные импорты и прочие нечестные приемы, будут автоматически оценены в 0 баллов без права пересдачи задания.

## 5.1 Silhouette

Метрика `силуэт` является классическим представителем внутренних метрик кластеризации. Её суть заключается в оценке двух параметров, характеризующих выделенные кластеры — компактность и отделимость.

Положим, что $C_i$ — номер кластера для объекта $i$.

$s_i$ — компактность кластеризации объекта $i$ определяется как среднее расстояние от него до всех объектов того же кластера:

$$s_i = \frac{1}{|\{j : C_j = C_i\}| - 1} \sum_{j:C_j=C_i} \|x_i - x_j\|$$

$d_i$ — отделимость кластеризации объекта $i$ определяется как среднее расстояние от него до всех объектов второго по близости кластера:

$$d_i = \min_{C:C\neq C_i} \frac{1}{|\{j : C_j = C\}|} \sum_{j:C_j=C} \|x_i - x_j\|$$

Тогда силуэт объекта $i$:

$$sil_i = \frac{d_i - s_i}{\max(d_i, s_i)}$$

И, наконец, коэффициент силуэта для выборки определяется как среднее силуэтов объектов:

$$S = \frac{1}{|X|} \sum_i sil_i$$

Если кластер состоит из одного объекта, то его силуэт равен нулю.

---

Реализуйте вычисление коэффициента силуэта для заданного разбиения. Шаблон функции представлен на листинге 2.

```python
def silhouette_score(x, labels):
    '''
    :param np.ndarray x: Непустой двумерный массив векторов-признаков
    :param np.ndarray y: Непустой одномерный массив меток объектов
    :return float: Коэффициент силуэта для выборки x с метками labels
    '''

    # Ваш код здесь: \(* o * l|l)/

    return sil_score
```

Рис. 2: Шаблон для реализации подсчёта коэффициента силуэта

**Ваша реализация должна удовлетворять следующим требованиям:**

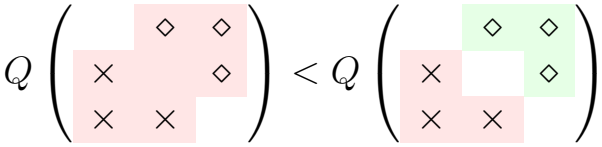
1. При вычислении не должно возникать warning, бесконечностей и nan-ов
2. Используйте не более одного цикла
3. Учтите, что метки кластеров могут идти не по порядку и принимать произвольные значения
4. Если в данных присутствует один кластер, то считайте что силуэт равен 0
5. Если $s_i = d_i = 0 \Longrightarrow sil_i = 0$
6. Разрешено использовать `sklearn.metrics.pairwise_distances` и аналоги
7. Запрещено использовать любые библиотечные реализации коэффициента силуэта

## 5.2 B-Cubed

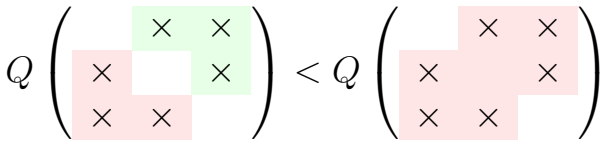
Пусть существует разметка $(y_1, ..., y_l)$, не участвующая в обучении. Мы не использовали эту разметку в качестве дополнительного признака, так как нам не хочется мотивировать модель данным признаком. Тогда предлагается ввести оценку качества алгоритма кластеризации при помощи внешней разметки, саму же разметку тогда называют *gold standard*.

Один из вариантов учесть gold standard разметку — внешняя метрика B-Cubed. Данная метрика позволяет определять следующие особенности кластеризации:

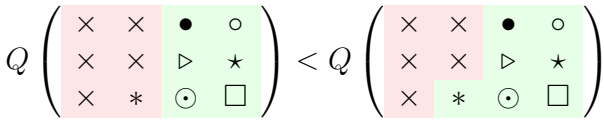
1. **Гомогенность.** Базовое свойство разделения разных объектов в разные кластеры:



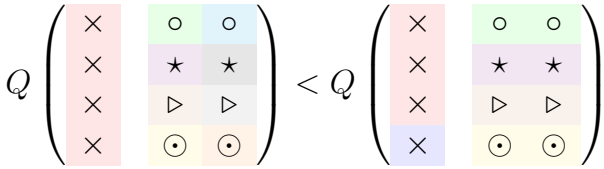
2. **Полнота.** Один кластер не должен дробиться на несколько маленьких:



3. **Rag-bag.** Весь мусор должен быть в одном "мусорном"кластере, чтобы остальные кластеры были "чистыми":



4. **Cluster size vs. quantity.** Лучше испортить один кластер с целью улучшить качество множества других:



Пусть $L(x)$ — gold standard, $C(x)$ — номер кластера, выдаваемый рассматриваемым алгоритмом.
Рассмотрим несколько величин:

$$\text{Correctness}(x, x') = \begin{cases} 1, C(x) = C(x') \wedge L(x) = L(x') \\ 0, \text{иначе} \end{cases}$$

$$\text{Precision-BCubed} = \operatorname*{Avg}_{x} \operatorname*{Avg}_{x':C(x)=C(x')} \text{Correctness}(x, x')$$

$$\text{Recall-BCubed} = \operatorname*{Avg}_{x} \operatorname*{Avg}_{x':L(x)=L(x')} \text{Correctness}(x, x')$$

Тогда,

$$\text{B-Cubed} = F_1 = 2\frac{\text{Precision-BCubed} \times \text{Recall-BCubed}}{\text{Precision-BCubed} + \text{Recall-BCubed}}$$

---

Реализуйте вычисление метрики B-Cubed. Шаблон функции представлен на листинге 3.

```python
def bcubed_score(true_labels, predicted_labels):
    '''
    :param np.ndarray true_labels: Непустой одномерный массив меток объектов
    :param np.ndarray predicted_labels: Непустой одномерный массив меток объектов
    :return float: B-Cubed для объектов с истинными метками true_labels и
        предсказанными метками predicted_labels
    '''

    # Ваш код здесь: \(* o * l|l)/

    return score
```

Рис. 3: Шаблон для реализации подсчёта метрики B-Cubed

**При реализации обратите внимание на следующие пункты:**

1. При вычислении не должно возникать warning, бесконечностей и nan-ов.
2. Использование циклов запрещено.
3. Обратите внимание на параметр `where` у функций-агрегаторов в `numpy` (numpy $\geqslant$ 1.20.0).
4. Запрещено использовать любые библиотечные реализации B-Cubed

## 5.3 KMeansClassifier

Рассмотрим задачу Semi-Supervised learning для задачи классификации. В таком случае метки правильных классов известны только для части объектов. Будем считать, что метки для неразмеченных объектов равны $-1$.

Предлагается следующий способ построения модели для решения задачи классификации: на первом шаге используется алгоритм кластеризации для определения групп похожих объектов. Затем, каждому кластеру назначается класс в соответствии с размеченной частью выборки.

---

Реализуйте данный алгоритм. Шаблон класса представлен на листинге 4. Обратите внимание, что автоматическое тестирование применяется только к функции `KMeansClassifier._best_fit_classification`. Работа остальных методов класса будет проверяться на кросс-проверке.

```
class KMeansClassifier(sklearn.base.BaseEstimator):
    def __init__(self, n_clusters):
        '''
        :param int n_clusters: Число кластеров которых нужно выделить
            в обучающей выборке с помощью алгоритма кластеризации
        '''
        super().__init__()
        self.n_clusters = n_clusters

        # Ваш код здесь: \(* o * l|l)/


    def fit(self, data, labels):
        '''
            Функция обучает кластеризатор KMeans с заданным числом кластеров, а затем с помощью
        self._best_fit_classification восстанавливает разметку объектов

        :param np.ndarray data: Непустой двумерный массив векторов-признаков объектов обучающей выборк
        :param np.ndarray labels: Непустой одномерный массив. Разметка обучающей выборки.
            Неразмеченные объекты имеют метку -1. Размеченные объекты могут иметь произвольную
                неотрицательную метку. Существует хотя бы один размеченный объект
        :return KMeansClassifier
        '''
        # Ваш код здесь: \(* o * l|l)/

        return self
```

```python
@staticmethod
def _best_fit_classification(cluster_labels, true_labels):
    '''
    :param np.ndarray cluster_labels: Непустой одномерный массив. Предсказанные метки кластеров.
        Содержит элементы в диапазоне [0, ..., n_clusters - 1]
    :param np.ndarray true_labels: Непустой одномерный массив. Частичная разметка выборки.
        Неразмеченные объекты имеют метку -1. Размеченные объекты могут иметь
            произвольную неотрицательную метку.
        Существует хотя бы один размеченный объект
    :return
        np.ndarray mapping: Соответствие между номерами кластеров и номерами классов в выборке,
            то есть mapping[idx] -- номер класса для кластера idx
        np.ndarray predicted_labels: Предсказанные в соответствии с mapping метки объектов

        Соответствие между номером кластера и меткой класса определяется как номер класса
            с максимальным числом объектов внутри этого кластера.
        * Если есть несколько классов с числом объектов, равным максимальному,
            то выбирается метка с наименьшим номером.
        * Если кластер не содержит размеченных объектов, то выбирается номер класса
            с максимальным числом элементов в выборке.
        * Если же и таких классов несколько, то также выбирается класс с наименьшим номером
    '''
    # Ваш код здесь: \(* o * l|l)/

    return mapping, predicted_labels


def predict(self, data):
    '''
    Функция выполняет предсказание меток класса для объектов, поданных на вход.
        Предсказание происходит в два этапа
        1. Определение меток кластеров для новых объектов
        2. Преобразование меток кластеров в метки классов с помощью выученного преобразования
    :param np.ndarray data: Непустой двумерный массив векторов-признаков объектов
    :return np.ndarray: Предсказанные метки класса
    '''
    # Ваш код здесь: \(* o * l|l)/

    return predictions
```

Рис. 4: Шаблон для реализации Semi-Supervised алгоритма с использованием KMeans