МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «МИСиС»

ПРОФИЛЬ ИННОВАЦИОННЫЕ IT-ПРОЕКТЫ

НАПРАВЛЕНИЕ ПРИКЛАДНАЯ ИНФОРМАТИКА

ГРУППА МПИ-20-4-2

Отчёт по лабораторной работе №3

ПО КУРСУ: «Нейронные сети и машинное обучение»

СТУДЕНТКА Денисова Е.А.

ПРЕПОДАВАТЕЛЬ Курочкин И. И.

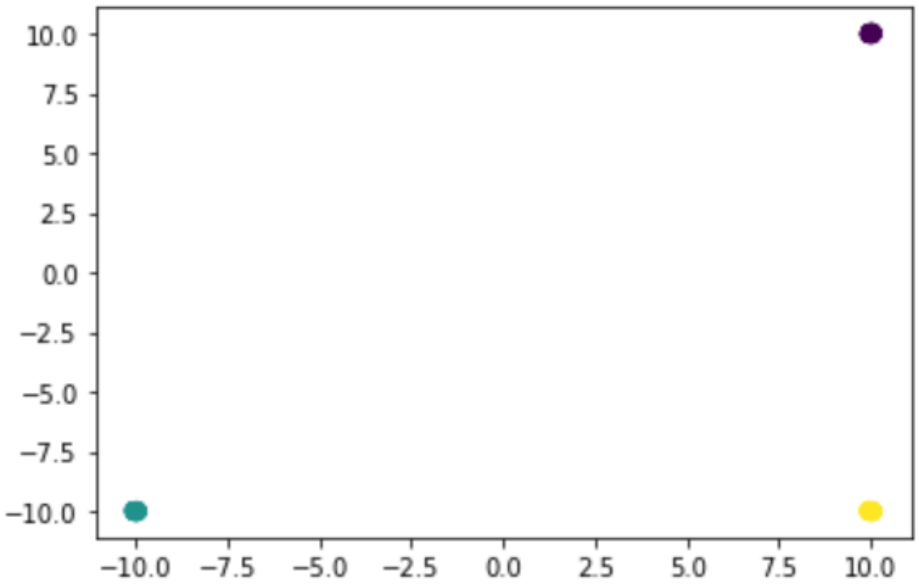
Москва, 2020г.

В ходе данной лабораторной работы были реализованы и протестированы на шести различных датасетах три метода кластеризации с евклидовой и манхеттенской метриками.

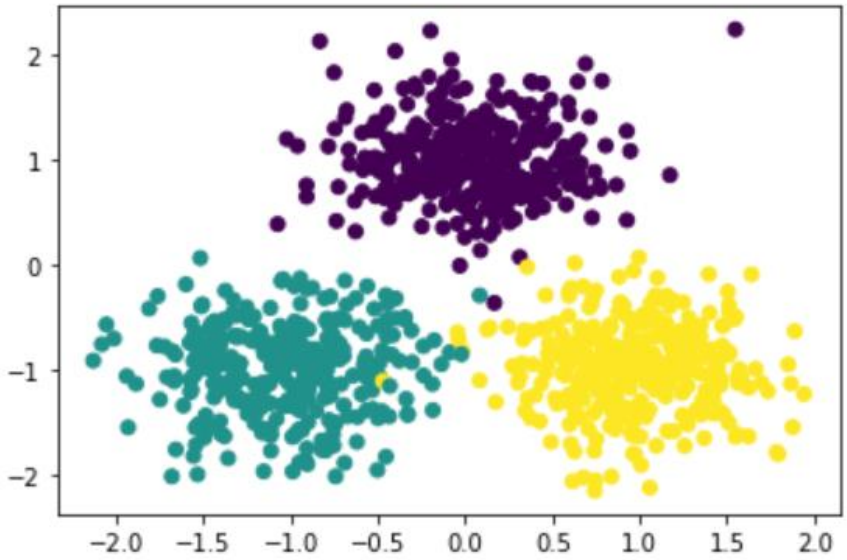
Для тестирования методов использовались датасеты:

1. Сгенерированный датасет с линейно разделимыми множествами, расстояние между группами во много раз превышает диаметр группы;
2. Сгенерированный датасет с линейно разделимыми множествами, группы расположены близко или касаются друг друга;
3. Сгенерированный датасет с линейно неразделимыми множествами, средняя площадь пересечения классов 10-20%;
4. Сгенерированный датасет с линейно неразделимыми множествами, средняя площадь пересечения классов 50-70%;
5. Эталонный датасет «Breast cancer Wiskonsin»;
6. Эталонный датасет «Wine».

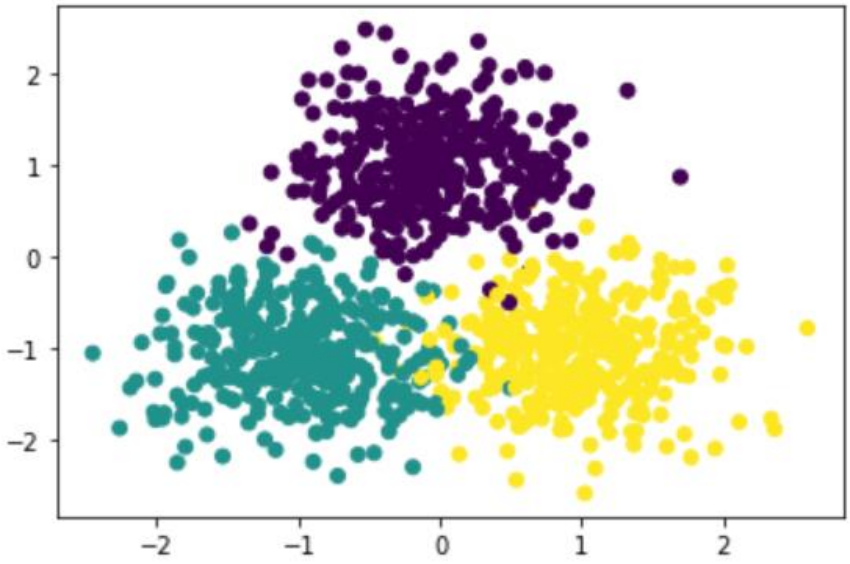
Визуализация сгенерированного датасета с линейно разделимыми множествами, расстояние между группами во много раз превышает диаметр группы. Количество примеров в данном датасете – 1000.



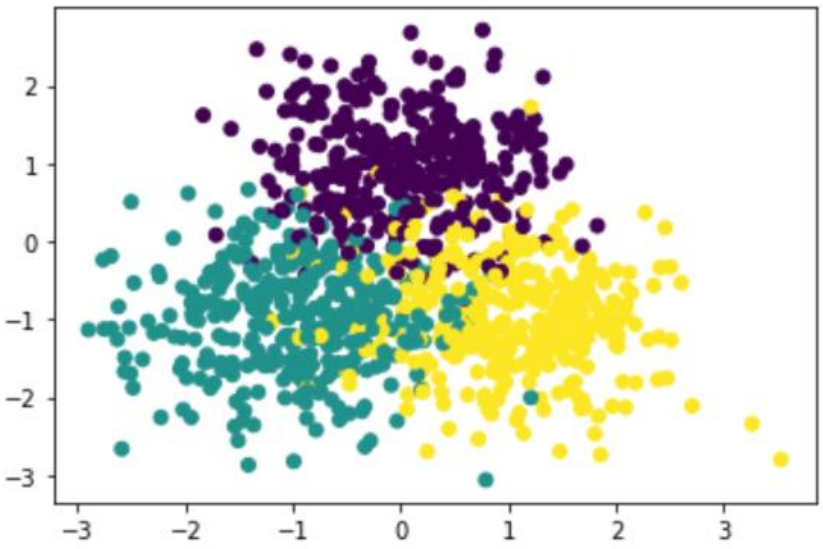
Визуализация сгенерированного датасета с линейно разделимыми множествами, группы расположены близко или касаются друг друга. Количество примеров в данном датасете также равно 1000.



Визуализация сгенерированного датасета с линейно разделимыми множествами, средняя площадь пересечения классов 10-20%. Количество примеров в данном датасете равно 1000.



Визуализация сгенерированного датасета с линейно разделимыми множествами, средняя площадь пересечения классов 50-70%. Количество примеров в данном датасете равно 1000.



Датасет «Breast cancer Wiskonsin» содержит 30 признаков, 569 образцов, 2 класса. Перед применением к датасету методов кластеризации данные в нем проходят препроцессинг с помощью функции sklearn scale(). Данная функция стандартизирует набор данных, центрируя и масштабируя их по среднему значению к единичной дисперсии.

Датасет «Wine» содержит 13 признаков, 178 образцов и 3 класса. Перед применением к датасету методов кластеризации данные в нем также проходят препроцессинг с помощью функции sklearn scale().

Для демонстрации качества разделения данных вычисляются 4 метрики: полнота, однородность, индекс Rand, скорректированная взаимная информация. Все оценки вычисляются с помощью фактических и проставленных меток.

Полнота – это показатель полноты маркировки кластеров с учетом фактической маркировки. Значение метрики уменьшается, если эталонный кластер разделить на части.

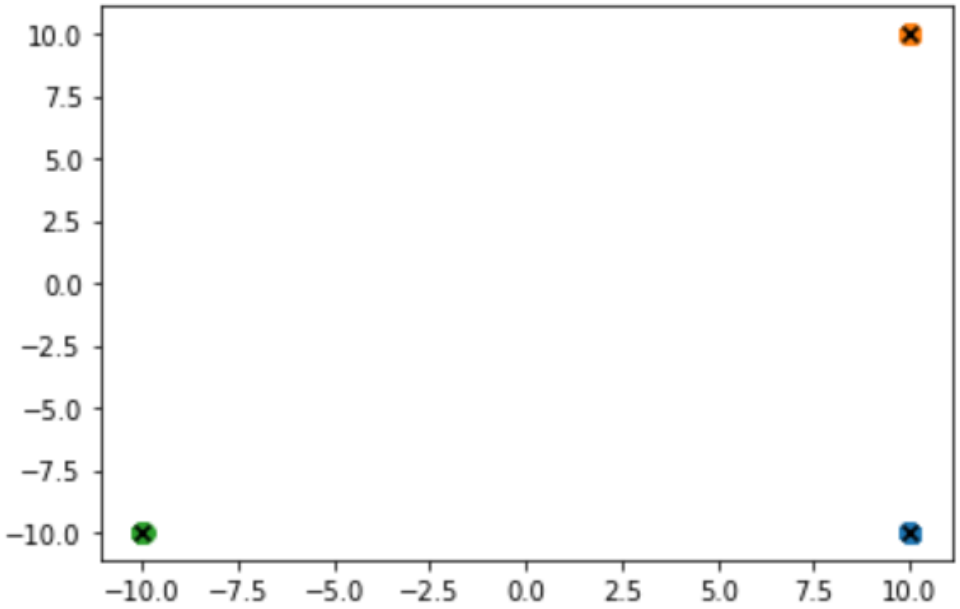
Однородность – это показатель однородности маркировки кластеров с учетом фактической маркировки. Результат кластеризации является однородным, если все его кластеры содержат только те точки данных, которые являются членами одного класса. Значение данной метрики качества уменьшается при объединении в один кластер двух фактических.

Индекс Rand – оценивает, насколько много из тех пар элементов, которые находились в одном классе, и тех пар элементов, которые находились в разных классах, сохранили данное состояние после кластеризации. В данной лабораторной работе вычисляется индекс Rand с поправкой на случайность.

Скорректированная взаимная информация – это скорректированная оценка взаимной информации для учета случайности. Взаимная информация – это функция, которая измеряет согласованность двух наборов меток, игнорируя перестановки.

Первым рассматриваемым методом будет алгоритм k-means с евклидовой и манхеттенской метриками.

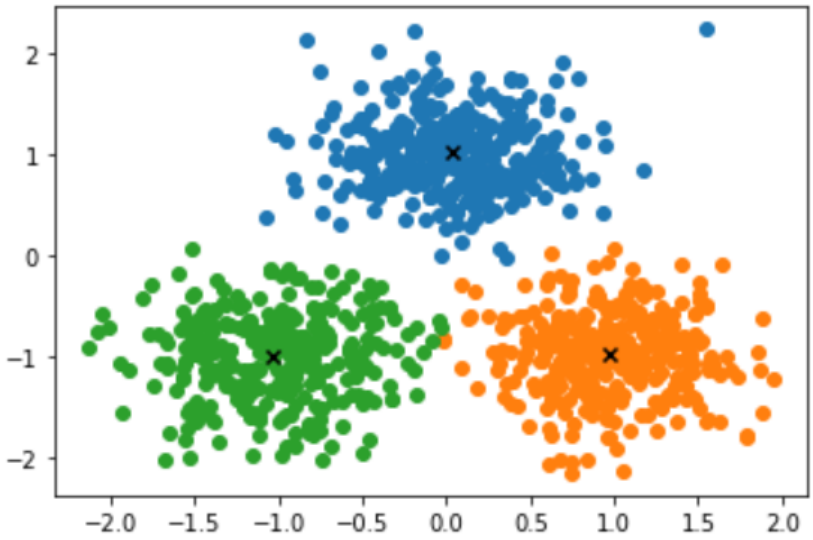
Сначала проверяется работа k-means с евклидовой метрикой. Первый датасет для проверки является сгенерированным датасетом, он представляет собой линейно разделимые множества с расстоянием между группами, во много раз большим, чем диаметр группы. Результат работы k-means с евклидовой метрикой для данного датасета. Крестиками обозначены центры кластеров, точки окрашены в цвета кластеров.



Значения метрик для k-means с евклидовой метрикой для линейно разделимого датасета.

```
Completeness: 1.000
Homogeneity: 1.000
Adjusted Rand index: 1.000
Adjusted Mutual information: 1.000
```

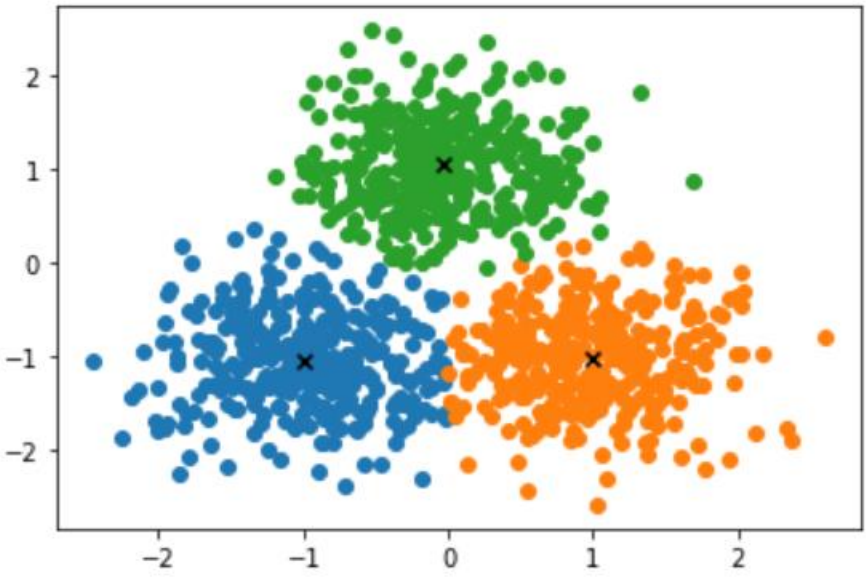
Далее k-means с евклидовой метрикой был протестирован на сгенерированном датасете, который состоит из линейно разделимых множеств, группы расположены близко. Визуализация работы k-means:



Значения метрик:

```
Completeness: 0.941
Homogeneity: 0.941
Adjusted Rand index: 0.967
Adjusted Mutual information: 0.941
```

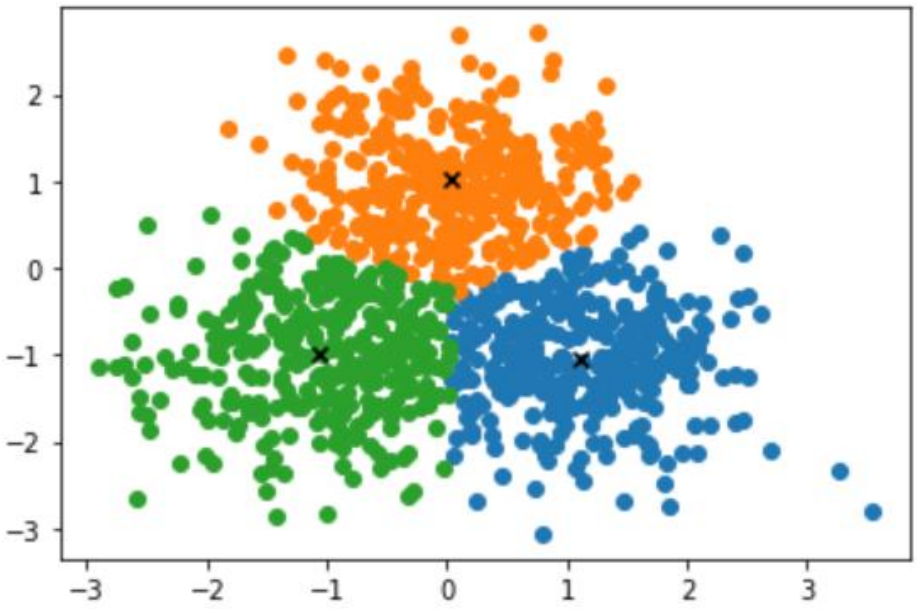
Следующим датасетом для проверки является сгенерированный датасет с линейно неразделимыми множествами, группы пересекаются на 10-20%. Визуализация работы k-means:



Результат работы k-means:

```
Completeness: 0.848
Homogeneity: 0.848
Adjusted Rand index: 0.901
Adjusted Mutual information: 0.848
```

Далее алгоритм k-means был протестирован на линейно неразделимом датасете, со средней площадью пересечения классов 50-70%. Результат работы k-means:



Значения метрик:

```
Completeness: 0.590
Homogeneity: 0.590
Adjusted Rand index: 0.668
Adjusted Mutual information: 0.589
```

Далее алгоритм был протестирован на 2 эталонных датасетах. В качестве первого датасета был взят датасет «Breast cancer Wiskonsin». Значения метрик для данного датасета:

```
Dataset Breast cancer Wisconsin
Completeness: 0.573
Homogeneity: 0.551
Adjusted Rand index: 0.677
Adjusted Mutual information: 0.561
```

В качестве эксперимента была предпринята попытка применить метод кластеризации к данному датасету, не подготавливая данные. В данном случае значения метрик показывают худшее качество кластеризации:

```
Dataset Breast cancer Wisconsin
Completeness: 0.517
Homogeneity: 0.422
Adjusted Rand index: 0.491
Adjusted Mutual information: 0.464
```

В качестве второго эталонного датасета был взят датасет «Wine». Значения метрик для данного датасета:

```
Dataset Wine
Completeness: 0.844
Homogeneity: 0.850
Adjusted Rand index: 0.864
Adjusted Mutual information: 0.846
```

В данном случае также была предпринята попытка не проводить препроцессинг данных. Значения метрик значительно хуже:

```
Dataset Wine
Completeness: 0.451
Homogeneity: 0.399
Adjusted Rand index: 0.352
Adjusted Mutual information: 0.417
```

Результаты качества разделения для k-means с евклидовой метрикой для различных датасетов:

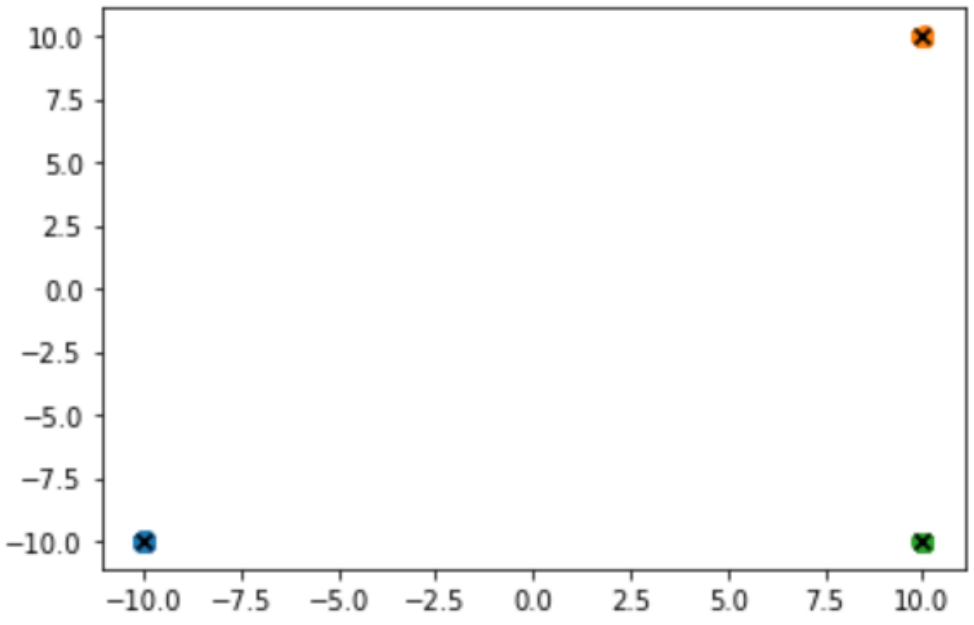
	Completeness	Homogeneity	Adjusted Rand index	Adjusted Mutual information
Большое расстояние между группами	1.000	1.000	1.000	1.000
Группы расположены близко	0.941	0.941	0.967	0.941

Группы пересекаются на 10-20%	0.848	0.848	0.901	0.848
Группы пересекаются на 50-70%	0.590	0.590	0.668	0.589
«Breast cancer Wiskonsin»	0.573	0.551	0.677	0.561
«Wine»	0.844	0.850	0.864	0.846

В таблице можно увидеть, что алгоритм работает тем лучше, чем лучше разделяются и чем дальше расположены классы. В случае, если классы пересекаются слишком сильно, значения метрик примерно равны 0.5 – 0.6. Также в ходе проверки работы алгоритма было установлено, что без препроцессинга данных качество кластеризации значительно хуже.

Далее была протестирована работа k-means с манхеттенской метрикой.

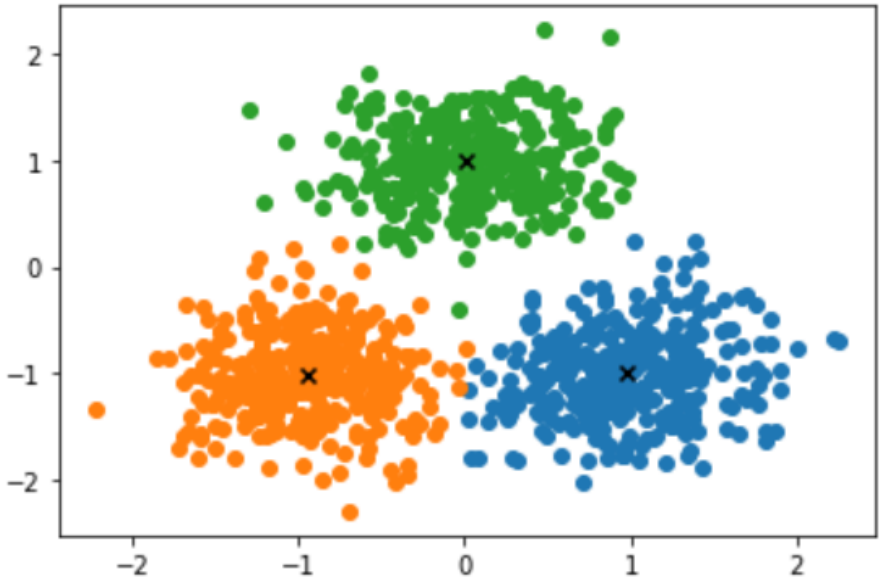
Результат работы k-means с манхеттенской метрикой на сгенерированном линейно разделимом датасете с расстоянием между группами во много раз большим, чем диаметр групп.



Значения метрик:

```
Completeness: 1.000
Homogeneity: 1.000
Adjusted Rand index: 1.000
Adjusted Mutual information: 1.000
```

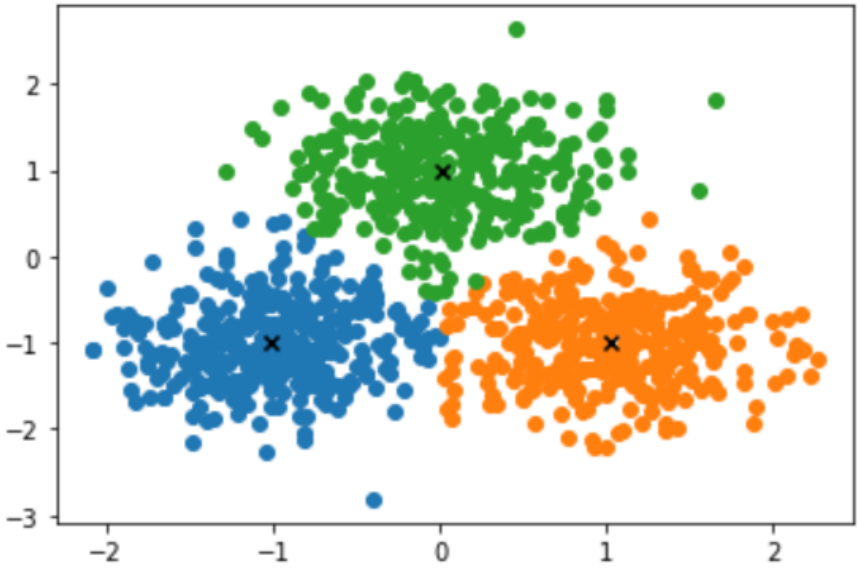
Результат работы k-means с манхеттенской метрикой на сгенерированном линейно разделимом датасете, в котором группы расположены близко или касаются друг друга.



Значения метрик:

```
Completeness: 0.955
Homogeneity: 0.955
Adjusted Rand index: 0.976
Adjusted Mutual information: 0.955
```

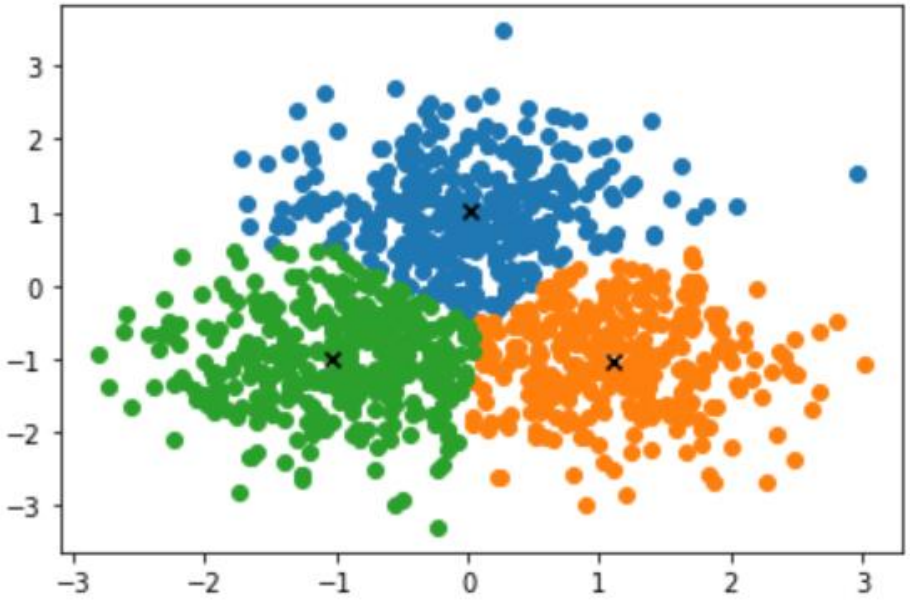
Результат работы k-means с манхеттенской метрикой на сгенерированном линейно неразделимом датасете, где средняя площадь пересечения классов 10-20%:



Значения метрик:

```
Completeness: 0.820
Homogeneity: 0.820
Adjusted Rand index: 0.881
Adjusted Mutual information: 0.819
```

Результат работы k-means с манхеттенской метрикой на сгенерированном линейно неразделимом датасете, где средняя площадь пересечения классов 50-70%:



Значения метрик:

```
Completeness: 0.615
Homogeneity: 0.615
Adjusted Rand index: 0.694
Adjusted Mutual information: 0.614
```

Результат работы k-means с манхеттенской метрикой на эталонном датасете «Breast cancer Wiskonsin», значения метрик:

```
Dataset Breast cancer Wisconsin
Completeness: 0.598
Homogeneity: 0.541
Adjusted Rand index: 0.640
Adjusted Mutual information: 0.568
```

Результат работы k-means с манхеттенской метрикой на эталонном датасете «Wine», значения метрик:

```
Dataset Wine
Completeness: 0.650
Homogeneity: 0.396
Adjusted Rand index: 0.380
Adjusted Mutual information: 0.489
```

Результаты качества разделения для k-means с манхеттенской метрикой для различных датасетов:

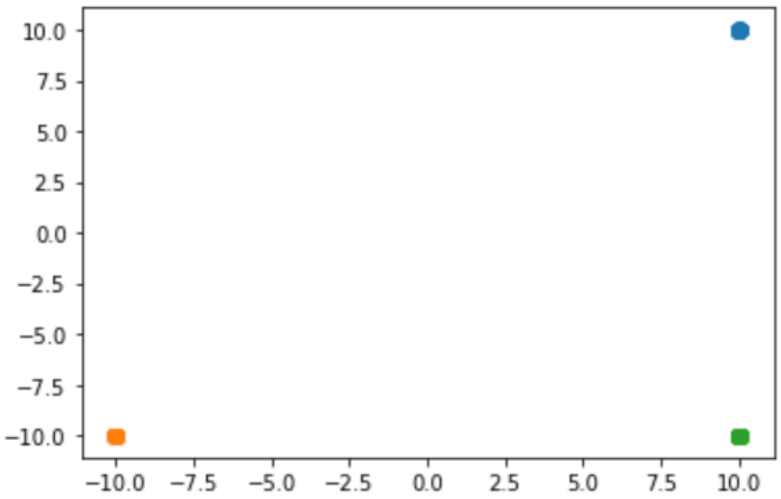
	Completeness	Homogeneity	Adjusted Rand index	Adjusted Mutual information
Большое расстояние между группами	1.000	1.000	1.000	1.000
Группы расположены близко	0.955	0.955	0.976	0.955
Группы пересекаются на 10-20%	0.820	0.820	0.881	0.819

Группы пересекаются на 50-70%	0.615	0.615	0.694	0.614
«Breast cancer Wiskonsin»	0.598	0.541	0.640	0.568
«Wine»	0.650	0.396	0.380	0.489

В таблице можно увидеть, что k-means с манхеттенской метрикой показывает примерно те же значения метрик, что и k-means с евклидовой метрикой, кроме датасета «Wine». Это может быть объяснено тем, что алгоритм k-means рассчитан на работу с евклидовой метрикой, а случае, если взять какую-либо иную метрику, алгоритм может не сойтись.

После этого была продемонстрирована работа иерархического агломеративного метода с евклидовой метрикой. В качестве данного метода был выбран метод Уорда. В данном методе в качестве расстояния между кластерами берется прирост суммы квадратов расстояний объектов до центра кластера, получаемого в результате их объединения. На каждом шаге алгоритма объединяются такие два кластера, которые приводят к минимальному увеличению дисперсии.

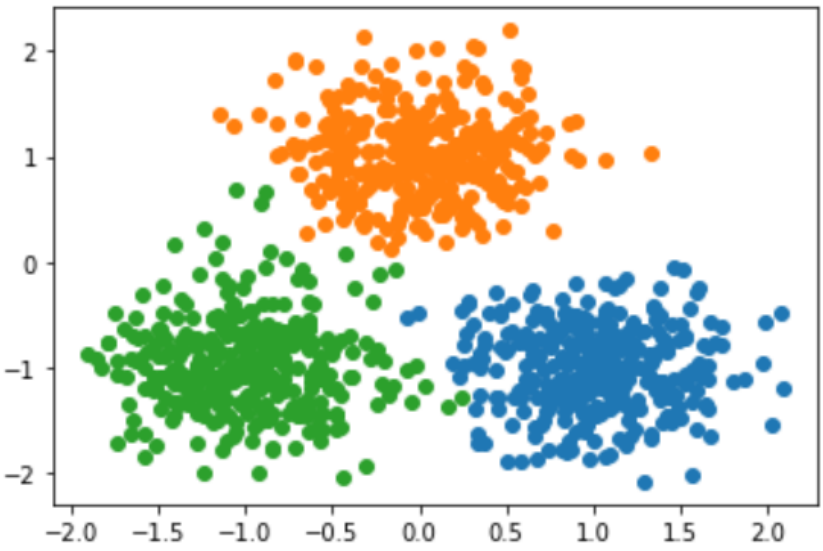
Результат работы метода Уорда на сгенерированном линейно разделимом датасете с расстоянием между группами во много раз большим, чем диаметр групп.



Значения метрик:

```
Completeness: 1.000
Homogeneity: 1.000
Adjusted Rand index: 1.000
Adjusted Mutual information: 1.000
```

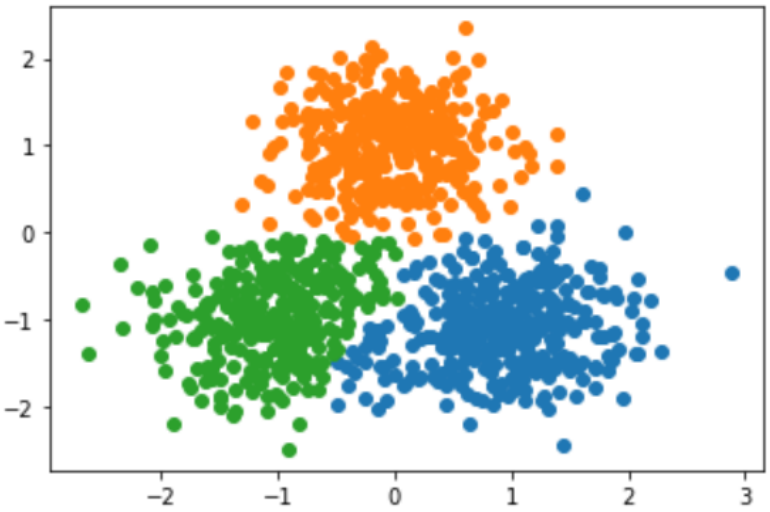
Результат работы метода Уорда на сгенерированном линейно разделимом датасете с группами, расположенными близко.



Значения метрик:

```
Completeness: 0.958
Homogeneity: 0.958
Adjusted Rand index: 0.976
Adjusted Mutual information: 0.958
```

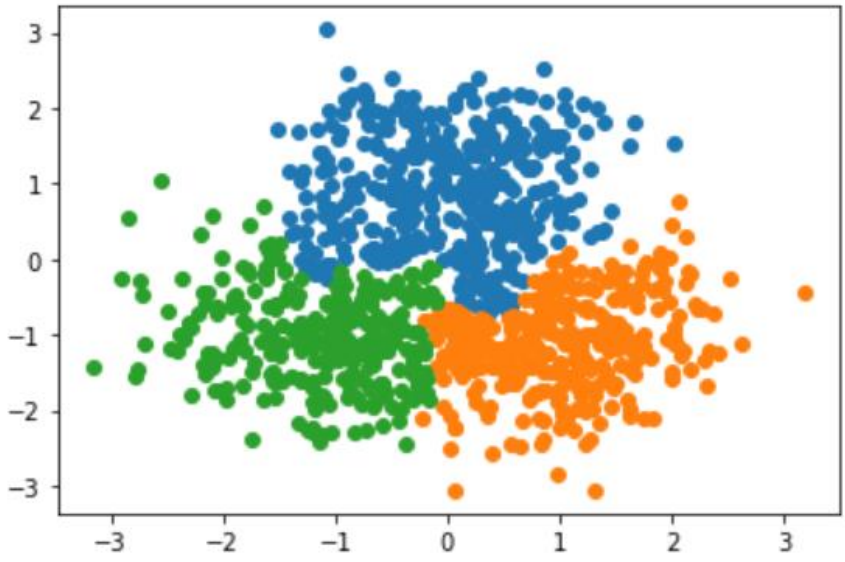
Результат работы метода Уорда на сгенерированном линейно неразделимом датасете с группами, пересекающимися на 10-20%.



Значения метрик:

```
Completeness: 0.841
Homogeneity: 0.841
Adjusted Rand index: 0.895
Adjusted Mutual information: 0.841
```

Результат работы метода Уорда на сгенерированном линейно неразделимом датасете с группами, пересекающимися на 50-70%.



Значения метрик:

```
Completeness: 0.560
Homogeneity: 0.557
Adjusted Rand index: 0.625
Adjusted Mutual information: 0.558
```

Результат работы метода Уорда с евклидовой метрикой на эталонном датасете «Breast cancer Wiskonsin», значения метрик:

```
Dataset Breast cancer Wisconsin
Completeness: 0.468
Homogeneity: 0.446
Adjusted Rand index: 0.575
Adjusted Mutual information: 0.456
```

Результат работы метода Уорда с евклидовой метрикой на эталонном датасете «Wine», значения метрик:

```
Dataset Wine
Completeness: 0.783
Homogeneity: 0.790
Adjusted Rand index: 0.790
Adjusted Mutual information: 0.784
```

Результаты качества разделения для метода Уорда с евклидовой метрикой для различных датасетов:

	Completeness	Homogeneity	Adjusted Rand index	Adjusted Mutual information
Большое расстояние между группами	1.000	1.000	1.000	1.000
Группы расположены близко	0.958	0.958	0.976	0.958
Группы пересекаются на 10-20%	0.841	0.841	0.895	0.841
Группы пересекаются на 50-70%	0.560	0.557	0.625	0.558
«Breast cancer Wiskonsin»	0.468	0.446	0.575	0.456
«Wine»	0.783	0.790	0.790	0.784

Исходя из таблицы, видно, что на разделимых датасетах метод Уорда работает примерно так же, как и предыдущие методы, но на датасетах, классы в которых пересекаются в значительной степени, он работает немного хуже. Также из всех иерархических агломеративных методов метод Уорда наиболее подходит и часто применяется для задач с близко расположенными кластерами. Для демонстрации разницы показателей кластеризации для датасета, в котором средняя площадь пересечения классов 50-70%, были применены другие иерархические агломеративные методы: метод полной связи и метод средней связи.

Значения метрик для метода полной связи:

```
Completeness: 0.405
Homogeneity: 0.397
Adjusted Rand index: 0.396
Adjusted Mutual information: 0.400
```

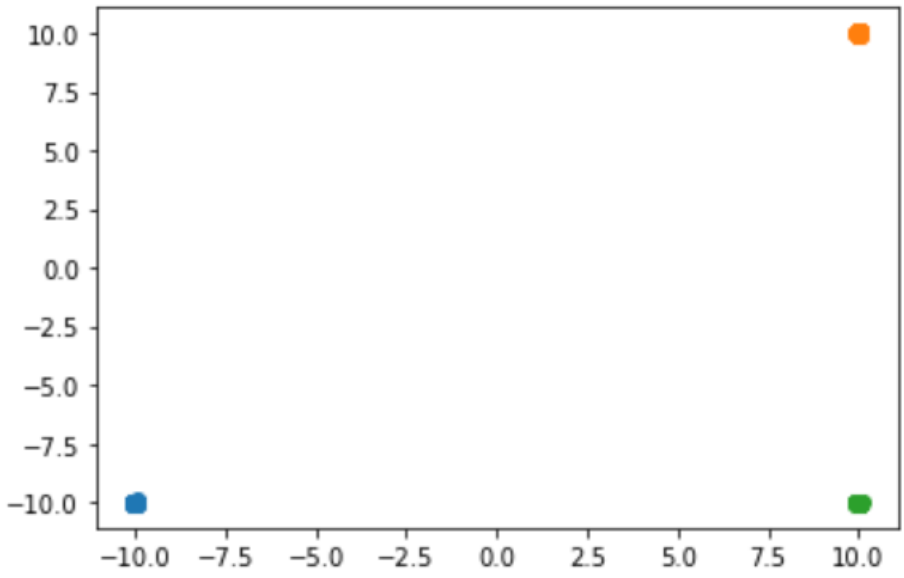
Значения метрик для метода средней связи:

```
Completeness: 0.577
Homogeneity: 0.332
Adjusted Rand index: 0.359
Adjusted Mutual information: 0.420
```

В обоих случаях можно наблюдать, что качество кластеризации хуже, чем при применении метода Уорда.

Далее была продемонстрирована работа иерархического агломеративного метода с манхеттенской метрикой. В качестве данного метода был выбран метод средней связи, поскольку метод Уорда работает только с евклидовой метрикой. Данный метод сводит к минимуму среднее расстояние между всеми образцами пар кластеров.

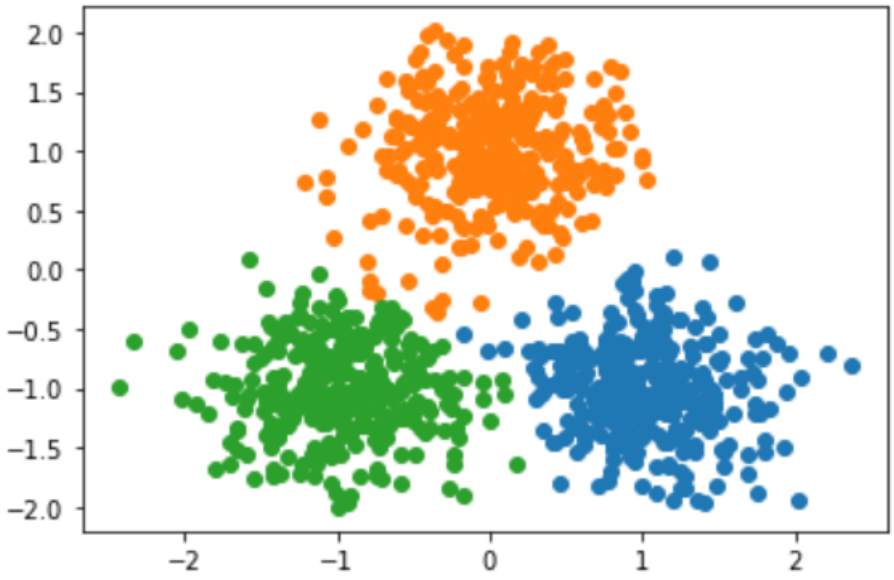
Результат работы метода средней связи на сгенерированном линейно разделимом датасете с расстоянием между группами во много раз большим, чем диаметр групп.



Значения метрик:

```
Completeness: 1.000
Homogeneity: 1.000
Adjusted Rand index: 1.000
Adjusted Mutual information: 1.000
```

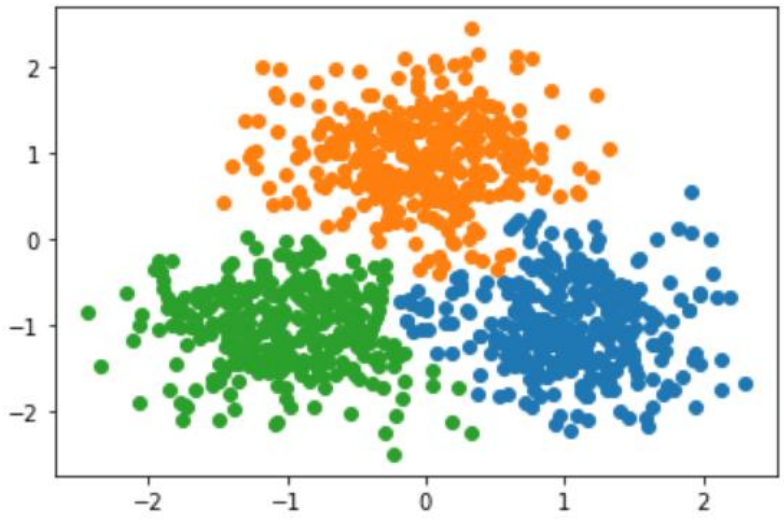
Результат работы метода средней связи на сгенерированном линейно разделимом датасете с группами, расположенными близко.



Значения метрик:

```
Completeness: 0.928
Homogeneity: 0.927
Adjusted Rand index: 0.953
Adjusted Mutual information: 0.927
```

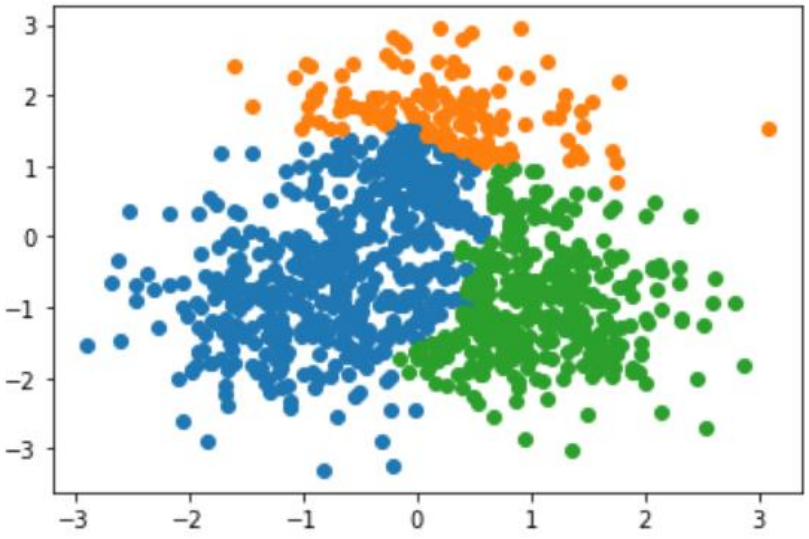
Результат работы метода средней связи на сгенерированном линейно неразделимом датасете с группами, пересекающимися на 10-20%.



Значения метрик:

```
Completeness: 0.833
Homogeneity: 0.833
Adjusted Rand index: 0.889
Adjusted Mutual information: 0.833
```

Результат работы метода средней связи на сгенерированном линейно неразделимом датасете с группами, пересекающимися на 50-70%.



Значения метрик:

```
Completeness: 0.443
Homogeneity: 0.393
Adjusted Rand index: 0.381
Adjusted Mutual information: 0.416
```

Результат работы метода средней связи с манхеттенской метрикой на эталонном датасете «Wine», значения метрик:

```
Dataset Wine
Completeness: 0.843
Homogeneity: 0.491
Adjusted Rand index: 0.473
Adjusted Mutual information: 0.615
```

Результаты качества разделения для метода средней связи с манхеттенской метрикой для различных датасетов:

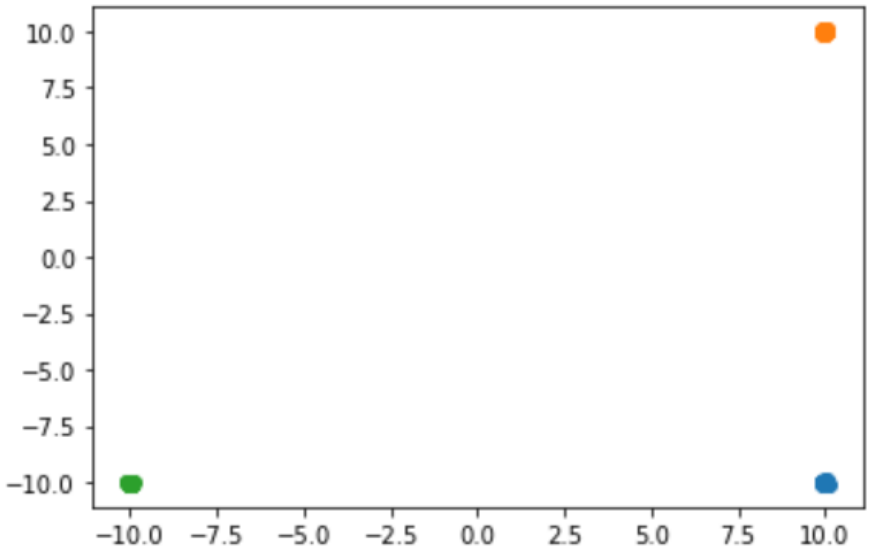
	Completeness	Homogeneity	Adjusted Rand index	Adjusted Mutual information
Большое расстояние между группами	1.000	1.000	1.000	1.000
Группы расположены близко	0.928	0.927	0.953	0.927
Группы пересекаются на 10-20%	0.833	0.833	0.889	0.833
Группы пересекаются на 50-70%	0.443	0.393	0.381	0.416
«Wine»	0.843	0.491	0.473	0.615

Из данной таблицы видно, что метод средней связи с манхеттенской метрикой на линейно разделимых датасетах или датасетах со слабо пересекающимися группами показал себя примерно так же, как и метод Уорда с евклидовой метрикой, а на датасетах, группы в которых пересекаются в более значительной степени, качество кластеризации с помощью данного метода хуже, чем при кластеризации методом Уорда.

После этого была продемонстрирована работа неиерархического метода с евклидовой метрикой. В качестве данного метода был выбран метод DBSCAN. Данный алгоритм кластеризации основан на плотности – если дан набор точек в пространстве, алгоритм группирует вместе точки, которые тесно расположены, и помечает как выбросы точки, находящиеся в областях с малой плотностью. При применении данного метода из

библиотеки sklearn не нужно указывать количество кластеров в качестве входного параметра, но необходимо указать два других входных параметра: ϵ и минимальное число точек. Эпсилон (ϵ) – это максимальное расстояние между двумя точками, чтобы они считались соседними. Минимальное число точек – это минимальное число точек, которые должны образовывать область. В используемом методе из библиотеки sklearn по умолчанию минимальное количество точек равно 5.

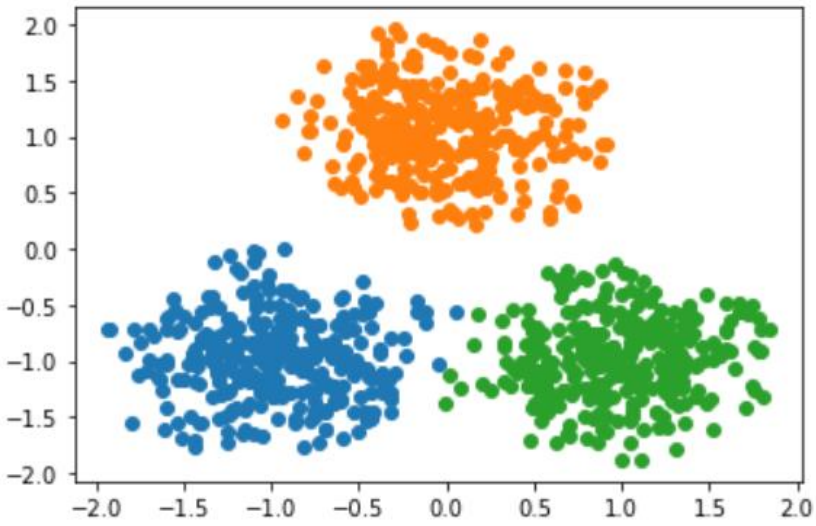
Результат работы метода DBSCAN на сгенерированном линейно разделимом датасете с расстоянием между группами во много раз большим, чем диаметр групп (ϵ = 0.5).



Значения метрик:

```
Completeness: 1.000
Homogeneity: 1.000
Adjusted Rand index: 1.000
Adjusted Mutual information: 1.000
```

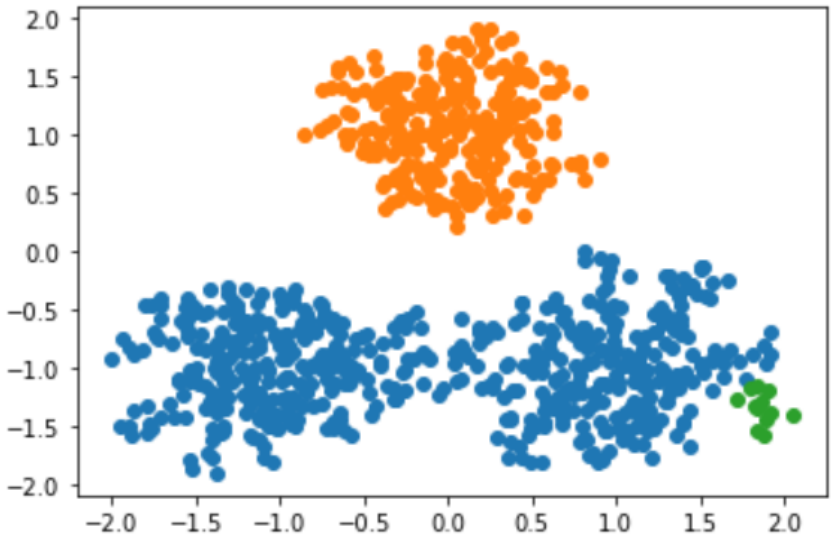
Результат работы метода DBSCAN на сгенерированном линейно разделимом датасете с группами, расположенными близко (ϵ = 0.2).



Значения метрик:

```
Completeness: 0.822
Homogeneity: 0.927
Adjusted Rand index: 0.912
Adjusted Mutual information: 0.871
```

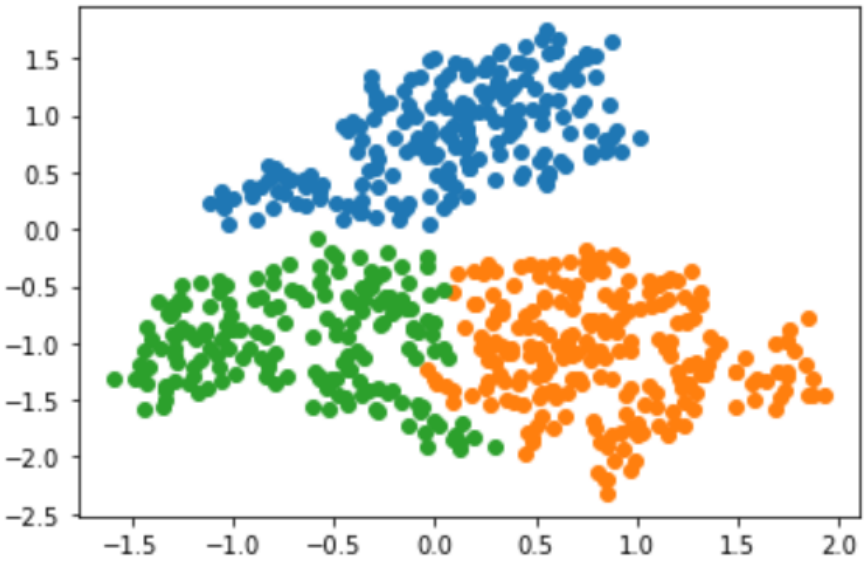
Результат работы DBSCAN на сгенерированном линейно неразделимом датасете с группами, пересекающимися на 10-20% (ϵ = 0.15).



Значения метрик:

```
Completeness: 0.448
Homogeneity: 0.501
Adjusted Rand index: 0.402
Adjusted Mutual information: 0.469
```

Результат работы DBSCAN на сгенерированном линейно неразделимом датасете с группами, пересекающимися на 50-70% (ϵ = 0.15).



Значения метрик:

```
Completeness: 0.256
Homogeneity: 0.451
Adjusted Rand index: 0.267
Adjusted Mutual information: 0.316
```

Результаты качества разделения для метода DBSCAN с евклидовой метрикой для различных датасетов:

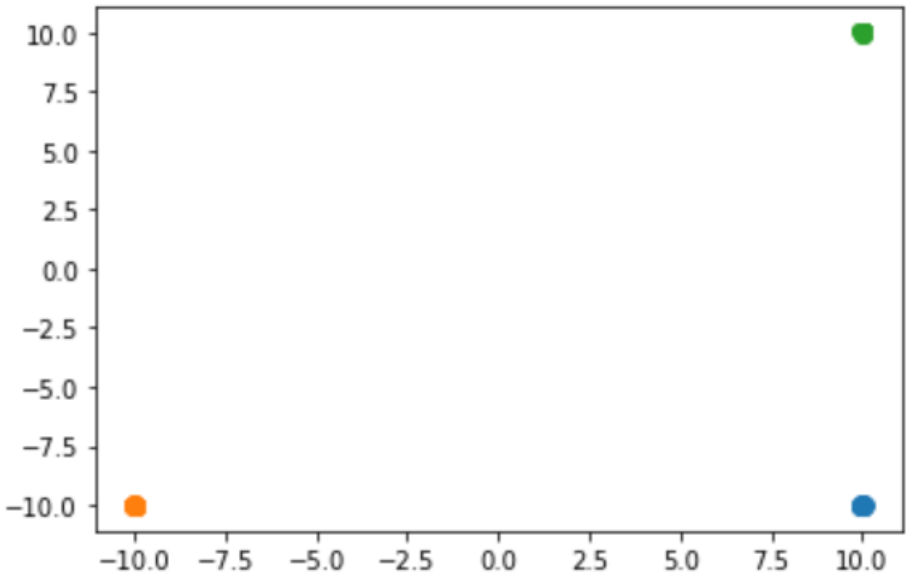
	Completeness	Homogeneity	Adjusted Rand index	Adjusted Mutual information
Большое расстояние между группами	1.000	1.000	1.000	1.000
Группы расположены близко	0.822	0.927	0.912	0.871
Группы пересекаются на 10-20%	0.448	0.501	0.402	0.469

Группы пересекаются на 50-70%	0.256	0.451	0.267	0.316

Данный алгоритм показал результат хуже, чем ранее рассмотренные методы. Также согласно данной таблице, качество разделения при использовании данного алгоритма достаточно высокое, когда группы в датасете линейно разделимы, а в случае, когда группы пересекаются, качество разделения резко снижается, поскольку алгоритм основан на плотности. Также в случае, когда группы пересекаются, необходимо достаточно долго эмпирически подбирать значение эпсилон и минимальное число точек для достижения приемлемого результата.

Далее была продемонстрирована работа DBSCAN с манхеттенской метрикой.

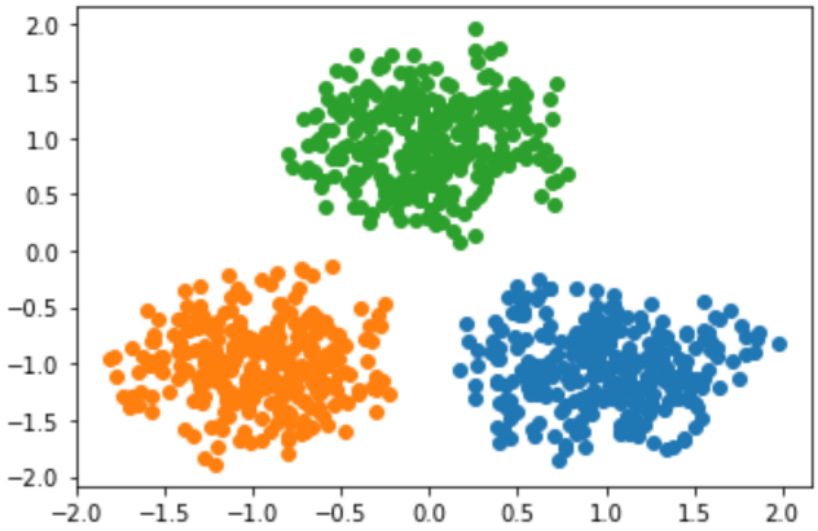
Результат работы метода DBSCAN с манхеттенской метрикой на сгенерированном линейно разделимом датасете с расстоянием между группами во много раз большим, чем диаметр групп (ϵ = 0.5).



Значения метрик:

```
Completeness: 1.000
Homogeneity: 1.000
Adjusted Rand index: 1.000
Adjusted Mutual information: 1.000
```

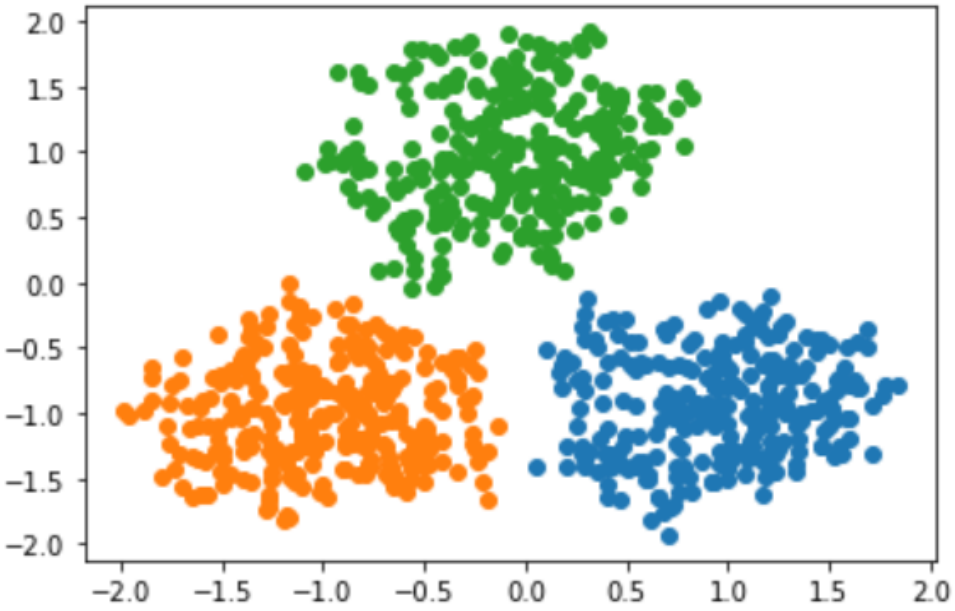
Результат работы метода DBSCAN с манхеттенской метрикой на сгенерированном линейно разделимом датасете с группами, расположенными близко (ϵ = 0.2).



Значения метрик:

```
Completeness: 0.757
Homogeneity: 0.907
Adjusted Rand index: 0.861
Adjusted Mutual information: 0.825
```

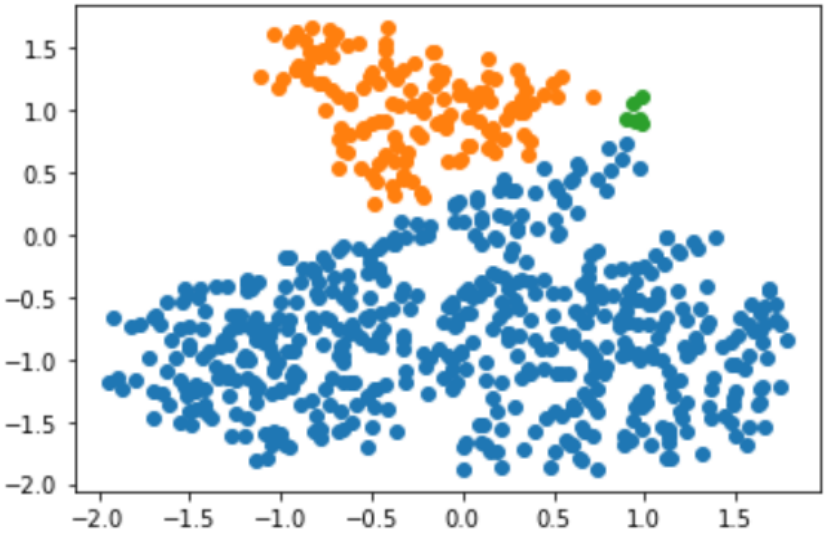
Результат работы DBSCAN с манхеттенской метрикой на сгенерированном линейно неразделимом датасете с группами, пересекающимися на 10-20% (ϵ = 0.2).



Значения метрик:

```
Completeness: 0.588
Homogeneity: 0.808
Adjusted Rand index: 0.716
Adjusted Mutual information: 0.678
```

Результат работы DBSCAN с манхеттенской метрикой на сгенерированном линейно неразделимом датасете с группами, пересекающимися на 50-70% (ϵ = 0.2).



Значения метрик:

```
Completeness: 0.222
Homogeneity: 0.306
Adjusted Rand index: 0.154
Adjusted Mutual information: 0.248
```

Результаты качества разделения для метода DBSCAN с манхеттенской метрикой для различных датасетов:

	Completeness	Homogeneity	Adjusted Rand index	Adjusted Mutual information
Большое расстояние между группами	1.000	1.000	1.000	1.000
Группы расположены близко	0.757	0.907	0.861	0.825

Группы пересекаются на 10-20%	0.588	0.808	0.716	0.678
Группы пересекаются на 50-70%	0.222	0.306	0.238	0.248

Данный алгоритм может быть использован с любой функцией расстояния, поэтому DBSCAN с манхеттенской метрикой показал примерно такие же результаты, что и DBSCAN с евклидовой метрикой: на линейно разделимых датасетах хорошие показатели метрик, если датасет линейно неразделим, показатели падают.