Akademia Górniczo-Hutnicza

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Eksploracja Danych

Szybka klasteryzacja oparta o maksima gęstości

Autorzy:
Maciej Kubicki
Tomasz Chronowski

Prowadzący:
dr inż. Szymon Łukasik

20 stycznia 2018

Spis treści

1 Wstęp

1.1 Temat projektu

Tematem naszego była implementacja algorytmu szybkiej klasteryzacji opartej o maksima gęstości z usprawnieniem w liczeniu odległości. Algorytm był przedstawiony w artykule autorów Rodriguez'a i Laio'a pod tytułem "Clustering by fast search and find of density peaks" w magazynie Science z 2015.

1.2 Wykorzystane technologie i oprogramowanie

Projekt został zrealizowany w Visual Studio 2017. Algorytm został zrealizowany w C++ z wykorzystaniem technologii MPI i OpenMP. Zgodnie z założeniami użyta została biblioteka FLANN. Pierwotnie chcieliśmy skorzystać z technologii CUDA(to prawdopodobnie przyśpieszyłoby algorytm znacząco), jednak kompilator z nowego VS nie poradził sobie z budową części biblioteki FLANN odpowiedzialnej za przerzucanie obliczeń na kartę graficzną. W każdym razie w kodzie w komentarzach umieściliśmy odpowiednie przykłady jakby to zostało zrealizowane.

1.3 Repozytorium

Adres repozytorium:
`https://github.com/maciekkubicki/DenesityPeaksBasedClustering`

2 Implementacja

Sama struktura programu jest oparta o MPI. Algorytm działa niezależnie od rozmiaru "świata". W funkcji **main** na początku deklarujemy środowisko MPI. Następnie sprawdzane są parametry z jakimi uruchomiono program - ilość oraz odpowiedniość. Następnie jeśli są odpowiednie to te parametry są przekazane do funkcji dokonującej klasteryzacji - **clustering**. Lista parametrów:

- **fileName** - nazwa plik z danymi do klasteryzacji,
- **radius** - rozmiar sąsiedztwa "punktu",
- **minDistF** - minimalna odległość "punktu" od innego "punktu" o większej gęstości, po to, by "punkt" był środkiem klastra (musi być spełniony warunek niżej),
- **minDensF** - minimalna gęstość "punktu", po to, by "punkt" był środkiem klastra (musi być spełniony warunek wyżej),
- **excludeHalo = false** (opcjonalny) - wartość logiczna czy pominąć tzw. "punkty halo",
- **densCol = R** (opcjonalny)- "punkty halo" będą wykluczane na podstawie gęstości globalnej (gęstość sąsiedztwa bez brania pod uwagi do jakiego klastra należy sąsiad - enum = R = 1), lub też lokalnej(gęstość sąsiedztwa składająca się tylko z sąsiadów tego samego klastra co badany punkt - enum = CR = 4),
- **factor = 1.f** (opcjonalny) - "punkty halo" są identyfikowane jeśli ich gęstość(globalna/lokalna) jest mniejsza, niż największa gęstość w obszarze brzegowym(w sąsiedztwie "punktu" brzegowego są "punkt/y" z innego/innych klastrów). Parametr **factor** dzieli tą największą gęstość, jest użyteczny w przypadku korzystanie z gęstości globalnej.

Funkcja **clustering** jest przystosowana do działania równolegle. Proces o indeksie 0 wczytuje dane do macierzy i liczy maksymalną możliwą odległość między dwoma "punktami". Proces 0 dzieli dane między wszystkie procesy w "świecie" - użycie **broadcast** i **scatter**. W pierwszym kroku każdy proces znajduje gęstość sąsiedztwa przydzielonych mu "punktów" - **radiusSearch** z biblioteki FLANN. Następnie obliczone gęstości są porozsyłane do wszystkich procesów - **all_gather**. W kolejnym kroku posiadając gęstości procesy znajdują odległości do punktów o większej gęstości, przechowujemy również indeks najbliższego sąsiada z większą gęstością - to ułatwi klasteryzację. Tu używamy **knnSearch** z FLANN(zgodnie z dokumentacjom projekt jest kompilowany z OpenMP i do przekazujemy do tej funkcji parametr z atrybutem **cores** równym 0, więc wyszukiwanie jest realizowane przy największej liczbie dostępnych rdzeni). W przypadku, gdy nie ma "punktu" o większej gęstości przypisana zostanie wartość maksymalnej możliwej odległości między punktami(znaleziona na początku). Dodatkowo może się zdarzyć, że w sąsiedztwie będzie kilka "punktów" o maksymalnej gęstości - jeśli to się stanie to naprawiamy to funkcjom **fix2**, której działanie przydałoby się usprawnić. Następnie znalezione odległości są normalizowane, by znajdowały się w przedziale $< 0, 1 >$ i ustalane są środki klastrów na podstawie parametrów **minDistF** i **minDensF**. Sama klasteryzacja realizowana jest w miejscu przy pomocy funkcji rekurencyjnej - "punkt" jest przypisany do tego samego klastra co jego najbliższy sąsiad o większej gęstości. Następnie, jeśli wartość parametru **excludeHalo** jest prawdą to realizujemy pozbywanie się tych "punktów" z wykorzystaniem zadanego rodzaju gęstości i wielkościom parametru **factor**. Tu również używana jest funkcja **radiusSearch** z FLANN. Następnie dane są zebrane przy pomocy **all_gather** i proces 0 zapisuje dane do pliku **outputp.dat**.

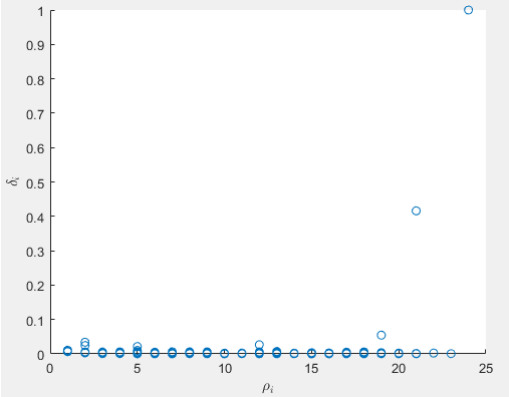
3 Użycie

Do przedstawienie algorytmu przygotowaliśmy kilka przykładowych zbirów danych, część jest wygenerowanych przez nas, a część z Internetu. Przykładowe komendy uruchomienia algorytmu wraz z parametrami znajdują się w pliku **readmeRunExample.txt**. Dodatkowo przygotowaliśmy dwa skrypty w Matlabie przydatne do tworzenia wykresów - **densdisttest.m**(wykres stosunku **minDensF** do **minDistF** i **clustertest.m**(porównywanie wyników naszej klasteryzacji z kmeans).

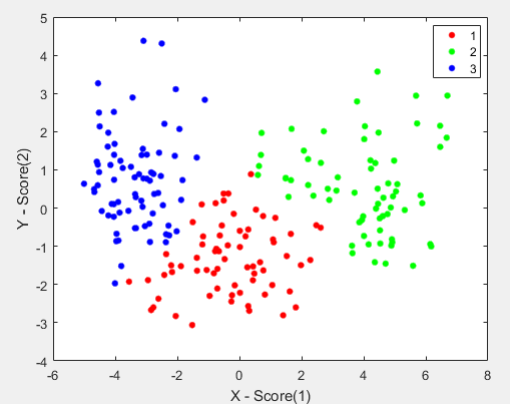
3.1 Działanie algorytmu

3.1.1 seeds_dataset

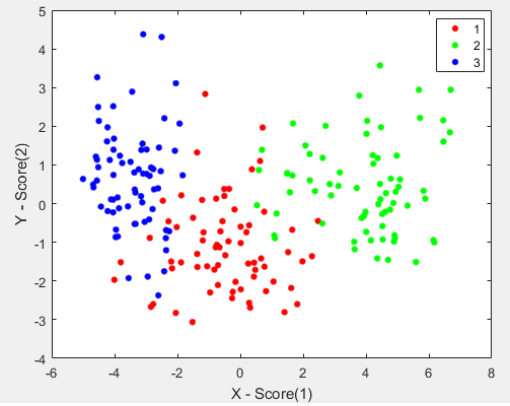
```
mpiexec -np 4 .\ConsoleApplication1.exe seeds.txt 0.9 0.05 15
mpiexec -np 4 .\ConsoleApplication1.exe seeds.txt 0.9 0.05 15 true 4 1
```



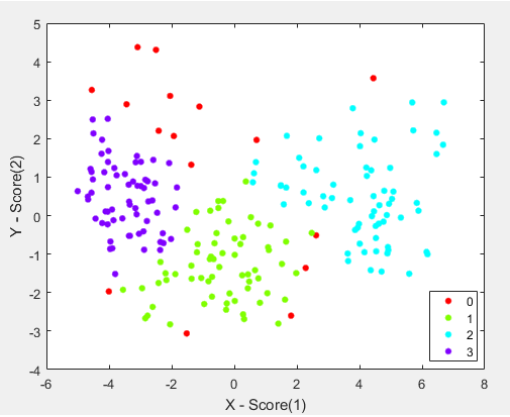
Rysunek 1: Stosunek ρ_i do δ_i



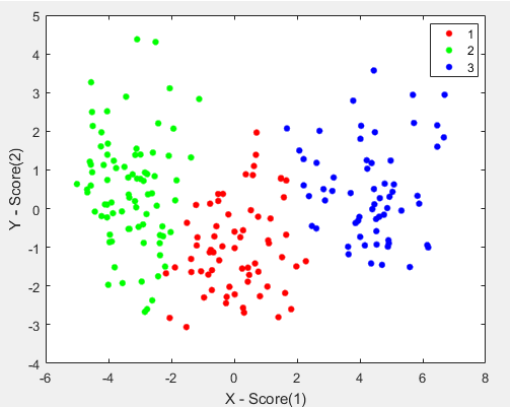
Rysunek 2: Algorytm bez wykluczania "punktów halo"



Rysunek 3: Oryginalne klastry



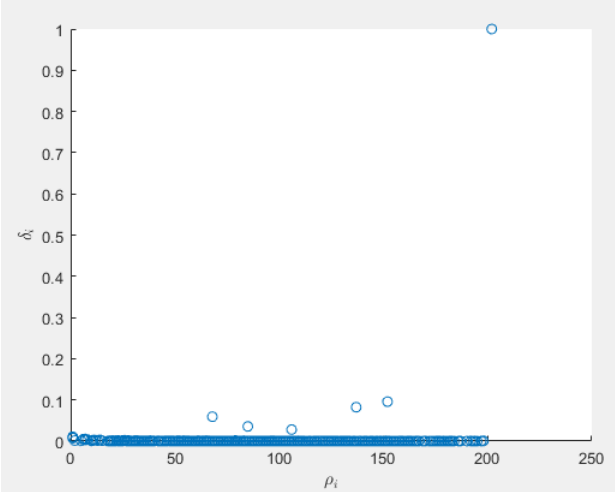
Rysunek 4: Algorytm z wykluczaniem "punktów halo"



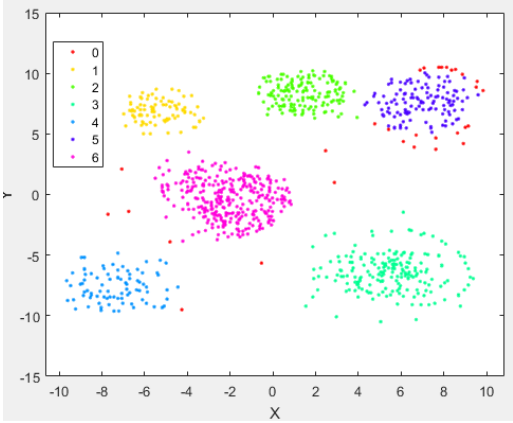
Rysunek 5: Klastry z kmeans

3.1.2 gener

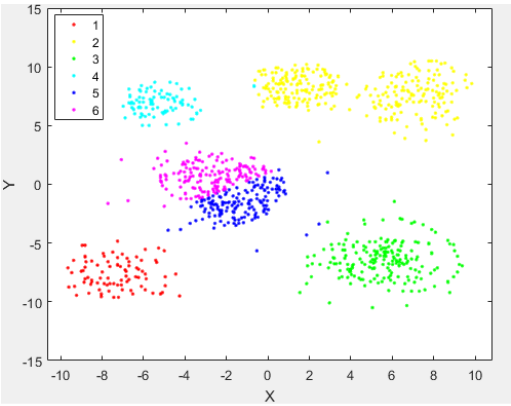
```
mpiexec -np 4 .\ConsoleApplication1.exe gener.txt 5 0.02 50 true 4 1
```



Rysunek 6: Stosunek ρ_i do δ_i



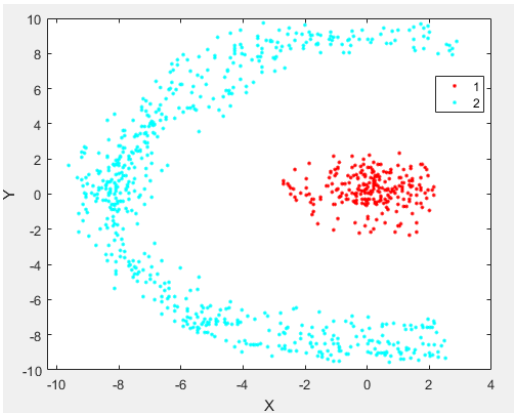
Rysunek 7: Algorytm z wykluczaniem "punktów halo"



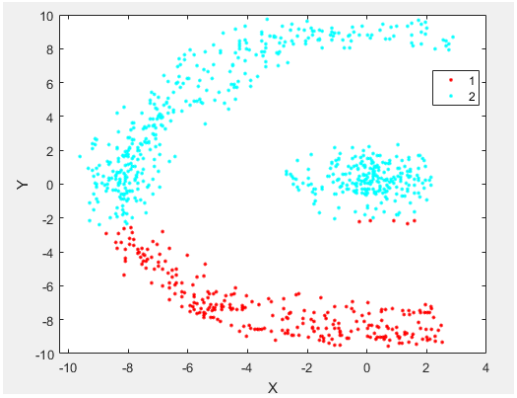
Rysunek 8: Klastry z kmeans

3.1.3 gener3

```
mpiexec -np 4 .\ConsoleApplication1.exe gener3.txt 1.1 0.1 60
```



Rysunek 9: Algorytm bez wykluczania "punktów halo"



Rysunek 10: Klastry z kmeans

3.2 Skalowalność algorytmu

4 Wnioski