Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

Национальный исследовательский технологический университет

«МИСиС»

Институт ИТАСУ (ИТКН)

Кафедра Инженерной кибернетики

Лабораторная работа №3 по курсу «Нейронные сети и машинное обучение»

Выполнил:

Студент гр. МПИ-20-4-2

Малынковский О.В.

Проверил:

Курочкин И.И.

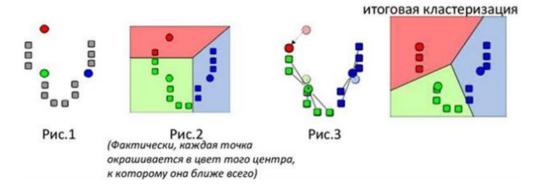
Оглавление

Теория	3
Реализация	7
Примеры работы	
Вывод	
Инструкция по запуску	
инструкции по запуску	20

Теория

Кластерный анализ предназначен для разбиения исходных данных на поддающиеся интерпретации группа, таким образом, чтобы элементы, входящие в одну группу, были максимально «схожи», а элементы из разных групп максимально «отличались» друг от друга.

К-Меаns - самый популярный метод кластеризации. Метод производит разбиение исходного множества объектов на непересекающиеся кластеры и центроиды, представляющие их. Этот метод интуитивно прост: случайным образом выбирается центры кластеров, затем каждая точка из исходного множества причисляется к центру, к которому находится ближе всего. Затем центры кластеров уточняются и вместе с ними остальные элементы могут быть переназначены. Когда спустя некоторое число повторений таких уточнений центры стабилизируются, полученные центроиды и будут считаться построенной кластеризацией.



Задание этой лабораторной работы предполагает использование Евклидового расстояния и Манхэттенского. Однако k-means изначально разработан для евклидового расстояния, и, хотя можно заменить функцию расстояния в коде, тем не менее это будет плохо соотноситься с подсчетом центроид, которые вычисляются через среднее (по сути, через расстояние евклида) точек по координатам. Такая смесь двух метрик может привести к тому, что метод не сойдется.

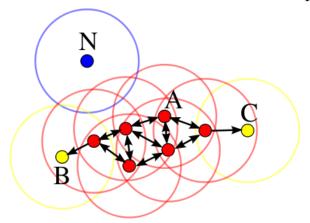
Чтобы обойти это ограничение можно использовать модифицированную версию k-means, который работает с любой функцией расстояния – k-medoids. В отличие от k-means, в k-medoids в качестве центроидов может выступать не любая точка, а только какие-то из имеющихся наблюдений. Медоиды определяются через сумму всех расстояний от одной точки до остальных в кластере: та точка, для которой такая сумма минимальна, и становится новым центром тяжести кластера на очередной итерации.

Следующий неиерархический метод, который использовался в лабораторной работе — DBSCAN (Density-based spatial clustering of applications with noise, плотностной алгоритм пространственной кластеризации с присутствием шума), как следует из названия, оперирует плотностью данных. На вход он принимает матрицу близости и два параметра — радиус є-окрестности и *minPts* - количество соседей, минимальное для образования плотной области.

Точки делятся на основные точки, достижимые по плотности точки и выбросы следующим образом:

- Точка p является основной точкой, если как минимум minPts точек находятся на расстоянии, не превосходящем ε (ε является максимальным радиусом соседства от p), до неё (включая саму точку p). Говорят, что эти точки достижимы прямо из p.
- Точка q прямо достижима из p, если точка q находится на расстоянии, не большем ϵ , от точки p и p должна быть основной точкой.
- Точка А q достижима из p, если имеется путь $p_1, ..., p_n$ с $p_1 = p$ и $p_n = q$, где каждая точка p_{i+1} достижима прямо из p_i (все точки на пути должны быть основными, за исключением q).
- Все точки, не достижимые из основных точек, считаются выбросами.

Теперь, если *р* является основной точкой, то она формирует *кластер* вместе со всеми точками (основными или неосновными), достижимые из этой точки. Каждый кластер содержит по меньшей мере одну основную точку. Неосновные точки могут быть частью кластера, но они формируют его «край», поскольку не могут быть использованы для достижения других точек.

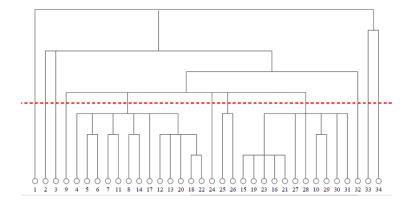


Точка А и другие красные точки являются основными точками, поскольку область с радиусом є, окружающая эти точки, содержит по меньшей мере 4 точки (включая саму точку). Поскольку все они достижимы друг из друга, точки образуют один кластер. Точки В и С основными не являются, но достижимы из А (через другие основные точки), и также принадлежат кластеру. Точка N является точкой шума, она не является ни основной точкой, ни доступной прямо.

Рассмотрим иерархический агломеративный метод:

Иерархическая кластеризация основана на идее о том, что объекты в большей степени связаны с близлежащими объектами, чем с объектами, находящимися на отдалении.

Под термином иерархия могут иметься в виду разные вещи в разных контекстах. В случае кластеризации подразумевается вложенная структура дерева решений вида как показано на рисунке:



Верхний узел, называемый корнем, представляет весь рассматриваемый набор объектов. Каждый внутренний узел иерархии имеет несколько дочерних узлов, представляющих деление на кластеры, представленные узлами, на более мелкие кластеры. Конечные узлы соответствуют единичным объектам. Итоговая кластеризация получается путем выбора места разреза на дереве.

Агломеративный метод строит иерархию кластеров, двигаясь снизу вверх, начиная с наименьших кластеров (каждая вершина графа является отдельным кластером), обычно одиночных, и последовательно на каждом шаге объединяет те кластеры, которые находятся ближе всего друг к другу. Обычно процесс заканчивается, когда все кластеры объединяются в корневой кластер, состоящий из всех элементов исходного множества.

Чтобы решить, какие объекты / кластеры должны быть объединены, нам нужна метрика для измерения сходства между ними. Существует много способов для расчета схожести между отдельными объектами, включая евклидово и манхэттенское расстояния. Также есть разные подходы для определения расстояния между кластерами, такие как расстояние ближнего соседа (single linkage), расстояние дальнего соседа (complete linkage), групповое среднее расстояние (average linkage), расстояние между центрами, расстояние Уорда (Ward's criterion).

В данной лабораторной работе используются следующие функции расстояния:

Расстояние Евклила:

$$d(X,Y) = \sqrt{\sum_{i=1}^{m} (X_i - Y_i)^2}$$

Манхэттенское расстояние:

$$d(X,Y) = \sum_{i=1}^{m} |X_i - Y_i|$$

Для оценки качества проделанной кластеризации будем использовать следующие показатели:

Внешние:

• Adjusted Rand index

Внутренние:

- Calinski-Harabasz index
- Davies–Bouldin index
- Silhouette Coefficient
- Cluster_cohesion

Формулы их расчёта представлены в статье по ссылке (или можно увидеть их в коде):

https://neerc.ifmo.ru/wiki/index.php?title=Оценка_качества_в_задаче_кластеризации

Реализация

На языке Python с использованием библиотек Sklearn, Sklearn-extra реализуем рассматриваемые методы кластеризации. Также в sklearn есть функции оценки качества, за исключением cluster cohesion, который был реализован без библиотек.

K-means – можно указать число кластеров (n_clusters)

```
cluster.KMeans(n_clusters=3).fit(X)
```

K-means — можно указать число кластеров (n_clusters), метрику в данной работе не меняем (манхэттенская)

```
KMedoids(n clusters=3, metric='manhattan').fit(X)
```

DBSCAN— можно радиус окрестности eps, минимальное число соседей для получения кластера min_samples, metric — 'euclidean' \ 'manhattan'

```
DBSCAN(eps=0.35, min samples=57, metric='euclidean').fit(X)
```

Аггломеративная иерархическая кластеризация — можно указать affinity — 'euclidean' \ 'manhattan', linkage - расстояние ближнего соседа (single linkage), расстояние дальнего соседа (complete linkage), групповое среднее расстояние (average linkage), расстояние между центрами, расстояние Уорда (Ward's criterion), и число кластеров n_clusters.

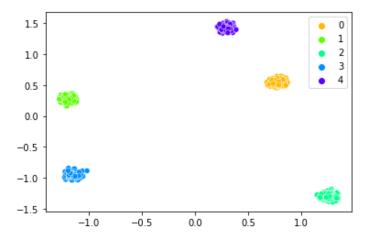
```
AgglomerativeClustering(affinity='euclidean',linkage='ward', n_clusters=3) .fit(X)
```

Также можно построить дерево решений:

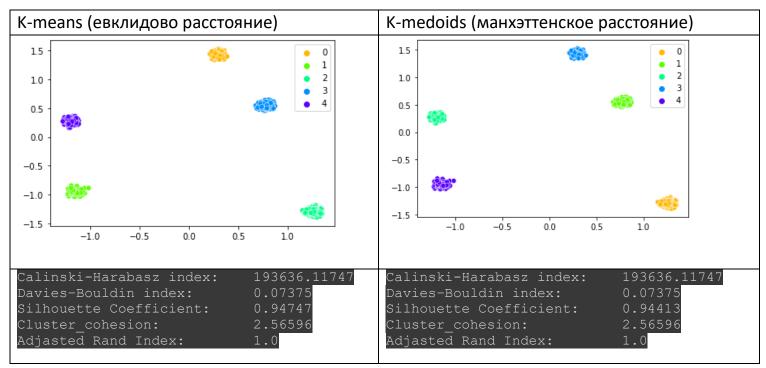
```
model = AgglomerativeClustering(distance_threshold=0, n_clusters=None, aff
inity='manhattan', linkage='complete')
model = model.fit(X)
plot_dendrogram(model, truncate_mode='level', p=3)
```

Примеры работы

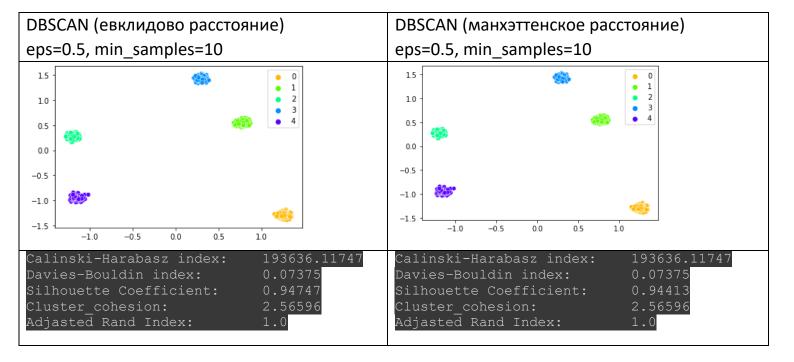
Датасет 1 - линейно разделимые множества (с расстоянием между группами в 10^3 раз больше, чем диаметр группы) — 5 кластеров, 1000 точек



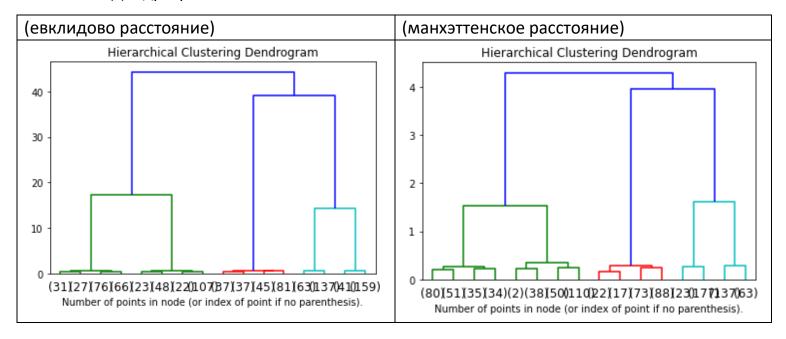
K-means:

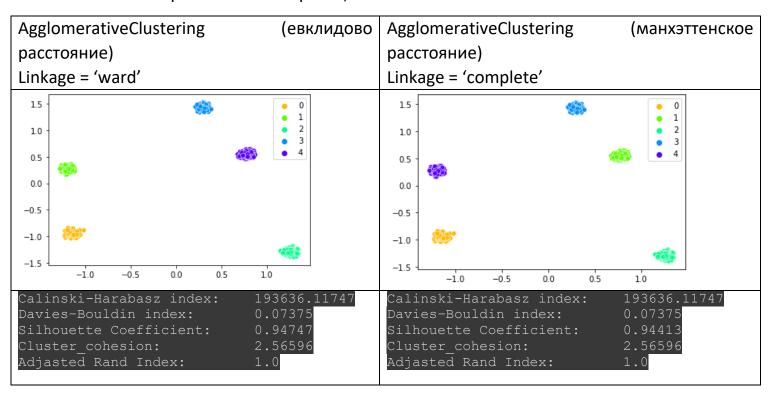


DBSCAN:

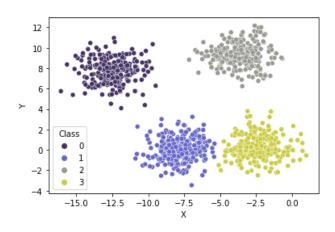


Дендрограмма:

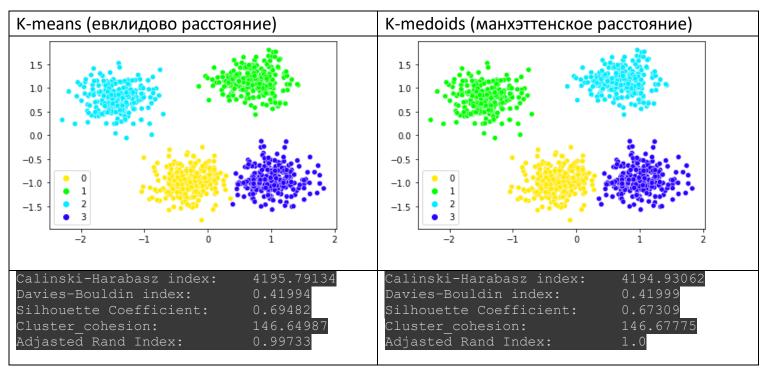




Датасет 2 - линейно разделимые множества (группы расположены близко или касаются друг друга) — 4 кластера, 1000 точек

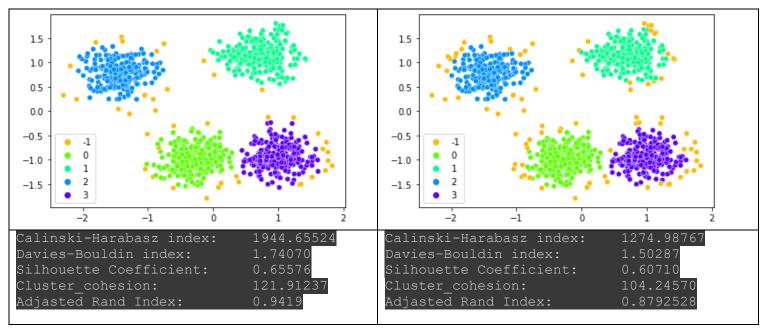


K-means:

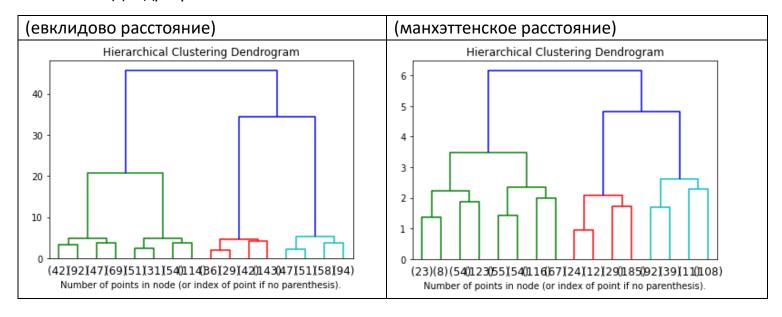


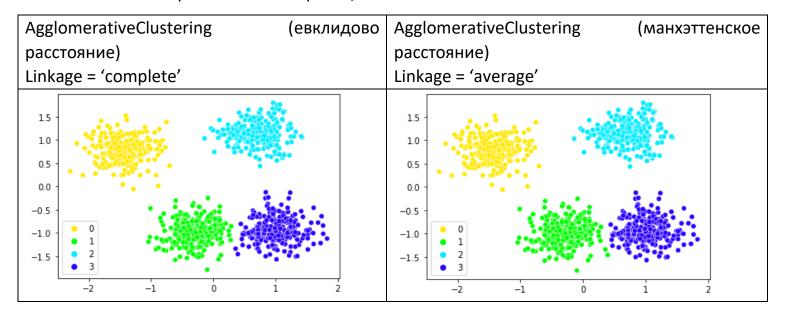
DBSCAN: (желтые точки метод определяет как выбросы)

DBSCAN (евклидово расстояние)	DBSCAN (манхэттенское расстояние)
eps=0.2, min_samples=10	eps=0.27, min_samples=25



Дендрограмма:

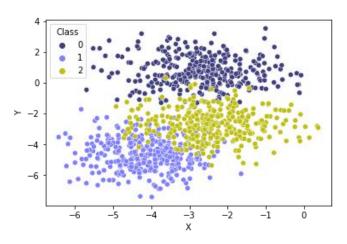




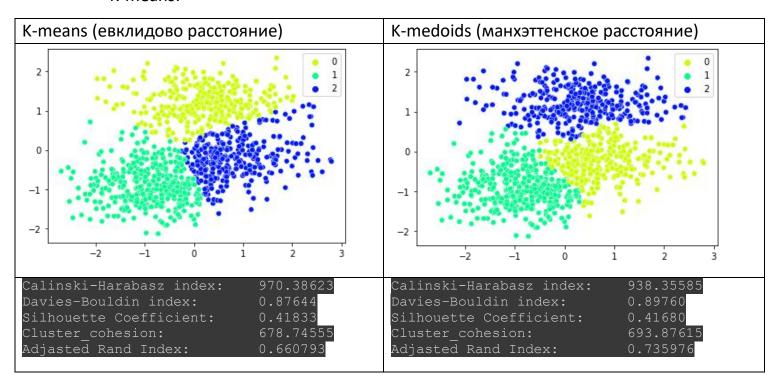
Calinski-Harabasz index: 4194.93062
Davies-Bouldin index: 0.41999
Silhouette Coefficient: 0.69478
Cluster_cohesion: 146.67775
Adjasted Rand Index: 1.0

Calinski-Harabasz index: 4194.35674
Davies-Bouldin index: 0.42002
Silhouette Coefficient: 0.67301
Cluster_cohesion: 146.69635
Adjasted Rand Index: 0.994672

Датасет 3 - линейно неразделимое множество (средняя площадь пересечения классов 10-20%)— 3 кластера, 1000 точек

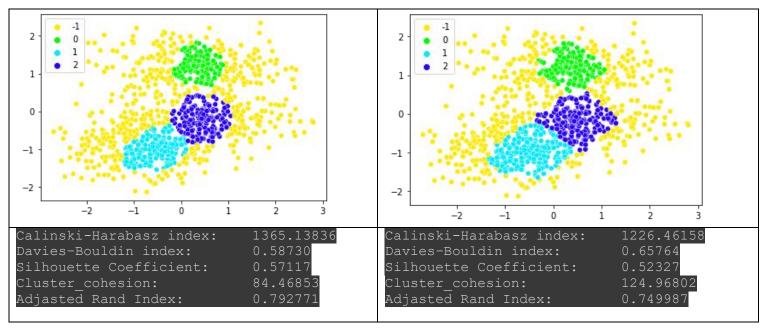


K-means:

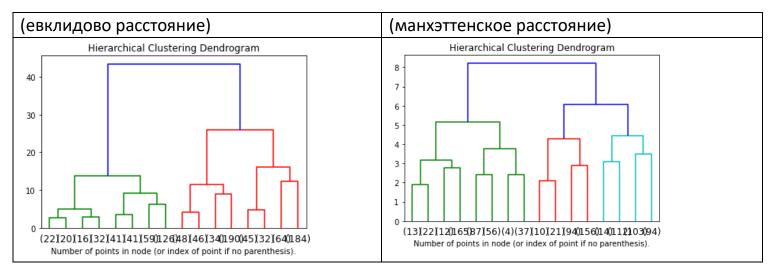


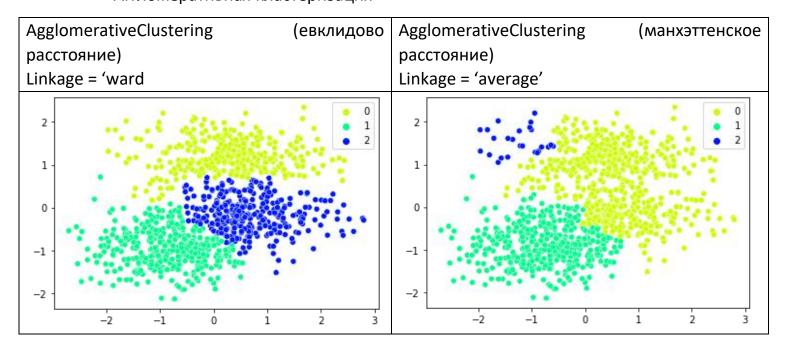
DBSCAN: (желтые точки метод определяет как выбросы)

DBSCAN (евклидово расстояние)	DBSCAN (манхэттенское расстояние)
eps=0.35, min_samples=57	eps=0.5, min_samples=70



Дендрограмма:

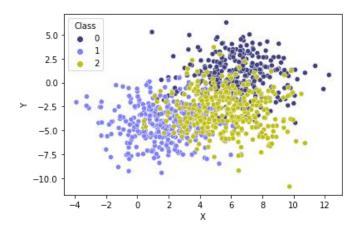




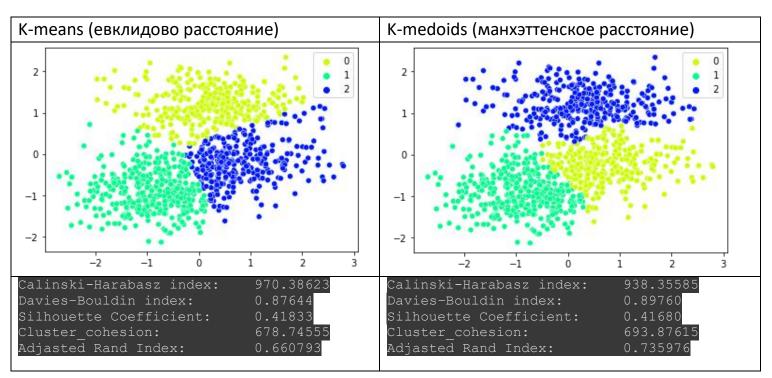
Calinski-Harabasz index: 890.60899
Davies-Bouldin index: 0.94286
Silhouette Coefficient: 0.39275
Cluster_cohesion: 717.72626
Adjasted Rand Index: 0.7345285

Calinski-Harabasz index: 573.82687
Davies-Bouldin index: 0.79904
Silhouette Coefficient: 0.33608
Cluster_cohesion: 929.75382
Adjasted Rand Index: 0.4338765

Датасет 4 - линейно неразделимое множество (средняя площадь пересечения классов 50-70%)— 3 кластера, 1000 точек

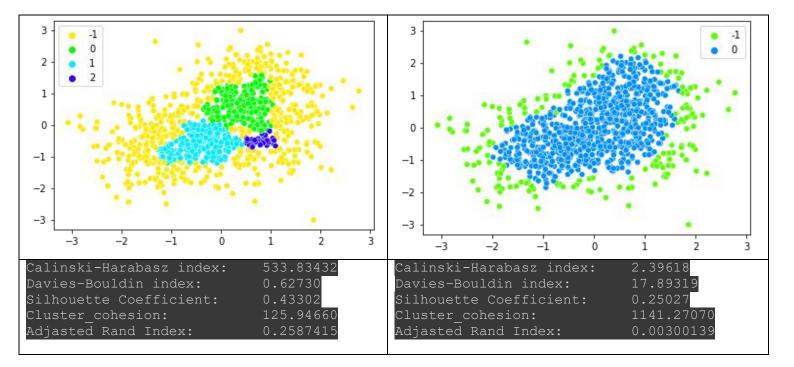


K-means:

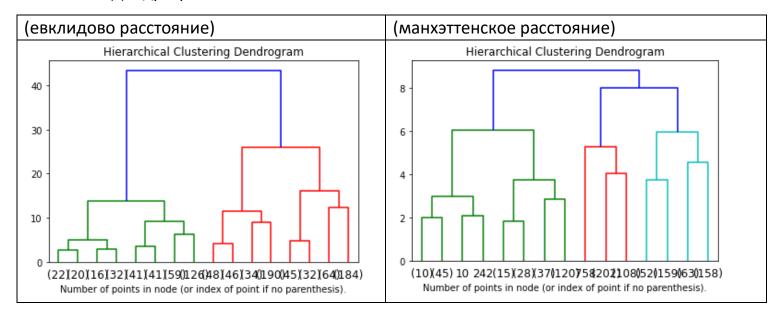


DBSCAN: (желтые точки слева (зеленые справа) метод определяет как выбросы)

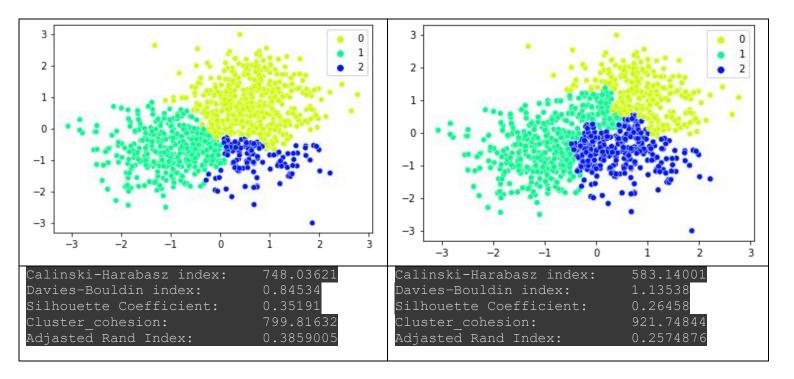
DBSCAN (евклидово расстояние)	DBSCAN (манхэттенское расстояние)
eps=0.21, min_samples=18	eps=0.3, min_samples=12



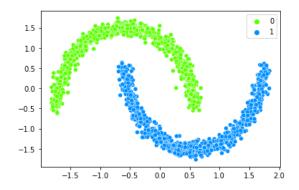
Дендрограмма:



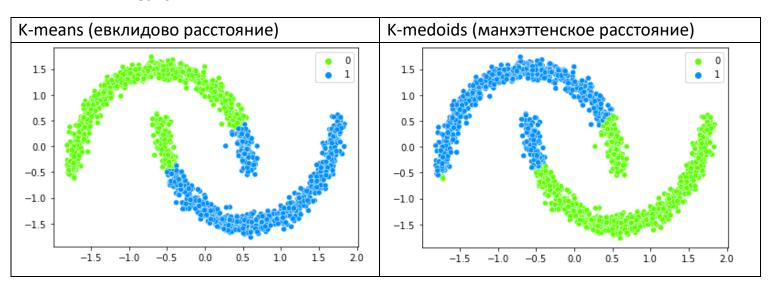
AgglomerativeClustering	(евклидово	AgglomerativeClustering	(манхэттенское
расстояние)		расстояние)	
Linkage = 'complete		Linkage = 'complete'	



Датасет 5 - линейно неразделимое множество без пересечений— 2 кластера, 1500 точек

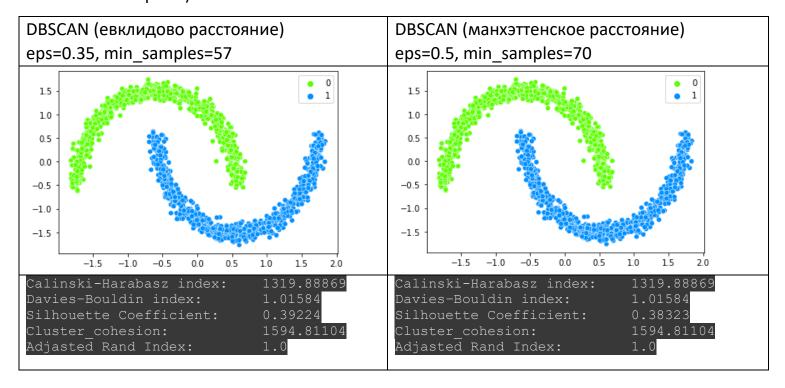


K-means:

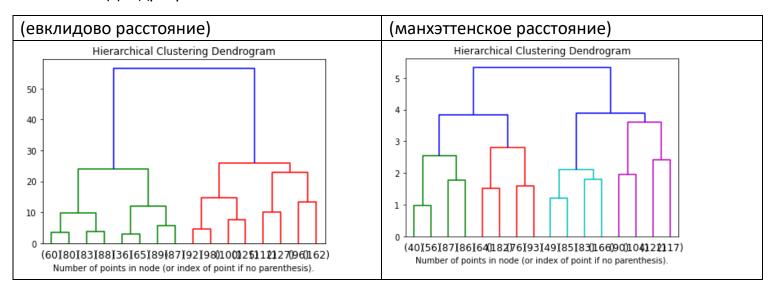


2092.27173 Calinski-Harabasz index: 2057.26868 Davies-Bouldin index: 0.81005 Davies-Bouldin index: 0.81510 0.49709 0.49080 Silhouette Coefficient: Silhouette Coefficient: Cluster cohesion: 1251.71584 Cluster cohesion: 1264.03949 Adjasted Rand Index: 0.49527933 Adjasted Rand Index: 0.46204132

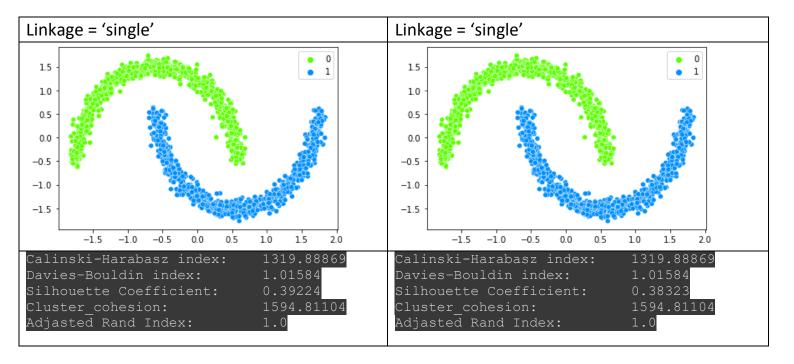
DBSCAN: (желтые точки слева (зеленые справа) метод определяет как выбросы)



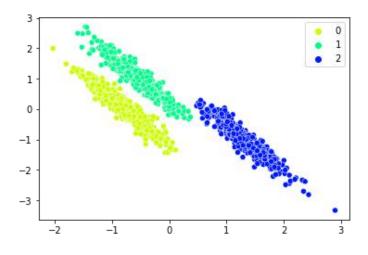
Дендрограмма:



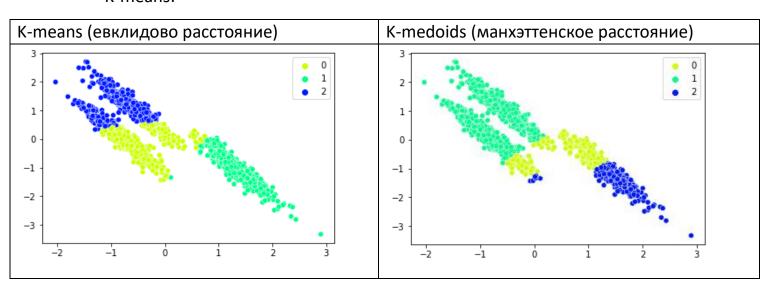
AgglomerativeClustering	(евклидово	AgglomerativeClustering	(манхэттенское
расстояние)		расстояние)	



Датасет 6 - линейно разделимое множество без пересечений, но не сгущение точек не сферической формы — 3 кластера, 1500 точек

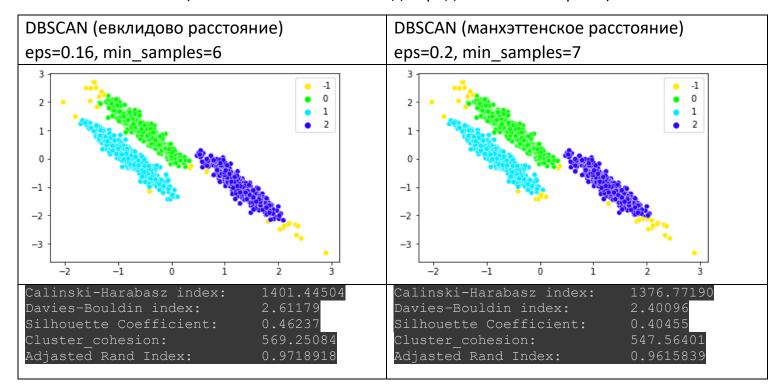


K-means:

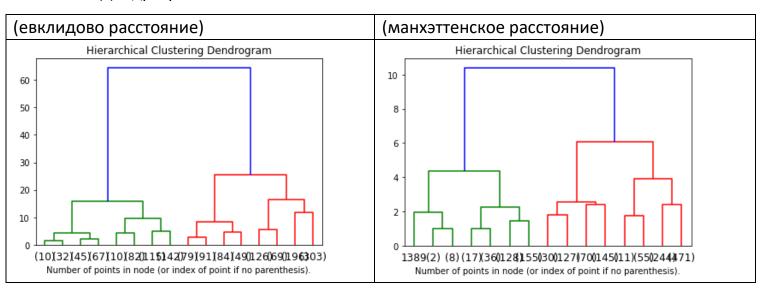


Calinski-Harabasz index: Calinski-Harabasz index: 2453.17409 Davies-Bouldin index: Davies-Bouldin index: 0.78958 Silhouette Coefficient: 0.50997 Silhouette Coefficient: 0.48512 701.35184 Cluster cohesion: 511.92170 Cluster cohesion: Adjasted Rand Index: 0.6074569 Adjasted Rand Index: 0.3930642

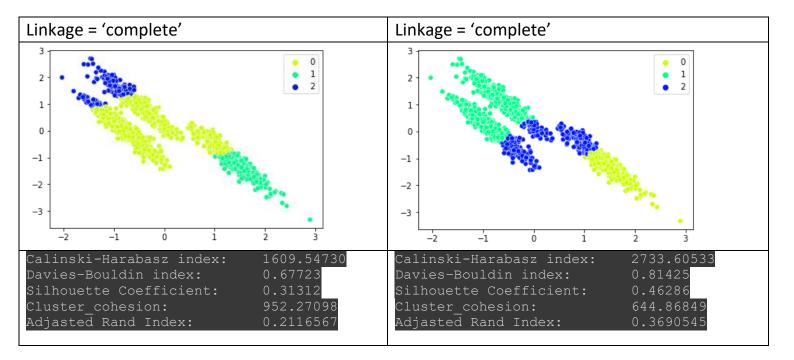
DBSCAN: (желтые точки слева метод определяет как выбросы)



Дендрограмма:



AgglomerativeClustering	(евклидово	AgglomerativeClustering	(манхэттенское
расстояние)		расстояние)	



Датасет 7 - http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Abalone

Abalon Data Set

Данные представляют собой таблицу измерений 8 физических параметров морских ракушек. По этим данным нужно предсказать возраст ракушки, который считается по числу колец на срезе. Возраст (число колец) здесь является классом. Итого таблица содержит 4417 строк.

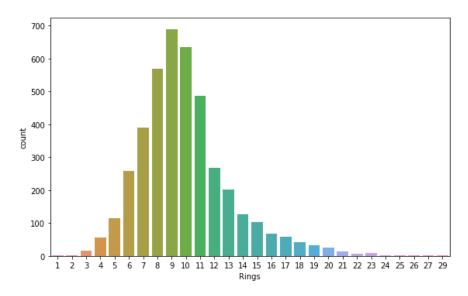
Признаки:

- Sex (категориальный) M, F, and I (infant)
- Length / Longest shell measurement (числовой)
- Diameter / perpendicular to length (числовой)
- Height / with meat in shell (числовой)
- Whole weight (числовой)
- Shucked weight (числовой)
- Viscera weight (числовой)
- Shell weight (числовой)

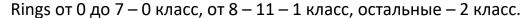
Проведем предобработку данных:

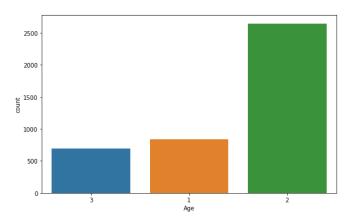
		10 00							
	Sex	Length	Diameter	Height	Whole weight	Shucked weight	Viscera weight	Shell weight	Rings
0	М	0.455	0.365	0.095	0.5140	0.2245	0.1010	0.150	15
1	М	0.350	0.265	0.090	0.2255	0.0995	0.0485	0.070	7
2	F	0.530	0.420	0.135	0.6770	0.2565	0.1415	0.210	9
3	M	0.440	0.365	0.125	0.5160	0.2155	0.1140	0.155	10
4	ĺ	0.330	0.255	0.080	0.2050	0.0895	0.0395	0.055	7

В датасете Abalone нет пропущенных значений, но классе крайне не сбалансированы (пока не будем с этим ничего делать). Ракушек возрастом до 5 и от 16 и более крайне мало.



Чтобы более-менее сделать группы равными по размеру сгруппируем новые классы:

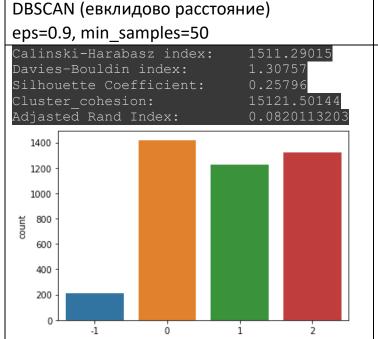




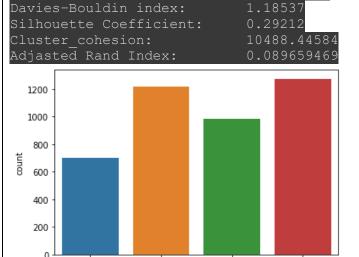
Признак 'Sex' категориальный, переведем его в числовое пространство, просто занумеровав (LabelEncoder). Далее данные стандартизуем и можно приступить к кластеризации

K-means:

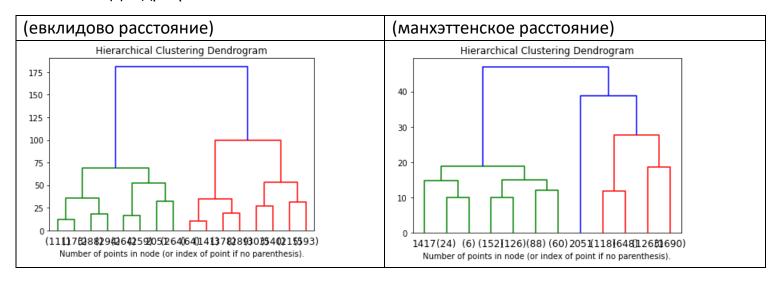
K-means (евклидово расстоян	ие)	K-medoids (манхэттенское расстояние)				
Davies-Bouldin index: Silhouette Coefficient: Cluster_cohesion:	4141.03163 1.01720 0.34819 11197.62971 0.146148473	Calinski-Harabasz index: Davies-Bouldin index: Silhouette Coefficient: Cluster_cohesion: Adjasted Rand Index:	4034.79284 1.04693 0.41138 11391.95557 0.138012995			



DBSCAN (манхэттенское расстояние) eps=1.3, min_samples=50 Calinski-Harabasz index: 1536.67706



Дендрограмма:



AgglomerativeClustering	(евклидово	AgglomerativeClustering	(манхэттенское
расстояние)		расстояние)	
Linkage = 'ward'		Linkage = 'complete'	
Calinski-Harabasz index: Davies-Bouldin index: Silhouette Coefficient: Cluster_cohesion: Adjasted Rand Index:	3707.17758 0.98161 0.32394 12036.08122 0.167812161	Calinski-Harabasz index: Davies-Bouldin index: Silhouette Coefficient: Cluster_cohesion: Adjasted Rand Index:	867.36840 0.59840 0.38060 23605.44877 0.006012446

Датасет 8 - https://www.kaggle.com/creepyghost/uci-ionosphere

UCI Ionosphere Data Set

Эти радиолокационные данные были собраны системой в Goose Bay, Labrador. Эта система состоит из фазовой решетки из 16 высокочастотных антенн с общей передаваемой мощностью порядка 6,4 киловатт. Мишенями служили свободные электроны в ионосфере. "Хорошие" радиолокационные сигналы — это те, которые показывают присутствие некоторого типа структуры в ионосфере. «Плохими» считаются те, которые не возвращаются; их сигналы проходят через ионосферу.

Полученные сигналы обрабатывались с помощью автокорреляционной функции, аргументы которой - время импульса и номер импульса. Для системы Goose Bay было 17 номеров импульсов. Экземпляры в этой базе данных описываются двумя атрибутами на один номер импульса, соответствующими комплексным значениям, возвращаемым функцией в результате сложного электромагнитного сигнала.

Информация об атрибутах:

- Все 34 непрерывные
- 35-й атрибут является либо «хорошим», либо «плохим» в соответствии с приведенным выше определением. Это задача двоичной классификации. Итого таблица содержит 315 строк.

Проведем предобработку данных:

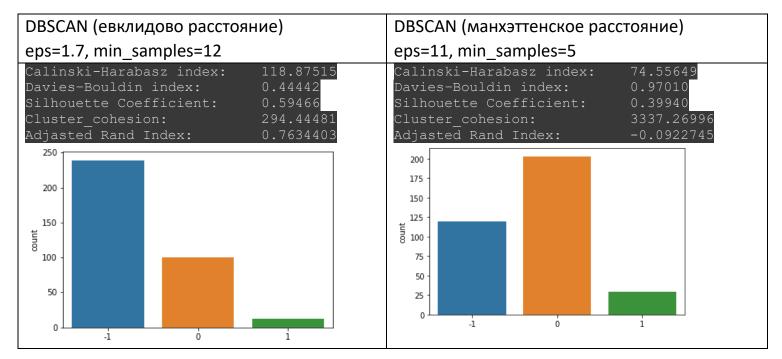
Col_21	Co1_22	Co1_23	Co1_24	Co1_25	Co1_26	Co1_27	Co1_28	Co1_29	Co1_30	Col_31	Co1_32	Co1_33	Class
).29674	0.36946	-0.47357	0.56811	-0.51171	0.41078	-0.46168	0.21266	-0.34090	0.42267	-0.54487	0.18641	-0.45300	g
0.45300	-0.18056	-0.35734	-0.20332	-0.26569	-0.20468	-0.18401	-0.19040	-0.11593	-0.16626	-0.06288	-0.13738	-0.02447	b
).27502	0.43385	-0.12062	0.57528	-0.40220	0.58984	-0.22145	0.43100	-0.17365	0.60436	-0.24180	0.56045	-0.38238	g
.00000	0.00000	0.00000	1.00000	0.90695	0.51613	1.00000	1.00000	-0.20099	0.25682	1.00000	-0.32382	1.00000	b
).35575	0.02309	-0.52879	0.03286	-0.65158	0.13290	-0.53206	0.02431	-0.62197	-0.05707	-0.59573	-0.04608	-0.65697	g

Пропущенных данных нет. Метки класса занумеруем с помощью LabelEncoder, приведем данные к стандартному виду и можно приступать к кластеризации.

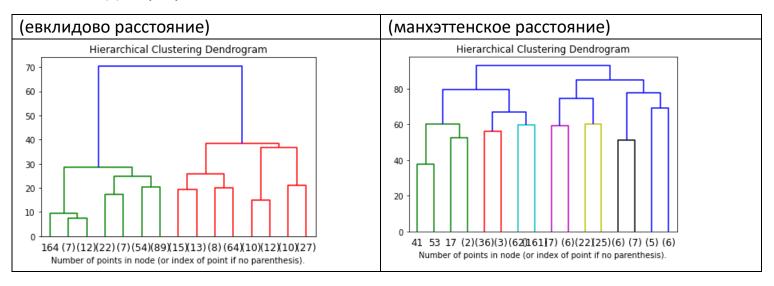
K-means:

K-means (евклидово расстоя	ние)	K-medoids (манхэттенское расстояние)			
Calinski-Harabasz index: Davies-Bouldin index: Silhouette Coefficient: Cluster_cohesion: Adjasted Rand Index:	95.91251 1.68190 0.27041 9085.98185 0.16790201	Calinski-Harabasz index: Davies-Bouldin index: Silhouette Coefficient: Cluster_cohesion: Adjasted Rand Index:	87.84073 1.74445 0.27808 9253.86935 0.08967090		

DBSCAN (синие столбики – доля выбросов)



Дендрограмма:



AgglomerativeClustering	(евклидово	AgglomerativeClustering	(манхэттенское
расстояние)		расстояние)	
Linkage = 'ward'		Linkage = 'complete'	
Calinski-Harabasz index:	95.43817	Calinski-Harabasz index:	17.32822
Davies-Bouldin index:	1.68755	Davies-Bouldin index:	3.94652
Silhouette Coefficient:	0.27130	Silhouette Coefficient:	0.23749
Cluster_cohesion:	9095.67921	Cluster_cohesion:	11035.09577
Adjasted Rand Index:	0.17747908	Adjasted Rand Index:	0.085825800

Вывод

В данной работе проводилось сравнение трех методов кластеризации с двумя функциями расстояния на разных данных.

В случае когда сгущения точек находятся далеко друг от друга или близко, но не пересекаясь (датасеты 1, 2) то все методы провели кластеризацию правильно.

Если группы накладываются друг на друга (датасеты 3, 4), то каждый метод дает разный результат. Причем k-means и аггломеративный подход дали приблизительно схожее разделение, хотя по adjusted rang index видно, что деление неидеально. DBSCAN совсем плохо смог выделить группы (для манхэттенской метрики вообще либо получались три маленькие группы, а большая часть точек относилась к выбросам, либо вообще не удавалось выделить требуемые 3 группы), с точки зрения метода данные больше похожи на единое облако окруженное большим количеством выбросов.

Зато на датасетах 5, 6 DBSCAN показал лучший результат. Аггломеративный метод справился только на одном из них, k-means -справился плохо. Это связано с данными, так как k-means хорошо работает с данными, которые обладают сферической формой, при этом группы в идеале должны не сильно отличатся в размерах. А DBSCAN хоть и плохо разделяет группы, если они имеют большую площадь пересечения, но он может выделить группы произвольной формы, если правильно задать параметры, и не будет сильных пересечений с соседними кластерами.

В датасете 7 лучше всего сработали k-means и аггломеративный метод, но по метрикам качества видно, что данные плохо скластеризировались. В датасете 8 по adjusted rang index хорошо показал себя DBSCAN, но также он очень почти треть данных относит к выбросам.

В итоге, видно, что каждый метод может хорошо работать на тех или иных данных, так как в основе каждого лежат разные гипотезы о том, какие точки считать членами одного кластера. Также влияние оказывает и метрика (хотя в данной работе почти всегда результат получался выше при использовании расстояния Евклида). Если бы у нас не было меток классов изначально, и мы могли бы использовать только внутренние показатели качества, то оценивать проводимую кластеризацию было бы еще сложнее, так как и в этих метриках тоже в основе лежат разные предположения о структуре данных, что требует дополнительного анализа от исследователя.

Инструкция по запуску

Для запуска потребуется использовать Anaconda (Jupiter Notebook), но предпочтительнее запускать Google Colab ИЗ (https://colab.research.google.com/drive/1F8MN28nnWvQGzfPqfJGUOWtFU04v E9qM?usp=sharing), так как там гарантированно уже установлены используемые библиотеки. Также все датасеты, использованные в отчете, должны лежать в одной папке с кодом, иначе нужно будет изменить в коде путь к ним.

Затем нужно просто последовательно выполнить код в ячейках. Никакие параметры менять не нужно, иначе не получиться воспроизвести достигнутые результаты классификации в точности как полученные в отчете к работе.