ĐẠI HỌC QUỐC GIA THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN
KHOA TOÁN - TIN HỌC

BTLT TUẦN 6: KHAI THÁC DỮ LIỆU

Sinh viên thực hiện: Nguyễn Công Hoài Nam
Mã số sinh viên: 21280099

Ngày 19 tháng 5 năm 2024

MỤC LỤC

1. Thuật toán K-means

1. Tiền xử lý

Tạo file `data.csv`
Import thư viện và đọc dữ liệu từ file

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.colors import ListedColormap

blobs = pd.read_csv('data.csv')
colnames = list(blobs.columns[1:-1])
```

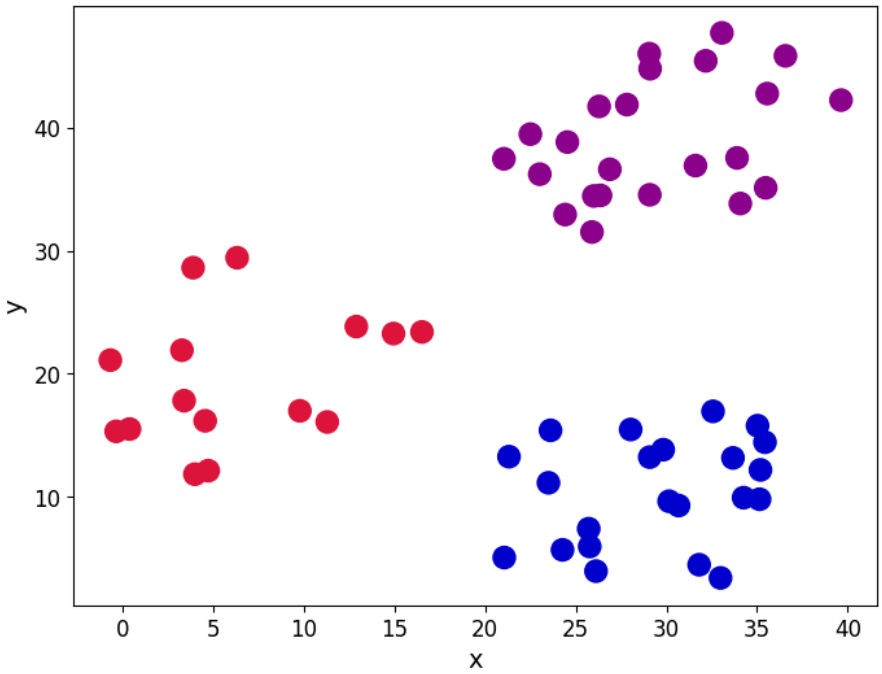
Dữ liệu có dạng:

```
blobs.head()
```

	ID	x	y	cluster
0	0	24.412	32.932	2
1	1	35.190	12.189	1
2	2	26.288	41.718	2
3	3	0.376	15.506	0
4	4	26.116	3.963	1

Chúng ta sẽ sử dụng cột phân cụm để hiển thị các nhóm khác nhau được biểu diễn trong tập dữ liệu

```
customcmap = ListedColormap(["crimson", "mediumblue", "darkmagenta"])
fig, ax = plt.subplots(figsize=(8,6))
plt.scatter(x = blobs['x'], y = blobs['y'], s=150,
            c=blobs['cluster'].astype('category'),
            cmap = customcmap)
ax.set_xlabel(r'x', fontsize = 14)
ax.set_ylabel(r'y', fontsize = 14)
plt.xticks(fontsize = 12)
plt.yticks(fontsize = 12)
plt.show()
```



2. Cài đặt thuật toán

Bước 1 và 2: Xác định k và khởi tạo các tâm

```
def initiate_centroids(k, dset):
    '''
    select k data points as centroids
    k: number of centroids
    dset: pandas dateframe
    '''
    centroids = dset.sample(k)
    return centroids

np.random.seed(42)
k = 3
df = blobs[['x', 'y']]
centroids = initiate_centroids(k,df)
centroids
```

Bước 3: tính khoảng cách
Công thức: $Dist(a,b) = \sum(a-b)^2$ với a, b là các điểm dữ liệu

```
def rsserr(a,b):
    '''
    Calculate sum of squared errors.
    a and b are numpy arrays
    '''
    return np.sum(np.square(a-b))
```

	x	y
0	24.412	32.932
5	25.893	31.515
36	26.878	36.609

Bước 4: gán giá trị các tâm

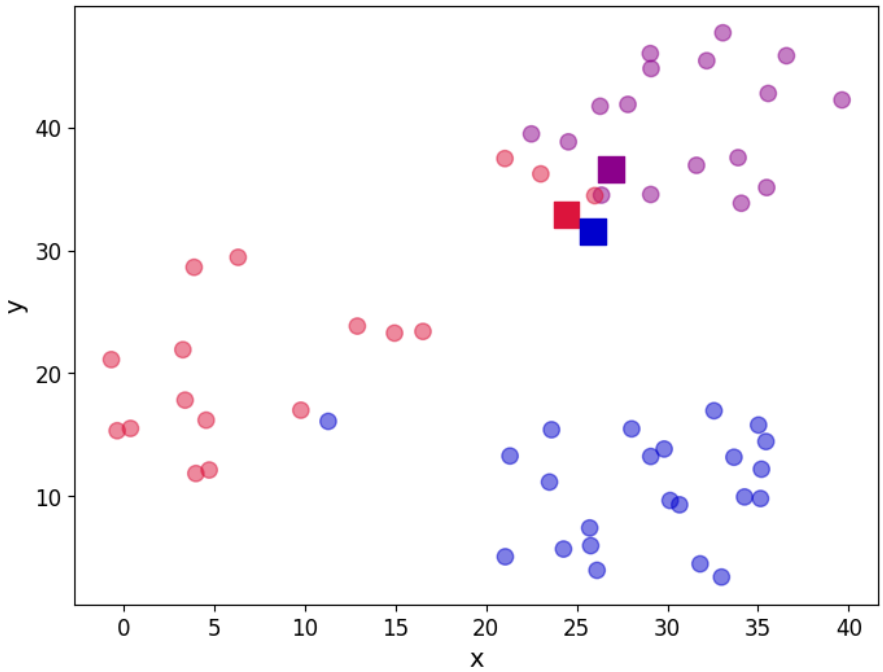
```
def centroid_assignation(dset, centroids):
    '''
    Given a dataframe `dset` and a set of `centroids`, we assign each
    data point in `dset` to a centroid.
    - dset - pandas dataframe with observations
    - centroids - pandas dataframe with centroids
    '''
    k = centroids.shape[0]
    n = dset.shape[0]
    assignation = []
    assign_errors = []

    for obs in range(n):
        # Estimate error
        all_errors = np.array([])
        for centroid in range(k):
            err = rsserr(centroids.iloc[centroid, :], dset.iloc[obs,:])
            all_errors = np.append(all_errors, err)

        # Get the nearest centroid and the error
        nearest_centroid =  np.where(all_errors==np.amin(all_errors))[0].tolist()[0]
        nearest_centroid_error = np.amin(all_errors)

        # Add values to corresponding lists
        assignation.append(nearest_centroid)
        assign_errors.append(nearest_centroid_error)

    return assignation, assign_errors
```

Thêm cột gán tâm và sai số phát sinh để cập nhật biểu đồ phân tán biểu diễn các trọng tâm

```
df['centroid'], df['error'] = centroid_assignation(df, centroids)
df.head()
```

	x	y	centroid	error
0	24.412	32.932	0	0.000000
1	35.190	12.189	1	459.928485
2	26.288	41.718	2	26.449981
3	0.376	15.506	0	881.394772
4	26.116	3.963	1	759.162433

```
fig, ax = plt.subplots(figsize = (8,6))
plt.scatter(df.iloc[:,0], df.iloc[:,1], marker = 'o',
           c=df['centroid'].astype('category'),
           cmap = customcmap, s=80, alpha = 0.5)
plt.scatter(centroids.iloc[:,0], centroids.iloc[:,1],
            marker = 's', s= 200, c=[0, 1, 2],
           cmap = customcmap)
ax.set_xlabel(r'x', fontsize = 14)
ax.set_ylabel(r'y', fontsize = 14)
plt.xticks(fontsize = 12)
plt.yticks(fontsize = 12)
plt.show()
```



Tổng các sai số

```
print('The total error is {0:.2f}'.format(df['error'].sum()))
```

The total error is **20606.25**

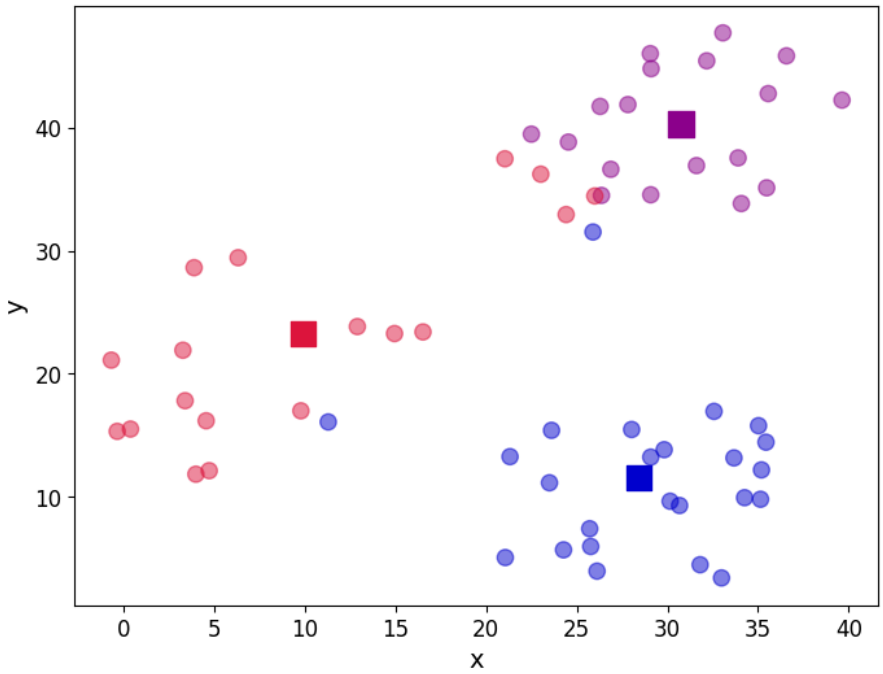
Bước 5: cập nhật vị trí của k tâm bằng việc tính giá trị trung bình của các quan sát được gán cho mỗi tâm

```
centroids = df.groupby('centroid').agg('mean').loc[:, colnames].reset_index(drop = True)
centroids
```

	x	y
0	9.889444	23.242611
1	28.431250	11.546250
2	30.759333	40.311167

Xem lại biểu đồ phân tán với vị trí của k tâm đã được cập nhật

```
fig, ax = plt.subplots(figsize = (8,6))
plt.scatter(df.iloc[:,0], df.iloc[:,1], marker = 'o',
           c=df['centroid'].astype('category'),
           cmap = customcmap, s=80, alpha = 0.5)
plt.scatter(centroids.iloc[:,0], centroids.iloc[:,1],
            marker = 's', s= 200, c=[0, 1, 2],
           cmap = customcmap)
ax.set_xlabel(r'x', fontsize = 14)
ax.set_ylabel(r'y', fontsize = 14)
plt.xticks(fontsize = 12)
plt.yticks(fontsize = 12)
plt.show()
```



Bước 6: lặp lại bước 3-5

```python
def kmeans(dset, k=2, tol=1e-4):
    '''
    K-means implementationd for a
    `dset`:  DataFrame with observations
    `k`: number of clusters, default k=2
    `tol`: tolerance=1E-4
    '''
    # Let us work in a copy, so we don't mess the original
    working_dset = dset.copy()
    # We define some variables to hold the error, the
    # stopping signal and a counter for the iterations
    err = []
    goahead = True
    j = 0

    # Step 2: Initiate clusters by defining centroids
    centroids = initiate_centroids(k, dset)

    while(goahead):
        # Step 3 and 4 - Assign centroids and calculate error
        working_dset['centroid'], j_err = centroid_assignation(working_dset, centroids)
        err.append(sum(j_err))

        # Step 5 - Update centroid position
        centroids = working_dset.groupby('centroid').agg('mean').reset_index(drop = True)

        # Step 6 - Restart the iteration
        if j>0:
            # Is the error less than a tolerance (1E-4)
            if err[j-1]-err[j]<=tol:
                goahead = False
        j+=1

    working_dset['centroid'], j_err = centroid_assignation(working_dset, centroids)
    centroids = working_dset.groupby('centroid').agg('mean').reset_index(drop = True)
    return working_dset['centroid'], j_err, centroids
```

3. Kết quả

Thực thi các hàm trên

```
np.random.seed(42)
df['centroid'], df['error'], centroid = kmeans(df[['x','y']], 3)
df.head()
```

	x	y	centroid	error
0	24.412	32.932	2	61.380524
1	35.190	12.189	1	37.472641
2	26.288	41.718	2	16.216075
3	0.376	15.506	0	51.798518
4	26.116	3.963	1	52.157062

Vị trí của các tâm cuối cùng

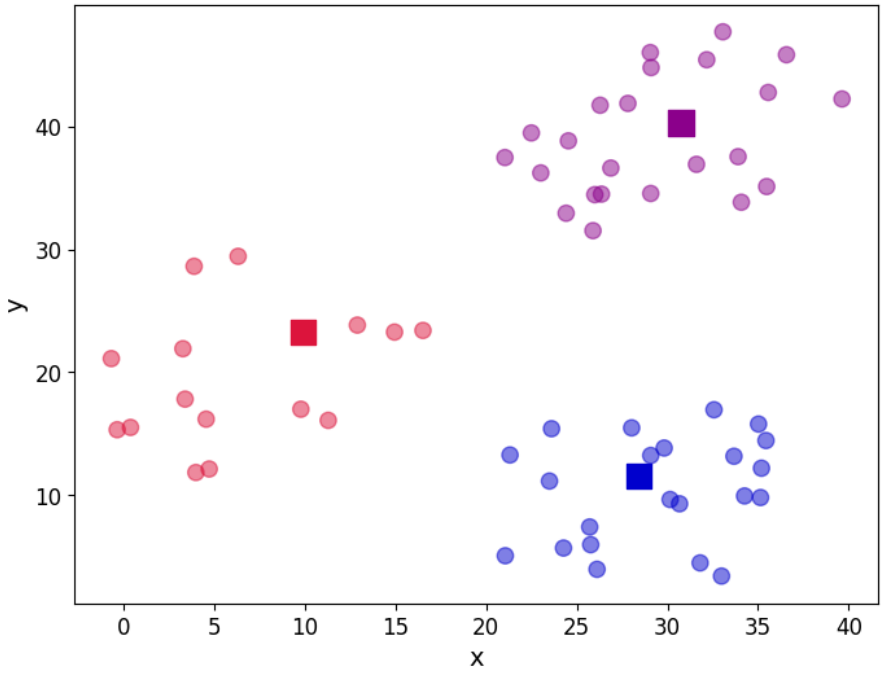
```
centroids
```

	x	y
0	9.889444	23.242611
1	28.431250	11.546250
2	30.759333	40.311167

Xem lại biểu đồ phân tán

```
fig, ax = plt.subplots(figsize = (8,6))
plt.scatter(df.iloc[:,0], df.iloc[:,1], marker = 'o',
           c=df['centroid'].astype('category'),
           cmap = customcmap, s=80, alpha = 0.5)
plt.scatter(centroids.iloc[:,0], centroids.iloc[:,1],
            marker = 's', s= 200, c=[0, 1, 2],
           cmap = customcmap)
ax.set_xlabel(r'x', fontsize = 14)
```

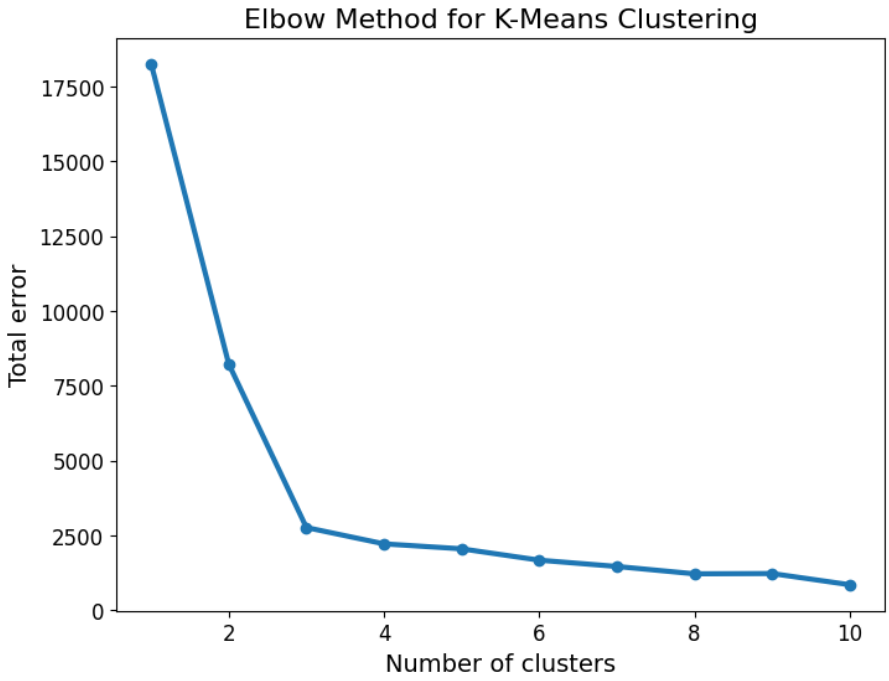
```
ax.set_ylabel(r'y', fontsize = 14)
plt.xticks(fontsize = 12)
plt.yticks(fontsize = 12)
plt.show()
```



Sử dụng **elbow** để chỉ ra số cụm tối ưu

```
err_total = []
n = 10
df_elbow = blobs[['x','y']]
for i in range(n):
    _, my_errs, _ = kmeans(df_elbow, i+1)
    err_total.append(sum(my_errs))
```

```
fig, ax = plt.subplots(figsize = (8,6))
plt.plot(range(1,n+1), err_total, linewidth =3, marker = 'o')
ax.set_xlabel(r'Number of clusters', fontsize = 14)
ax.set_ylabel(r'Total error', fontsize = 14)
ax.set_title('Elbow Method for K-Means Clustering', fontsize=16)
plt.xticks(fontsize = 12)
plt.yticks(fontsize = 12)
plt.show()
```



Số cụm tối ưu là 3 (chỗ khuỷu tay)

2. Thuật toán K-medians

Về cơ bản, `K-medians` chỉ khác `K-means` ở:

- Cách tính khoảng cách (sử dụng khoảng cách Mahattan thay vì Euclid)
- Cách cập nhật trong tâm (dùng median thay cho mean)

1. Cài đặt thuật toán

Lấy ngẫu nhiên trọng tâm ban đầu, tương tự như với hàm `inititate_means` của `kmeans`

```
def initiate_medians(k, dset):
    '''
    select k data points as medians
    k: number of medians
    dset: pandas dateframe
    '''
    centroids = dset.sample(k)
    return centroids
```

Hàm tính khoảng cách, khác với `kmeans`, `kmedians` sử dụng khoảng cách `Manhattan`
Công thức: $Dist(a,b) = \sum |a-b|$ với a, b là các điểm dữ liệu

```
def rsserr(a,b):
    '''
    Calculate sum of squared errors.
    a and b are numpy arrays
    '''
    return np.sum(np.abs((a-b)))
```

Gán các giá trị tâm, tương tự `kmeans`

```
def median_assignation(dset, centroids):
```

```
    '''
    Given a dataframe `dset` and a set of `medians`, we assign each
    data point in `dset` to a median.
    - dset - pandas dataframe with observations
    - medians - pandas dataframe with medians
    '''
    k = centroids.shape[0]
    n = dset.shape[0]
    assignation = []
    assign_errors = []

    for obs in range(n):
        all_errors = np.array([])
        for centroid in range(k):
            err = rsserr(centroids.iloc[centroid, :], dset.iloc[obs,:])
            all_errors = np.append(all_errors, err)

        nearest_centroid =  np.where(all_errors==np.amin(all_errors))[0].tolist()[0]
        nearest_centroid_error = np.amin(all_errors)

        assignation.append(nearest_centroid)
        assign_errors.append(nearest_centroid_error)

    return assignation, assign_errors
```

Khác với `kmeans`, `kmeans` sử dụng trung vị (median) để tính lại các centroid

```
def kmedians(dset, k=2, tol=1e-4):
    working_dset = dset.copy()
    err = []
    goahead = True
    j = 0
    centroids = initiate_medians(k, working_dset)

    while goahead:
        working_dset['centroid'], j_err = median_assignation(working_dset.iloc[:, :2],
            centroids)
        err.append(sum(j_err))
        centroids = working_dset.groupby('centroid').agg('median').reset_index(drop=True)

        if j > 0:
            if err[j-1] - err[j] <= tol:
                goahead = False
        j += 1

    return working_dset['centroid'], j_err, centroids
```

2. Kết quả

Kết quả hàm

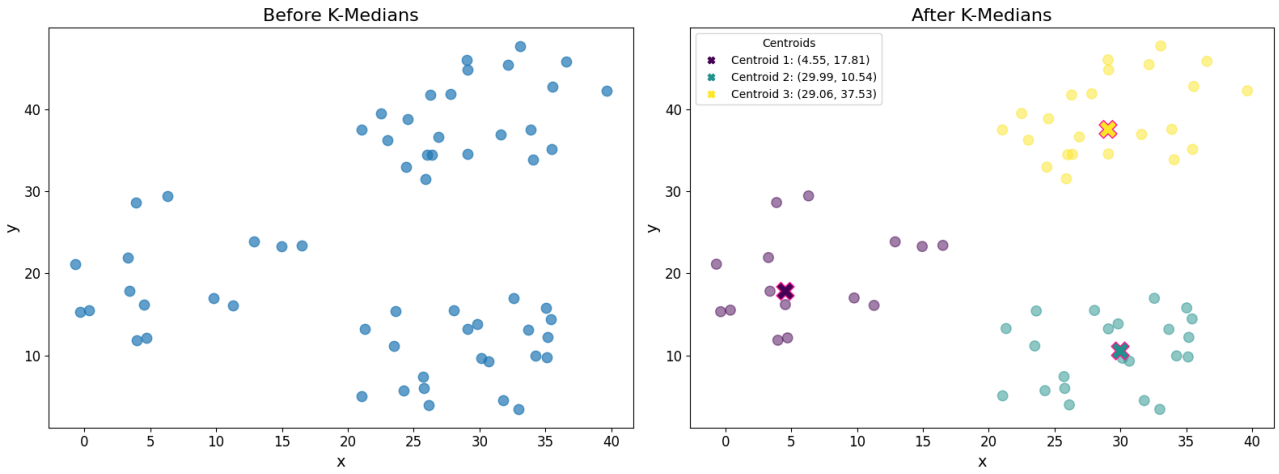
```
np.random.seed(42)
df['centroid'], df['error'], centroids = kmedians(df[['x','y']], 3)
print('The total error is {0:.2f}'.format(df['error'].sum()))
df.head()
```

```
The total error is 486.99
```

	x	y	centroid	error
0	24.412	32.932	2	9.2470
1	35.190	12.189	1	6.8565
2	26.288	41.718	2	6.9510
3	0.376	15.506	0	6.4780
4	26.116	3.963	1	10.4435

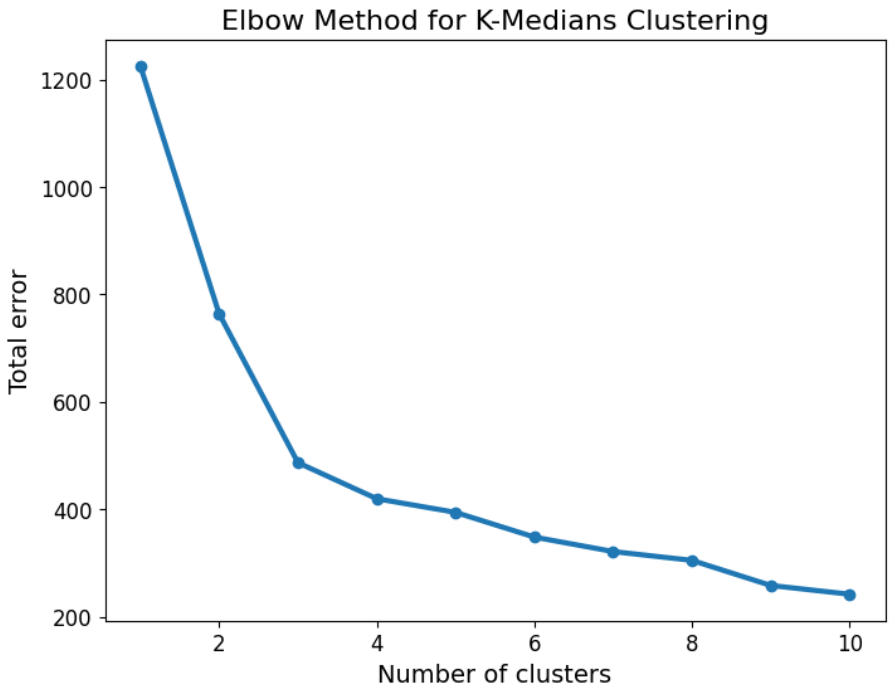
Vẽ biểu đồ để trực quan kết quả vừa tìm được

```python
def plot_kmedians(df, centroids):
    k = centroids.shape[0]
    plt.figure(figsize=(16, 6))

    plt.subplot(1, 2, 1)
    plt.scatter(df.iloc[:, 0], df.iloc[:, 1], marker='o', s=80, alpha=0.7)
    plt.xlabel('x', fontsize=14)
    plt.ylabel('y', fontsize=14)
    plt.title('Before K-Medians', fontsize=16)
    plt.xticks(fontsize=12)
    plt.yticks(fontsize=12)

    plt.subplot(1, 2, 2)
    plt.scatter(df.iloc[:, 0], df.iloc[:, 1], marker='o', c=df['centroid'].astype('category')
        , cmap='viridis', s=80, alpha=0.5)
    scatter_centroids = plt.scatter(centroids.iloc[:, 0], centroids.iloc[:, 1], marker='X', s
        =250, c=[i for i in range(k)], cmap='viridis', edgecolors='deeppink')
    plt.xlabel('x', fontsize=14)
    plt.ylabel('y', fontsize=14)
    plt.title('After K-Medians', fontsize=16)
    plt.xticks(fontsize=12)
    plt.yticks(fontsize=12)

    legend_labels = [f'Centroid {i+1}: ({centroids.iloc[i, 0]:.2f}, {centroids.iloc[i, 1]:.2f
        })' for i in range(k)]
    legend_elements = scatter_centroids.legend_elements()[0]
    plt.legend(legend_elements, legend_labels, title='Centroids', loc='upper left')

    plt.tight_layout()
    plt.show()


plot_kmedians(df, centroids)
```



Cùng khám phá biểu đồ `elbow` để chọn số `cluster` thích hợp

```
err_total=[]
n = 10
df_elbow=blobs[['x','y']]
for i in range(n):
    _,my_errs,_= kmedians(df_elbow,k=i+1)
    err_total.append(sum(my_errs))

fig,ax=plt.subplots(figsize=(8,6))
plt.plot(range(1,n+1),err_total,linewidth=3,marker='o')
ax.set_xlabel(r'Number of clusters',fontsize=14)
ax.set_ylabel(r'Total error',fontsize=14)
ax.set_title('Elbow Method for K-Medians Clustering', fontsize=16)
plt.xticks(fontsize=12)
plt.yticks(fontsize=12)
plt.show()
```



Số cluster phù hợp là 3.