ВМК МГУ

Задание 7. Кластеризация. Методы снижения размерности

Курс по методам машинного обучения, 2022-2023, Находнов Максим

1 Характеристики задания

- **Длительность:** 2 недели
- **Кросс-проверка:** 24 балла; в течение 1 недели после дедлайна; нельзя сдавать после жесткого дедлайна
- **Юнит-тестирование:** 16 баллов; можно сдавать после дедлайна со штрафом в 40%; публичная и приватная частив; PEP8
- **Почта:** ml.cmc@mail.ru
- **Темы для писем на почту:** ВМК.ML[Задание 7][peer-review], ВМК.ML[Задание 7][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.

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

1. Функция для расчёта коэффициента силуэта
2. Функция для расчёта метрики B-Cubed

3 Кросс-проверка

- **Ссылка на задание:** ссылка тут
- **Туториал по интерактивным графикам** ссылка тут

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

Обратите внимание, что для ускорения выполнения работы можно скачать файл `cifar10_deep_features.npy` (также скачивается автоматически в ноутбуке через gdown). Не забудьте положить его в ту же директорию, что и сам ноутбук. Выполненный ноутбук `Clusterization.ipynb` необходимо сдать в тестирующую систему во вкладку `Кластеризация (notebook)`.

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

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.

Замечание: Под циклами далее подразумеваются как явные Python-циклы (`for`, `while`, list comprehension, ...), так и неявное использование таких циклов внутри библиотек (`np.apply_along_axis` и подобные). В случае возникновения ошибки **Time limit** проверьте код на соответствие числа используемых циклов с требованиями к реализации.

Замечание: Для самопроверки доступны как публичные тесты, так и тесты внутри Jupyter Notebook (смотрите задания **1.c.1, 1.c.3**).

Внимание! Окружение с библиотеками обновилось! Для уменьшения числа ошибок из-за разных версий советуем локально сделать новое вирутальное окружение с новым requirements2.txt . Старое окружение лучше оставить для совместимости с предыдущими заданиями (если захотите их еще дорешать)

Окружения с библиотеками можно создать следующим образом

```
# using pip
python3 -m venv <env_name>
source <env_name>/bin/activate
pip3 install -r requirements2.txt

# using Conda
conda create --name <env_name> --file requirements2.txt
```

4.1 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 1.

```python
def silhouette_score(x, labels):
    '''
    :param np.ndarray x: Непустой двумерный массив векторов-признаков
    :param np.ndarray labels: 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. 1: Шаблон для реализации подсчёта коэффициента силуэта

Входные данные тестов удовлетворяют одному из следующих ограничений:

1. Число объектов $n \leqslant 3000$, размерность пространства $d \leqslant 1200$
2. Число объектов $n \leqslant 5000$, размерность пространства $d = 1$

Ваша реализация должна удовлетворять следующим требованиям:

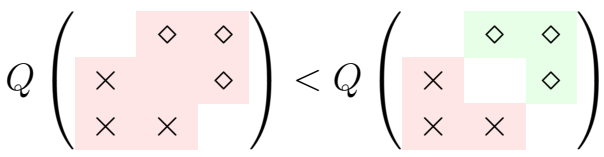
1. При вычислении не должно возникать warning, бесконечностей и nan-ов
2. Используйте не более одного цикла
3. Учтите, что метки кластеров могут идти не по порядку и принимать произвольные значения
4. Если в данных присутствует один кластер, то считайте что силуэт равен 0
5. Если $s_i = d_i = 0 \Longrightarrow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

4.2 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:

$$Q\left(\begin{array}{ccc} & \times & \times \\ \times & & \times \\ \times & \times & \end{array}\right) < Q\left(\begin{array}{ccc} & \times & \times \\ \times & & \times \\ \times & \times & \end{array}\right)$$

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

$$Q\left(\begin{array}{cccc} \times & \times & \bullet & \circ \\ \times & \times & \triangleright & \star \\ \times & * & \odot & \square \end{array}\right) < Q\left(\begin{array}{cccc} \times & \times & \bullet & \circ \\ \times & \times & \triangleright & \star \\ \times & * & \odot & \square \end{array}\right)$$

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

$$Q\left(\begin{array}{ccc} \times & \circ & \circ \\ \times & \star & \star \\ \times & \triangleright & \triangleright \\ \times & \odot & \odot \end{array}\right) < Q\left(\begin{array}{ccc} \times & \circ & \circ \\ \times & \star & \star \\ \times & \triangleright & \triangleright \\ \times & \odot & \odot \end{array}\right)$$

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 2.

```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. 2: Шаблон для реализации подсчёта метрики B-Cubed

Входные данные тестов удовлетворяют одному из следующих ограничений:

1. Число объектов $n \leqslant 1000$, число подтестов в одном тесте $T \leqslant 70$

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 Стиль программирования

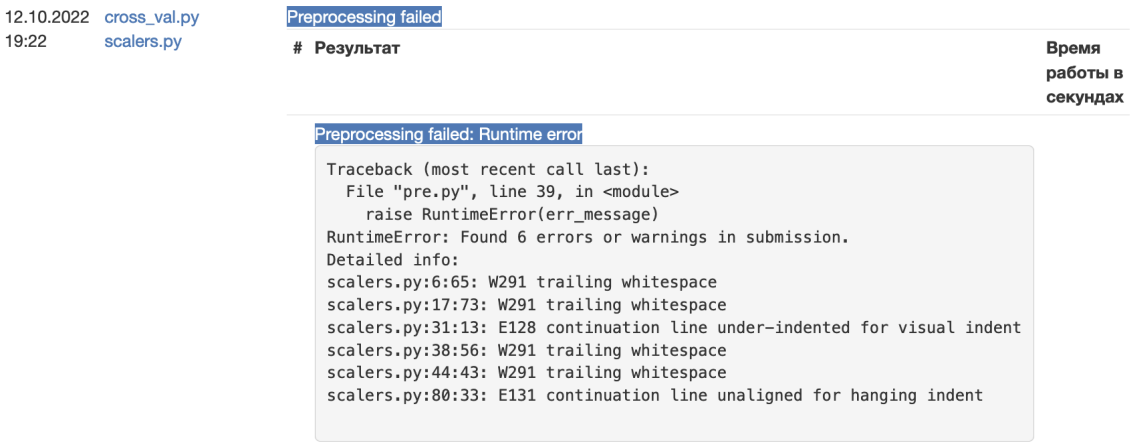
При выполнении задач типа unit-tests, ML-задания вам необходимо будет соблюдать определенный стиль программирования (codestyle). В данном случае мы выбрали PEP8 как один из популярных стилей для языка Python. Зачем мы это вводим? Хорошая читаемость кода — не менее важный параметр, чем работоспособность кода. Единый стиль позволяет быстрее понимать код коллег (в командных проектах, например), упрощает понимание кода (как другим, так и вам). Также, привыкнув к какому-либо стилю программирования, вам будет проще переориентироваться на другой.

В интернете есть много материалов для самостоятельного изучения PEP8, но мы предлагаем ознакомится со следующими полезными ссылками:

- Официальный сайт PEP8, на английском
- Небольшое руководство по основам на русском

Требования к PEP8 мы вводим только для заданий с авто-тестами, требований к такому же оформлению ноутбуков нет. Но улучшение качества кода в соответствии с PEP8 в них приветствуется!

В проверяющей системе, при несоответствии прикрепляемого кода PEP8, будет высвечиваться вердикт `Preprocessing failed`. Более подробно посмотреть на ошибки можно, нажав на них:



Проверить стиль программирования локально можно при помощи утилиты pycodestyle с параметром максимальной длины строки (мы используем 160 вместе дефолтных 79):

```
pycodestyle --max-line-length=160 solution.py
```

6 Тестирование

В cv-gml можно скачать все файлы, необходимые для тестирования, одним архивом. Для этого просто скачайте zip-архив во вкладке **шаблон решения** соответствующего задания и разархивируйте его. Далее следуйте инструкциям по запуску тестирования.

6.1 Онлайн тестирование

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

При тестировании баллы за каждую из функций начисляются независимо — 8 баллов за каждую задачу (7 **баллов за прохождение всех приватных тестов и** 1 **балл за прохождение всех публичных тестов**).

Из-за особенностей тестирующей системы явного разделения тестов на публичные и приватные, а также между отдельными подзадачами отсутствует.

Соответствие между номером теста и задачей можно установить из следующего списка:

[1-7]: `public/bcubed_score`

[8-15]: `public/silhouette_score`

[16-33]: `private/bcubed_score`

[34-52]: `private/silhouette_score`

Тестирование запускается следующей командой из корневой директории:

```
python3 ./run.py ./public_tests
# В случае успешного прохождения тестов вывод будет следующим:
>> Ok
>> ...
>> Ok
>> Mark: 2.0 2.000/2.000
```