机器学习概论实验报告

PB20111699 吴骏东

2022.12.8

在本次的实验中，我们需要自主实现 [《Clustering by fast search and find of density peaks》]() 一文中提到的聚类算法（以下简称 DPC 算法）

原理分析

DPC

DPC 算法是集成了 k-means 和 DBSCAN 两种算法的聚类算法。算法指出，在聚类过程中，聚类中心往往满足以下两个特征：

- 聚类中心周围密度较低，中心密度较高；
- 聚类中心与其它密度更高的点之间通常都距离较远。

基于此，我们可以采用如下的策略选择聚类中心：

1. 引入参数 d_c
2. 对于每一个数据点 m_i，计算下面的两个指标：

   局部密度：$\rho_i=\sum_j \chi(d_{ij}-d_c)$，其中 $\chi(x)=1 \text{ if } x<0 \text{ and } \chi(x)=0 \text{ if } x\geq 0$；

   密度距离：$\delta_i=\min_{\rho_j>\rho_i} d_{ij}$。若当前数据点 m_i 为 ρ 最大点，则定义 $\delta_i=\max_{j\neq i} d_{ij}$。
3. 绘制 $\delta-\rho$ 决策图。样本点因如下特征而被划分成不同类型的点：

   聚类中心：δ 较大且 ρ 加大；

   离群点：δ 较大而 ρ 较小；

   普通点：其他所有非聚类中心与离群点。
4. 根据决策图，确定聚类中心的划分指标。对于每一个普通点 m_i，将其划分到 m_j 所在的聚类簇中，其中 $j=\text{argmin}_{\rho_j>\rho_i} d_{ij}$。

   综上所述，我们可以实现简单而高效的聚类算法。

代码设计与分析

数据预处理

由于原始数据之间的距离差异较大，为了便于绘图与计算，我们将数据进行归一化。

```
import pandas as pd
import numpy as np

df = pd.read_csv(FILEPATH, names=['x','y'], header=None,sep=" ")
data = df.apply(lambda x: (x - np.min(x)) / (np.max(x) -
np.min(x)).round(4).to_numpy()
```

DPC 算法

计算顶点距离

为了高效计算数据点之间的距离，我们采用矩阵运算的形式。假设原始数据集 $X \in \mathbb{R}^{m\times 2}$，

$$\begin{aligned} d_{ij} &= \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \\ &= \sqrt{(x_i^2 + y_i^2) + (x_j^2 + y_j^2) - 2(x_i x_j + y_i y_j)} \end{aligned}$$

定义 $D^2 = (d_{ij}^2)_{m\times m}$， $X^2 = (x_{ij}^2)_{m\times 2}$，于是有

$$D^2 = X^2 \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 1 \end{pmatrix} {X^2}^T - 2XX^T$$

在代码中，我们如下进行距离矩阵的初始化

```
self.X = data
self.m, self.n = self.X.shape
X2 = np.square(self.X)
one = np.ones((self.m, self.n))
self.D = np.sqrt(np.abs(X2 @ one.T + one @ X2.T - 2 * self.X @ self.X.T))
```

计算 ρ 与 δ

直接按照算法实现。

```
def calculate(self, dc = 1):
    self.rho = np.zeros((self.m, 1))
    self._rho = np.zeros((self.m, 1))
    self.delta = np.zeros((self.m, 1))

    for i in range(0, self.m):
        index = np.where((self.D[i:i+1][:] < dc).all(axis=0))[0]
        self.rho[i] = len(index) - 1
        self._rho[i] = self.rho[i] + np.random.rand()/1000

    max_rho = self._rho.max()

    for i in range(0, self.m):
        if self._rho[i] == max_rho:
            self.delta[i] = np.max(self.D[i][:])
        else:
            index = np.where(self._rho > self._rho[i][0])[0]
            self.delta[i] = np.min(self.D[i][index])
```

确定聚类中心

根据决策图，确定属于决策中心的点的参数范围 ρ_{min}、δ_{min}。随后将 $\rho \geq \rho_{min}, \delta \geq \delta_{min}$ 的数据点标记为聚类中心点，将 $\rho < \rho_{min}, \delta \geq \delta_{min}$ 的数据点标记为离群点。

```
def find_center(self, base_rho, base_delta):
    rho_index = np.where(self._rho >= base_rho)[0]
    delta_index = np.where(self.delta[rho_index, :] >= base_delta)[0]
    self.center_index = np.array(rho_index)[delta_index]
    self.cluster_num = len(self.center_index)

    all = list(range(0, self.m))
    self.other_index = []
    for i in all:
        if i not in self.center_index:
            self.other_index.append(i)
```

聚类簇划分

在确定聚类中心点的坐标后，我们按照 ρ 递减的顺序，对普通点进行聚类划分：将其划分到比自己 ρ 更大的最近的点所属的簇中。为了便于绘图，对于每一个簇，我们维护一个下标集合，用来标记被分在该簇中的顶点；每一个顶点都有一个标签，用于标记其所在的簇。

```
def _get_cluster(self):
    self.clusters = []
    self.label = np.zeros((self.m, 1))

    for i in range(0, self.cluster_num):
        self.clusters.append([])

    for i in range(0, self.cluster_num):
        self.label[self.center_index[i]] = int(i)

    self.other_index.sort(key=self._get_rho, reverse=True)

    for i in self.other_index:
          index = np.where(self._rho > self._rho[i][0])[0]
          i_index = index[np.argmin(self.D[i][index])]
          cluster_index = int(self.label[i_index][0])

          self.clusters[cluster_index].append(i)
          self.label[i] = cluster_index
```

模型训练与比较

评价指标

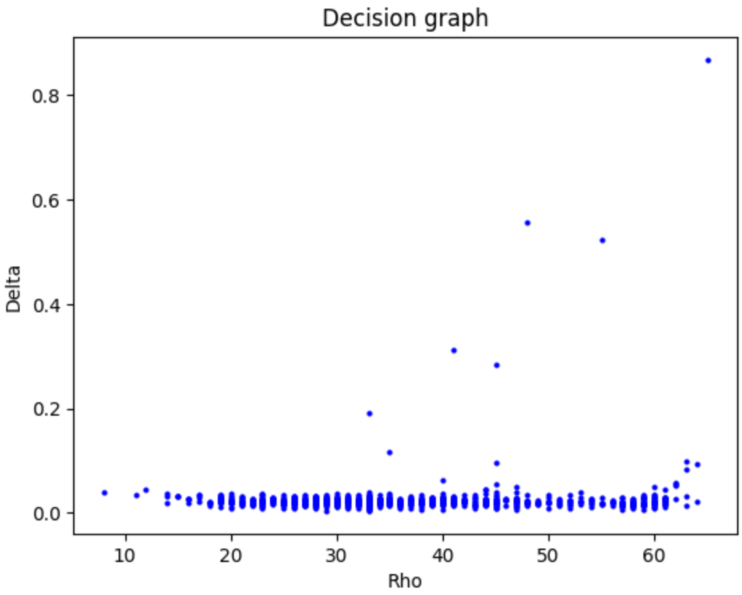
本次实验采用 DBI 作为评价指标。

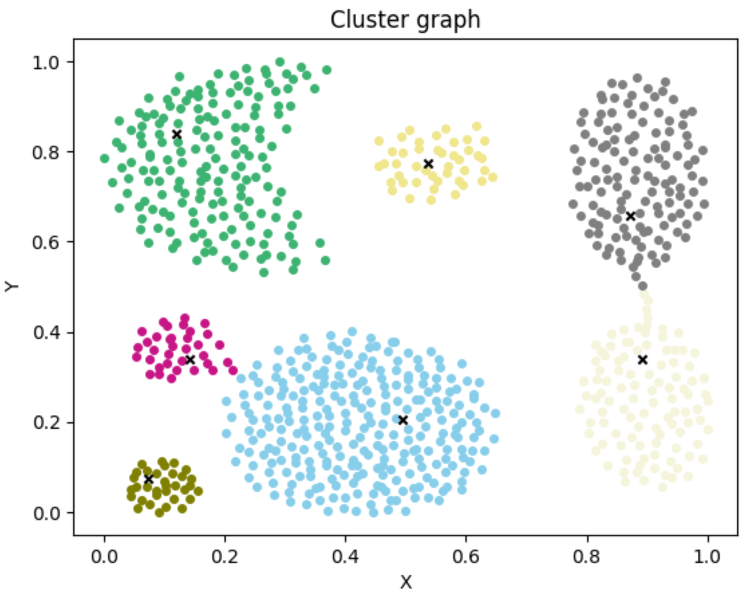
```
import sklearn.metrics as sklm
score = sklm.davies_bouldin_score(data, model.label.flatten())
print("DBI = {}".format(score))
```

接下来，我们针对每一个模型，给出经过调参后的最优结果（即调整 d_c 后所能得出的最佳 DBI）

Aggregation

参数设定为 $d_c = 0.1, \rho_{min} = 20, \delta_{min} = 0.11$

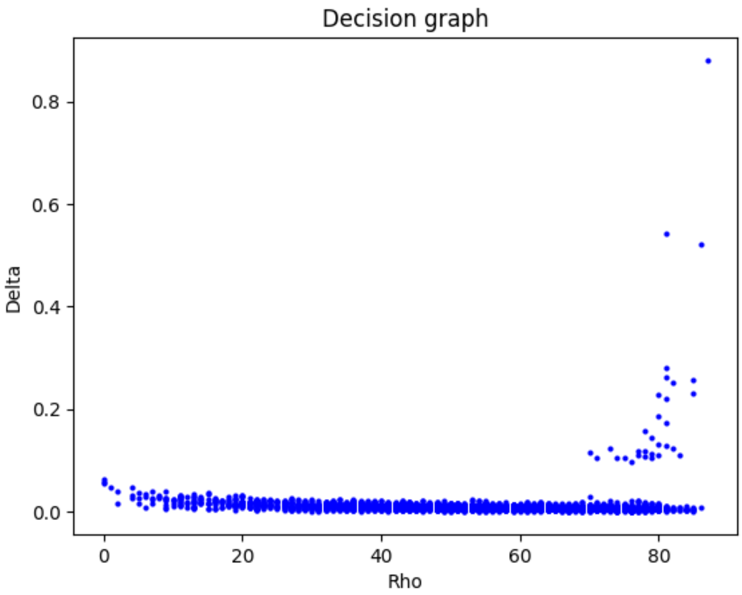


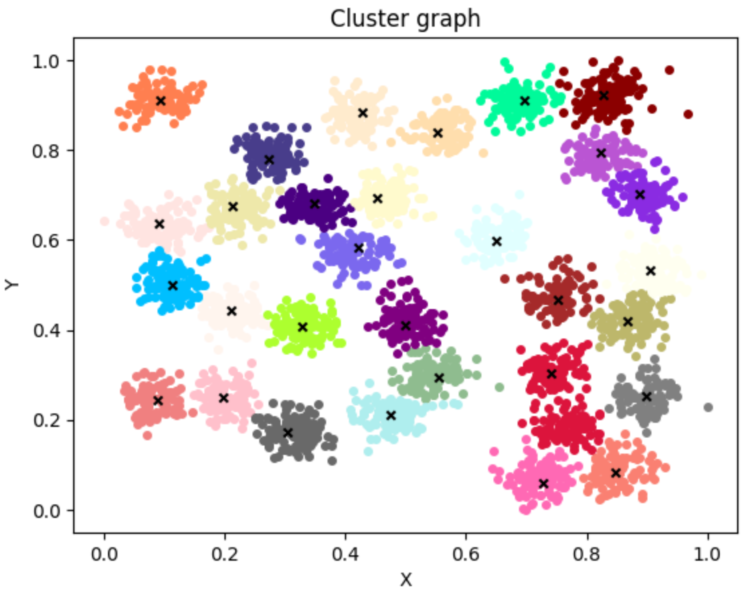


DBI = 0.5461317734754553

D31

参数设定为 $d_c = 0.01, \rho_{min} = 60, \delta_{min} = 0.1$

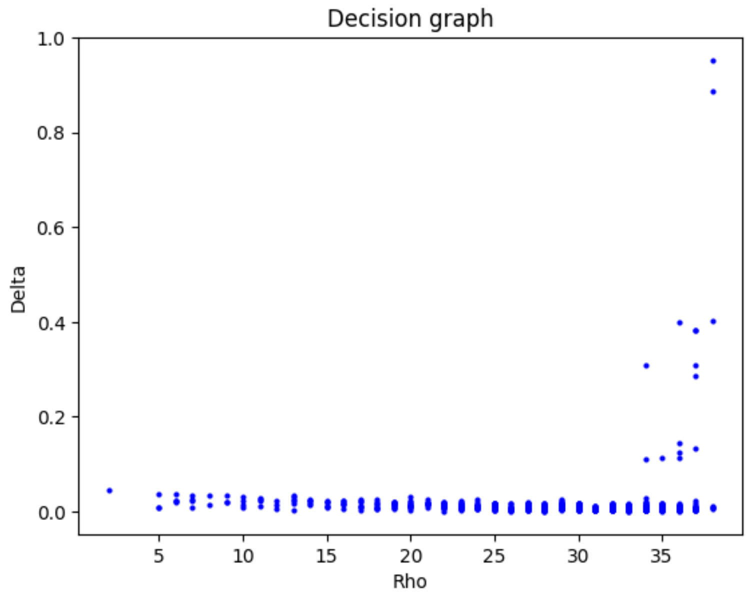


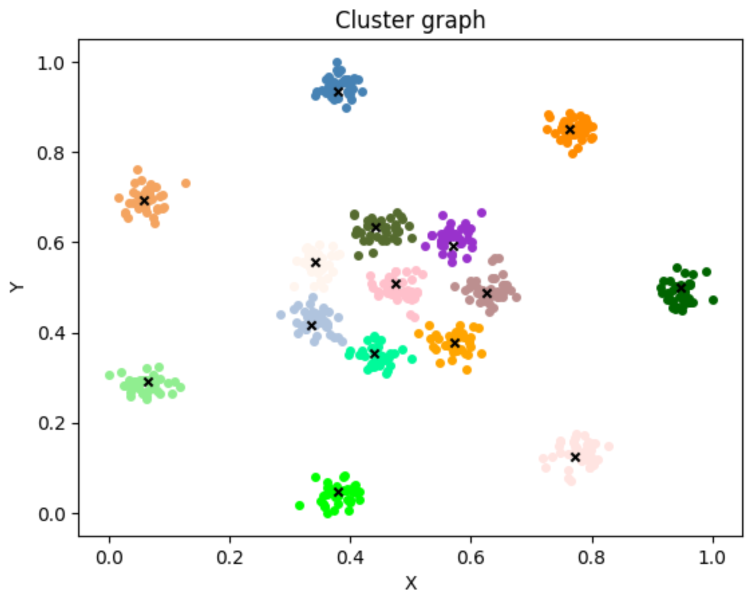


DBI = 0.5657232907049606

R15

参数设定为 $d_c = 0.05, \rho_{min} = 30, \delta_{min} = 0.08$





DBI = 0.3147059939103035

与 K-means 的比较

数据集	k-means	DPC
Aggregation	0.69826	0.54613
D31	0.54711	0.56572
R15	0.31470	0.31470

可以发现，在 Aggregation 数据集上， DPC 算法的效果明显优于 k-means，在其他数据集上二者效果基本相同。这主要是因为 Aggregation 数据集中样本点的分布情况并不均匀，形成的簇形状也不相同，对于 k-means 算法带来了一定的影响。

总结

本次实验通过实现 DPC 算法，我对于聚类有了更深的认识。相比于传统 k-means，DPC 算法更为简洁，且不需要预先指定簇的数目。