

zumz4b

April 19, 2018

0.1 Uczenie maszynowe UMZ 2017/2018

1 4. Algorytm KNN, uczenie nienadzorowane

1.0.1 Cz 2

1.1 4.2. Uczenie nienadzorowane – Algorytm k rednich

In [1]: # Przydatne importy

```
import ipywidgets as widgets
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
import pandas
import random
import seaborn

%matplotlib inline
```

In [2]: # Wczytanie danych (gatunki kosaców)

```
data_iris = pandas.read_csv('iris.csv', header=0, usecols=['od.d.', 'od.sz.', 'p.d.',
data_iris.columns=['x1', 'x2', 'x3', 'x4']

X = data_iris.values
Xs = data_iris.values[:, 2:4]
```

In [3]: # Wykres danych

```
def plot_unlabeled_data(X, col1=0, col2=1, x1label=r'$x_1$', x2label=r'$x_2$'):
    fig = plt.figure(figsize=(16*.7, 9*.7))
    ax = fig.add_subplot(111)
    fig.subplots_adjust(left=0.1, right=0.9, bottom=0.1, top=0.9)
    X1 = X[:, col1].tolist()
    X2 = X[:, col2].tolist()
    ax.scatter(X1, X2, c='k', marker='o', s=50, label='Dane')
    ax.set_xlabel(x1label)
    ax.set_ylabel(x2label)
    ax.margins(.05, .05)
    return fig
```

```
In [4]: # Przygotowanie interaktywnego wykresu
```

```
dropdown_arg1 = widgets.Dropdown(options=[0, 1, 2, 3], value=2, description='arg1')
dropdown_arg2 = widgets.Dropdown(options=[0, 1, 2, 3], value=3, description='arg2')

def interactive_unlabeled_data(arg1, arg2):
    fig = plot_unlabeled_data(
        X, col1=arg1, col2=arg2, x1label='$x_{}$'.format(arg1), x2label='$x_{}$'.format(arg2))
```

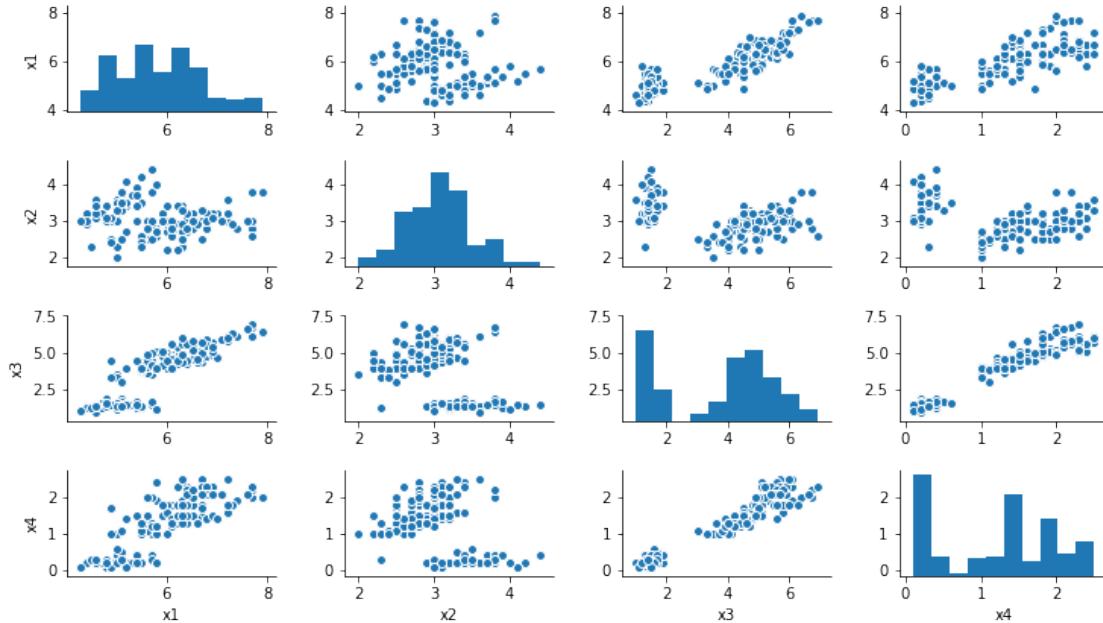
```
In [5]: widgets.interact(interactive_unlabeled_data, arg1=dropdown_arg1, arg2=dropdown_arg2)

interactive(children=(Dropdown(description=u'arg1', index=2, options=(0, 1, 2, 3), value=2), D
```

```
Out[5]: <function __main__.interactive_unlabeled_data>
```

```
In [6]: seaborn.pairplot(data_iris, vars=data_iris.columns, size=1.5, aspect=1.75)
```

```
Out[6]: <seaborn.axisgrid.PairGrid at 0x7f0eafdaf8d0>
```



```
In [7]: # Odlego euklidesowa
```

```
def euclidean_distance(x1, x2):
    return np.linalg.norm(x1 - x2)
```

```
In [8]: # Algorytm k rednich
```

```
def k_means(X, k, distance=euclidean_distance):
    history = []
```

```

Y = []

# Wylosuj centroid dla kadej klasy
centroids = [[random.uniform(X.min(axis=0)[f], X.max(axis=0)[f])
              for f in range(X.shape[1])]
             for c in range(k)]

# Powtarzaj, dopoki klasy si zmieniaj
while True:
    distances = [[distance(centroids[c], x) for c in range(k)] for x in X]
    Y_new = [d.index(min(d)) for d in distances]
    if Y_new == Y:
        break
    Y = Y_new
    XY = np.asarray(np.concatenate((X, np.matrix(Y).T), axis=1))
    Xc = [XY[XY[:, 2] == c][:, :-1] for c in range(k)]
    centroids = [[Xc[c].mean(axis=0)[f] for f in range(X.shape[1])]
                  for c in range(k)]
    history.append((centroids, Y))

result = history[-1][1]
return result, history

```

```

In [9]: # Wykres danych - klastrowanie
def plot_clusters(X, Y, k, centroids=None):
    color = ['r', 'g', 'b', 'c', 'm', 'y', 'k']
    fig = plt.figure(figsize=(16*.7, 9*.7))
    ax = fig.add_subplot(111)
    fig.subplots_adjust(left=0.1, right=0.9, bottom=0.1, top=0.9)

    X1 = X[:, 0].tolist()
    X2 = X[:, 1].tolist()
    X1 = [[x for x, y in zip(X1, Y) if y == c] for c in range(k)]
    X2 = [[x for x, y in zip(X2, Y) if y == c] for c in range(k)]

    for c in range(k):
        ax.scatter(X1[c], X2[c], c=color[c], marker='o', s=25, label='Dane')
        if centroids:
            ax.scatter([centroids[c][0]], [centroids[c][1]], c=color[c], marker='+', s=100, label='Centroid')

    ax.set_xlabel(r'$x_1$')
    ax.set_ylabel(r'$x_2$')
    ax.margins(.05, .05)
    return fig

```

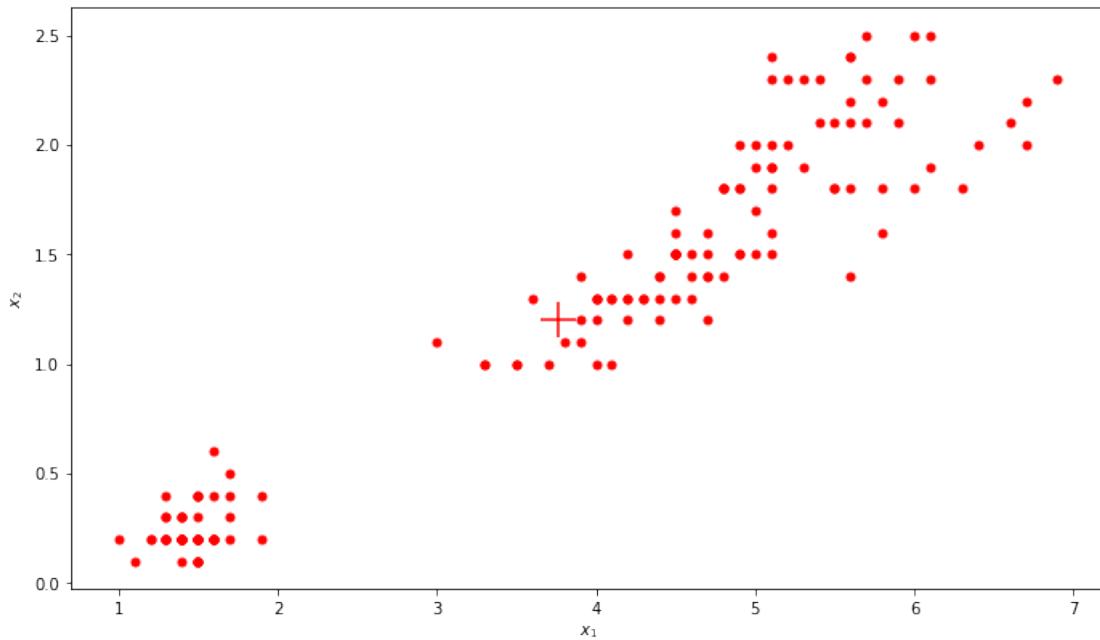
```

In [10]: Ys, history = k_means(Xs, 2)
fig = plot_clusters(Xs, Ys, 2, centroids=history[-1][0])

```

/home/pawel/.local/lib/python2.7/site-packages/ipykernel_launcher.py:21: RuntimeWarning: Mean

```
/home/pawel/.local/lib/python2.7/site-packages/numpy/core/_methods.py:73: RuntimeWarning: invalid value encountered in ravel
  ret, rcount, out=ret, casting='unsafe', subok=False)
```



```
In [11]: # Przygotowanie interaktywnego wykresu
```

```
slider_k = widgets.IntSlider(min=1, max=7, step=1, value=2, description=r'$k$', width=40)

def interactive_kmeans_k(steps, history, k):
    if steps >= len(history) or steps == 10:
        steps = len(history) - 1
    fig = plot_clusters(Xs, history[steps][1], k, centroids=history[steps][0])

def interactive_kmeans(k):
    slider_steps = widgets.IntSlider(min=1, max=10, step=1, value=1, description=r'steps')
    history = k_means(Xs, k)
    widgets.interact(interactive_kmeans_k, steps=slider_steps,
                    history=widgets.fixed(history), k=widgets.fixed(k))


```

```
In [12]: widgets.interact_manual(interactive_kmeans, k=slider_k)
```

```
interactive(children=(IntSlider(value=2, description=u'$k$', max=7, min=1), Button(description=u'Run')))
```

```
Out[12]: <function __main__.interactive_kmeans>
```

1.1.1 Algorytm k rednich – dane wejściowe

- k – liczba klastrów
- zbiór uczący $X = \{x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(m)}\}$, $x^{(i)} \in \mathbb{R}^n$

Na wejściu nie ma zbioru Y , ponieważ jest to uczenie nienadzorowane!

1.1.2 Algorytm k rednich – pseudokod

1. Zainicjalizuj losowo k centroidów (rodki cikoci klastrów): μ_1, \dots, μ_k .
2. Powtarzaj dopóki przyporządkowania klastrów się zmieniają:
3. Dla $i = 1$ do m : za $y^{(i)}$ przyjmij klas najbliższego centroidu.
4. Dla $c = 1$ do k : za μ_c przyjmij redni wszystkich punktów $x^{(i)}$ takich, że $y^{(i)} = c$.

```
In [13]: # Algorytm k rednich
def k_means(X, k, distance=euclidean_distance):
    Y = []
    centroids = [[random.uniform(X.min(axis=0)[f], X.max(axis=0)[f])
                  for f in range(X.shape[1])]
                  for c in range(k)] # Wylosuj centroydy
    while True:
        distances = [[distance(centroids[c], x) for c in range(k)]
                      for x in X] # Oblicz odlegości
        Y_new = [d.index(min(d)) for d in distances]
        if Y_new == Y:
            break # Jeli nic się nie zmienia, przerwij
        Y = Y_new
        XY = np.concatenate((X, np.matrix(Y).T), axis=1)
        Xc = [XY[XY[:, 2] == c][:, :-1] for c in range(k)]
        centroids = [[Xc[c].mean(axis=0)[f]
                      for f in range(X.shape[1])]
                      for c in range(k)] # Przesu centroidy
    return Y
```

- Liczba klastrów jest określona z góry i wynosi k .
- Jeżeli w którym kroku algorytmu jedna z klas nie zostanie przyporządkowana adnemu z przykładów, pomija się j – w ten sposób wynikiem działania algorytmu może być mniej niż k klastrów.

1.1.3 Funkcja kosztu dla problemu klasterowania

$$J(y^{(1)}, \dots, y^{(m)}, \mu_1, \dots, \mu_k) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \|x^{(i)} - \mu_{y^{(i)}}\|^2$$

- Zauważamy, że z każdym krokiem algorytmu k rednich koszt się zmniejsza (lub ewentualnie pozostaje taki sam).

1.1.4 Wielokrotna inicjalizacja

- Algorytm k rednych zawsze znajdzie lokalne minimum funkcji kosztu J , ale nie zawsze będzie to globalne minimum.
- Aby temu zaradzić, można uruchomić algorytm k rednych wiele razy, za każdym razem z innym losowym położeniem centroidów (tzw. **wielokrotna losowa inicjalizacja – multiple random initialization**).
- Z każdym razem obliczamy koszt J . Wybieramy ten wynik, który ma najniższy koszt.

1.1.5 Wybór liczby klastrów k

- Najlepiej wybrać k ręcznie w zależności od kształtu danych i celu, który chcemy osiągnąć.

1.2 4.3. Metryki

```
In [16]: def powerme(x1,x2,n):  
    X = []  
    for m in range(n+1):  
        for i in range(m+1):  
            X.append(np.multiply(np.power(x1,i),np.power(x2,(m-i))))  
    return np.hstack(X)
```

```
In [17]: # Wykres danych  
def plot_data_for_classification(X, Y, xlabel=None, ylabel=None, Y_predicted=[], highlight=False):  
    fig = plt.figure(figsize=(16*.6, 9*.6))  
    ax = fig.add_subplot(111)  
    fig.subplots_adjust(left=0.1, right=0.9, bottom=0.1, top=0.9)  
    X = X.tolist()  
    Y = Y.tolist()  
    X1n = [x[1] for x, y in zip(X, Y) if y[0] == 0]  
    X1p = [x[1] for x, y in zip(X, Y) if y[0] == 1]  
    X2n = [x[2] for x, y in zip(X, Y) if y[0] == 0]  
    X2p = [x[2] for x, y in zip(X, Y) if y[0] == 1]  
  
    if Y_predicted != []:  
        Y_predicted = Y_predicted.tolist()  
        X1tn = [x[1] for x, y, yp in zip(X, Y, Y_predicted) if y[0] == 0 and yp[0] == 0]  
        X1fn = [x[1] for x, y, yp in zip(X, Y, Y_predicted) if y[0] == 1 and yp[0] == 0]  
        X1tp = [x[1] for x, y, yp in zip(X, Y, Y_predicted) if y[0] == 1 and yp[0] == 1]  
        X1fp = [x[1] for x, y, yp in zip(X, Y, Y_predicted) if y[0] == 0 and yp[0] == 1]  
        X2tn = [x[2] for x, y, yp in zip(X, Y, Y_predicted) if y[0] == 0 and yp[0] == 0]  
        X2fn = [x[2] for x, y, yp in zip(X, Y, Y_predicted) if y[0] == 1 and yp[0] == 0]  
        X2tp = [x[2] for x, y, yp in zip(X, Y, Y_predicted) if y[0] == 1 and yp[0] == 1]  
        X2fp = [x[2] for x, y, yp in zip(X, Y, Y_predicted) if y[0] == 0 and yp[0] == 1]  
  
    if Y_predicted != []:  
        if highlight == 'tn':  
            ax.scatter(X1tn, X2tn, c='r', marker='x', s=50, label='Dane')
```

```

        ax.scatter(X1fn, X2fn, c='k', marker='o', s=50, label='Dane')
        ax.scatter(X1tp, X2tp, c='k', marker='o', s=50, label='Dane')
        ax.scatter(X1fp, X2fp, c='k', marker='x', s=50, label='Dane')
    elif highlight == 'fn':
        ax.scatter(X1tn, X2tn, c='k', marker='x', s=50, label='Dane')
        ax.scatter(X1fn, X2fn, c='r', marker='o', s=50, label='Dane')
        ax.scatter(X1tp, X2tp, c='k', marker='o', s=50, label='Dane')
        ax.scatter(X1fp, X2fp, c='k', marker='x', s=50, label='Dane')
    elif highlight == 'tp':
        ax.scatter(X1tn, X2tn, c='k', marker='x', s=50, label='Dane')
        ax.scatter(X1fn, X2fn, c='k', marker='o', s=50, label='Dane')
        ax.scatter(X1tp, X2tp, c='g', marker='o', s=50, label='Dane')
        ax.scatter(X1fp, X2fp, c='k', marker='x', s=50, label='Dane')
    elif highlight == 'fp':
        ax.scatter(X1tn, X2tn, c='k', marker='x', s=50, label='Dane')
        ax.scatter(X1fn, X2fn, c='k', marker='o', s=50, label='Dane')
        ax.scatter(X1tp, X2tp, c='k', marker='o', s=50, label='Dane')
        ax.scatter(X1fp, X2fp, c='g', marker='x', s=50, label='Dane')
    else:
        ax.scatter(X1tn, X2tn, c='r', marker='x', s=50, label='Dane')
        ax.scatter(X1fn, X2fn, c='r', marker='o', s=50, label='Dane')
        ax.scatter(X1tp, X2tp, c='g', marker='o', s=50, label='Dane')
        ax.scatter(X1fp, X2fp, c='g', marker='x', s=50, label='Dane')

else:
    ax.scatter(X1n, X2n, c='r', marker='x', s=50, label='Dane')
    ax.scatter(X1p, X2p, c='g', marker='o', s=50, label='Dane')

if xlabel:
    ax.set_xlabel(xlabel)
if ylabel:
    ax.set_ylabel(ylabel)

ax.margins(.05, .05)
return fig

```

```

In [18]: # Wczytanie danych
import pandas
import numpy as np

alldata = pandas.read_csv('data.tsv', sep='\t')
data = np.matrix(alldata)

m, n_plus_1 = data.shape
n = n_plus_1 - 1
Xn = data[:, 1:]

X2 = powerme(data[:, 1], data[:, 2], n)

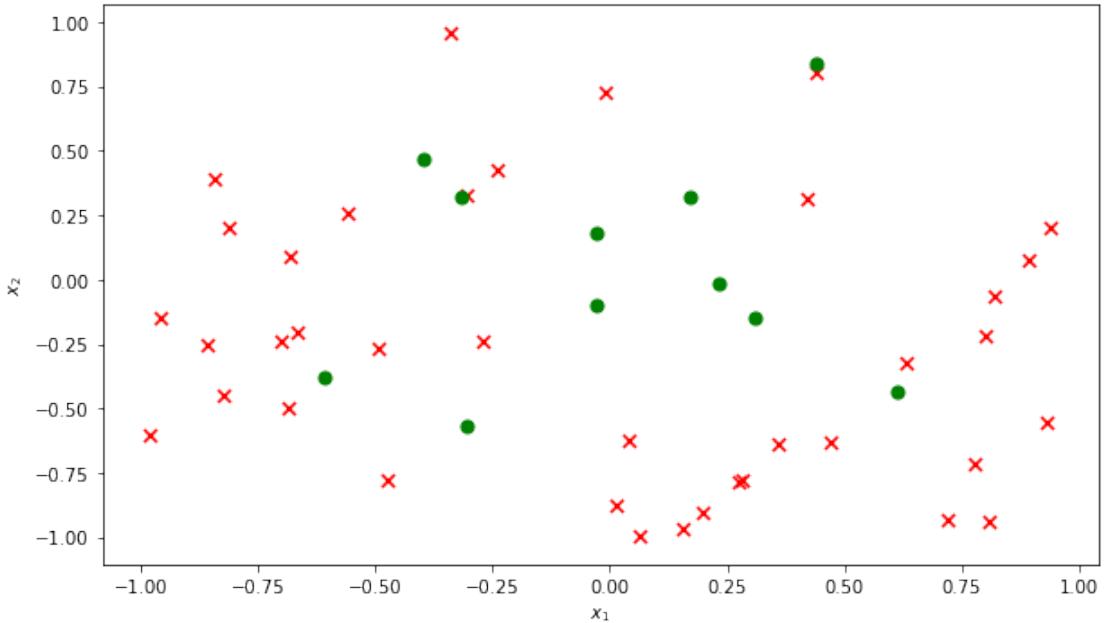
```

```

Y2 = np.matrix(data[:, 0]).reshape(m, 1)

In [19]: fig = plot_data_for_classification(X2, Y2, xlabel=r'$x_1$', ylabel=r'$x_2$')

```



```

In [20]: def safeSigmoid(x, eps=0):
    y = 1.0/(1.0 + np.exp(-x))
    if eps > 0:
        y[y < eps] = eps
        y[y > 1 - eps] = 1 - eps
    return y

def h(theta, X, eps=0.0):
    return safeSigmoid(X*theta, eps)

def J(h, theta, X, y, lamb=0):
    m = len(y)
    f = h(theta, X, eps=10**-7)
    j = -np.sum(np.multiply(y, np.log(f)) +
               np.multiply(1 - y, np.log(1 - f)), axis=0)/m
    if lamb > 0:
        j += lamb/(2*m) * np.sum(np.power(theta[1:], 2))
    return j

def dJ(h, theta, X, y, lamb=0):
    g = 1.0/y.shape[0]*(X.T*(h(theta, X)-y))
    if lamb > 0:

```

```

        g[1:] += lamb/float(y.shape[0]) * theta[1:]
    return g

def classifyBi(theta, X):
    prob = h(theta, X)
    return prob

In [21]: # Metoda gradientu prostego dla regresji logistycznej
def GD(h, fJ, fdJ, theta, X, y, alpha=0.01, eps=10**-3, maxSteps=10000):
    errorCurr = fJ(h, theta, X, y)
    errors = [[errorCurr, theta]]
    while True:
        # oblicz nowe theta
        theta = theta - alpha * fdJ(h, theta, X, y)
        # raportuj poziom bdu
        errorCurr, errorPrev = fJ(h, theta, X, y), errorCurr
        # kryteria stopu
        if abs(errorPrev - errorCurr) <= eps:
            break
        if len(errors) > maxSteps:
            break
        errors.append([errorCurr, theta])
    return theta, errors

In [22]: # Uruchomienie metody gradientu prostego dla regresji logistycznej
theta_start = np.matrix(np.zeros(X2.shape[1])).reshape(X2.shape[1],1)
theta, errors = GD(h, J, dJ, theta_start, X2, Y2,
                    alpha=0.1, eps=10**-7, maxSteps=10000)
print('theta = {}'.format(theta))

theta = [[ 1.37136167]
 [ 0.90128948]
 [ 0.54708112]
 [-5.9929264 ]
 [ 2.64435168]
 [-4.27978238]]


In [23]: # Wykres granicy klas
def plot_decision_boundary(fig, theta, X):
    ax = fig.axes[0]
    xx, yy = np.meshgrid(np.arange(-1.0, 1.0, 0.02),
                          np.arange(-1.0, 1.0, 0.02))
    l = len(xx.ravel())
    C = powerme(xx.reshape(l, 1), yy.reshape(l, 1), n)
    z = classifyBi(theta, C).reshape(int(np.sqrt(l)), int(np.sqrt(l)))

    plt.contour(xx, yy, z, levels=[0.5], lw=3);

```

```
In [24]: Y_predicted = (classifyBi(theta, X2) > 0.5).astype(int)
Y_predicted[:10]
```

```
Out[24]: matrix([[0],
 [1],
 [0],
 [0],
 [0],
 [0],
 [1],
 [1],
 [1],
 [0]])
```

```
In [25]: # Przygotowanie interaktywnego wykresu
```

```
dropdown_highlight = widgets.Dropdown(options=['all', 'tp', 'fp', 'tn', 'fn'], value='all')

def interactive_classification(highlight):
    fig = plot_data_for_classification(X2, Y2, xlabel=r'$x_1$', ylabel=r'$x_2$',
                                         Y_predicted=Y_predicted, highlight=highlight)
    plot_decision_boundary(fig, theta, X2)
```

```
In [26]: widgets.interact(interactive_classification, highlight=dropdown_highlight)
```

```
interactive(children=(Dropdown(description=u'highlight', options=('all', 'tp', 'fp', 'tn', 'fn')),
```

```
Out[26]: <function __main__.interactive_classification>
```

Dokadno (*accuracy*):

$$\text{accuracy} = \frac{tp + tn}{tp + fp + tn + fn}$$

Precyzja (*precision*):

$$\text{precision} = \frac{tp}{tp + fp}$$

Pokrycie (*recall*):

$$\text{recall} = \frac{tp}{tp + fn}$$

F-measure:

$$F = \frac{2 \cdot \text{precision} \cdot \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}}$$

F_β -measure:

$$F_\beta = \frac{(1 + \beta) \cdot \text{precision} \cdot \text{recall}}{\beta^2 * \text{precision} + \text{recall}}$$

- $F = F_1$

1.3 4.4. Analiza głównych składowych

1.3.1 Redukcja liczby wymiarów

Z jakich powodów chcemy redukować liczb wymiarów?

- Chcemy pozbyć się nadmiarowych cech, np. "dugo w cm" / "dugo w calach", "dugo" i szeroko" / "powierzchnia".
- Chcemy znaleźć bardziej optymalną kombinację cech.
- Chcemy przyspieszyć działanie algorytmów.
- Chcemy zvisualizować dane.

1.3.2 Bd rzutowania

Bd rzutowania – bd redniokwadratowy pomiędzy danymi oryginalnymi a danymi zrzutowanymi.

1.3.3 Sformuowanie problemu

Analiza głównych składowych (*Principal Component Analysis*, PCA):

Zredukować liczb wymiarów z n do k , czyli znaleźć k wektorów $u^{(1)}, u^{(2)}, \dots, u^{(k)}$ takich, że rzutowanie danych na podprzestrzeń opisaną na tych wektorach minimalizuje błąd rzutowania.

- Analiza głównych składowych to zupenie inne zagadnienie niż regresja liniowa!

1.3.4 Algorytm PCA

1. Dany jest zbiór składający się z $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(m)} \in \mathbb{R}^n$.
2. Chcemy zredukować liczb wymiarów z n do k ($k < n$).
3. W ramach wstępniego przetwarzania dokonujemy skalowania i normalizacji średniej.
4. Znajdujemy macierz kowariancji:

$$\Sigma = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^n \left(x^{(i)} \right) \left(x^{(i)} \right)^T$$

5. Znajdujemy wektory własne macierzy Σ (rozkład SVD):

$$(U, S, V) := \text{SVD}(\Sigma)$$

6. Pierwszych k kolumn macierzy U to szukane wektory.

In [27]: `from sklearn.preprocessing import StandardScaler`

```
# Algorytm PCA - implementacja
def pca(X, k):
    X_std = StandardScaler().fit_transform(X) # normalizacja
    mean_vec = np.mean(X_std, axis=0)
    cov_mat = np.cov(X_std.T) # macierz kowariancji
    n = cov_mat.shape[0]
```

```

eig_vals, eig_vecs = np.linalg.eig(cov_mat) # wektory wasne
eig_pairs = [(np.abs(eig_vals[i]), eig_vecs[:, i])
             for i in range(len(eig_vals))]
eig_pairs.sort()
eig_pairs.reverse()
matrix_w = np.hstack([eig_pairs[i][1].reshape(n, 1)
                      for i in range(k)]) # wybór
return X_std.dot(matrix_w) # transformacja

```

In [28]: `X_pca = pca(X, 2)`
`fig = plot_unlabeled_data(X_pca)`

