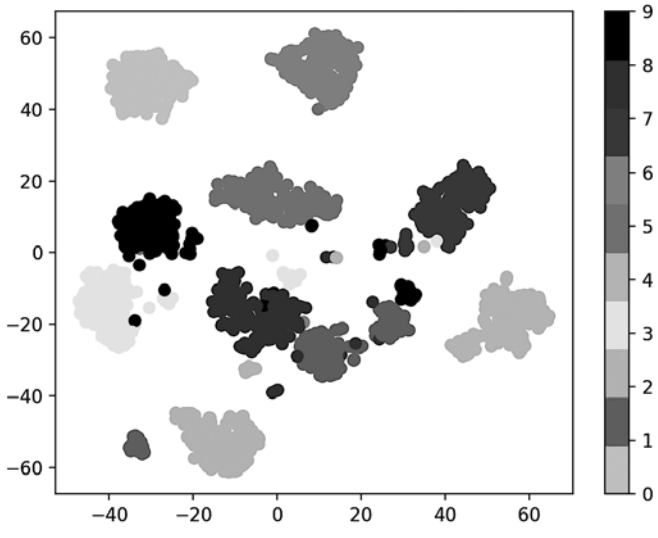


14.7. Практический пример: машинное обучение без учителя, часть 2 — кластеризация методом k средних

В этом разделе будет представлен, пожалуй, самый простой из алгоритмов машинного обучения без учителя — *кластеризация методом k средних*. Алгоритм анализирует *непомеченные* образцы и пытается объединить их в кластеры. Поясним, что *k* в «методе *k* средних» представляет количество кластеров, на которые предполагается разбить данные.

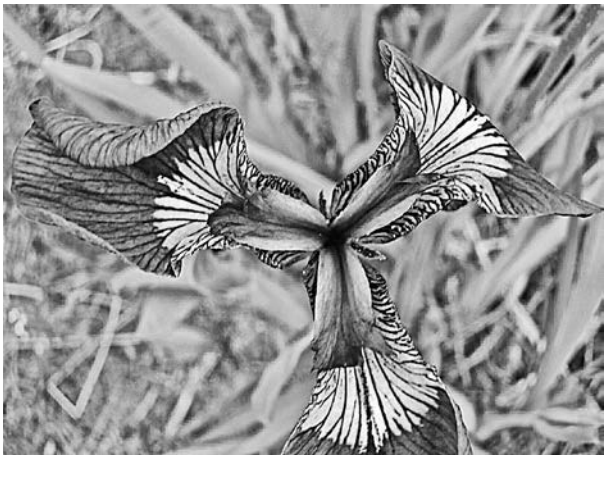
Алгоритм распределяет образцы на заранее заданное количество кластеров, используя метрики расстояния, сходные с метриками алгоритма кластеризации *k* ближайших соседей. Каждый кластер группируется вокруг *центроида* — центральной точки кластера. Изначально алгоритм выбирает *k* случайных центроидов среди образцов набора данных, после чего остальные образцы распределяются по кластерам с ближайшим центроидом. Далее выполняется итеративный пересчет центроидов, а образцы перераспределяются по кластерам, пока для всех кластеров расстояние от заданного центроида до образцов, входящих в его кластер, не будет минимизировано. В результате выполнения алгоритма формируется одномерный массив меток, обозначающих кластер,

к которому относится каждый образец, а также двумерный массив центроидов, представляющих центр каждого кластера.

Набор данных Iris

Поработаем с популярным *набором данных Iris*[1], входящим в поставку scikit-learn. Этот набор часто анализируется при классификации и кластеризации. И хотя набор данных помечен, мы не будем использовать эти метки, чтобы продемонстрировать кластеризацию. Затем метки будут использованы для определения того, насколько хорошо алгоритм *k* средних выполняет кластеризацию образцов.

Набор данных Iris относится к «игрушечным» наборам данных, поскольку состоит только из 150 образцов и четырех признаков. Набор данных описывает 50 образцов трех видов цветов ириса — *Iris setosa*, *Iris versicolor* и *Iris virginica* (см. фотографии ниже). Признаки образцов: длина наружной доли околоцветника (sepal length), ширина наружной доли околоцветника (sepal width), длина внутренней доли околоцветника (petal length) и ширина внутренней доли околоцветника (petal width), измеряемые в сантиметрах.



Iris setosa. Credit: Courtesy of Nation Park services

[1] Fisher, R.A., «The use of multiple measurements in taxonomic problems», Annual Eugenics, 7, Part II, 179–188 (1936); также «Contributions to Mathematical Statistics» (John Wiley, NY, 1950).

Iris versicolor. Credit: Courtesy of Jefficus

Iris virginica. Credit: Christer T Johansson

14.7.1. Загрузка набора данных Iris

Запустите IPython командой `ipython --matplotlib`, после чего воспользуйтесь *функцией* `load_iris` модуля `sklearn.datasets` для получения объекта `Bunch` с набором данных:

```
In [1]: from sklearn.datasets import load_iris

In [2]: iris = load_iris()
```

Атрибут `DESCR` объекта `Bunch` показывает, что набор данных состоит из 150 образцов (`Number of Instances`), каждый из которых обладает четырьмя признаками (`Number of Attributes`). В наборе данных нет отсутствующих значений. Образцы классифицируются целыми числами 0, 1 и 2, представляющими *Iris setosa*, *Iris versicolor* и *Iris virginica* соответственно. *Проигнорируем* метки и поручим определение классов образцов алгоритму кластеризации методом *k* средних. Ключевая информация `DESCR` выделена жирным шрифтом:

```
In [3]: print(iris.DESCR)
.. _iris_dataset:

Iris plants dataset
--------------------

**Data Set Characteristics:**

    :Number of Instances: 150 (50 in each of three classes)
    :Number of Attributes: 4 numeric, predictive attributes and the class
    :Attribute Information:
        - sepal length in cm
        - sepal width in cm
        - petal length in cm
        - petal width in cm
        - class:
                - Iris-Setosa
                - Iris-Versicolour
                - Iris-Virginica

    :Summary Statistics:

    ============== ==== ==== ======= ===== ====================
                    Min  Max   Mean    SD   Class Correlation
    ============== ==== ==== ======= ===== ====================
    sepal length:   4.3  7.9   5.84   0.83    0.7826
    sepal width:    2.0  4.4   3.05   0.43   -0.4194
    petal length:   1.0  6.9   3.76   1.76    0.9490  (high!)
    petal width:    0.1  2.5   1.20   0.76    0.9565  (high!)
    ============== ==== ==== ======= ===== ====================

    :Missing Attribute Values: None
    :Class Distribution: 33.3% for each of 3 classes.
    :Creator: R.A. Fisher
    :Donor: Michael Marshall (MARSHALL%PLU@io.arc.nasa.gov)
    :Date: July, 1988
...
```

Проверка количества образцов, признаков и целевых значений

Количество образцов и признаков можно узнать из атрибута `shape` массива `data`, а количество целевых значений — из атрибута `shape` массива `target`:

```
In [4]: iris.data.shape
Out[4]: (150, 4)

In [5]: iris.target.shape
Out[5]: (150,)
```

Массив `target_names` содержит имена числовых меток массива. Выражение `target — dtype='<U10'` означает, что его элементами являются строки длиной не более 10 символов:

```
In [6]: iris.target_names
Out[6]: array(['setosa', 'versicolor', 'virginica'], dtype='<U10')
```

Массив `feature_names` содержит список строковых имен для каждого столбца в массиве `data`:

```
In [7]: iris.feature_names
Out[7]:
['sepal length (cm)',
 'sepal width (cm)',
 'petal length (cm)',
 'petal width (cm)']
```

14.7.2. Исследование набора данных Iris: описательная статистика в Pandas

Используем коллекцию `DataFrame` для исследования набора данных Iris. Как и в случае с набором данных California Housing, зададим параметры pandas для форматирования столбцового вывода:

```
In [8]: import pandas as pd

In [9]: pd.set_option('max_columns', 5)

In [10]: pd.set_option('display.width', None)
```

Создадим коллекцию `DataFrame` с содержимым массива `data`, используя содержимое массива `feature_names` как имена столбцов:

```
In [11]: iris_df = pd.DataFrame(iris.data, columns=iris.feature_names)
```

Затем добавим столбец с названием вида для каждого из образцов. Трансформация списка в следующем фрагменте использует каждое значение в массиве `target` для поиска соответствующего названия в массиве `target_names`:

```
In [12]: iris_df['species'] = [iris.target_names[i] for i in iris.target]
```

Воспользуемся pandas для идентификации нескольких образцов. Как и прежде, если pandas выводит \ справа от имени столбца, это означает, что в выводе остаются столбцы, которые будут выведены ниже:

```
In [13]: iris_df.head()
Out[13]:
   sepal length (cm)  sepal width (cm)  petal length (cm)  \
0                5.1               3.5                1.4
1                4.9               3.0                1.4
2                4.7               3.2                1.3
3                4.6               3.1                1.5
4                5.0               3.6                1.4
   petal width (cm) species
0               0.2  setosa
1               0.2  setosa
2               0.2  setosa
3               0.2  setosa
4               0.2  setosa
```

Вычислим некоторые показатели описательной статистики для числовых столбцов:

```
In [14]: pd.set_option('precision', 2)

In [15]: iris_df.describe()
Out[15]:
       sepal length (cm)  sepal width (cm)  petal length (cm)  \
count             150.00            150.00             150.00
mean                5.84              3.06               3.76
std                 0.83              0.44               1.77
min                 4.30              2.00               1.00
25%                 5.10              2.80               1.60
50%                 5.80              3.00               4.35
75%                 6.40              3.30               5.10
max                 7.90              4.40               6.90
```

```
       petal width (cm)
count            150.00
mean               1.20
std                0.76
min                0.10
25%                0.30
50%                1.30
75%                1.80
max                2.50
```

Вызов метода `describe` для столбца `'species'` подтверждает, что он содержит три уникальных значения. Нам заранее известно, что данные состоят из трех классов, к которым относятся образцы, хотя в машинном обучении без учителя это и не всегда так.

```
In [16]: iris_df['species'].describe()
Out[16]:
count        150
unique         3
top       setosa
freq          50
Name: species, dtype: object
```

14.7.3. Визуализация набора данных функцией pairplot

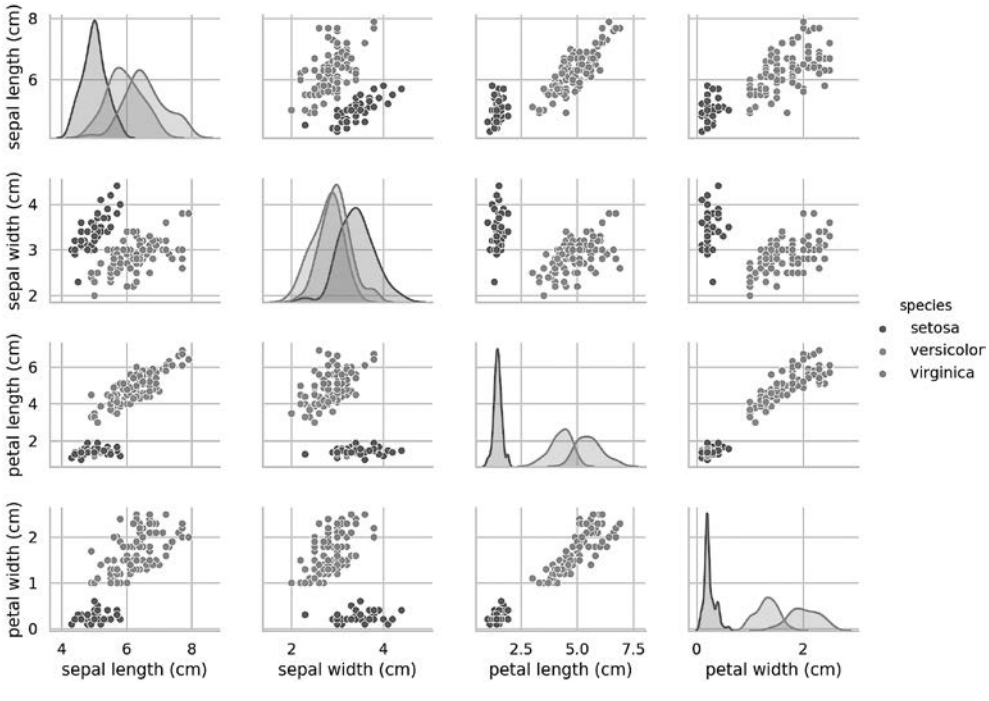
Проведем визуализацию признаков в этом наборе данных. Один из способов извлечь информацию о ваших данных — посмотреть, как признаки связаны друг с другом. Набор данных имеет четыре признака. Мы не сможем построить диаграмму соответствия одного признака с тремя другими на одной диаграмме. Тем не менее можно построить диаграмму, на которой будет представлено соответствие между двумя признаками. Фрагмент [20] использует функцию `pairplot` библиотеки Seaborn для создания таблицы диаграмм, на которых каждый признак сопоставляется с одним из других признаков:

```
In [17]: import seaborn as sns

In [18]: sns.set(font_scale=1.1)

In [19]: sns.set_style('whitegrid')

In [20]: grid = sns.pairplot(data=iris_df, vars=iris_df.columns[0:4],
    ...:     hue='species')
    ...:
```

Ключевые аргументы:

- `data` — коллекция `DataFrame`[1] с набором данных, наносимым на диаграмму;
- `vars` — последовательность с именами переменных, наносимых на диаграмму. Для коллекции `DataFrame` она содержит имена столбцов. В данном случае используются первые четыре столбца `DataFrame`, представляющие длину (ширину) наружной доли околоцветника и длину (ширину) внутренней доли околоцветника соответственно;
- `hue` — столбец коллекции `DataFrame`, используемый для определения цветов данных, наносимых на диаграмму. В данном случае данные окрашиваются в зависимости от вида ирисов.

Предыдущий вызов `pairplot` строит следующую таблицу диаграмм 4 × 4:



[1] Также может использоваться двумерный массив или список.