实验介绍

1.实验内容

本实验介绍K均值聚类算法。并通过实验来了解二分k-均值算法。

2.实验目标

通过本实验掌握kMeans聚类算法。

3.实验知识点

- 聚类

4.实验环境

- python 3.6.5

5.预备知识

- 初等数学知识
- Linux命令基本操作
- Python编程基础

准备工作

点击屏幕右上方的下载实验数据模块，选择下载kmeans_algo.tgz到指定目录下，然后再依次选择点击上方的File->Open->Upload,上传刚才下载的数据集压缩包，再使用如下命令解压：

In [1]:
```
!tar -zxvf kmeans_algo.tgz
```

```
kmeans_algo/
kmeans_algo/testSet.txt
kmeans_algo/testSet2.txt
```

【原理】无监督学习

从本节开始，我们进入了无监督学习的深深海洋。在监督学习中，即我们讲过的分类和回归，其目标变量的值是已知的。但在无监督学习中，目标变量事先并不存在。

与之前"对于输入数据X能预测变量Y"不同的是，这里要回答的问题是："从数据X中能发现什么？"

【原理】聚类算法

我们先来介绍一下无监督学习中的聚类方法，聚类即将相似特征的数据聚集在一起，归到同一个簇中，它有点像全自动分类。聚类方法几乎可以应用于所有的数据对象，簇内的对象越相似，聚类效果越好。

用一个例子来帮助理解：

目前很常见的就是各个购物APP会为用户推荐商品，那么这个是怎么实现的呢？

APP会先收集用户的搜索记录，浏览记录等数据，因为这些数据都与用户的购物意向息息相关。然后，将这些信息输入到某个聚类算法中。接着，对聚类中的每一个簇，精心的选择，为其推荐相应的商品。最后，观察上述做法是否有效。

聚类和分类最大的不同在于，分类的目标事先已知，而聚类则不一样。聚类产生的结果与分类相同，而只是类别没有预先定义。也因此被称为无监督分类。

【原理】K-means聚类算法

在本节，我们主要介绍K-均值聚类算法，并用该算法对数据进行分组。

在介绍K-均值聚类算法前，我们先讨论一下簇识别(cluster identification)。簇识别给出聚类结果的含义，即告诉我们每堆相似的数据到底是什么。

我们已经知道聚类是将相似数归到一个簇中，那么如何度量相似呢？其取决于所选择的相似度计算方法。

接下来，开始我们对K-means聚类算法的学习！

【实验】K-均值聚类算法

K-均值是发现给定数据的k个簇的算法。而簇个数k是用户给定的，每个簇会通过其质心(centroid)，即簇中所有点的中心来描述。

我们先来了解一下该算法的工作流程：

```
随机确定k个初始点作为质心
当任意一个点的簇分配结果发生改变时：
    为每个点寻找距其最近的质心
    将其分配给该质心所对应的簇
    将每个簇的质心更新为该簇所有点的平均值
```

在算法的工作流程中，我们提到了寻找距其最近的质心。那么如何计算“最近”的距离呢？我们可以使用任何可以度量距离的计算方法。但不同的计算方法会影响数据集上K-均值算法的性能。

本节我们使用的距离函数为欧氏距离。

$$\rho = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}$$

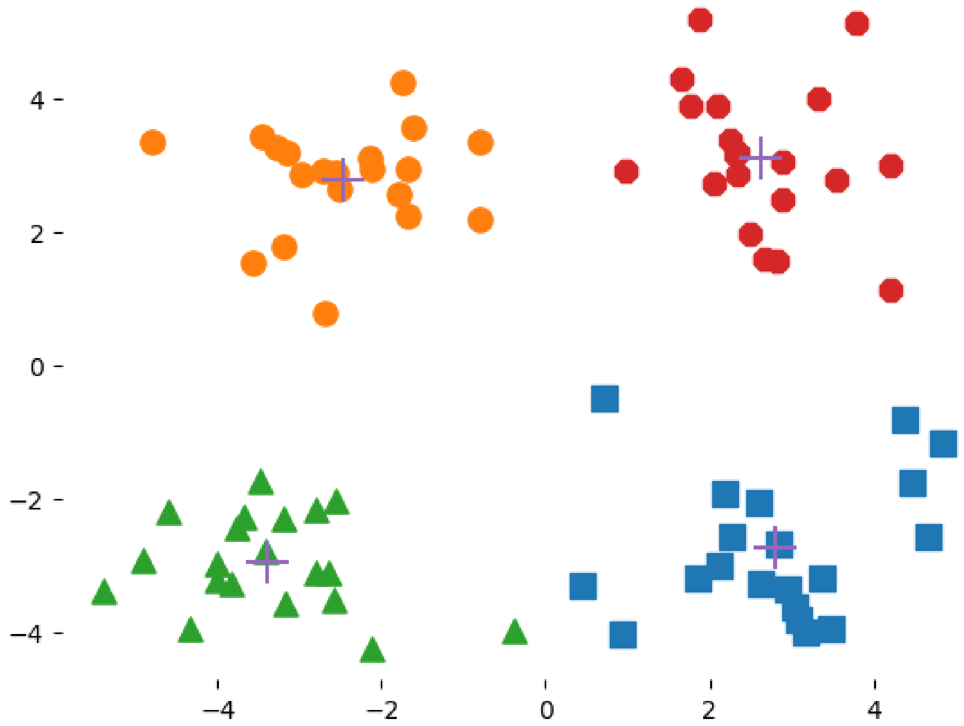
下面给出该算法的代码实现。

【练习】代码实现

In [6]:
```python
import matplotlib.pyplot as plt
from numpy import *


def loadDataSet(fileName):
    """加载数据集

    Args:
        fileName: 文件名
    Returns:
        dataMat:数据列表
    """
    dataMat = []
    fr = open(fileName)
    for line in fr.readlines():
        curLine = line.strip().split('\t')
        fltLine = list(map(float, curLine))  # 将数据转换为float型数据
        dataMat.append(fltLine)
    return dataMat


def distEclud(vecA, vecB):
    """计算向量欧氏距离

    Args:
        vecA: 向量A
        vecB: 向量B
    Returns:
        dist: 欧氏距离
    """
    #实现使用距离计算公式并返回dist
    dist = sqrt(sum(power(vecA - vecB, 2)))
    # dist = linalg.norm(vecA-vecB)
    return dist


def randCent(dataSet, k):
    """为给定数据集构建一个包含k个随机质心的集合

    Args:
        dataSet: 数据集
        k: 质心个数
    Returns:
        centroids: 质心列表
    """
    n = shape(dataSet)[1]
    centroids = mat(zeros((k, n)))  #创建存储质心的矩阵, 初始化为0
    for j in range(n):  #随机质心必须再整个数据集的边界之内
        minJ = min(dataSet[:, j])
        rangeJ = float(max(dataSet[:, j]) - minJ)  #通过找到数据集每一维的最小和最大值
        centroids[:, j] = mat(minJ + rangeJ * random.rand(k, 1))  #生成0到1之间的随机数, 确保质心落在边界之内
    return centroids


def kMeans(dataSet, k, distMeas=distEclud, createCent=randCent):
    """K-均值算法

    Args:
        dataSet: 数据集
        k: 簇个数
        distMeas: 距离计算函数
        createCent: 创建初始质心函数
    Returns:
        centroids: 质心列表
        clusterAsment: 簇分配结果矩阵
    """
    #确定数据集中数据点的总数
    m = shape(dataSet)[0]
    #创建矩阵来存储每个点的簇分配结果,第一列记录簇索引值, 第二列存储误差
    clusterAsment = mat(zeros((m, 2)))
    #创建初始质心
    centroids = createCent(dataSet, k)
```

```
    #标志变量，若为True，则继续迭代
    clusterChanged = True
    while clusterChanged:
        clusterChanged = False
        #遍历所有数据找到距离每个点最近的质心
        for i in range(m):
            # 初始化最小距离为inf(无穷大) 索引为负
            min_dist = inf
            min_index = -1
            #遍历所有质心
            for j in range(k):
                #针对当前数据点，计算质心与数据点之间的距离
                #注意以行为开头 即 行向量 即对每个数据点计算其到每个类中心点的欧氏距离
                distance = distMeas(centroids[j, :], dataSet[i, :])
                if distance < min_dist:
                    # 每次进行判断是否比上次距离更小 进行存储更小的距离
                    # 直至比较到最后取到最小距离 【不保存所有距离，只保存最小距离】
                    min_dist = distance
                    min_index = j
            # 如果索引即 该数据点的归属类（簇）发生了改变 就继续进行循环
            if clusterAssment[i, 0] != min_index:
                clusterChanged = True
            #将数据点分配到距其最近的簇，并保存距离平方和
            clusterAssment[i, :] = min_index, min_dist ** 2
        #对每一个簇
        for cent in range(k):
            #得到该簇中所有点的值（找到 当前类质心 下的所有数据点）
            all_data = dataSet[nonzero(clusterAssment[:, 0].A == cent)[0]]  # .A 将矩阵转化为数组
            #计算所有点的均值并更新为质心
            centroids[cent, :] = mean(all_data, axis=0)
    return centroids, clusterAssment


def drawDataSet(dataMat, centList, myNewAssments, k):
    """绘图

    Args:
        centList: 质心列表
        myNewAssments: 簇列表
        dataMat: 数据集
        k: 簇个数
    Returns:
        null
    """
    fig = plt.figure()
    rect = [0.1, 0.1, 0.8, 0.8]  #绘制矩形
    scatterMarkers = ['s', 'o', '^', '8', 'p', 'd', 'v', 'h', '>', '<']  #构建标记形状的列表用于绘制散点图
    ax1 = fig.add_axes(rect, label='ax1', frameon=False)
    for i in range(k):  #遍历每个簇
        ptsInCurrCluster = dataMat[nonzero(myNewAssments[:, 0].A == i)[0], :]
        markerStyle = scatterMarkers[i % len(scatterMarkers)]  #使用索引来选择标记形状
        ax1.scatter(ptsInCurrCluster[:, 0].flatten().A[0], ptsInCurrCluster[:, 1].flatten().A[0], marker=marke
                    s=90)
    ax1.scatter(centList[:, 0].flatten().A[0], centList[:, 1].flatten().A[0], marker='+', s=300)  #使用"+"来
    plt.show()


if __name__ == '__main__':
    dataMat = mat(loadDataSet('kmeans_algo/testSet.txt'))
    centList, myNewAssments = kMeans(dataMat, 4)
    print(centList)
    drawDataSet(dataMat, centList, myNewAssments, 4)
```

```
[[ 2.80293085 -2.7315146 ]
 [-2.46154315  2.78737555]
 [-3.38237045 -2.9473363 ]
 [ 2.6265299   3.10868015]]
```



可以看到，上面的结果给出了4个质心，且经过5次迭代之后K-均值算法收敛，并在图中可以看到我们的簇分布。

[注]由于质心随机选择，运行结果可能有所不同，但每个质心列表中应有4个质心，即最终分为4个簇。

【实验】使用后处理来提高聚类性能

到目前为止，我们看到K-均值聚类算法进行的很顺利，但还有些事情我们需要注意一下。

在最开始的时候，我们随机指定了k个质心，这导致数据最开始就被分成了k个簇，不断的更新每个簇，最终只能收敛到簇内的局部最小值，而非全局最小值，即最好结果。

前面提到过用户可以指定簇的个数k值，那么问题来了。用户如何才能知道，选择的k值是否合适？生成的簇的结果是否好呢?

即我们需要一个指标来度量聚类质量。在包含簇分配结果的矩阵中保存着每个点的误差(该点到质心的距离平方值)。

一种用于度量聚类效果的指标是SSE（sum of squared error,误差平方和），sse值越小表示数据点越接近它的质心，聚类效果越好。因为对误差取了平方，因此距离质心较远的点所占的比重会更大。

一种肯定可以降低sse值的方法是：增加簇的个数，但这并不会对数据分组有什么好的效果。聚类的目标是保持簇个数不变的情况下提高簇的质量。

还有一种方法是对生成的簇进行后处理。在保持簇总数不变的情况下，对某两个簇进行合并。具体做法是合并最近的质心，或者合并两个使得sse增幅最小的质心。

【实验】结果分析

K-均值聚类

优点：容易实现

缺点：可能收敛到局部最小值，在大规模数据集上收敛较慢

使用数据类型：数值型数据

接下来，我们将讨论利用上述簇划分技术得到更好的聚类结果的方法。快进入下一节吧。

【实验】二分K-均值算法

为克服K-均值算法收敛于局部最小值的问题，本节我们介绍一种二分K-均值(bisecting K-means)的算法。

该算法首先将所有点看作一个簇，然后将该簇一分为二。之后选择其中一个簇继续进行划分，选择哪一个簇则取决于对其划分是否可以最大程度降低SSE的值。

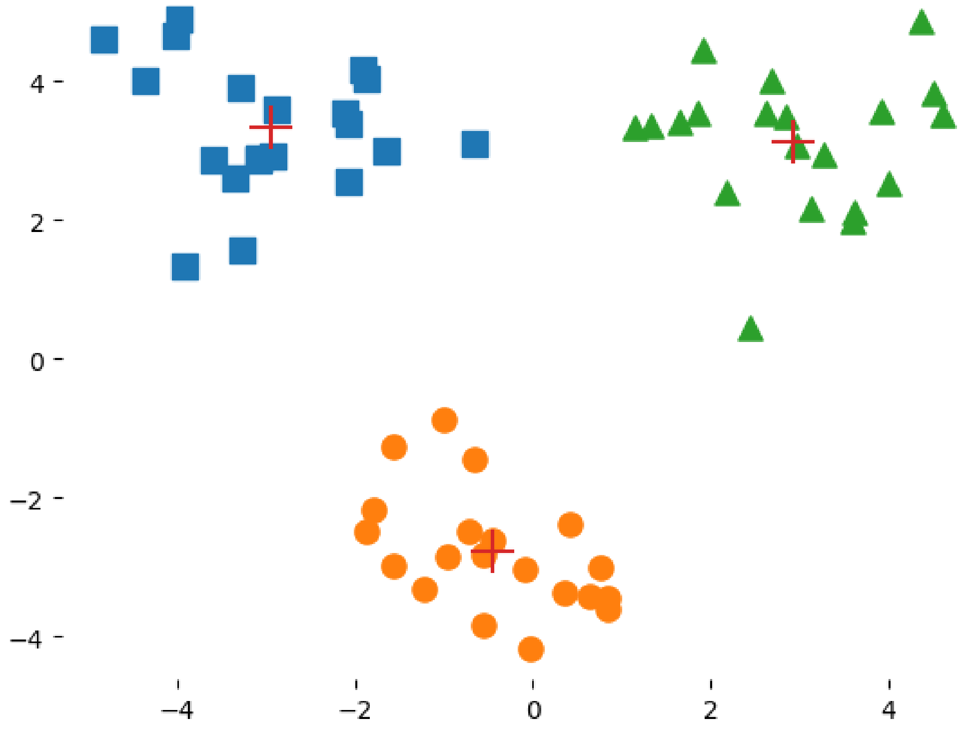
可以看出该算法是基于SSE的划分过程。最终划分的簇个数是用户指定的簇数目。

【练习】代码实现

话不多说，我们按照该算法的工作流程给出以下代码。

```python
In [7]: def biKmeans(dataSet, k, distMeas=distEclud):
            """函数说明：二分K-均值聚类算法

            Args:
                dataSet: 数据集
                k: 期望簇个数
                distMeas: 距离计算函数
            Returns:
                mat(centList): 质心列表矩阵
                clusterAssment: 聚类结果
            """
            m = shape(dataSet)[0]  #得到数据集中样本点的个数
            clusterAssment = mat(zeros((m, 2)))  #创建存储每个样本点的簇信息
            centroid0 = mean(dataSet, axis=0).tolist()[0]  #最初将所有的数据看作一个簇，计算其均值 -> 计算整个数据集的
            centList = [centroid0]  #创建一个初始化簇，并使用一个列表来保存所有质心

            for j in range(m):  #遍历所有数据
                clusterAssment[j, 1] = distMeas(mat(centroid0), dataSet[j, :]) ** 2  #计算每个样本点与质点的距离（距离
            # 尝试划分已有的每一个簇,寻找使得SSE降幅最大的那个簇,然后对其进行2-Means聚类划分
            while (len(centList) < k):  #判断是否已经划分到用户指定的簇个数
                #将最小SSE设为无穷大
                lowestSSE = inf
                #遍历所有簇
                for i in range(len(centList)):  #尝试划分每一个簇
                    #得到该簇所有数据的值
                    all_data = dataSet[nonzero(clusterAssment[:, 0].A == i)[0], :]  #选择每一个簇中的所有点，作为一个
                    #在给定的簇上面进行K-均值聚类（k=2）
                    centroidMat, splitClustAss = kMeans(all_data, 2)  #将该簇用kMeans一分为二，给出质心，分配的质心和
                    #计算被划分的数据的误差
                    sseSplit = sum(splitClustAss[:, 1])
                    #计算剩余数据的误差
                    sseNoSplit = sum(clusterAssment[nonzero(clusterAssment[:, 0].A != i)[0], 1])
                    print(f"划分数据的误差, 未划分数据的误差: {sseSplit}, {sseNoSplit}")
                    #如果该划分的误差平方和（SSE）值最小
                    if (sseSplit + sseNoSplit) < lowestSSE:
                        #将本次划分结果保存
                        bestCentToSplit = i
                        bestNewCents = centroidMat.copy()
                        bestClustAss = splitClustAss.copy()  #该簇的划分情况
                        lowestSSE = sseSplit + sseNoSplit
                    #由于使用二分均值聚类，会得到两个编号分别为0和1的结果簇
                    #需要将这些簇编号更新为新加簇的编号
                    bestClustAss[nonzero(bestClustAss[:, 0].A == 1)[0], 0] = len(centList)  #新加簇的编号
                    bestClustAss[nonzero(bestClustAss[:, 0].A == 0)[0], 0] = bestCentToSplit  #划分簇的编号

                print('最佳划分簇为: ', bestCentToSplit)
                print('最佳簇的长度为: ', len(bestCentToSplit))
                #更新质心列表
                centList[bestCentToSplit] = bestNewCents[0, :].tolist()[0]
                #将新的质心添加至列表
                centList.append(bestNewCents[1, :].tolist()[0])
                #更新新的簇分配结果
                clusterAssment[nonzero(clusterAssment[:, 0].A == bestCentToSplit)[0], :] = bestClustAss
            return mat(centList), clusterAssment


        if __name__ == '__main__':
            dataMat = mat(loadDataSet('kmeans_algo/testSet2.txt'))
            centList, myNewAssments = kMeans(dataMat, 3)
            print(centList)
            drawDataSet(dataMat, centList, myNewAssments, 3)
```

```
[[-2.94737575  3.3263781 ]
 [-0.45965615 -2.7782156 ]
 [ 2.93386365  3.12782785]]
```



现在我们运行下程序，看到聚类会收敛到全局最小值。

实验总结

本节我们介绍了K均值聚类算法，并实现了二分K-均值聚类算法，您应该能达到以下两个目标：

1. 掌握K均值聚类算法。
2. 学会实现相应算法。

参考文献与延伸阅读

参考资料:

1.哈林顿，李锐. 机器学习实战 : Machine learning in action[M]. 人民邮电出版社, 2013.
2.周志华. 机器学习:Machine learning[M]. 清华大学出版社, 2016.

延伸阅读

1.李航. 统计学习方法[M]. 清华大学出版社, 2012.