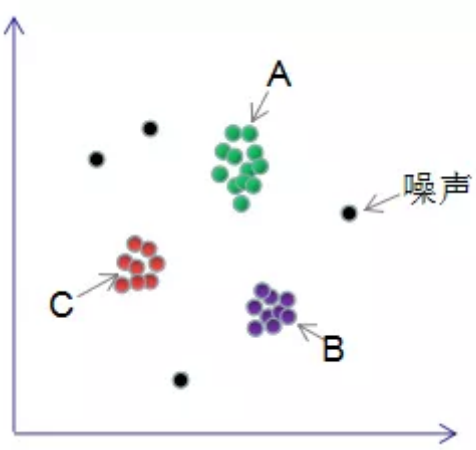
DBSCAN聚类算法原理总结

原创 石头 机器学习算法那些事 2019-06-05

DBSCAN是基于密度空间的聚类算法，在机器学习和数据挖掘领域有广泛的应用，其聚类原理通俗点讲是每个簇类的密度高于该簇类周围的密度，噪声的密度小于任一簇类的密度。如下图簇类ABC的密度大于周围的密度，噪声的密度低于任一簇类的密度，因此DBSCAN算法也能用于异常点检测。本文对DBSCAN算法进行了详细总结 。



目录

1. DBSCAN算法的样本点组成

DBSCAN算法处理后的聚类样本点分为：核心点（core points），边界点（border points）和噪声点（noise），这三类样本点的定义如下：

核心点：对某一数据集D，若样本p的ε-领域内至少包含MinPts个样本（包括样本p），那么样本p称核心点。

即：

$$N_\varepsilon(p) \geq MinPts$$

称p为核心点，其中ε-领域$N_\varepsilon(p)$的表达式为：

$$N_\varepsilon(p) = \{q \in D \mid dist(p,q) \leq \varepsilon\}$$

边界点：对于非核心点的样本b，若b在任意核心点p的ε-领域内，那么样本b称为边界点。

即：

$$\begin{cases} p、\text{b分别为核心点与非核心点} \\ \text{b} \in N_\varepsilon(p) \end{cases}$$

称b为边界点。

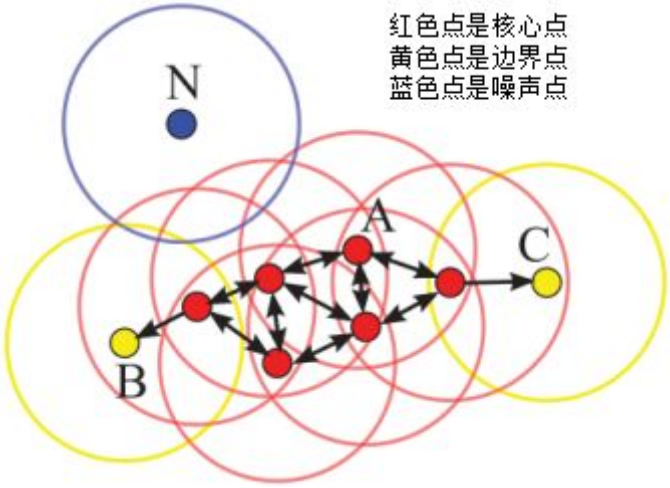
噪声点：对于非核心点的样本n，若n不在任意核心点p的ε-领域内，那么样本n称为噪声点。

即：

$$\begin{cases} p、\text{n分别为核心点与非核心点} \\ \text{n} \notin N_\varepsilon(p) \end{cases}$$

称n为噪声点。

假设MinPts=4，如下图的核心点、非核心点与噪声的分布：



2. DBSCAN算法原理

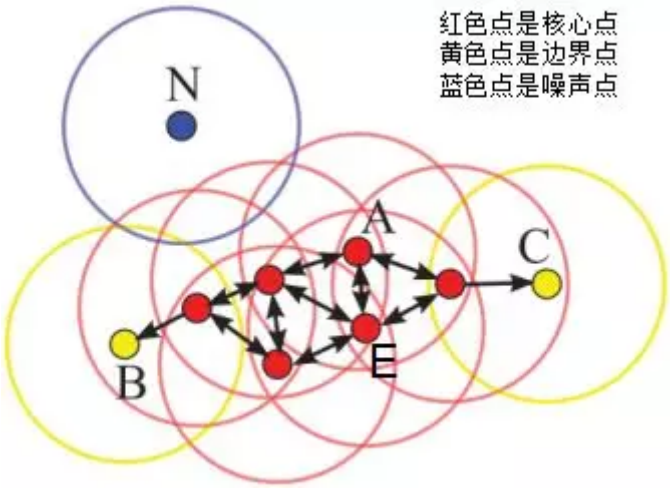
由上节可知，DBSCAN算法划分数据集D为核心点，边界点和噪声点，并按照一定的连接规则组成簇类。介绍连接规则前，先定义下面这几个概念：

密度直达（directly density-reachable）：若q处于p的ε-邻域内，且p为核心点，则称q由p密度直达；

密度可达（density-reachable）：若q处于p的ε-邻域内，且p，q均为核心点，则称q的邻域点由p密度可达；

密度相连（density-connected）：若p，q均为非核心点，且p，q处于同一个簇类中，则称q与p密度相连。

下图给出了上述概念的直观显示（MinPts）：



其中核心点E由核心点A密度直达，边界点B由核心点A密度可达，边界点B与边界点C密度相连，N为孤单的噪声点。

DBSCAN是基于密度的聚类算法，原理为：只要任意两个样本点是密度直达或密度可达的关系，那么该两个样本点归为同一簇类，上图的样本点ABCE为同一簇类。因此，DBSCAN算法从数据集D中随机选择一个核心点作为“种子”，由该种子出发确定相应的聚类簇，当遍历完所有核心点时，算法结束。

DBSCAN算法的伪代码：

```
# DB为数据集，distFunc为样本间的距离函数
# eps为样本点的领域，MinPts为簇类的最小样本数
DBSCAN(DB,distFunc,eps,minPts){
    C = 0                                                # 初始化簇类个数
    # 数据集DB被标记为核心点和噪声点
    for each point P in database DB{                     #  遍历数据集
        if label(P) != undefined then continue          # 如果样本已经被标记了，跳过此次循环
        Neighbors N = RangeQuery(DB,distFunc,P,eps)   # 计算样本点P在eps邻域内的个数，包含样本点本
        if |N| < minPts then {                           # 密度估计
            label(P) = Noise                              # 若样本点P的eps邻域内个数小于MinPts，则为噪
            continue
        }
        C = C + 1              # 增加簇类个数
        label(P) = C           # 初始化簇类标记
        Seed set S = N \{P}    # 初始化种子集，符号\表示取补集
        for each point Q in S{
            if label(Q) = Noise then label(Q) = C    # 核心点P的邻域为噪声点，则该噪声点重新标记为
            if label(Q) != undefined then continue  # 如果样本已经被标记了(如上次已经被标记的噪声
            label(Q) = C                      # 核心点P的邻域都标记为簇类C
            Neighbors N = RangeQuery(DB,distFunc,Q,eps)   # 计算样本Q的邻域个数
            if N >= minPts then{                             # 密度检测，检测Q是否为核心样本
                S = S.append(N)                  # 邻域Q样本添加到种子集
            }
        }
    }
}
```

其中计算样本Q邻域个数的伪代码：

```
# 计算样本Q的eps邻域集
RangeQuery(DB,distFunc,Q,eps){
    Neighbors = empty list  # 初始化Q样本的邻域为空集
    for each point P in database DB{
        if distFunc(Q,P) <= eps then {
            Neighbors = Neighbors.append(Q)    # 若Q在P的eps邻域内，则邻域集增加该样本
        }
    }
    return Neighbors
}
```

其中计算样本P与Q的距离函数dist(P,Q)不同，邻域形状也不同，若我们使用的距离是曼哈顿（manhattan）距离，则邻域性状为矩形；若使用的距离是欧拉距离，则邻域形状为圆形。

DBSCAN算法可以抽象为以下几步：

1）找到每个样本的ε-邻域内的样本个数，若个数大于等于MinPts，则该样本为核心点；

2）找到每个核心样本密度直达和密度可达的样本，且该样本亦为核心样本，忽略所有的非核心样本；

3）若非核心样本在核心样本的ε-邻域内，则非核心样本为边界样本，反之为噪声。

3. DBSCAN算法的参数估计

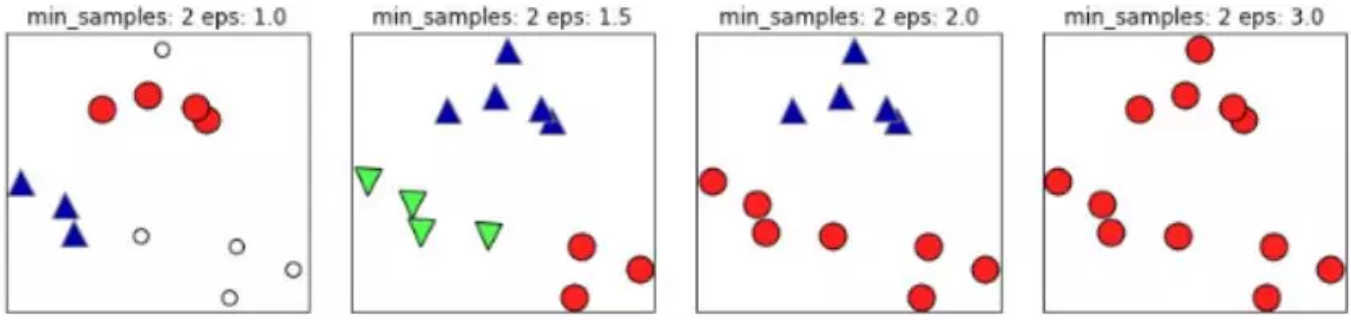
由上一节可知，DBSCAN主要包含两个参数：

ε：两个样本的最小距离，它的含义为：如果两个样本的距离小于或等于值ε，那么这两个样本互为邻域。

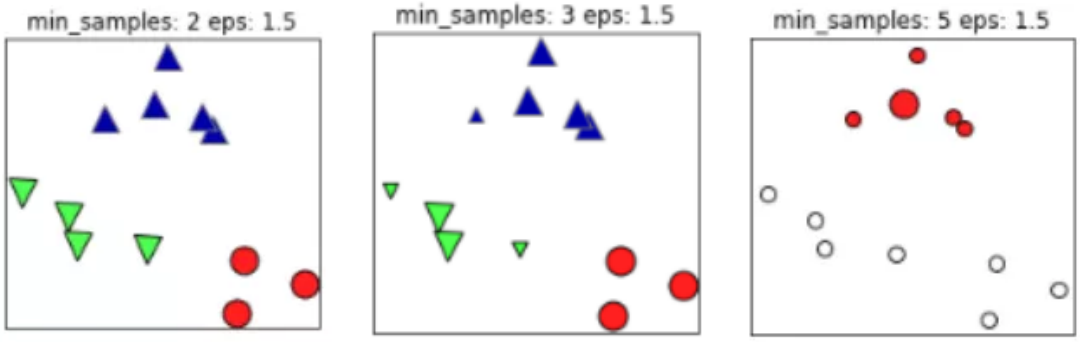
MinPts：形成簇类所需的最小样本个数，比如MinPts等于5，形成簇类的前提是至少有一个样本的ε-邻域大于等于5。

ε参数和MinPts参数估计：

如下图，如果ε值取的太小，部分样本误认为是噪声点（白色）；ε值取的多大，大部分的样本会合并为同一簇类。

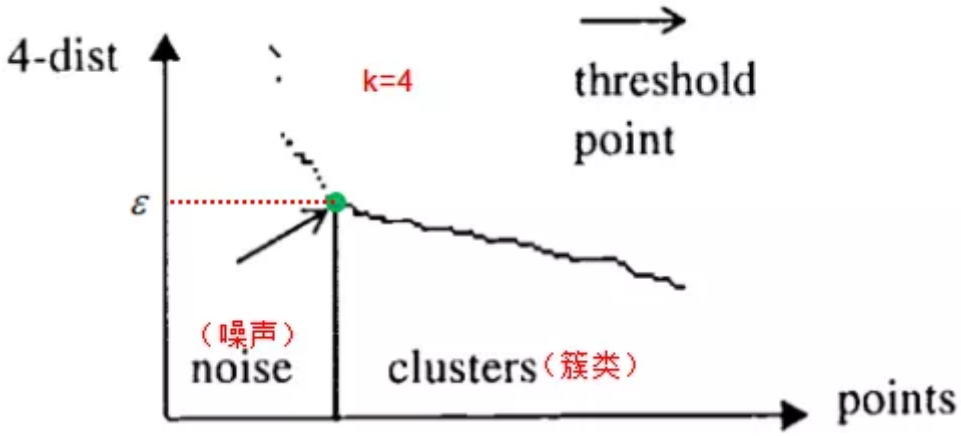


同样的，若MinPts值过小，则所有样本都可能为核心样本；MinPts值过大时，部分样本误认为是噪声点（白色），如下图：



根据经验，minPts的最小值可以从数据集的维数D得到，即$\min Pts \geq D+1$。若minPts=1，含义为所有的数据集样本都为核心样本，即每个样本都是一个簇类；若minPts≤2，结果和单连接的层次聚类相同；因此minPts必须大于等于3，因此一般认为minPts=2*dim，若数据集越大，则minPts的值选择的亦越大。

ε值常常用k-距离曲线（k-distance graph）得到，计算每个样本与所有样本的距离，选择第k个最近邻的距离并从大到小排序，得到k-距离曲线，曲线拐点对应的距离设置为ε，如下图：



由图可知或者根据k-距离曲线的定义可知：样本点第k个近邻距离值小于ε归为簇类，大于ε的样本点归为噪声点。根据经验，一般选择ε值等于第（minPts-1）的距离，计算样本间的距离前需要对数据进行归一化，使所有特征值处于同一尺度范围，有利于ε参数的设置。

如果(k+1)-距离曲线和k-距离曲线没有明显差异，那么minPts设置为k值。例如k=4和k>4的距离曲线没有明显差异，而且k>4的算法计算量大于k=4的计算量，因此设置MinPts=4。

4. DBSCAN算法实战

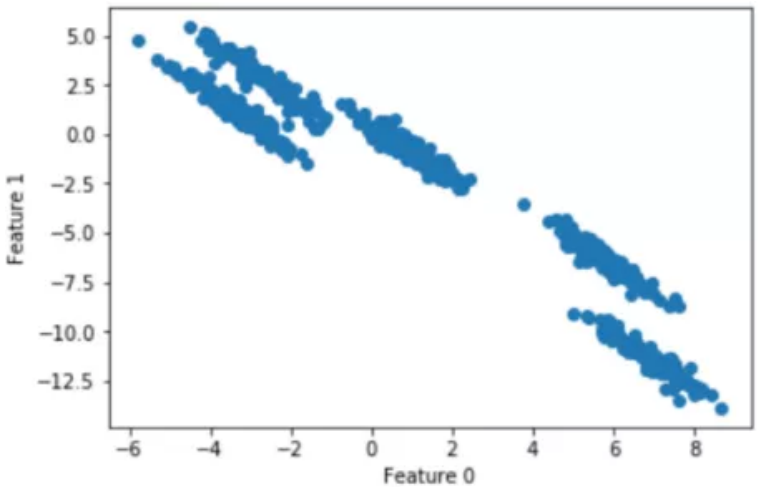
k-means聚类算法假设簇类所有方向是同等重要的，若遇到一些奇怪的形状（如对角线）时，k-means的聚类效果很差，本节采用DBSCAN算法以及简单的介绍下如何去选择参数ε和MinPts。

随机生成五个簇类的二维数据：

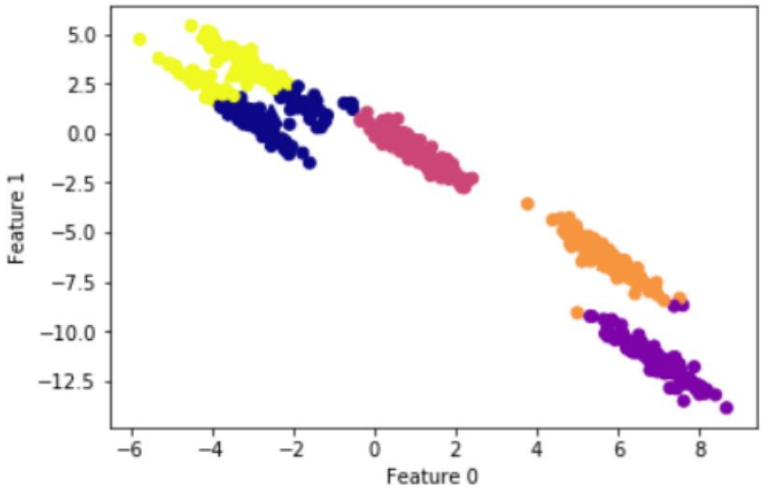
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.datasets import make_blobs
from sklearn.cluster import DBSCAN
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
```

```
# 生成随机簇类数据
X, y =make_blobs(random_state=170,n_samples=600,centers=5)
rng = np.random.RandomState(74)
# 数据拉伸
transformation = rng.normal(size=(2,2))
X = np.dot(X,transformation)
# 绘制延伸图
plt.scatter(X[:,0],X[:,1])
plt.xlabel("Feature 0")
plt.ylabel("Feature 1")
plt.show()
```

散点图为：



k-means聚类结果：



按照经验MinPts=2*ndims，因此我们设置MinPts=4。

为了方便参数ε的选择，我们首先对数据的特征进行归一化：

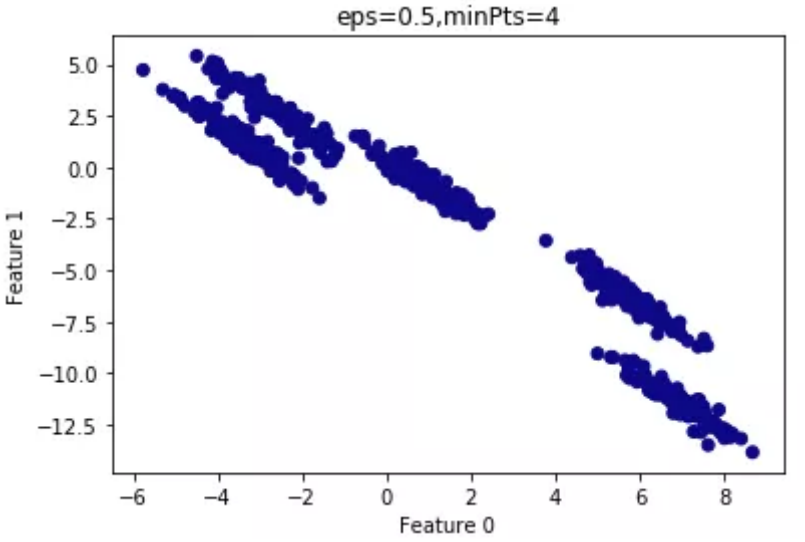
```
#特征归一化
scaler = StandardScaler()
X_scaled = scaler.fit_transform(X)
```

假设ε=0.5：

```
# dbscan聚类算法
t0=time.time()
dbscan = DBSCAN(eps=0.12,min_samples = 4)
clusters = dbscan.fit_predict(X_scaled)
```

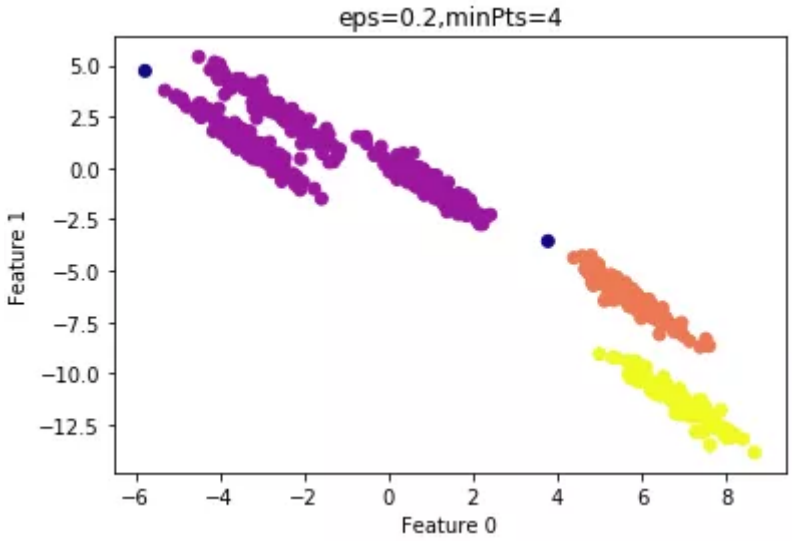
```
# 绘制dbscan聚类结果
plt.scatter(X[:,0],X[:,1],c=clusters,cmap="plasma")
plt.xlabel("Feature 0")
plt.ylabel("Feature 1")
plt.title("eps=0.5,minPts=4")
plt.show()
t1=time.time()
print(t1-t0)
```

查看聚类结果：



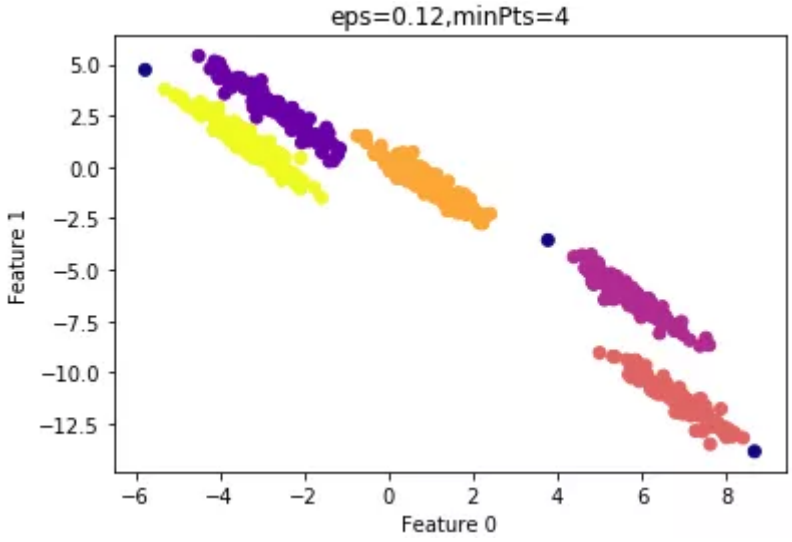
由上图可知，所有的样本都归为一类，因此ε设置的过大，需要减小ε。

设置ε=0.2的结果：



由上图可知，大部分样本还是归为一类，因此ε设置的过大，仍需要减小ε。

设置ε=0.12的结果：



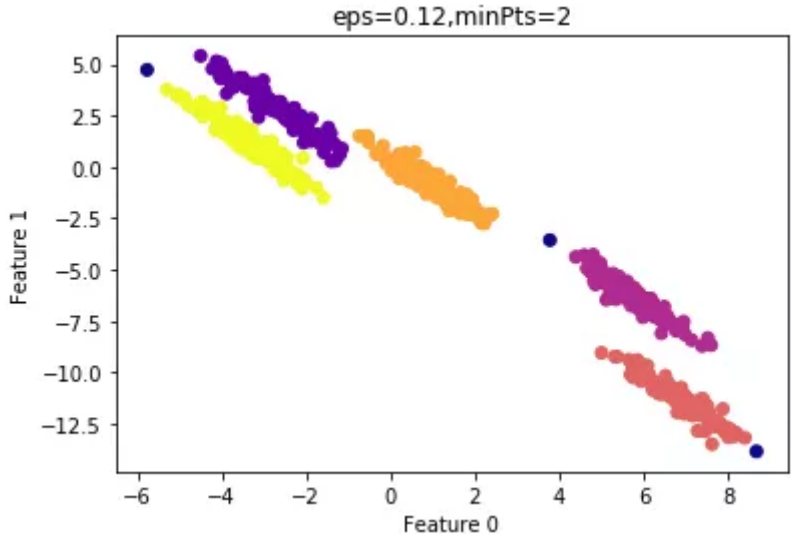
结果令人满意，看看聚类性能度量指数：

```
# 性能评价指标ARI
from sklearn.metrics.cluster import adjusted_rand_score
# ARI指数
print("ARI=",round(adjusted_rand_score(y,clusters),2))

#>
        ARI= 0.99
```

由上节可知，为了较少算法的计算量，我们尝试减小MinPts的值。

设置MinPts=2的结果：



其ARI指数为：0.99

算法的运行时间较minPts=4时要短，因此我们最终选择的参数：ε=0.12，minPts=4。

这是一个根据经验的参数优化算法，实际项目中，我们首先根据先验经验去设置参数的值，确定参数的大致范围，然后根据性能度量去选择最优参数。

5 DBSCAN算法的优缺点

优点：

1）DBSCAN不需要指定簇类的数量；

2）DBSCAN可以处理任意形状的簇类；

3）DBSCAN可以检测数据集的噪声，且对数据集中的异常点不敏感；

4）DBSCAN结果对数据集样本的随机抽样顺序不敏感（细心的读者会发现样本的顺序不一样，结果也可能不一样，如非核心点处于两个聚类的边界，若核心点抽样顺序不同，非核心点归于不同的簇类）；

缺点：

1）DBSCAN最常用的距离度量为欧式距离，对于高维数据集，会带来维度灾难，导致选择合适的ε值很难；

2）若不同簇类的样本集密度相差很大，则DBSCAN的聚类效果很差，因为这类数据集导致选择合适的minPts和ε值非常难，很难适用于所有簇类。

参考

https://en.wikipedia.org/wiki/DBSCAN#Parameter_estimation

https://towardsdatascience.com

A Density-Based Algorithm for Discovering Clusters

推荐阅读

k-means聚类算法原理总结

干货 | 非常全面的谱聚类算法原理总结

文章已于2019-06-05修改