Bisecting k-means聚类算法实现

2015-12-09 14:35:04　Yanjun

Bisecting k-means聚类算法，即二分k均值算法，它是k-means聚类算法的一个变体，主要是为了改进k-me算法随机选择初始质心的随机性造成聚类结果不确定性的问题，而Bisecting k-means算法受随机选择初始质心影响比较小。

首先，我们考虑在欧几里德空间中，衡量簇的质量通常使用如下度量：误差平方和（Sum of the Squared Error，简称SSE），也就是要计算执行聚类分析后，对每个点都要计算一个误差值，即非质心点到最近的质心的离。那么，既然每个非质心点都已经属于某个簇，也就是要计算每个非质心点到其所在簇的质心的距离，最后将些距离值相加求和，作为SSE去评估一个聚类的质量如何。我们的最终目标是，使得最终的SSE能够最小，也就一个最小化目标SSE的问题。在n维欧几里德空间，SSE形式化地定义，计算公式如下：

$$\mathrm{SSE}=\sum_{m=1}^{k}\sum_{p_i\in C_i} dist(p_i,c_i)^2=\sum_{m=1}^{k}\sum_{p_i\in C_i}\sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{n}_{C_i}}(p_{ij}-c_{ij})^2$$

Bisecting k-means聚类算法的基本思想是，通过引入局部二分试验，每次试验都通过二分具有最大SSE值的一簇，二分这个簇以后得到的2个子簇，选择2个子簇的总SSE最小的划分方法，这样能够保证每次二分得到的2个是比较优的（也可能是最优的），也就是这2个簇的划分可能是局部最优的，取决于试验的次数。

Bisecting k-means聚类算法的具体执行过程，描述如下所示：

1. 初始时，将待聚类数据集D作为一个簇C0，即C={C0}，输入参数为：二分试验次数m、k-means聚类的基本参数；
2. 取C中具有最大SSE的簇Cp，进行二分试验m次：调用k-means聚类算法，取k=2，将Cp分为2个簇：Ci1、Ci2，一共得到m个二分结果集合B={B1,B2,…,Bm}，其中，Bi={Ci1,Ci2}，这里Ci1和Ci2为每一次二分试验得到的2个簇；
3. 计算上一步二分结果集合B中，每一个划分方法得到的2个簇的总SSE值，选择具有最小总SSE的二分方法得到的结果：Bj={Cj1,Cj2}，并将簇Cj1、Cj2加入到集合C，并将Cp从C中移除；
4. 重复步骤2和3，直到得到k个簇，即集合C中有k个簇。

聚类算法实现

基于上面描述的聚类执行过程，使用Java实现Bisecting k-means聚类，代码如下所示：

```
01 @Override
02 public void clustering() {
03      // parse sample files
04      final List<Point2D> allPoints =
   Lists.newArrayList();
05      FileUtils.read2DPointsFromFiles(allPoints, "
   [\t,;\\s]+", inputFiles); // 从文件中读取二维坐标
   点，加入到集合allPoints中
06
07      final int bisectingK = 2;
08      int bisectingIterations = 0;
```

```
11      final Map<CenterPoint,
Set<ClusterPoint<Point2D>>> clusteringPoints =
Maps.newConcurrentMap(); // 最终的聚类结果集合
12      while(clusteringPoints.size() <= k) { // 当
得到k个簇，则算法终止
13          LOG.info("Start bisecting iterations:
#" + (++bisectingIterations) + ", bisectingK=" +
bisectingK + ", maxMovingPointRate=" +
maxMovingPointRate +
14                      ", maxInterations=" +
maxInterations + ", parallism=" + parallism);
15
16          // for k=bisectingK, execute k-means
clustering
17
18          // bisecting trials
19          KMeansClustering bestBisectingKmeans
= null;
20          double minTotalSSE = Double.MAX_VALUE;
21          for (int i = 0; i < m; i++) { // 执行
二分试验：调用k-means聚类算法，将输入的点集进行二
分，得到2个簇，试验执行m次
22              final KMeansClustering kmeans
= new KMeansClustering(bisectingK,
maxMovingPointRate, maxInterations, parallism);
23              kmeans.initialize(points);
24              // the clustering result should
have 2 clusters
25              kmeans.clustering();
26              double currentTotalSSE =
computeTotalSSE(kmeans.getCenterPointSet(),
kmeans.getClusteringResult()); // 计算一次二分试
验中总的SSE的值
27              if(bestBisectingKmeans == null) {
28                  bestBisectingKmeans =
kmeans;
29                  minTotalSSE =
currentTotalSSE;
30              } else {
31                  if(currentTotalSSE <
minTotalSSE) { // 记录总SSE最小的二分聚类，通过
kmeans保存二分结果
32                      bestBisectingKmeans =
kmeans;
33                      minTotalSSE =
currentTotalSSE;
34                  }
35              }
36              LOG.info("Bisecting trial <<" + i
+ ">> : minTotalSSE=" + minTotalSSE + ",
currentTotalSSE=" + currentTotalSSE);
37          }
38          LOG.info("Best biscting:
minTotalSSE="+ minTotalSSE);
39
40          // merge cluster points for choosing
cluster bisected again
41          int id =
generateNewClusterId(clusteringPoints.keySet()); //
每次执行k-means聚类，都多了一个簇，为多出的这个簇分配一
个编号
42          Set<CenterPoint> bisectedCentroids =
bestBisectingKmeans.getCenterPointSet(); // 二分
得到的2个簇的质心的集合
43          merge(clusteringPoints, id, bisectedCentroids,
bestBisectingKmeans.getClusteringResult().getClusteredPoints()); //
将二分得到的2个簇的集合，合并加入到最终结果的集合中
```

```
已经得到k个簇，算法终止
                    break;
               }

               // compute cluster to be bisected
               ClusterInfo cluster =
chooseClusterToBisect(clusteringPoints);
               // remove centroid from collected
clusters map
               clusteringPoints.remove(cluster.centroidToBisect);
               LOG.info("Cluster to be bisected: " +
cluster);

               points = Lists.newArrayList();
               for(ClusterPoint<Point2D> cp :
cluster.clusterPointsToBisect) {
                    points.add(cp.getPoint());
               }

               LOG.info("Finish bisecting iterations:
#" + bisectingIterations + ", clusterSize=" +
clusteringPoints.size());
          }

          // finally transform to result format
          Iterator<Entry<CenterPoint,
Set<ClusterPoint<Point2D>>>> iter =
clusteringPoints.entrySet().iterator();
          while(iter.hasNext()) { // 构造最终输出结果
的数据结构
               Entry<CenterPoint,
Set<ClusterPoint<Point2D>>> entry = iter.next();
               clusteredPoints.put(entry.getKey().getId(),
entry.getValue());
               centroidSet.add(entry.getKey());
          }
}
```

上面，我们调用chooseClusterToBisect方法区实现对具有最大的SSE的簇进行二分，具体选择的实现过程，代如下所示：

```
private ClusterInfo
chooseClusterToBisect(Map<CenterPoint,
Set<ClusterPoint<Point2D>>> clusteringPoints) {
          double maxSSE = 0.0;
          int clusterIdWithMaxSSE = -1;
          CenterPoint centroidToBisect = null;
          Set<ClusterPoint<Point2D>> clusterToBisect
= null;
          Iterator<Entry<CenterPoint,
Set<ClusterPoint<Point2D>>>> iter =
clusteringPoints.entrySet().iterator();
          while(iter.hasNext()) {
               Entry<CenterPoint,
Set<ClusterPoint<Point2D>>> entry = iter.next();
               CenterPoint centroid = entry.getKey();
               Set<ClusterPoint<Point2D>> cpSet =
entry.getValue();
               double sse = computeSSE(centroid,
cpSet); // 计算一个簇的SSE值
               if(sse > maxSSE) {
                    maxSSE = sse;
                    clusterIdWithMaxSSE =
centroid.getId();
                    centroidToBisect = centroid;
                    clusterToBisect = cpSet;
```

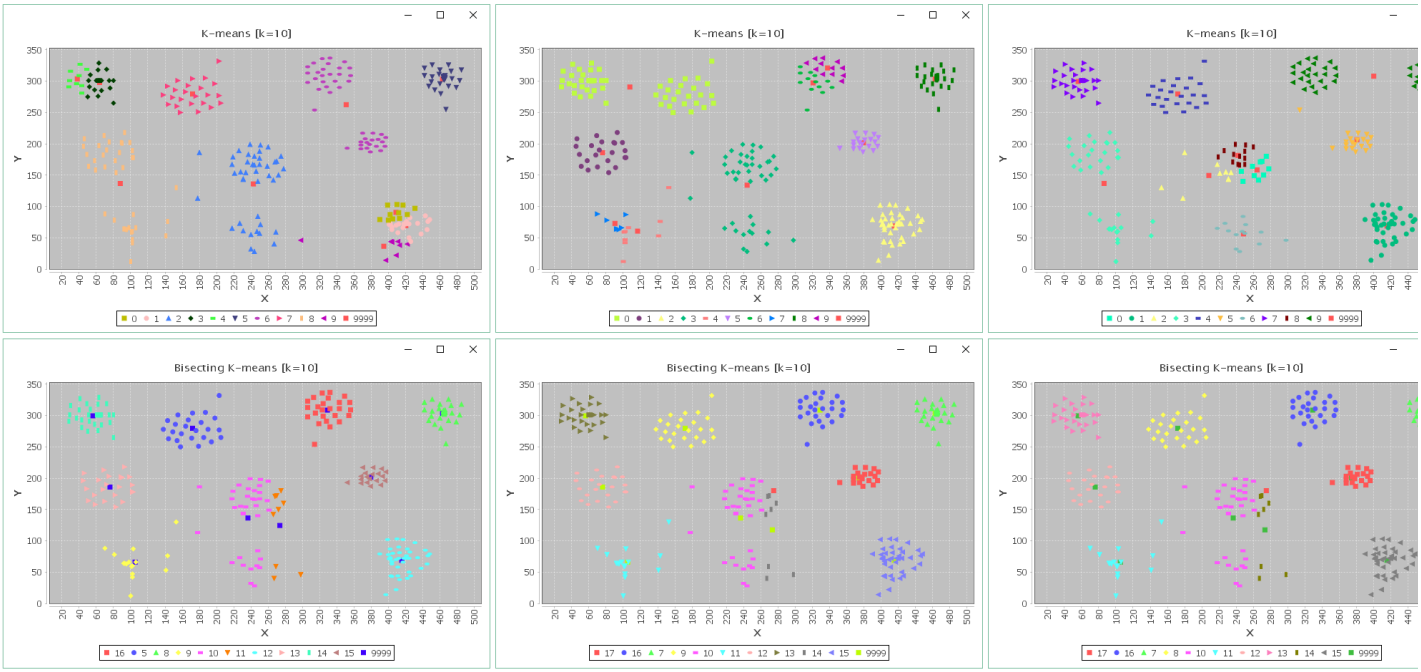
```
19        return new ClusterInfo(clusterIdWithMaxSSE,
centroidToBisect, clusterToBisect, maxSSE); //
将待分裂的簇的信息保存在ClusterInfo对象中
20    }
21
22    private double computeSSE(CenterPoint centroid,
Set<ClusterPoint<Point2D>> cpSet) { // 计算某个
簇的SSE
23        double sse = 0.0;
24        for(ClusterPoint<Point2D> cp : cpSet) {
25            // update cluster id for ClusterPoint
object
26            cp.setClusterId(centroid.getId());
27            double distance =
MetricUtils.euclideanDistance(cp.getPoint(),
centroid);
28            sse += distance * distance;
29        }
30        return sse;
31    }
```

在二分试验过程中，因为每次二分都生成2个新的簇，通过计算这2个簇的总SSE的值，通过迭代计算，找到一个部最小的总SSE对应的2个簇的划分方法，然后将聚类生成的2簇加入到最终的簇集合中，总SSE的计算法方法在computeTotalSSE方法中，如下所示：

```
01    private double computeTotalSSE(Set<CenterPoint>
centroids, ClusteringResult<Point2D>
clusteringResult) {
02        double sse = 0.0;
03        for(CenterPoint center : centroids) { // 计
算2个簇的总SSE值
04            int clusterId = center.getId();
05            for(ClusterPoint<Point2D> p :
clusteringResult.getClusteredPoints().get(clusterId))
{
06                double distance =
MetricUtils.euclideanDistance(p.getPoint(),
center);
07                sse += distance * distance;
08            }
09        }
10        return sse;
11    }
```

聚类效果对比

下面，我们对比一下，k-means算法与Bisecting k-means多次运行的聚类结果对比，如下图所示：



上图中，第一排是执行k-means聚类得到的效果图，第二排是执行Bisecting k-means聚类得到的效果图，其中
号为9999的点为质心点。第二排效果图看似多次计算质心没有变化，但是实际是变化的，只是质心点的位置比较
定，例如，下面是两组质心点：

```
462.9642857142857,303.5,7
172.0,279.625,8
236.54285714285714,136.257142857142
105.125,65.9375,11
75.91304347826087,185.7826086956522,12
56.03333333333333,299.53333333333336,13
273.5,117.5,14
415.5952380952381,68.71428571428571,15
329.04,308.68,16
374.35,200.55,17

172.0,279.625,5
462.9642857142857,303.5,8
105.125,65.9375,9
236.54285714285714,136.25714285714287,10
273.6666666666667,124.44444444444444,11
415.5952380952381,68.71428571428571,12
75.91304347826087,185.7826086956522,13
56.03333333333333,299.53333333333336,14
379.57894736842104,201.6315789473684,15
329.04,308.68,16
```

同k-means算法一样，Bisecting k-means算法不适用于非球形簇的聚类，而且不同尺寸和密度的类型的簇，
太适合。