20 K均值聚类

K-Means Clustering

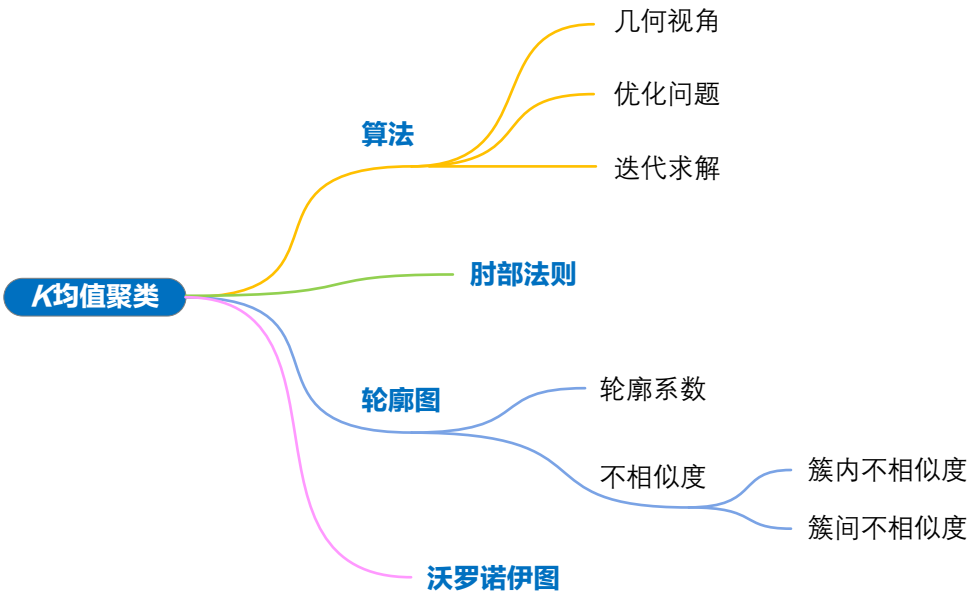
簇内距离和最小，迭代求解

几何是万物美的本原。

Geometry is the archetype of the beauty of the world.

—— 约翰内斯·开普勒 (Johannes Kepler) | 德国天文学家、数学家 | 1571 ~ 1630

- `numpy.cov()` 计算协方差矩阵
- `pandas.DataFrame.cov()` 计算数据帧协方差矩阵
- `scipy.spatial.Voronoi` 函数获得沃罗诺伊图相关数据
- `scipy.spatial.voronoi_plot_2d` 函数绘制沃罗诺伊图
- `sklearn.cluster.KMeans()` K 均值聚类算法函数；`model.fit()` 拟合数据，`model.predict()` 预测聚类标签，`model.cluster_centers_`，输出簇质心位置，`model.inertia_`输出簇 SSE 之和
- `sklearn.metrics.silhouette_score` 计算轮廓系数
- `yellowbrick.cluster.SilhouetteVisualizer` 函数绘制轮廓图



20.1 K均值聚类

K均值聚类 (*K*-means clustering) 的 K 不同于 k 近邻中的 k。

注意，本书第 2 章介绍的 **k近邻算法** (*k*-Nearest Neighbors, *k*-NN) 是有监督学习分类算法，样本数据有标签，它的 k 是指设定的近邻数量。

而 K 均值聚类则是无监督学习聚类算法，样本数据无标签，K 是指将给定样本集 Ω 划分成 K 簇 $C = \{C_1, C_2, ... C_K\}$。

原理

图 1 所示为 K 均值算法原理图。K 均值聚类的每一簇样本数据用**簇质心** (cluster centroid) 来描述。比如，二聚类问题有两个簇质心 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$。

如果以欧氏距离为距离度量，距离质心 $\boldsymbol{\mu}_1$ 更近的点，被划分为 C_1 簇；而距离质心 $\boldsymbol{\mu}_2$ 更近的点，被划分为 C_2 簇。

比如，图 1 中 A 点明显距离 $\boldsymbol{\mu}_1$ 更近，A 点被划分为 C_1 簇，C 点距离 $\boldsymbol{\mu}_2$ 更近，因此 C 点划分到 C_2 簇。B 点距离 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$ 相等，因此 B 点位于决策边界。很明显，决策边界为 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$ **中垂线** (perpendicular bisector)。

建议大家回顾《矩阵力量》第 19 章讲解的有关中垂线内容。

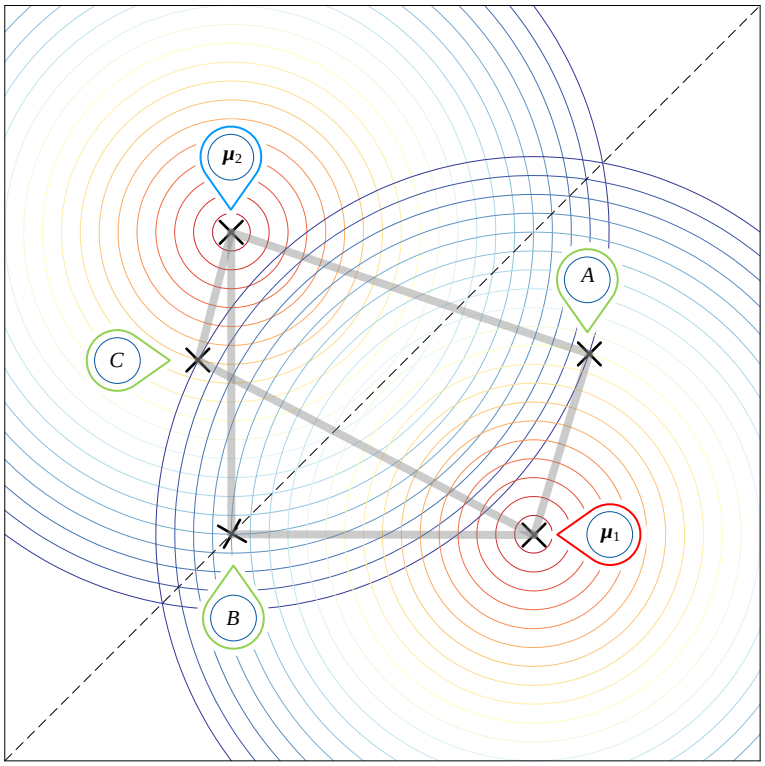


图 1. K 均值算法原理

由于采用欧氏距离，图 1 中簇质心 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$ 等高线为两组同心圆；同心圆颜色相同，代表距离簇质心 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$ 距离相同。因此，同色同心圆的交点位于决策边界上。

20.2 优化问题

K 均值聚类算法的优化目标是，将所有给定样本点划分 K 簇，并使得簇内距离平方和最小。采用最简单的欧拉距离，以上优化目标记做：

$$\arg\min_{C} \sum_{k=1}^{K} \sum_{\boldsymbol{x} \in C_k} \left\| \boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_k \right\|^2 \tag{1}$$

其中，$\boldsymbol{x}$ 为样本数据任意一点，形式为列向量；$\boldsymbol{\mu}_k$ 为任意一簇 C_k 样本数据的质心。

实际上，(1) 中簇内距离平方和相当于**残差平方和** (Sum of Squared Error, SSE)。SSE 度量样本数据的聚集程度；为了方便读者理解，下一节专门讲解质心、协方差矩阵、残差平方和等描述簇数据的数学工具。

任意一点 $\boldsymbol{x}$ 和质心 $\boldsymbol{\mu}_k$ 欧氏距离平方，可以通过下式计算得到：

$$d^2 = \text{dist}\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}_k\right)^2 = \left\| \boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_k \right\|^2 = \left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_k\right)^{\mathrm{T}} \left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_k\right) \tag{2}$$

其中，

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_D \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}, \quad \boldsymbol{\mu}_k = \begin{bmatrix} \mu_{k,1} & \mu_{k,2} & \cdots & \mu_{k,D} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{3}$$

两特征聚类

当特征数为 $D = 2$ 时，欧氏距离平方和展开为下式：

$$\begin{aligned} d^2 &= \left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_k\right)^{\mathrm{T}} \left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_k\right) \\ &= \left(x_1 - \mu_{k,1}\right)^2 + \left(x_2 - \mu_{k,2}\right)^2 \end{aligned} \tag{4}$$

丛书反复介绍，当 d 取某一定值时，(4) 所示解析式是以 $(\mu_{k,1}, \mu_{k,2})$ 为圆心的正圆，d 为半径。如图 1 所示，d 取不同值时，(4) 的几何表达为以 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$ 为中心得到两组同心正圆。

对于二分类问题，决策边界满足：

$$\left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_1\right)^{\mathrm{T}} \left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_1\right) = \left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_2\right)^{\mathrm{T}} \left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_2\right) \tag{5}$$

整理得到决策边界解析式

$$\left(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2\right)^{\mathrm{T}} \left(\boldsymbol{x} - \frac{\left(\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2\right)}{2} \right) = 0 \tag{6}$$

发现 K 均值聚类决策边界为一超平面，超平面通过 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$ 中点，并垂直于 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$ 连线，即垂直于 $(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)$。

三聚类

图 2 所示为三聚类问题簇数据和质心位置。根据这三个质心位置，可以绘制两两质心的中垂线。决策边界在这三条中垂线上。图 2 实际上便是**沃罗诺伊图** (Voronoi diagram)。本章最后一节介绍沃罗诺伊图。

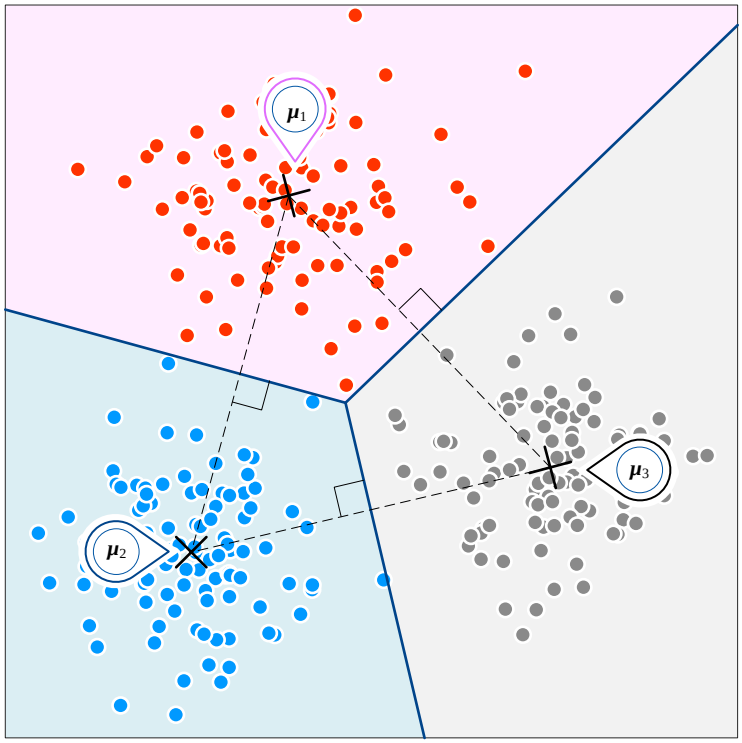


图 2. 三聚类问题簇质心、决策边界和区域划分

图 3 中，z 轴高度代表三聚类预测标签。

容易发现，在确定决策边界位置上，*K* 均值聚类原理和本书第 2 章介绍的**最近质心分类器** (Nearest Centroid Classifier) 很相似。

不同的是，*K* 均值聚类算法采用迭代方式找到簇质心位置，这是下一节要介绍的内容。

采用欧氏距离的 *K* 均值聚类相当于**高斯混合模型** (Gaussian Mixture Model, GMM) 的一个特例。这一点，下一章会详细介绍。

目前 Scikit-learn 中 *K* 均值聚类算法距离度量仅支持欧氏距离；MATLAB 中 *K* 均值聚类算法函数还支持城市街区距离、余弦距离、相关系数距离等。

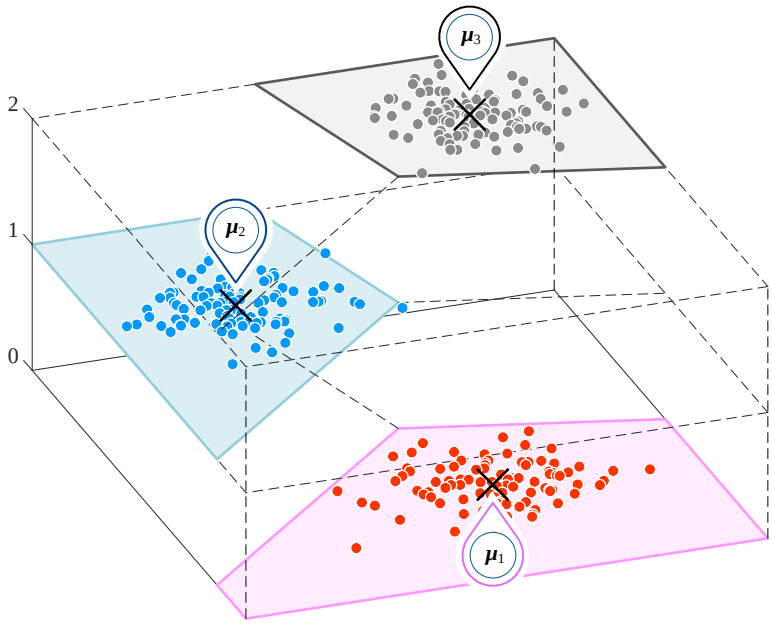


图 3. 三聚类预测标签

20.3 迭代过程

本节以二聚类为例介绍 K 均值聚类流程图。

流程

流程输入为样本数据和聚类簇数 (比如 2)。然后，从样本中随机选取 2 个数据作为初始簇质心 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$。然后进入如下迭代循环：

- 计算每一个样本和均值向量 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$ 距离；
- 比较每个样本和 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$ 距离，确定簇划分；
- 根据当前簇，计算并更新均值向量 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$

直到均值向量 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$ 满足迭代停止条件，得到簇划分。

图 4 所示为一鸢尾花数据为例 K 均值算法迭代过程。随机选取三个样本点 (黄色高亮) 作为初始簇质心 $\boldsymbol{\mu}_1$、$\boldsymbol{\mu}_2$ 和 $\boldsymbol{\mu}_3$，经过 10 次迭代，簇质心位置不断连续变化，最终收敛。

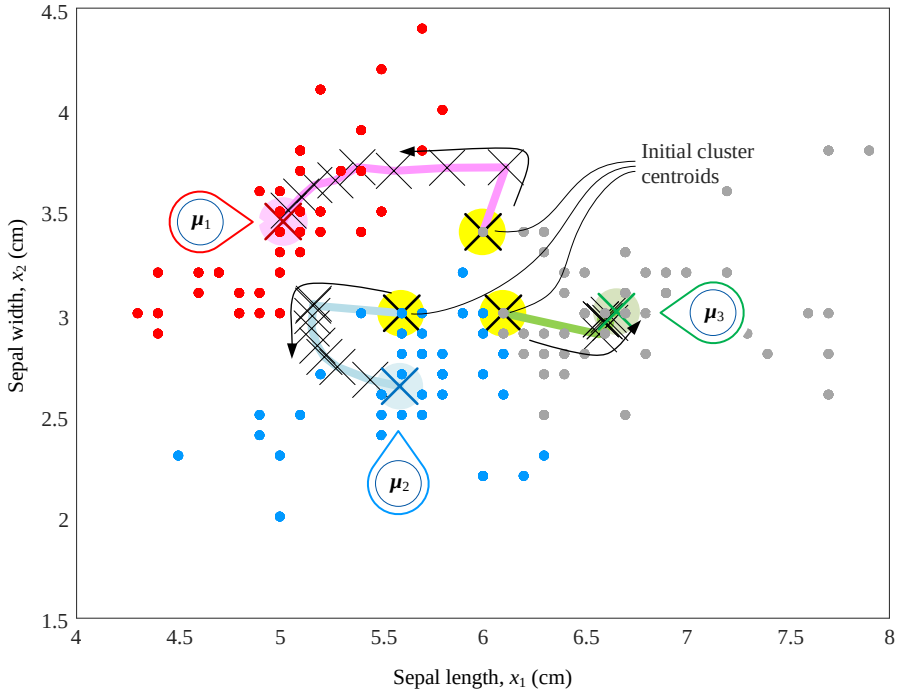


图 4. *K* 均值算法迭代过程，鸢尾花数据为例

鸢尾花数据聚类

图 5 所示为 *K* 均值算法聚类鸢尾花数据。Scikit-learn 工具包用来 *K* 均值聚类算法函数为 `sklearn.cluster.KMeans()`。利用 `model.fit()` 拟合数据后，`model.predict()` 预测聚类标签，`model.cluster_centers_`，输出簇质心位置。

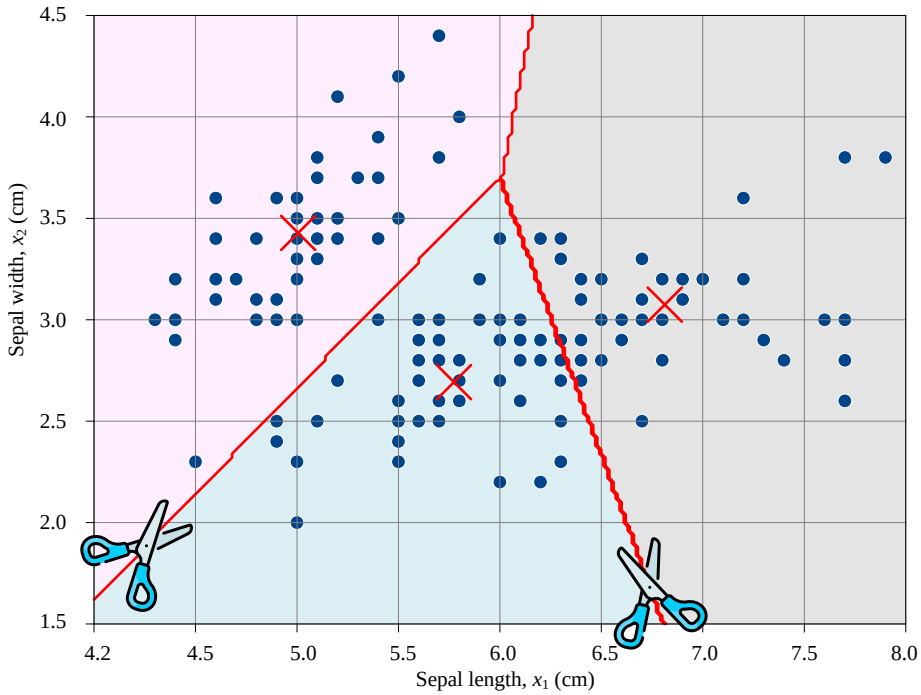


图 5. *K* 均值算法聚类鸢尾花数据

代码 Bk7_Ch20_01.ipynb 绘制图 5。下面聊聊其中关键语句。

ⓐ用 sklearn.datasets.load_iris() 导入数据。

ⓑ只用鸢尾花数据的前两个特征（花萼长度、花萼宽度）训练聚类。请大家尝试使用鸢尾花其他特征组合完成聚类。

ⓒ用 sklearn.cluster.KMeans()创建 KMeans 对象。

n_clusters=3 指定了要将数据分成的簇的数量。请大家尝试其他簇数，比如 2、4 等等，并比较结果。

n_init='auto'指定了初始化中心点的次数。KMeans 算法的结果可能受到初始中心点位置的影响，因此可以尝试多次不同的初始化以找到更好的聚类结果。'auto'表示算法会自动选择一个合适的初始化次数，当前默认 10 次。

ⓓ调用 KMeans 对象 kmeans，用 fit()方法对训练数据进行拟合。

ⓔ使用 KMeans 模型对网格数据进行聚类预测。

其中，ravel() 是 numpy 中的方法，它将多维数组转换为一维。np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()] 按列并列拼接两个一维数组，形成一个包含网格中所有点坐标的二维数组。

《编程不难》介绍过，对于已经训练好的聚类模型，如果模型可以将全新的数据点分配到确定的簇中，这类聚类算法叫做归纳聚类（inductive clustering）。

不具备这种能力的聚类算法叫做非归纳聚类（non-inductive clustering）。非归纳聚类只能对训练数据进行聚类，而不能将新数据点添加到已有的模型中进行预测。

显然，KMeans 是一种归纳聚类算法。

ⓕ将聚类预测结果规整成和网格数据相同形状的矩阵。

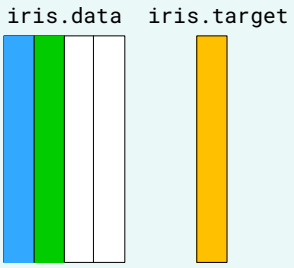
```
# 导入鸢尾花数据
iris = datasets.load_iris()

# 取出鸢尾花前两个特征
X_train = iris.data[:, :2]

# 创建KMeans对象
kmeans = KMeans(n_clusters=3, n_init = 'auto')

# 使用KMeans算法训练数据
kmeans.fit(X_train)

# 使用KMeans模型对网格中的点进行预测
# 并将预测结果整形成与网格相同形状的矩阵
Z = kmeans.predict(np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()])
Z = Z.reshape(xx.shape)
```



代码 1. 用 sklearn.cluster.KMeans()完成聚类 | Bk7_Ch20_01.ipynb

20.4 肘部法则：选定聚类簇值

手肘法则 (elbow method) 可以用来判断合适的聚类簇值 K。手肘法则的关键指标是误差平方和 SSE：

$$\mathrm{SSE}(\boldsymbol{X}|K)=\sum_{k=1}^{K}\mathrm{SSE}(C_k)=\sum_{k=1}^{K}\sum_{\boldsymbol{x}\in C_k}\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_k\right\|^2 \tag{7}$$

SSE 也叫**惯性量** (inertia)。

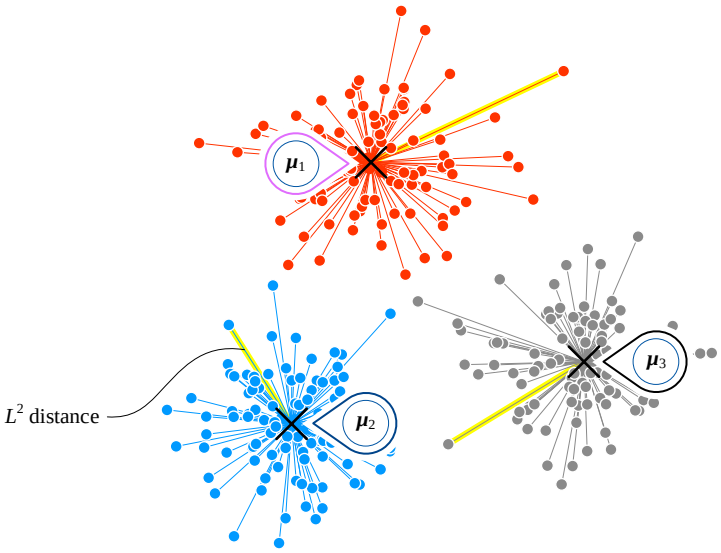


图 6. 样本数据和各簇质心 $\boldsymbol{\mu}_1$、$\boldsymbol{\mu}_2$ 和 $\boldsymbol{\mu}_3$ 之间的距离

随着聚类簇数 K 不断增大，均值聚类算法对样本数据划分会逐渐变得更加精细；因此，随着 K 不断增大，每个簇的聚合程度会逐渐提高，SSE 会逐渐变小。

极端情况，当 $K = n$，也就是每个样本数据自成一簇，SSE = 0。

K 不断增大，SSE 不断减小的过程如图 7 所示。观察此图发现一个有意思的现象，当 K 小于“合适”聚类数时，K 增大时，会导致 SSE 大幅下降；但是，K 大于“合适”聚类数时，K 再增大，SSE 下降幅度不断变缓。

这就是为什么图 7 呈现出“手肘”形状，也便是手肘法则的名称来由。理想的聚类簇数 K 便是“肘”拐点的位置。K 均值聚类算法函数输出值 `model.inertia_` 便是当前 SSE 值。

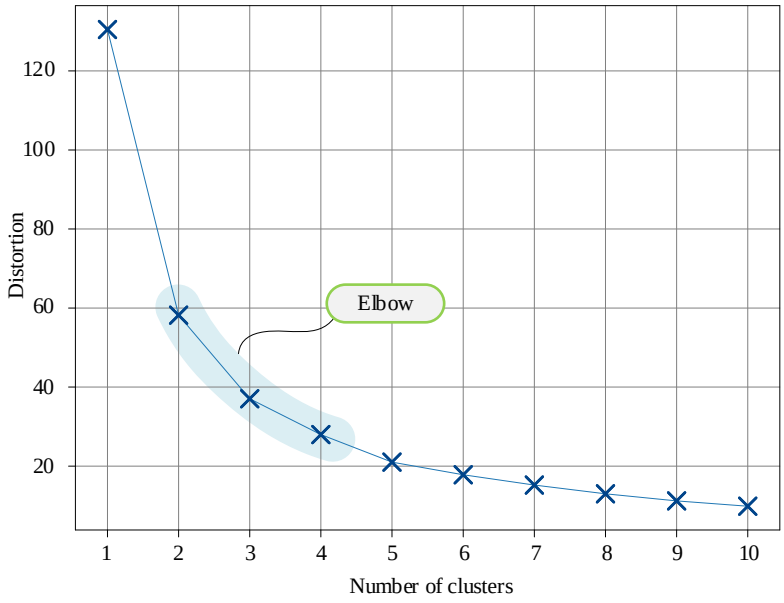


图 7. K 均值算法聚类鸢尾花数据

代码 Bk7_Ch20_02.ipynb 绘制图 7。请大家自行学习这段代码。

20.5 轮廓图：选定聚类簇值

轮廓图 (silhouette plot) 也常用来选定聚类簇值 K。

轮廓图上每一条线代表的是**轮廓系数** (silhouette coefficient)，s_i，可以通过下式计算获得：

$$s_i = \frac{b_i - a_i}{\max\{a_i,\ b_i\}} \tag{8}$$

其中，a_i 为簇内不相似度，b_i 为簇间不相似度。

簇内不相似度

如图 8 (a) 所示，簇内不相似度 a_i 代表样本 i ($i \in C_k$) 到同簇其他样本 j ($j \in C_k$, $i \neq j$) 距离平均值：

$$a_i = \frac{1}{\text{count}(C_k) - 1} \sum_{j \in C_k, i \neq j} d_{i,j} \tag{9}$$

其中，$d_{i,j}$ 为样本 i 和 j 之间距离。a_i 越小，说明样本 i 越应该被划分到 C_k 簇。

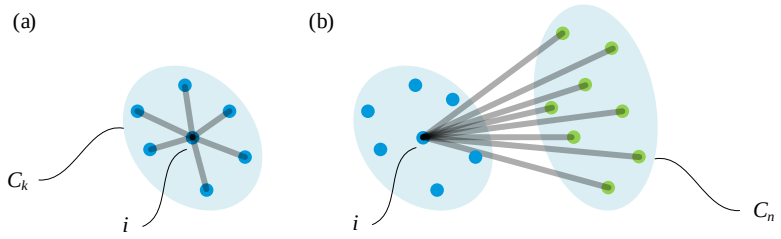


图 8. a_i 为簇内不相似度，和 b_i 为簇间不相似度

簇间不相似度

如图 8 (b) 所示，簇间不相似度 b_i 代表样本 i ($i \in C_k$) 到其他簇 (C_m) 样本 j ($j \in C_m$, $C_m \neq C_k$) 距离平均值的最小值：

$$b_i = \min \frac{1}{\text{count}(C_m)} \sum_{j \in C_m} d_{i,j} \tag{10}$$

b_i 越大，说明样本 i 越不应该被划分到其他簇。

⚠ 注意，当簇数超过 2 时，b_i 需要在不同簇之间取最小值。

以鸢尾花数据为例

轮廓系数 s_i 的取值在 [−1, 1] 区间。s_i 越趋向于 1，说明样本 i 分类越正确；s_i 越趋向于−1，说明样本 i 分类越错误。当 s_i 在 0 附近时，样本 i 靠近聚类边界。

图 9、图 10 和图 11 所示为 K 分别取 3、4 和 5 时，聚类边界和轮廓图。理想的聚类结果是，簇内尽量紧密，簇间尽量远离。轮廓系数平均值越高，说明分类越合理。比较图 9、图 10 和图 11，K = 3 时，轮廓系数较高，并且轮廓图簇宽度均匀。轮廓图结合肘部法则判断聚类簇数更合适。

计算轮廓系数的函数为 `sklearn.metrics.silhouette_score`。

`yellowbrick.cluster.SilhouetteVisualizer` 函数绘制轮廓图。

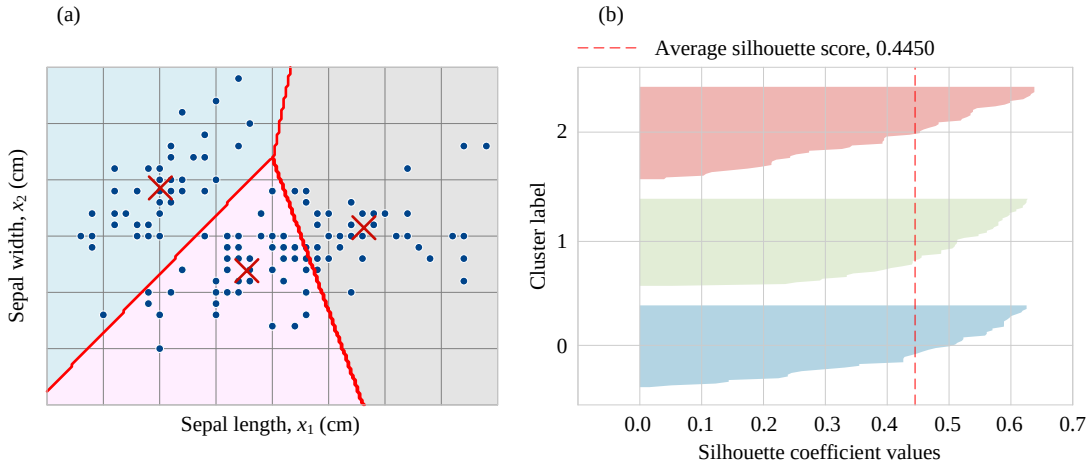


图 9. K 均值算法聚类鸢尾花数据和轮廓图，K = 3

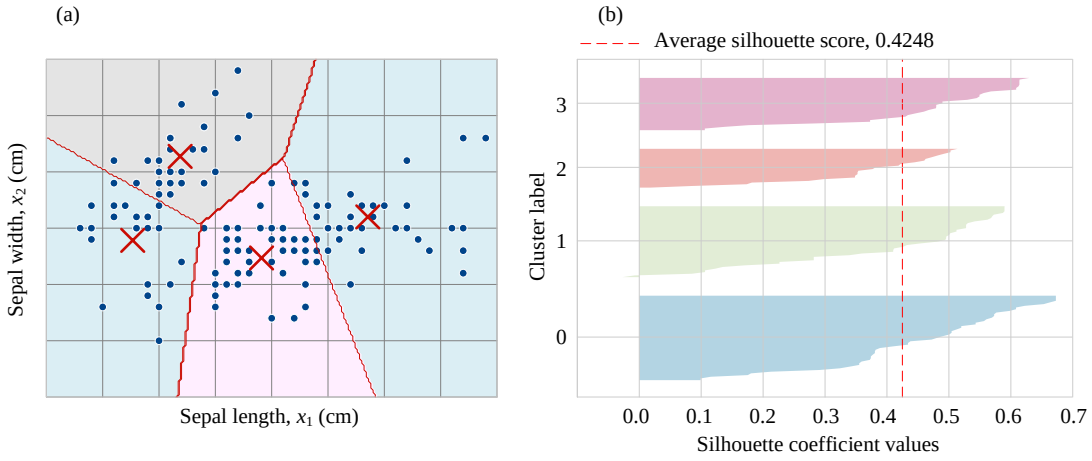


图 10. K 均值算法聚类鸢尾花数据和轮廓图，$K = 4$

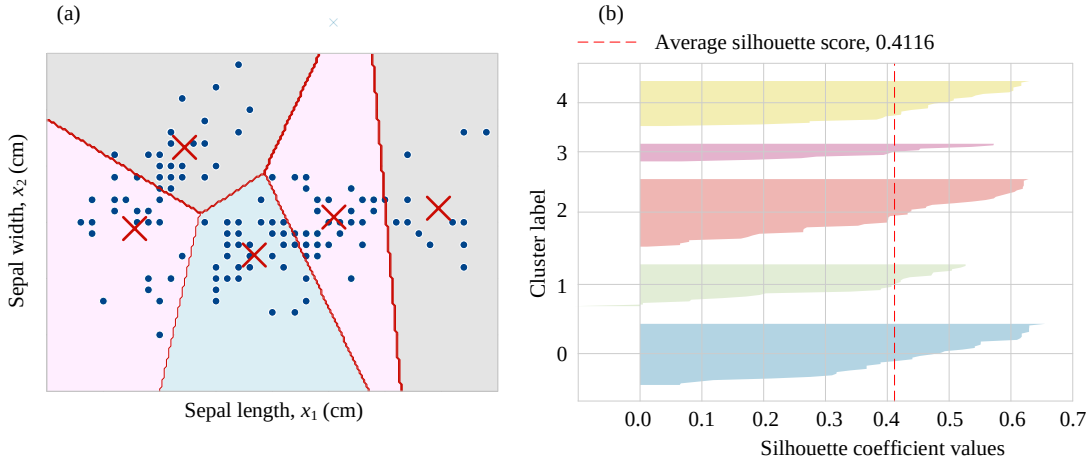


图 11. K 均值算法聚类鸢尾花数据和轮廓图，$K = 5$

代码 Bk7_Ch20_03.ipynb 绘制图 9、图 10 和图 11。请大家先用 pip install yellowbrick 安装 yellowbrick。

20.6 沃罗诺伊图

沃罗诺伊图 (Voronoi diagram)，是由俄国数学家格**奥尔吉 · 沃罗诺伊** (Georgy Voronoy) 发明的空间分割算法。本章介绍的 K 均值聚类，本书前文介绍的**最近质心分类器** (Nearest Centroid Classifier)，实际上都依赖沃罗诺伊图确定决策边界。

图 12 所示为平面 4 点构造的沃罗诺伊图。距离较近的两点连线，绘制中垂线；若干中垂线便是分割平面区域的边界线。

`scipy.spatial.Voronoi` 函数获得沃罗诺伊图相关数据。`scipy.spatial.voronoi_plot_2d` 函数绘制沃罗诺伊图。图 13 所示为随机生成平面 30 个点，以及它们构造的沃罗诺伊图。

K 均值聚类，相当于在利用圆圈 (欧氏距离) 描述每个簇质心；而实际上，描述簇数据更好的形状可能是正椭圆，甚至旋转椭圆。这就是下一章高斯混合模型 GMM 可以解决的问题。

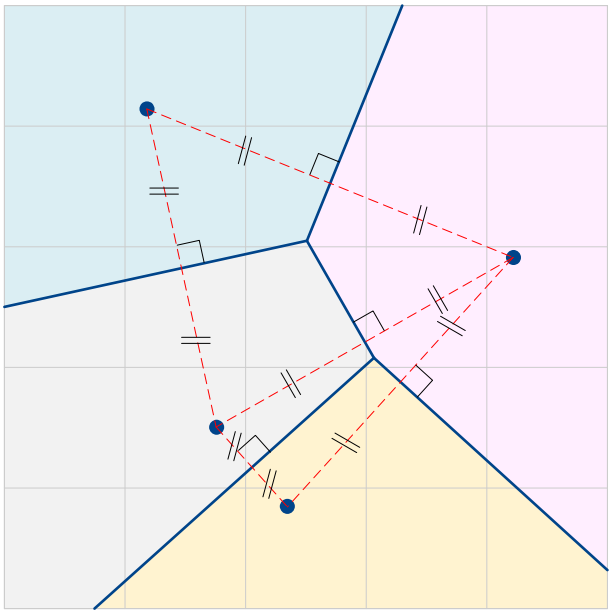


图 12. 4 点平面沃罗诺伊图

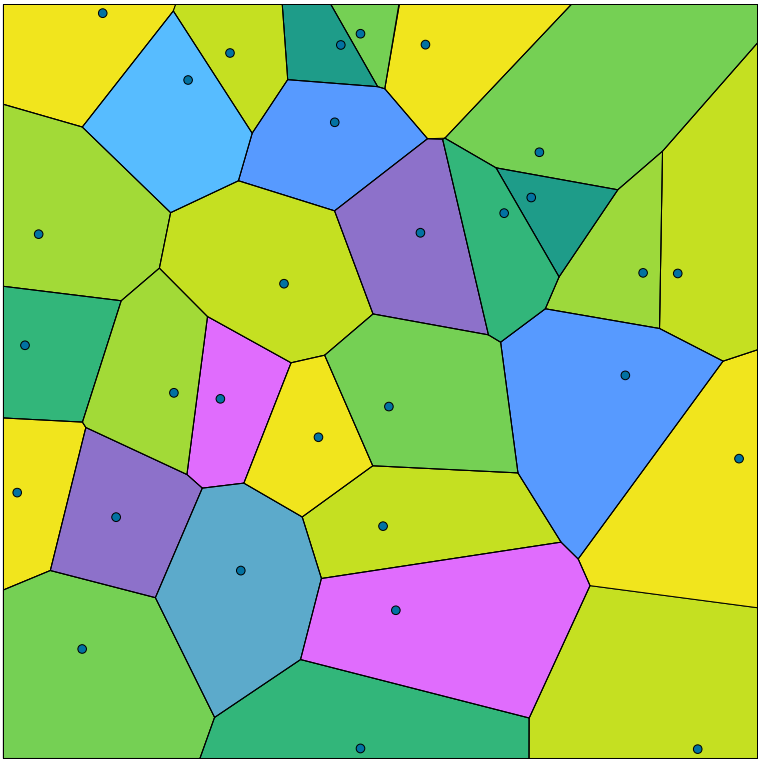


图 13. 30 点平面沃罗诺伊图

代码 Bk7_Ch20_04.ipynb 绘制图 13。

K 均值聚类是一种无监督的机器学习技术，用于将数据集分为 *K* 个不同的簇。该算法首先需要随机初始化 *K* 个聚类中心，然后根据数据点和聚类中心的距离将数据点划分到最近的簇中。接着更新聚类中心，并重复以上步骤，直到聚类中心不再发生变化或达到预设的迭代次数。

该算法的优化问题是最小化数据点与其所属聚类中心之间的距离和，可以使用梯度下降等方法来求解。肘部法则是一种确定最佳 *K* 值的方法，它基于聚类中心数量 *K* 与聚类误差平方和之间的关系。当 *K* 值增大时，SSE 逐渐减小，但减小速度会逐渐变慢，当 *K* 达到某个值时，SSE 的下降速度会急剧减缓，这个 *K* 值对应的点就是肘部。轮廓图是一种衡量聚类结果质量的方法，它基于数据点与其所属簇的紧密度和分离度之间的平衡。

K-means 聚类结果的簇质心并不是从样本数据点挑选出来的；如果从样本数据点所在位置挑选合适的位置作为簇质心的话，这种方法叫做 *k* 中心聚类 (*k*-medoids clustering)。请大家参考下例，这个例子还使用不同距离度量。

https://scikit-learn-extra.readthedocs.io/en/latest/auto_examples/cluster/plot_kmedoids_digits.html