15 Hierarchical Clustering 层次聚类

基于数据之间距离，自下而上聚合，或自上而下分裂

如果不能简单地解释某个理论，说明你并没有真正理解它。

If you can't explain it simply, you don't understand it well enough.

—— 阿尔伯特·爱因斯坦 (Albert Einstein) | 理论物理学家 | 1879 ~ 1955

- `numpy.triu()` 提取上三角矩阵
- `scipy.cluster.hierarchy.dendrogram()` 绘制树形图
- `scipy.cluster.hierarchy.linkage()` 计算簇间距离
- `seaborn.clustermap()` 绘制树形图和热图
- `seaborn.heatmap()` 绘制热图
- `sklearn.cluster.AgglomerativeClustering()` 层次聚类函数
- `sklearn.metrics.pairwise.rbf_kernel()` 计算 RBF 核成对亲近度矩阵

15.1 层次聚类

层次聚类 (hierarchical clustering) 算法是一种聚类分析算法。层次聚类依据数据之间的距离远近，或者亲近度大小，将样本数据划分为簇。层次聚类可以通过**自下而上** (agglomerative) 合并，或者**自上而下** (divisive) 分割来构造分层结构聚类。

图 1 所示为根据鸢尾花样本数据前两个特征——花萼长度和宽度——获得的层次聚类**树形图** (dendrogram)。

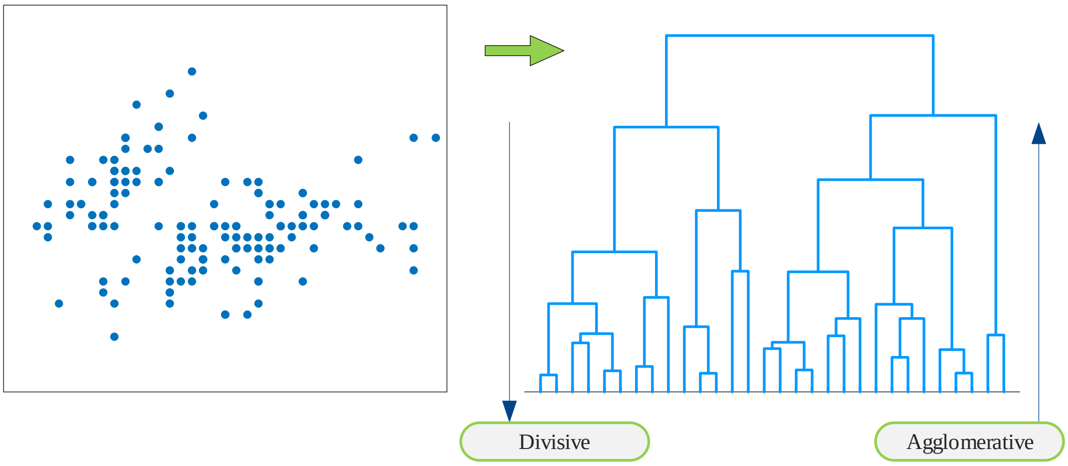


图 1. 区分“自上而下”和“自下而上”层次聚类

自下而上合并

图 2 所示为自下而上合并原理。整个过程有点像“搭积木”，首先以每个数据点本身作为一簇，每次迭代合并“距离”较近或亲近度大的类别，直到最后只剩一簇为止。这个过程可以使用的距离度量或亲和度也是多种多样的。请大家回顾本书第 3 章有关距离度量和亲近度内容。

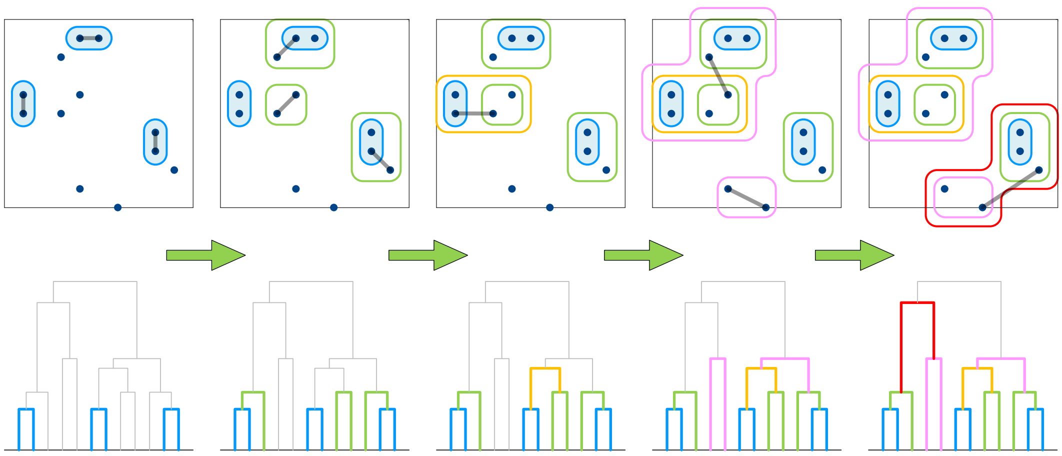


图 2. 层次聚类原理

本章下面首先介绍如何一步步通过自下而上合并获得树形图。大家可能已经注意到，图 2 中不仅仅要考虑，“点”与“点”之间距离，还需要考虑“簇”与“簇”之间的距离。“簇”与“簇之间的距离，也是本章要探讨的核心内容之一。

15.2 树形图

图 3 给出 12 个样本数据在平面上的位置。相信大家还记得**成对距离矩阵** (pairwise distance matrix) 这个概念。图 4 所示 12 个样本数据成对欧氏距离矩阵的热图。

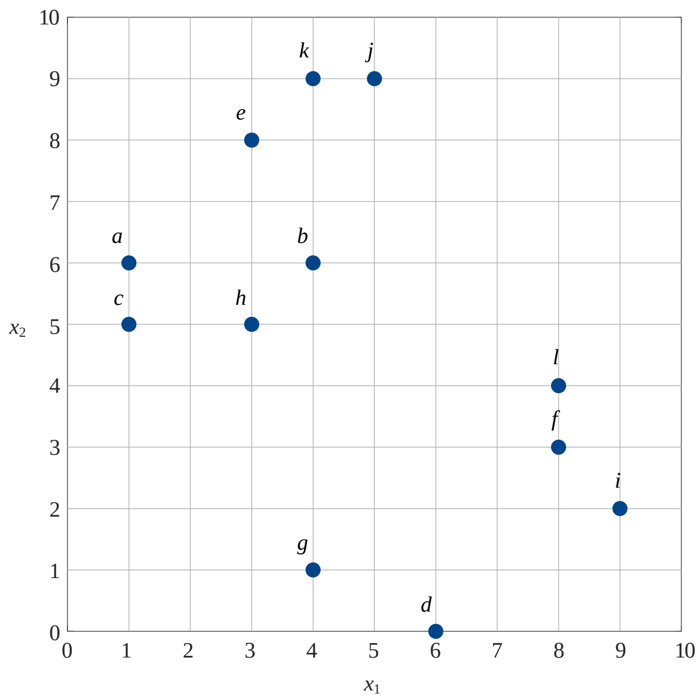


图 3. 12 个样本数据

有了图 4 所示成对欧氏距离矩阵，便可以得到如图 5 所示树形图。树形图横轴对应样本数据编号，纵轴对应数据点间距离和簇间欧氏距离。

观察图 5 树形图，在距离值 2.5 处切一刀，可以将图 3 所示数据分成 3 簇；如果在距离值为 4 处切一刀，可以将图 3 所示数据分成 2 簇。下面，我们一步步介绍如何自下而上构造如图 5 所示树形图。

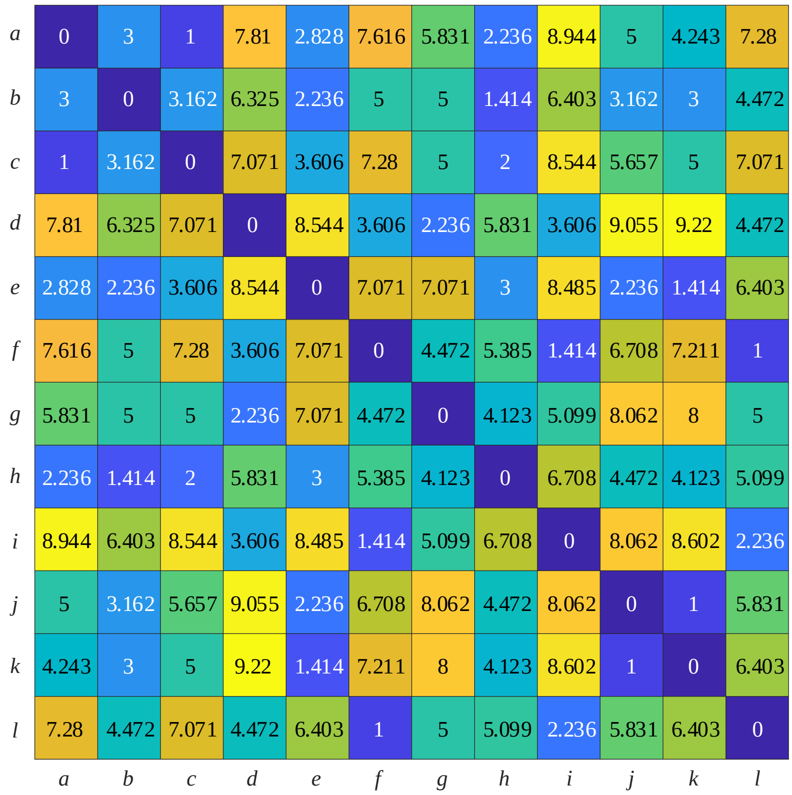


图 4. 12 个样本数据成对距离构成的方阵热图

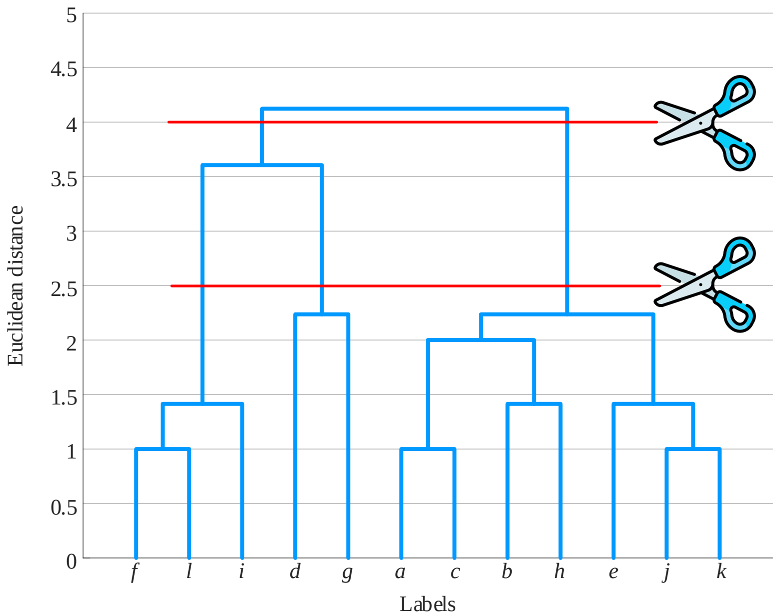


图 5. 数据树形图

第一层

图 6 所示，首先发现 a 和 c、k 和 j、f 和 l 成对距离最短，均为 1；这样我们便构造树形图最底层。这三个成对距离在热图位置如图 8 (a) 所示。

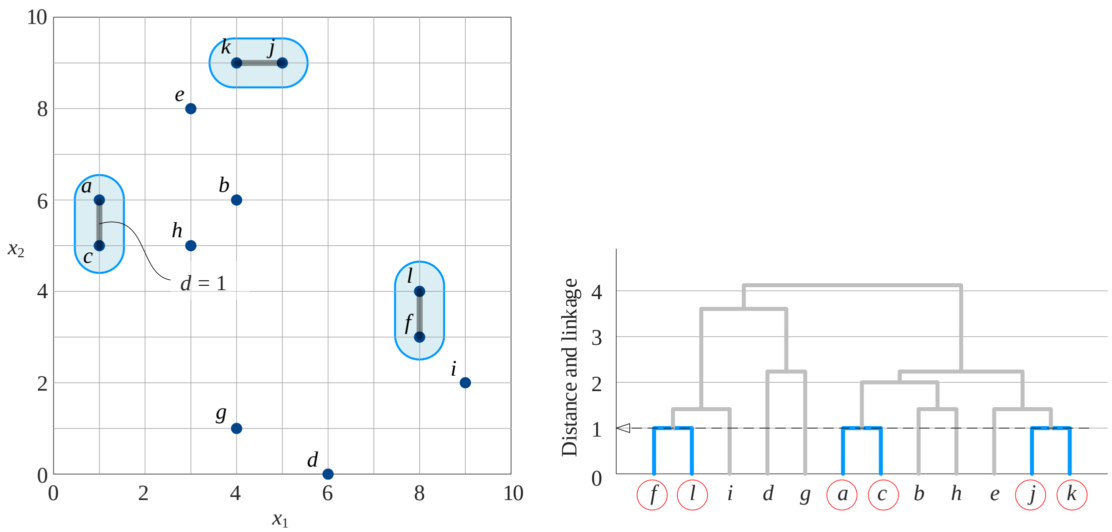


图 6. 构建树形图，第一层

第二层

构造树形图第二层时，遇到一个麻烦——簇间距离如何定义。这里，我们首先采用最简单的**最近点距离** (single linkage 或 nearest neighbor)。最近点距离指的是两个簇样本数据成对距离最近值。

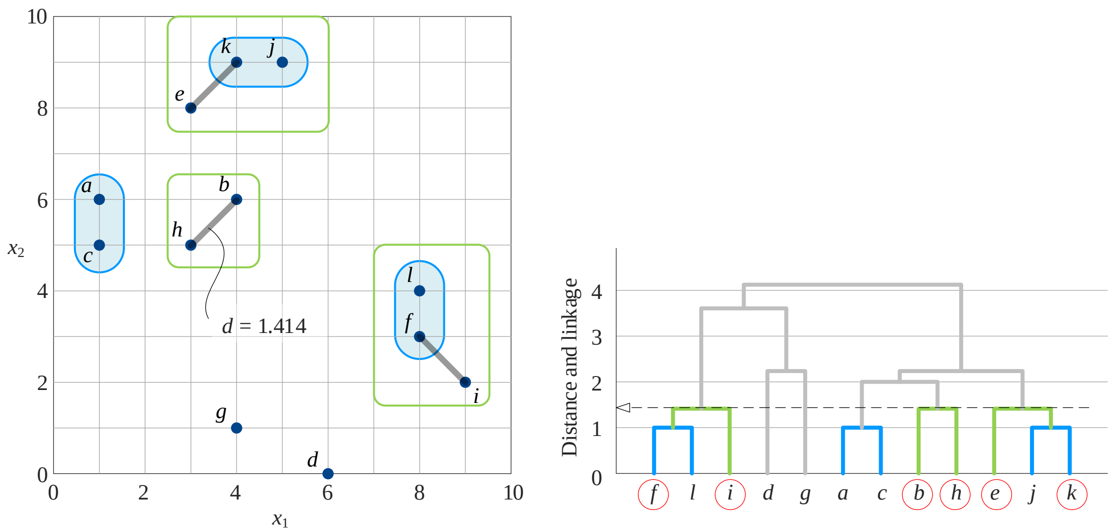


图 7. 构建树形图，第二层

k 和 j、f 和 l 已经分别“成团”；e 距离 k 更近，而 i 距离 f 更近。因此树形图第二层的距离值定为 sqrt(2)，也就是约 1.414。同样，b 和 h 的距离也是 1.414。这样我们便构造得到了如图 7 所示的树形图第二层。这三个“簇间”/“点间”距离在热图位置如图 8 (b) 所示。

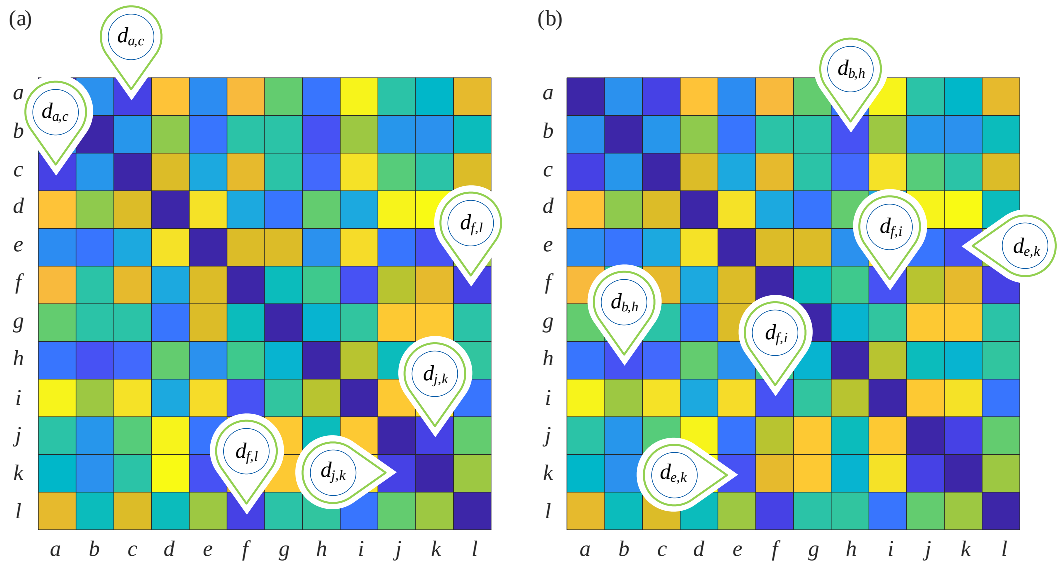


图 8. 成对距离矩阵热图，第一层和第二层距离位置

第三层

再向上一层，利用簇 a 和 c (第一层)、簇 b 和 h (第二层)之间簇间距离 2，从而得到树形图第三层。这个距离在热图上的位置如图 11 (a) 所示。

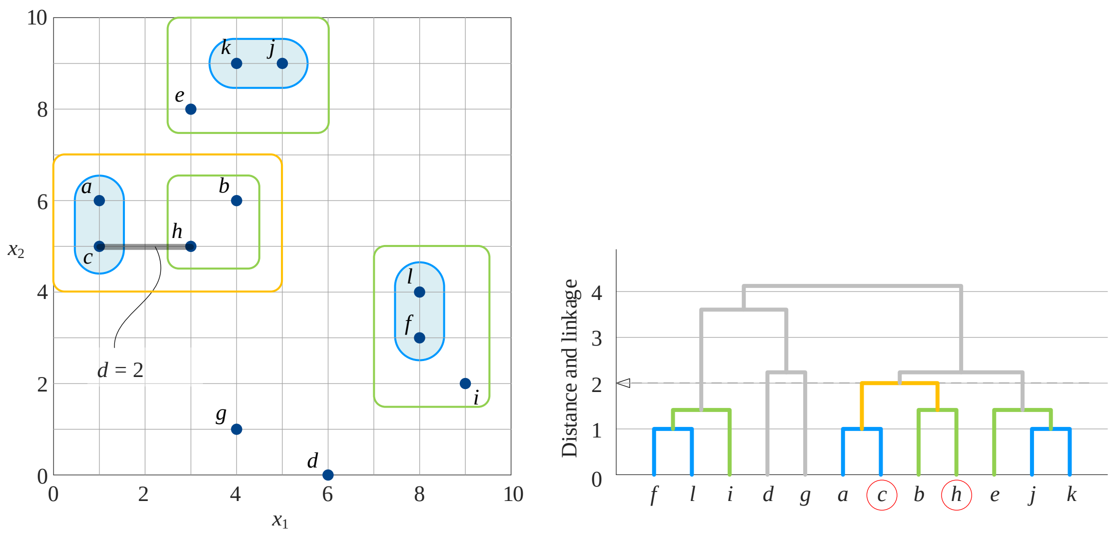


图 9. 构建树形图，第三步

第四层

树形图的第四层采用的距离值为 sqrt(5)，约 2.236。图 10 所示为树形图第四层位置。可以发现此时，所有的数据点均参与聚类，形成 3 簇。

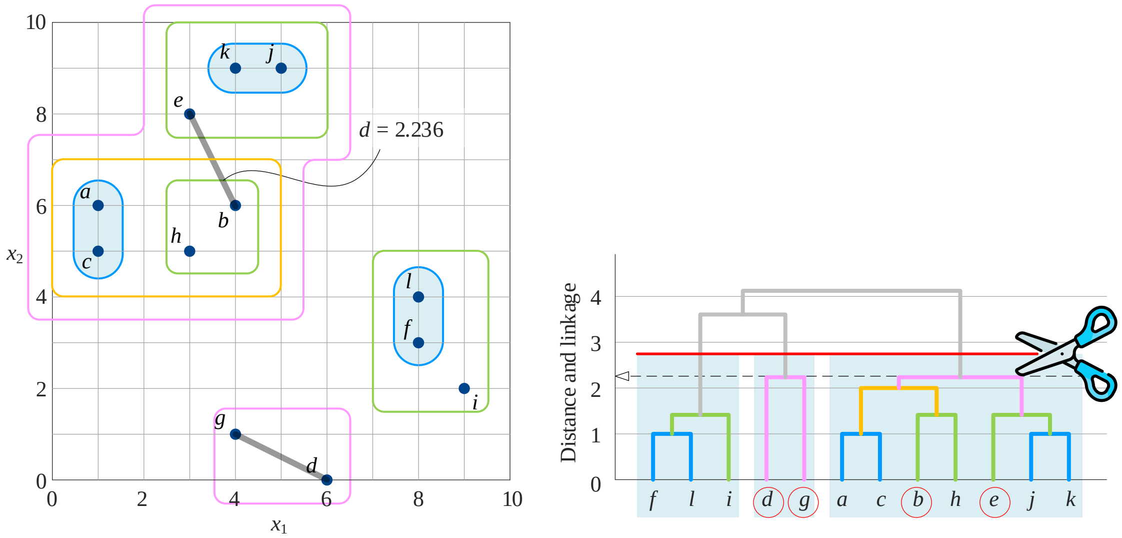


图 10. 构建树形图，第四层

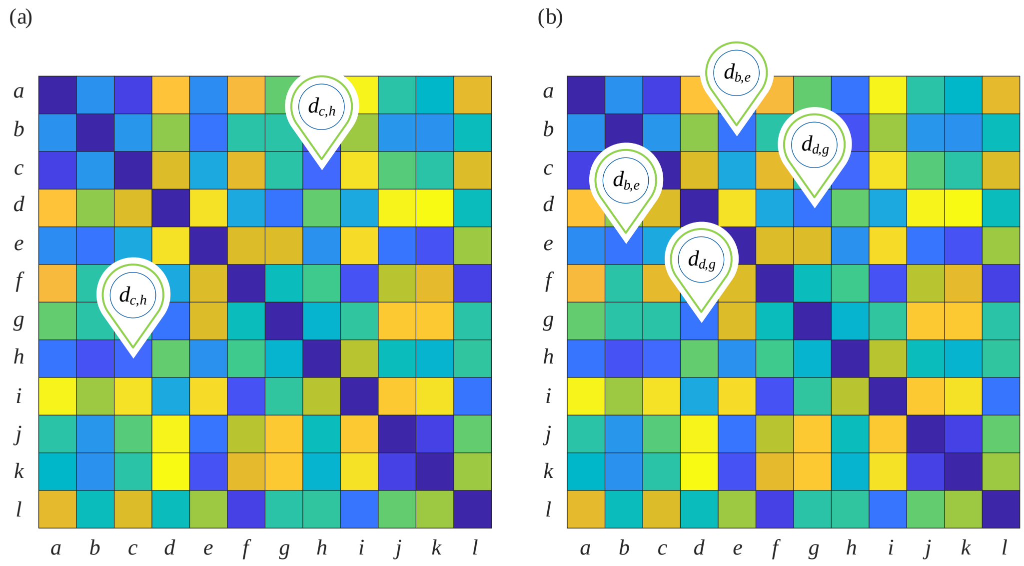


图 11. 成对距离矩阵热图，第三层和第四层距离位置

第五层

图 12 所示为树形图第五层位置。在第五层，样本数据被划分为两簇；再加一层，整个树形图便封顶。

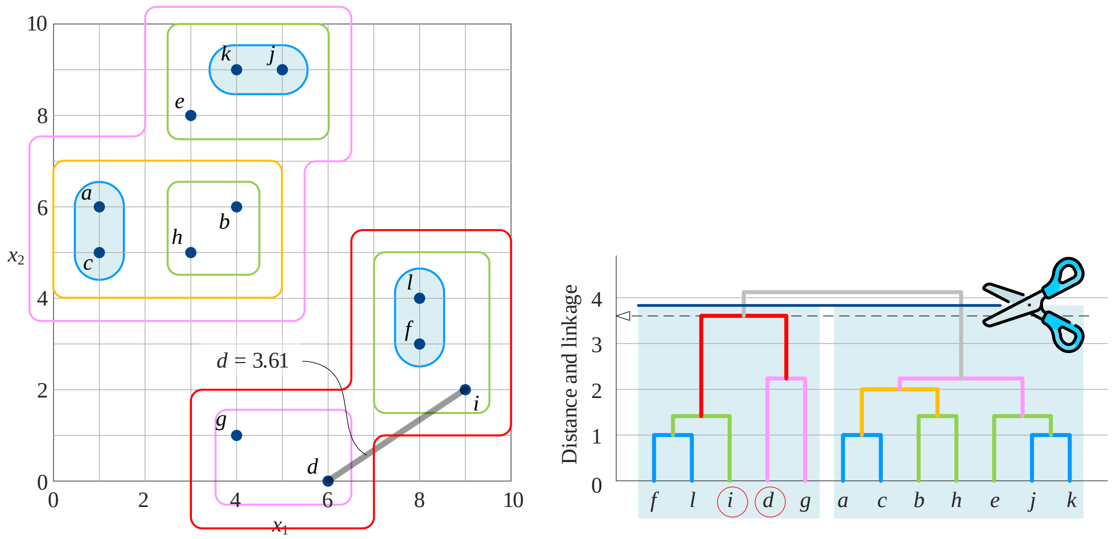
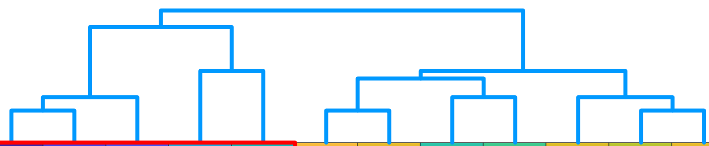


图 12. 构建树形图，第五层

重新排序

树形结构把数据序号重新排列。根据这个顺序，可以得到一个全新的热图，如图 13 所示。根据颜色，图 13 所示热图很容易分为两个区域，对应数据划分为两簇。这便是层次聚类的思路。



	f	l	i	d	g	a	c	b	h	e	j	k
f	0	1	1.414	3.606	4.472	7.616	7.28	5	5.385	7.071	6.708	7.211
l	1	0	2.236	4.472	5	7.28	7.071	4.472	5.099	6.403	5.831	6.403
i	1.414	2.236	0	3.606	5.099	8.944	8.544	6.403	6.708	8.485	8.062	8.602
d	3.606	4.472	3.606	0	2.236	7.81	7.071	6.325	5.831	8.544	9.055	9.22
g	4.472	5	5.099	2.236	0	5.831	5	5	4.123	7.071	8.062	8
a	7.616	7.28	8.944	7.81	5.831	0	1	3	2.236	2.828	5	4.243
c	7.28	7.071	8.544	7.071	5	1	0	3.162	2	3.606	5.657	5
b	5	4.472	6.403	6.325	5	3	3.162	0	1.414	2.236	3.162	3
h	5.385	5.099	6.708	5.831	4.123	2.236	2	1.414	0	3	4.472	4.123
e	7.071	6.403	8.485	8.544	7.071	2.828	3.606	2.236	3	0	2.236	1.414
j	6.708	5.831	8.062	9.055	8.062	5	5.657	3.162	4.472	2.236	0	1
k	7.211	6.403	8.602	9.22	8	4.243	5	3	4.123	1.414	1	0

图 13. 按树形图重组数据树形图

15.3 簇间距离

上一节提到，两簇之间的距离可以采用最近点距离；当然，簇间距离也有其他定义。本节介绍常用的几种簇间距离。

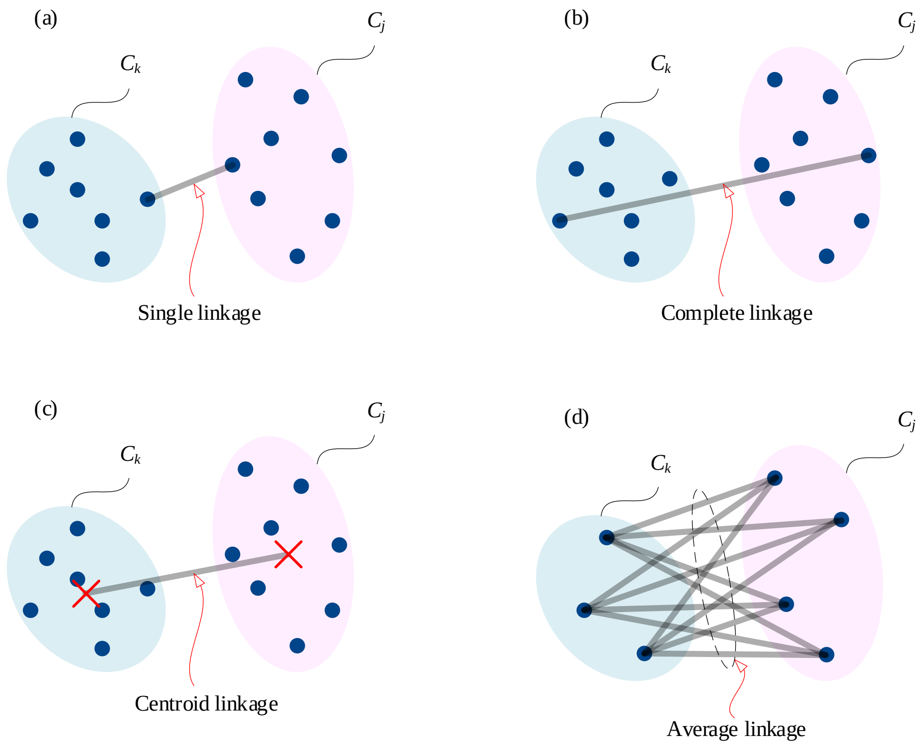


图 14. 簇间距离定义

最近点距离

簇间距离，也叫做**距离值** (linkage distance 或者 linkage)。如图 14 (a) 所示，**最近点距离** (single linkage 或 nearest neighbor)，代号为 `'single'`，指的是两个簇样本数据成对距离最近值：

$$d\left(C_k, C_j\right) = \min_{x \in C_k,\ z \in C_j} \left(\operatorname{dist}\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}\right)\right) \tag{1}$$

图 15 所示为，采用 `'single'` 层次聚类得到的树形图和鸢尾花数据聚类结果。可以发现，树形图分支并不均衡，聚类结果不理想。

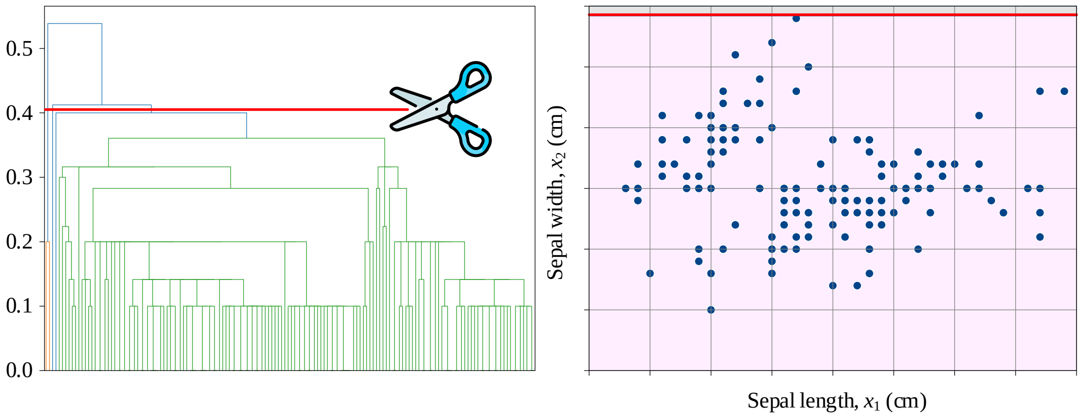


图 15. 鸢尾花聚类结果，'single' 层次聚类

最远点距离

如图 14 (b) 所示，**最远点距离** (complete linkage 或 farthest neighbor) 定义为，两簇样本数据成对距离最远值：

$$d\left(C_k, C_j\right) = \max_{\boldsymbol{x}\in C_k,\ \boldsymbol{z}\in C_j}\left(\operatorname{dist}\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}\right)\right) \tag{2}$$

最远点距离代号为 `'complete'`。图 16 所示为，采用 `'complete'` 层次聚类得到的树形图和鸢尾花数据聚类结果。最远点距离对于离群点/噪音点敏感。

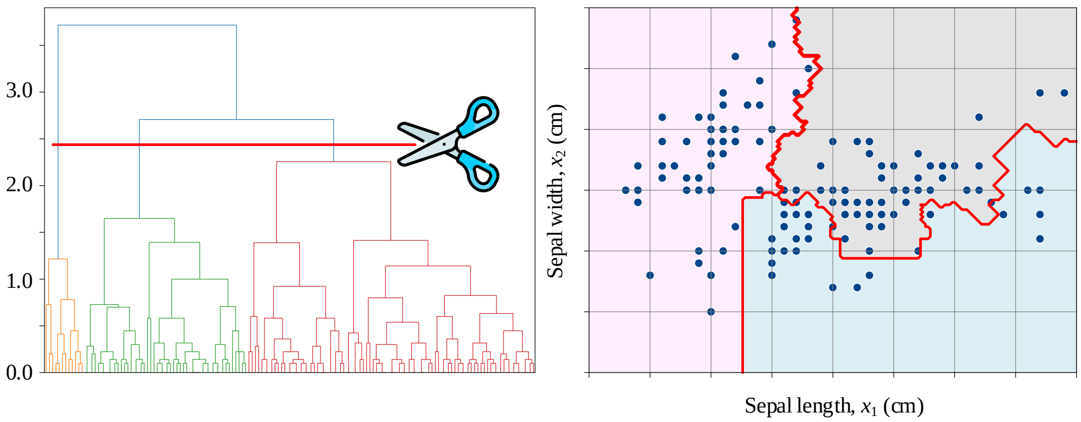


图 16. 鸢尾花聚类结果，'complete' 层次聚类

均值点距离

如图 14 (c) 所示，**均值点距离** (centroid linkage) 采用两个簇样本数据均值点之间的距离：

$$d\left(C_i, C_j\right) = d\left(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\mu}_j\right) \tag{3}$$

其中，$\boldsymbol{\mu}_i$ 和 $\boldsymbol{\mu}_j$ 分别为 C_i 和 C_j 的质心点。目前 Scikit-learn 中的层次聚类函数并不支持均值点距离；但是 `scipy.cluster.hierarchy.linkage` 支持均值点距离，代号为 `'centroid'`。

平均距离

如图 14 (d) 所示，**平均距离** (average linkage) 采用两簇样本数据成对点之间距离取平均值：

$$d\left(C_k, C_j\right) = \underset{\boldsymbol{x}\in C_k,\ \boldsymbol{z}\in C_j}{\operatorname{mean}} \left(\operatorname{dist}\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}\right)\right) = \frac{\sum_{\boldsymbol{x}\in C_k,\ \boldsymbol{z}\in C_j} \operatorname{dist}\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}\right)}{\operatorname{count}\left(C_k\right)\cdot \operatorname{count}\left(C_j\right)} \tag{4}$$

平均距离代号为 `'average'`。图 17 所示为，采用 `'average'` 层次聚类得到的树形图和鸢尾花数据聚类结果。

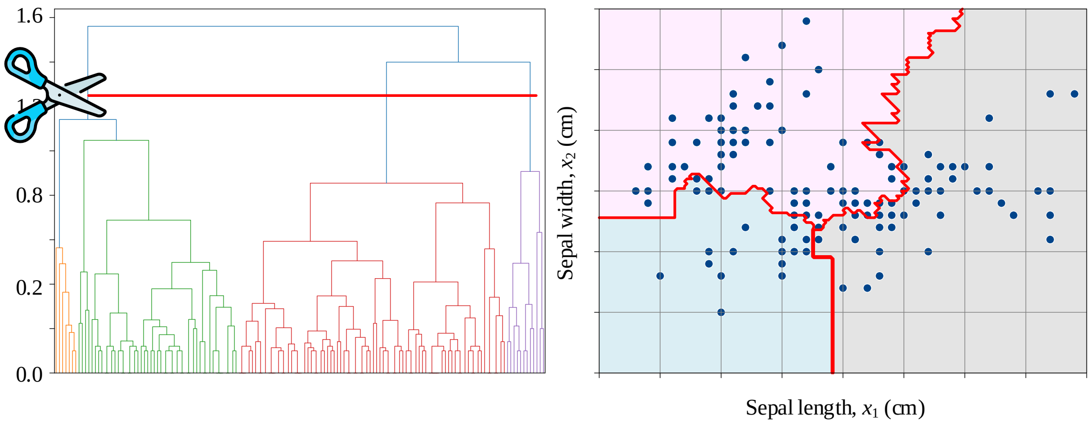


图 17. 鸢尾花聚类结果，'average' 层次聚类

平均距离

Ward's 簇间距离的定义如下：

$$\begin{aligned} d\left(C_k, C_j\right) &= \sqrt{2\times\left(\underbrace{\sum_{\boldsymbol{x}\in C_k\cup C_j} \operatorname{dist}\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}_{C_k\cup C_j}\right)^2}_{\text{After merge}} - \underbrace{\left(\sum_{\boldsymbol{x}\in C_k} \operatorname{dist}\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}_{C_k}\right)^2 + \sum_{\boldsymbol{x}\in C_j} \operatorname{dist}\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}_{C_j}\right)^2\right)}_{\text{Before merge}}\right)} \\ &= \sqrt{\frac{2\cdot \operatorname{count}\left(C_k\right)\cdot \operatorname{count}\left(C_j\right)}{\operatorname{count}\left(C_k\right)+\operatorname{count}\left(C_j\right)}}\cdot \operatorname{dist}\left(\boldsymbol{\mu}_{C_k}, \boldsymbol{\mu}_{C_j}\right) \end{aligned} \tag{5}$$

观察 (5)，可以发现它等价于：

$$d\left(C_k, C_j\right) = \sqrt{2\times\left(\underbrace{\operatorname{SST}\left(C_k\cup C_j\right)}_{\text{After merge}} - \underbrace{\left(\operatorname{SST}\left(C_k\right)+\operatorname{SST}\left(C_j\right)\right)}_{\text{Before merge}}\right)} \tag{6}$$

其中，SSE 为从书前文介绍的**总离差平方和** (Sum of Squares for Total, SST)。

SSE 便是本书前文介绍的“**簇惯性** (cluster inertia)”，也就是：

$$\begin{cases} \operatorname{SST}\left(C_k \cup C_j\right)=\sum_{x \in C_k \cup C_j} \operatorname{dist}\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}_{C_k \cup C_j}\right)^2=\sum_{x \in C_k \cup C_j}\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_{C_k \cup C_j}\right\|^2 \\ \operatorname{SST}\left(C_j\right)=\sum_{x \in C_j} \operatorname{dist}\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}_{C_j}\right)^2=\sum_{x \in C_j}\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_{C_j}\right\|^2 \\ \operatorname{SST}\left(C_k\right)=\sum_{x \in C_k} \operatorname{dist}\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}_{C_k}\right)^2=\sum_{x \in C_k}\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_{C_k}\right\|^2 \end{cases} \tag{7}$$

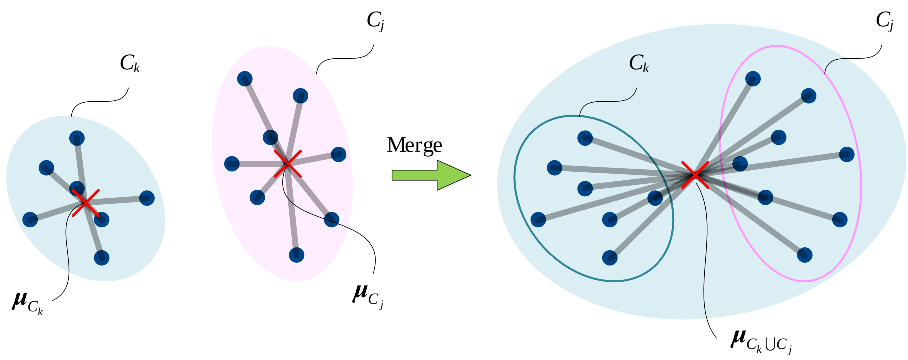


图 18. 鸢尾花聚类结果，Ward’s 簇间距离

Ward’s 簇间距离定义看着复杂，实际上背后的思想很简单——计算**合并后** (after merge)、**合并前** (before merge) 残差平方和 SSE 的差值。原理如图 18 所示。这个差值，也就是一种簇数据“合并”的“代价”。

平均距离代号为 `'ward'`。`'ward'`为 Scikit-learn 默认簇间距离。图 19 所示为，采用 `'ward'` 层次聚类得到的树形图和鸢尾花数据聚类结果。

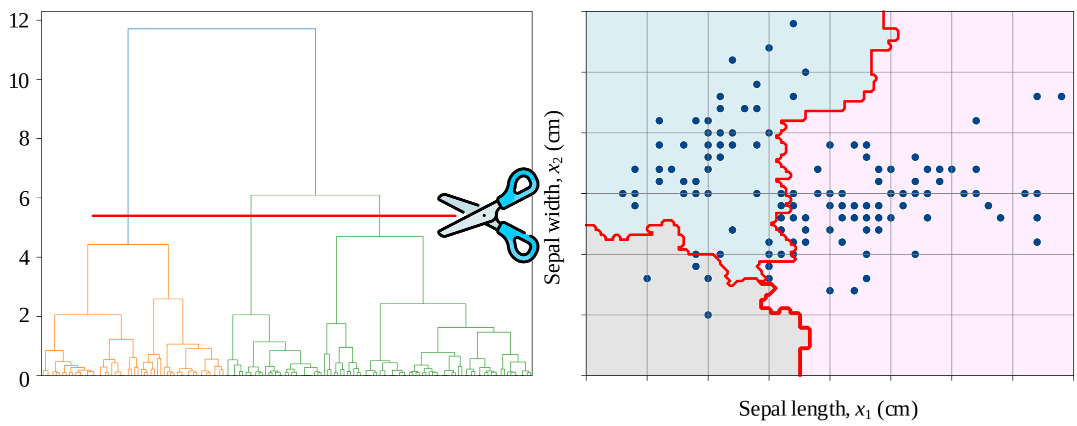


图 19. 鸢尾花聚类结果，'ward' 层次聚类

代码 Bk7_Ch14_01.py 可以绘制图 15、图 16、图 17 和图 19。

15.4 亲近度层次聚类

本章前文介绍的是采用欧氏距离构造树形图，以便进行层次聚类；其实，亲近度也可以用来构造树形图，从而聚类。回顾**高斯核** (Gaussian kernel) 亲近度定义：

$$\kappa(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q})=\exp\left(-\gamma\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\right\|^2\right) \tag{8}$$

图 20 左图是鸢尾花数据高斯核亲近度成对矩阵热图。利用 `seaborn.clustermap()` 函数可以绘制基于亲近度矩阵的树形图，以及相应热图，具体如图 20 右图所示。

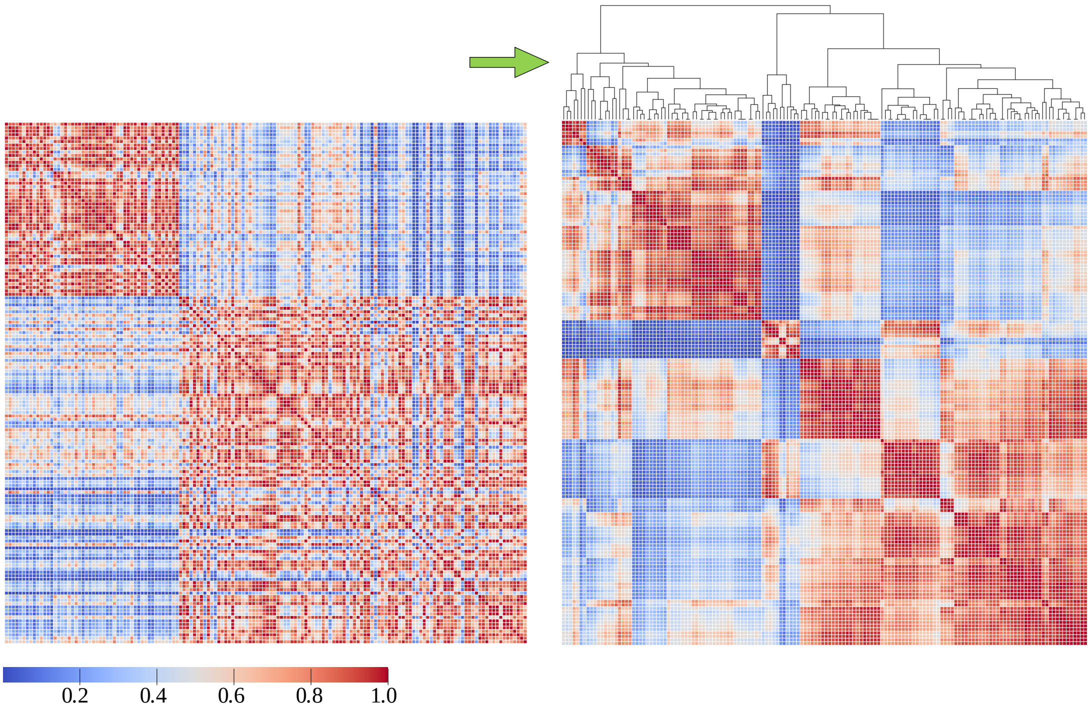


图 20. 鸢尾花花萼两个特征构造的亲近度矩阵，以及树形结构和重排额的亲近度矩阵

代码 Bk7_Ch14_02.py 可以绘制图 20 两幅子图。