AI学习笔记--skLearn--KMeans聚类

Scikit-learn(sklearn)的定位是通用机器学习库，而TensorFlow(tf)的定位主要是深度学习库。一个显而易见的不同：tf并未提供sklearn那种强大的特征工程，如维度压缩、特征选择等。究其根本，我认为是因为机器学习模型的两种不同的处理数据的方式：

- 传统机器学习：利用特征工程(feature engineering)，人为对数据进行提炼清洗
- 深度学习：利用表示学习(representation learning)，机器学习模型自身对数据进行提炼

Sklearn更倾向于使用者可以自行对数据进行处理，比如选择特征、压缩维度、转换格式，是传统机器学习库。而以tf为代表的深度学习库会自动从数据中抽取有效特征，而不需要人为的来做这件事情，因此并未提供类似的功能。

Scikit-Learn环境搭建

默认情况下，Scikit-Learn并非集成到TensorFlow环境中，如果需要使用，则需要使用pip下载。并且，scikit库包括几个分支，例如image处理的，scikit-image和scikit-learn两个库，在终端中输入一个命令即可解决：

```
→  Python_Workplace  pip install scikit-learn
```

Scikit-Learn 第一个程序

第一个程序例子，我们了解一下Python的语法和执行环境。可以选用ipython作为编辑环境也可以使用编辑器sublime作为编写环境。编写代码：

```
# -*- coding: utf-8 -*

from matplotlib import pyplot as plt
from sklearn.cluster import k_means
import pandas as pd
from sklearn.metrics import silhouette_score

file = pd.read_csv("cluster_data.csv", header=0)
x = file['x']
y = file['y']
print file
```

上面的代码结构简单，导入sklearn的库，打开csv文件，并且采集数据，最后输出。这里有坑，可能会存在pandas mode找不到的情况，还有字符不对的情况。我们可以在py脚本上面添加相关编码格式、并且安装库的方式去解决这个问题。

```
→  Python_Workplace  pip install pandas
```

如果出现编码格式不对，在coding：下一行添加代码：

```
# -*- coding: utf-8 -*
import sys
reload(sys)
sys.setdefaultencoding('utf8')
```

如此一来，第一个sklearn学习demo代码就编写完成了，最后在终端执行脚本：

```
→  Python_Workplace ipython k_means_cluster.py
```

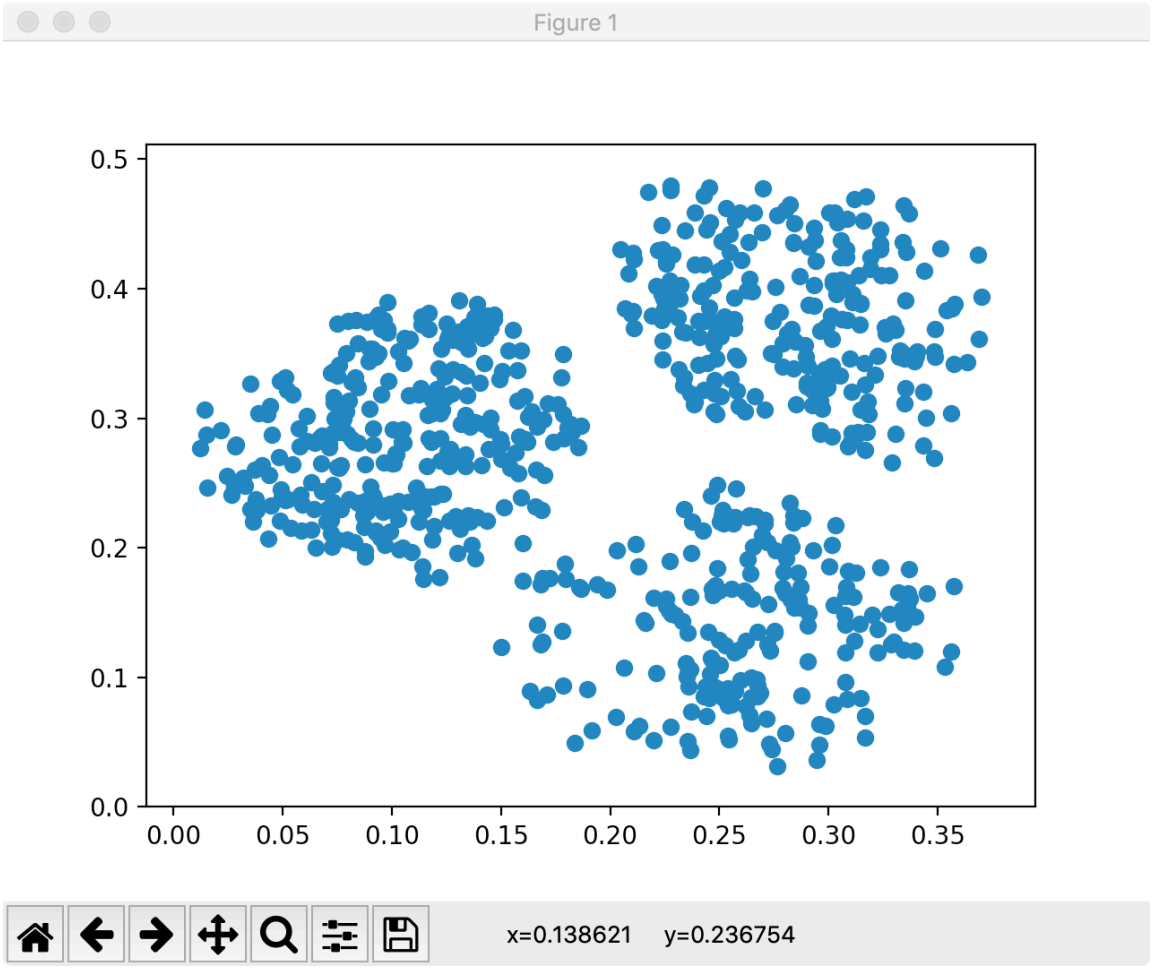
接下来就可以看到对应的数据打印，CSV的逐条数据一一打印出来的情况了。

```
x            y
   0.0720376 0.221381067
 0.058398649  0.24065473
 0.064184457 0.229640274
 0.076806009 0.230121658
 0.073072657 0.235259831
  0.07064053 0.229773075
 0.048279513 0.270236579
 0.049115359 0.245176393
 0.043667391 0.255978852
 0.063051153 0.250294758
 0.054370789 0.264563296
   0.0579757 0.278009583
 0.037176407 0.260527888
 0.074941076 0.262401247
 0.040604012 0.263890693
```

这种数据不太好看，也可以用matplotlib工具把离散的点花在对应的坐标点上，编辑代码：

```
# -*- coding: utf-8 -*
from matplotlib import pyplot as plt
from sklearn.cluster import k_means
import pandas as pd
from sklearn.metrics import silhouette_score

file = pd.read_csv("cluster_data.csv", header=0)
x = file['x']
y = file['y']
plt.scatter(x,y)
plt.show()
#print file
```

如此一来，就可以在GUI窗口上看到一个一个离散的点数据。



接下来学习一下聚类的方法，scikit-learn 关于聚类的算法都包括在了sklearn.cluster方法下面，我们使用k-Means方法来实现找中心。代码如下：

```
-*- coding: utf-8 -*
from matplotlib import pyplot as plt
from sklearn.cluster import k_means
import pandas as pd
from sklearn.metrics import silhouette_score

file = pd.read_csv("cluster_data.csv", header=0)
x = file['x']
y = file['y']
plt.scatter(x,y)
plt.show()
#from matplotlib import pyplot as plt

model = k_means(file,n_clusters = 3)
print model
#print file
```

执行脚本后，得到输出如下：

```
→  Python_Workplace ipython k_means_cluster.py
```

```
(array([[0.26098231, 0.14011151],
       [0.28288786, 0.37671499],
       [0.1040997 , 0.28663691]]), array([2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2,
2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2,
       2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2,
       2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2,
       2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2,
       2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2,
       2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2,
       2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2,
       2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2,
       2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2,
       2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2,
       2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2,
       2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2,
       2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2,
       2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1,
       1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1,
       1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1,
       1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1,
       1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1,
       1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1,
       1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1,
       1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
       0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
       0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
       0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
       0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
       0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
       0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
       0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
       0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
       0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1,
       1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1,
       1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1,
       1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1,
       1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1], dtype=int32), 3.349558811907321)
```

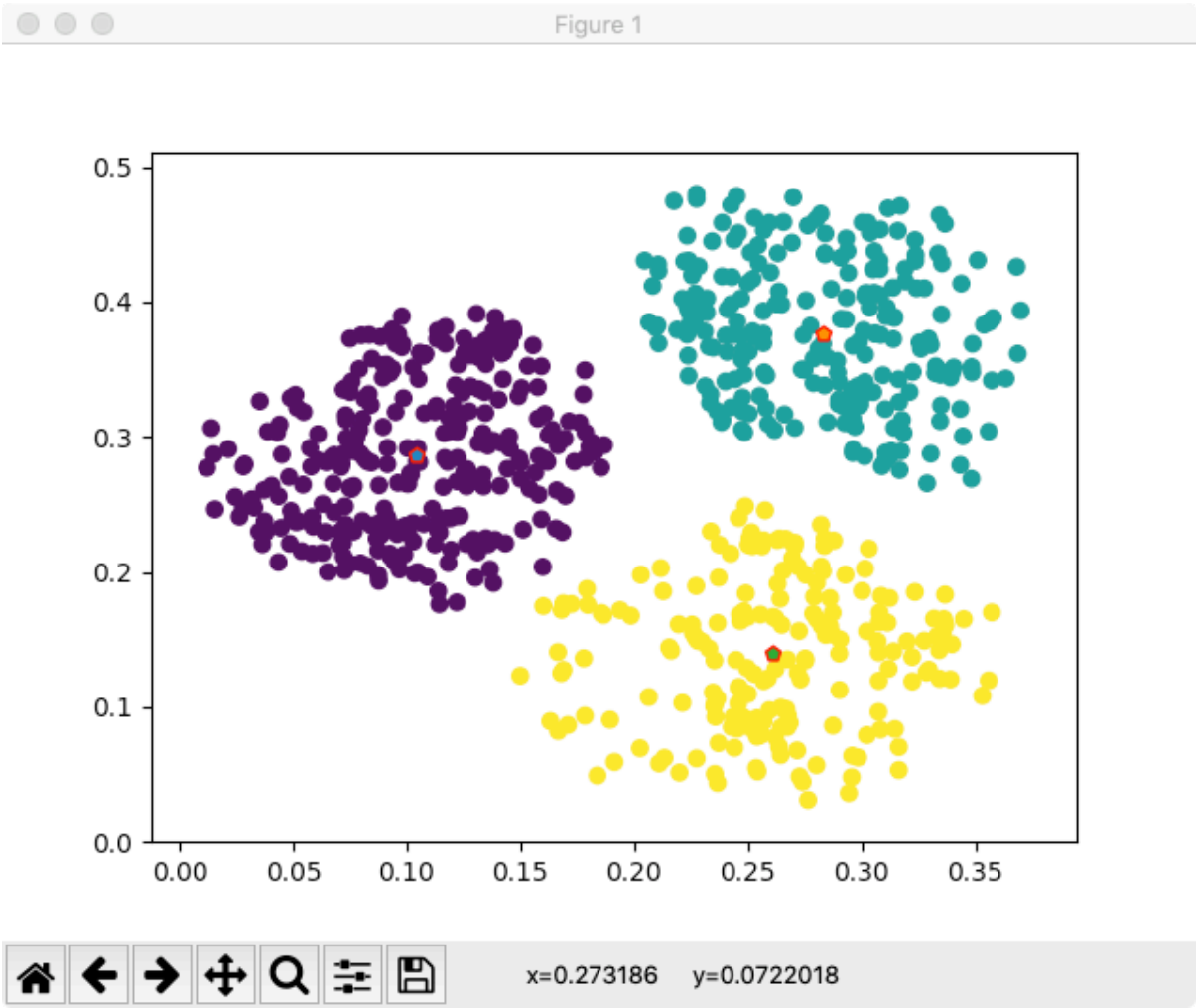
我们也可以用图形的方式来显示。添加代码:

```
# -*- coding: utf-8 -*

from matplotlib import pyplot as plt
from sklearn.cluster import k_means
import pandas as pd
from sklearn.metrics import silhouette_score

file = pd.read_csv("cluster_data.csv", header=0)
x = file['x']
y = file['y']
#plt.scatter(x,y)
```

```
#plt.show()
#from matplotlib import pyplot as plt

model = k_means(file,n_clusters = 3)
cluster_centers = model[0] # 聚类中心数组
cluster_labels = model[1] # 聚类标签数组
plt.scatter(x, y, c=cluster_labels) # 绘制样本并按聚类标签标注颜色
# 绘制聚类中心点，标记成五角星样式，以及红色边框
for center in cluster_centers:
    plt.scatter(center[0], center[1], marker="p", edgecolors="red")

plt.show() # 显示图#print model

#print file
```

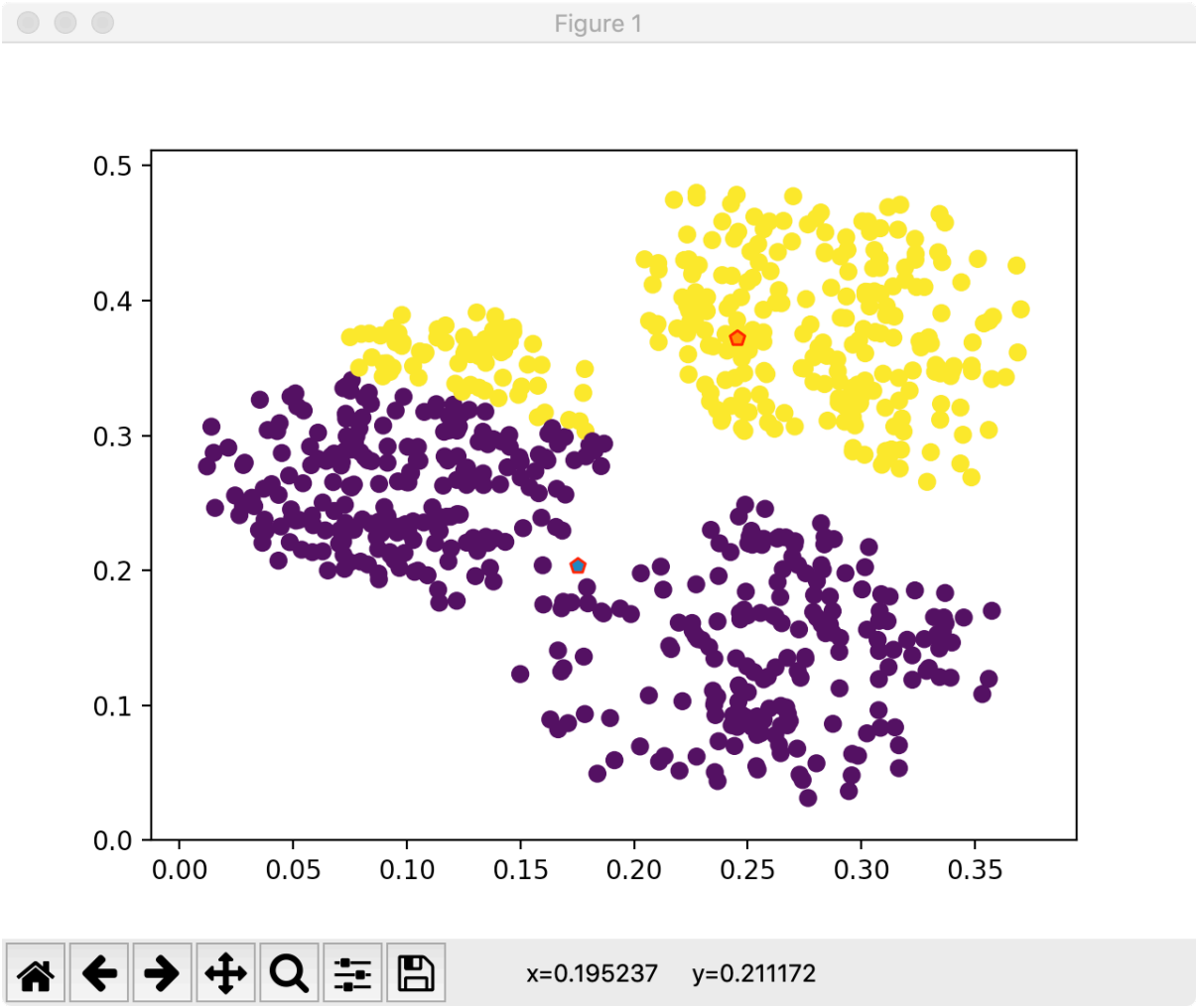
cluster_data.csv

运行脚本，得到最终的输出图



上图发现，数据类的中心位置，被标记位红圈，两边的数据都用紫色、蓝色、黄色等表示。k_Mean 可以看做是，找到一堆数据的集合，并且均值求得数据的中心。n_clusters

则是对应的数据集合个数。如果调整这个参数为2个集群，得到的结果就不一样了。



那么，我们如何确定在K_mean 中K的数值？是否有方法去实现自动找。确定这个K有以下几个方法：

- 肘部法则
- 轮廓系数

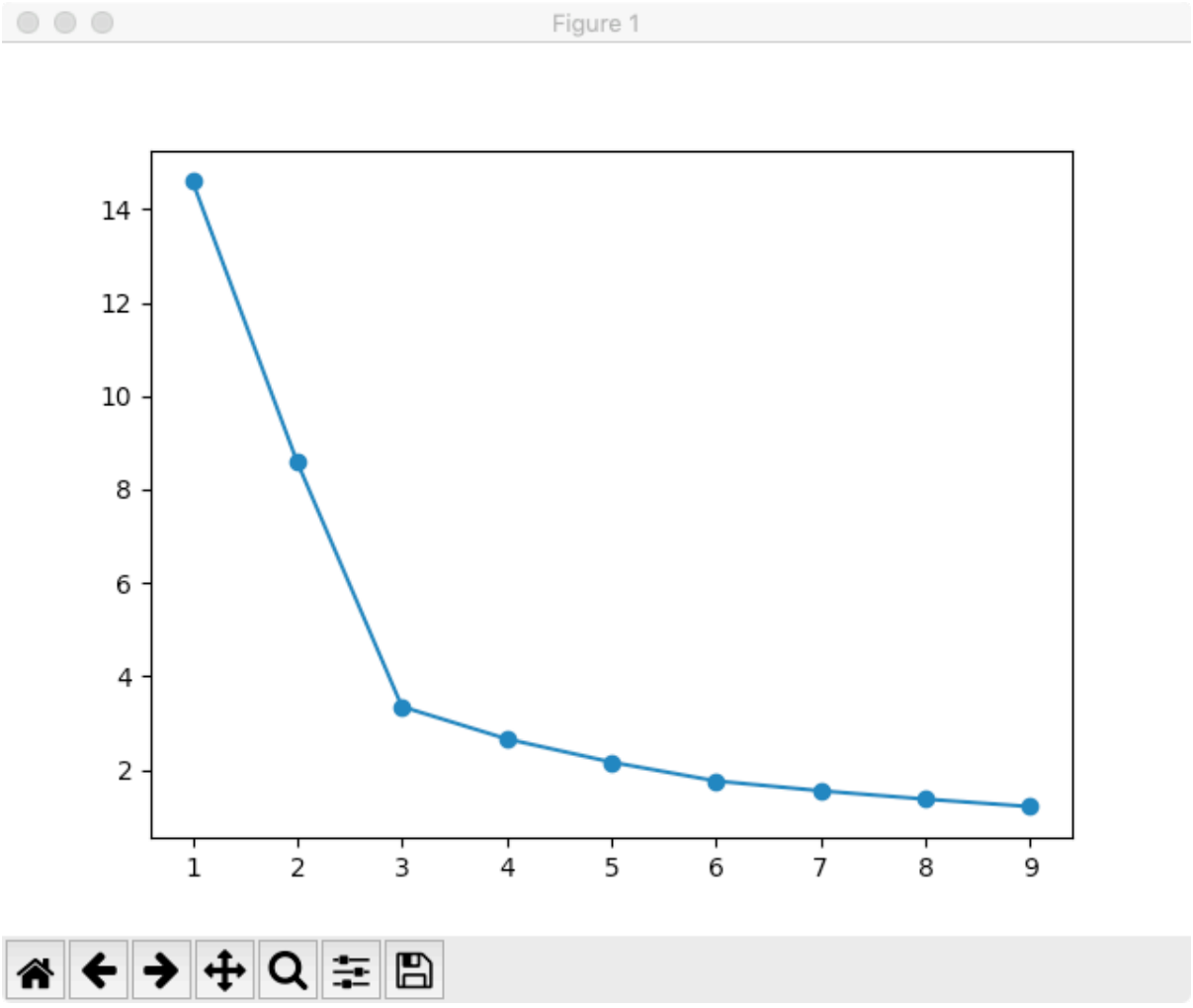
肘部法则

肘部法则是一种启发性的学习算法，上面print 的时候，我们用到了前面三组数据，但是没用到最后一组，dtype这个参数，准确的来说，最后一组数据用来表示样本举例中心点的距离综合。可以想象，随着聚类采集的中心增大，相对应到中心点的距离也会逐渐减小，也就是说，如果样本只有一个类别的情况下，这个数值会逐渐变为0。可以通过曲线来表示数值和聚类数量之间的曲线关系。

编写测试代码：

```
# -*- coding: utf-8 -*

from matplotlib import pyplot as plt
from sklearn.cluster import k_means
import pandas as pd
from sklearn.metrics import silhouette_score

file = pd.read_csv("cluster_data.csv", header=0)

index = []
inertia = []

for i  in  range(9):
    model = k_means(file,n_clusters = i + 1)
    index.append(i+1)
    inertia.append(model[2])

plt.plot(index,inertia,"-o")
plt.show()
```

执行脚本后，可以发现对应的关系图如下：



这里有个明显的拐点，有点类似于关节肘部，是变化最大的情况，这里我们可以看到这个值明显是3左右，所以依据肘部原则，K阈值选择3。

- 轮廓系数

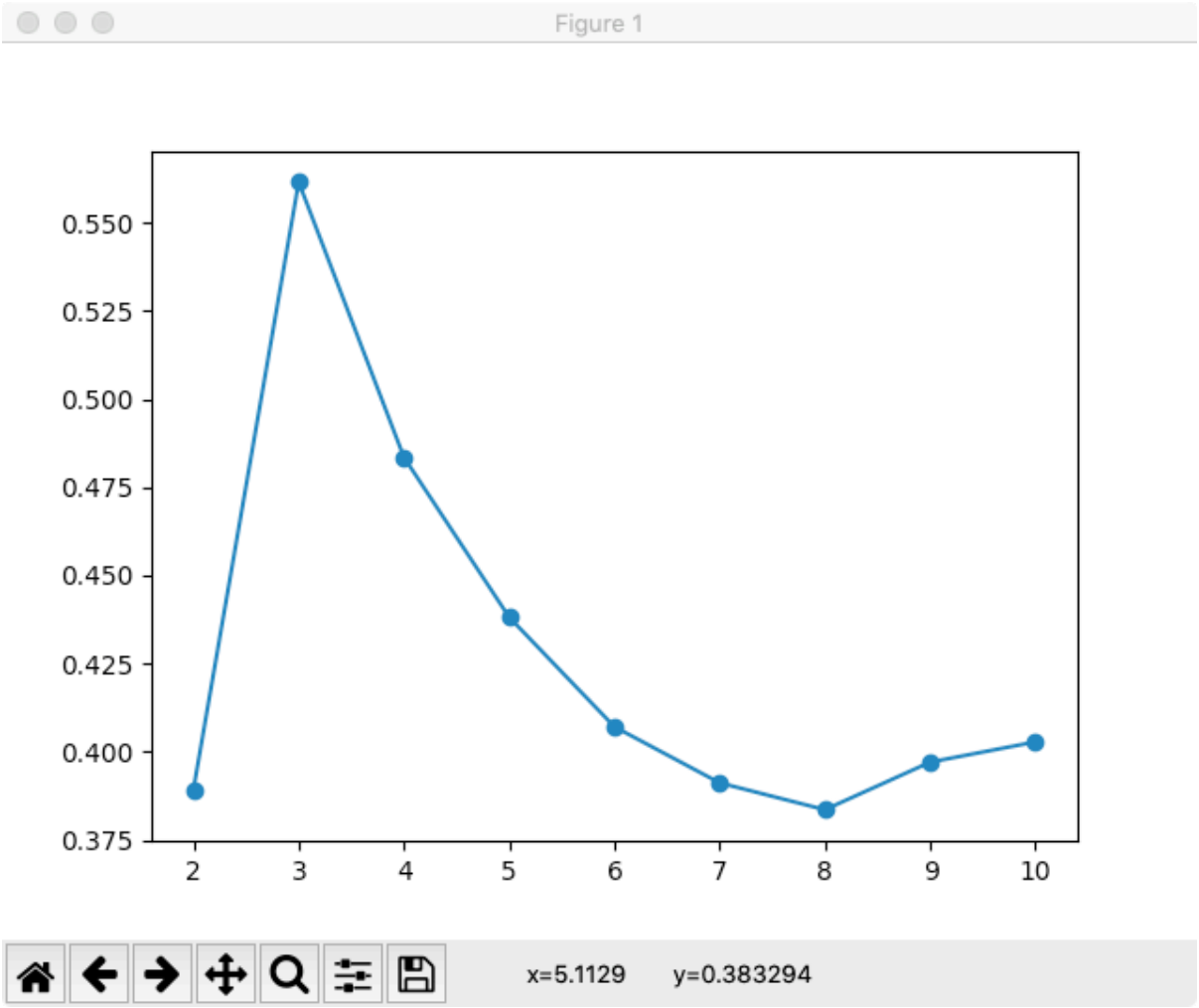
除了肘部原则，聚类还有一种评估方法，叫做轮廓系数。轮廓系数结合了聚类后的两项因素，内聚度和分离度。内聚度就指的是一个样本在集合中的不相似度，而分离度指的是一个样本在集合之间的不相似度。在scikit-learn中，同样提供了直接计算轮廓系数的方法。示例代码如下：

```
# -*- coding: utf-8 -*

from matplotlib import pyplot as plt
from sklearn.cluster import k_means
import pandas as pd
from sklearn.metrics import silhouette_score
file = pd.read_csv("cluster_data.csv", header=0)
index = []
#inertia = []
silhouette = []
for i  in  range(9):
    model = k_means(file,n_clusters = i + 2)
    index.append(i+2)
    # inertia.append(model[2])
    silhouette.append(silhouette_score(file,model[1]))
print silhouette
plt.plot(index,silhouette,"-o")
# plt.plot(index,inertia,"-o")
plt.show()
```

输出结果：

```
➜  Python_Workplace ipython k_means_cluster.py
[0.38937751658822506, 0.5614542787641772, 0.4834779533963621,
0.4381539507972644, 0.4071181742250774, 0.39122012638324916,
0.3836111661159799, 0.39710065914642656, 0.4028243567368712]
```

并且图：



轮廓系数的判别条件是，越接近1的状态，代表聚类的效果越好。从图上可以看出轮廓等于3的时候，效果最好。

- Mini Batch K-Means

实现方法在sklearn.cluster.miniBatchKmeans方法中。

Min Batch K-Means整体效果和K-Means方法很相似，他是一种K-Means的变种形式。与K-Means不同的是，他每次都会从全部数据抽样小数据集进行迭代。Mini K-Means算法也会减少聚类的算法时间损耗。

- Affinity Propagation

实现方法：sklearn.cluster.AffinityPropagation中。

Affinity Propagation又被称为亲和传播聚类。Affinity Propagation是基于数据点进行消

息传递的理念设计。与K-Means聚类算法不同的点在于，他不需要提前确定聚类的数量，即K值，但是运行的效率较低。

- Mean Shift

  实现方法:sklearn.cluster.MeanShift

  MeanShift 又被称为均值漂移聚类。Mean Shift 聚类的目的是找出最密集的区域， 同样 也是一个迭代过程。在聚类过程中，首先算出初始中心点的偏移均值，将该点移动到此偏 移均值，然后以此为新的起始点，继续移动，直到满足最终的条件。Mean Shift 也引入了核函数，用于改善聚类效果。除此之外，Mean Shift 在图像分割，视频跟踪等领域也 有较好的应用。

- Spectral Clustering

  实现方法:sklearn.cluster.SpectralClustering

  Spectral Clustering 又被称为谱聚类。谱聚类同样也是一种比较常见的聚类方法，它是从 图论中演化而来的。谱聚类一开始将特征空间中的点用边连接起来。其中，两个点距离越 远，那么边所对应的权值越低。同样，距离越近，那么边对应的权值越高。最后，通过对所有特征点组成的网络进行切分，让切分后的子图互相连接的边权重之和尽可能的低，而各子图内部边组成的权值和经可能高，从而达到聚类的效果。谱聚类的好处是能够识别任意形状的样本空间，并且可以得到全局最优解。

- Agglomerative Clustering

  实现方法:sklearn.cluster.AgglomerativeClustering

  Agglomerative Clustering 又被称为层次聚类。层次聚类算法是将所有的样本点自下而上合并组成一棵树的过程，它不再产生单一聚类，而是产生一个聚类层次。层次聚类通过计算各样本数据之间的距离来确定它们的相似性关系，一般情况下，距离越小就代表相似度越高。最后，将相似度越高的样本归为一类，依次迭代，直到生成一棵树。由于层次聚 类涉及到循环计算，所以时间复杂度比较高，运行速度较慢。

- Birch 聚类

  实现方法:sklearn.cluster.Birch

  Rirch 是英文 Balanced Iterative Reducing and Clustering Using Hierarchies 的简 称，它的中文译名为「基于层次方法的平衡迭代规约和聚类」。Birch 引入了聚类特征树(CF 树)，先通过其他的聚类方法将其聚类成小的簇，然后再在 簇间采用 CF 树对簇聚类。Birch 的优点是，只需要单次扫描数据集即可完成聚类，运行速度较快，特别适合大数据集。

- DBSCAN

实现方法:sklearn.cluster.DBSCAN

DBSCAN 是英文 Density-based spatial clustering of applications with noise 的简称，它的中文译名为「基于空间密度与噪声应用的聚类方法」。DBSCAN 基于密度概念，要求聚类空间中的一定区域内所包含的样本数目不小于某一给 定阈值。算法运行速度快，且能够有效处理特征空间中存在的噪声点。但是对于密度分布 不均匀的样本集合，DBSCAN 的表现较差。

- 算法对比

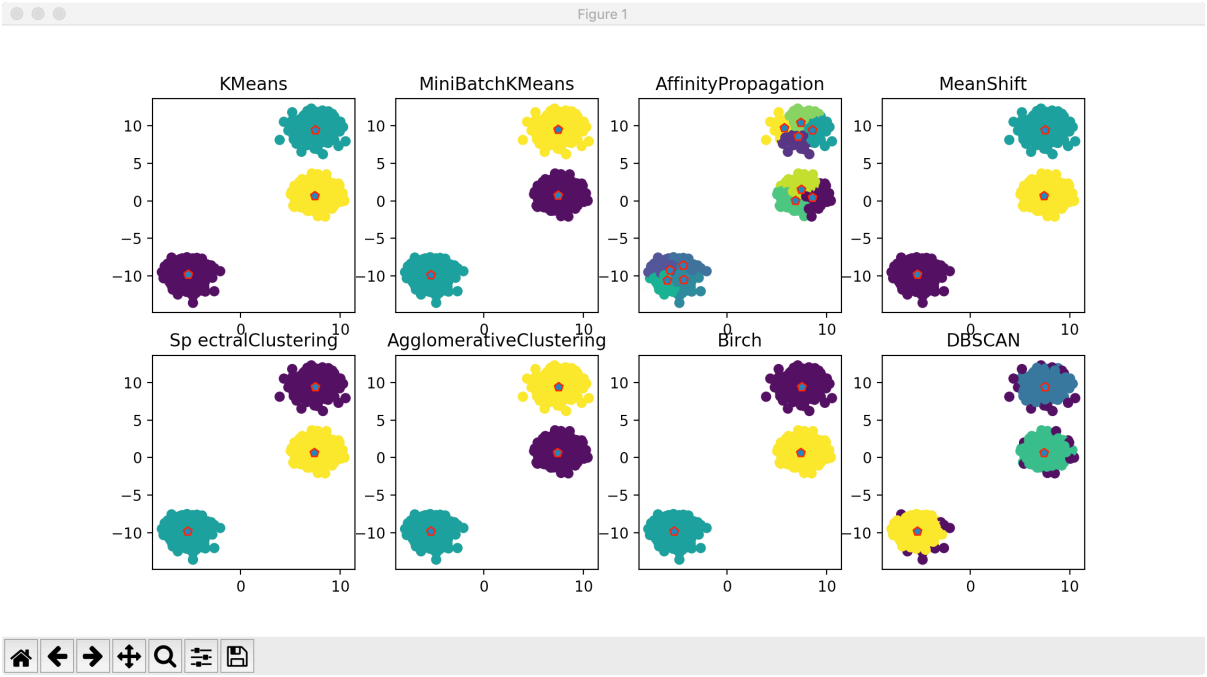
算法需要一个新的数据文件。代码和大致数据如下：

```
数据：
x    y    class
5.867498067    8.17715188    0
5.613699815    9.932955266    0
7.225084278    10.44886194    0
6.762822546    0.605145352    1
8.0161824    1.543147009    1
8.40185356    -0.373481315    1
6.511922767    9.81342902    0
7.399679603    0.91258881    1
-4.984363346    -11.42227525    2
9.888250958    0.902413919    1
8.80002143    8.543235209    0
7.95311372    8.368976645    0
6.108460663    8.233439954    0
8.339755138    8.888149572    0
8.88361084    9.01589874    0

脚本代码：

# -*- coding: utf-8 -*

from matplotlib import pyplot as plt
from sklearn import cluster
import pandas as pd
import numpy as np
from sklearn.metrics import silhouette_score

data = pd.read_csv("data_blobs.csv", header=0)
x = data[['x', 'y']]
y = data['class']
plot_num = 1 # 为绘制子图准备
```

```
cluster_names = ['KMeans', 'MiniBatchKMeans', 'AffinityPropagation',
'MeanShift', 'Sp ectralClustering', 'AgglomerativeClustering', 'Birch',
'DBSCAN']
# 确定聚类方法相应参数
cluster_estimators = [
    cluster.KMeans(n_clusters=3),
    cluster.MiniBatchKMeans(n_clusters=3),
    cluster.AffinityPropagation(),
    cluster.MeanShift(),
    cluster.SpectralClustering(n_clusters=3),
    cluster.AgglomerativeClustering(n_clusters=3),
    cluster.Birch(n_clusters=3),
    cluster.DBSCAN()
]

for name, algorithm in zip(cluster_names, cluster_estimators):
    algorithm.fit(x) # 聚类
    # 判断方法中是否由 labels_ 参数，并执行不同的命令
    if hasattr(algorithm, 'labels_'):
        algorithm.labels_.astype(np.int)
    else:
        algorithm.predict(x)
# 绘制子图
    plt.subplot(2, len(cluster_estimators) / 2, plot_num)
    plt.scatter(data['x'], data['y'], c=algorithm.labels_)
# 判断方法中是否由 cluster_centers_ 参数，并执行不同的命令
    if hasattr(algorithm, 'cluster_centers_'):
        centers = algorithm.cluster_centers_
    plt.scatter(centers[:, 0], centers[:, 1], marker="p", edgecolors="red")
# 绘制图标题
    plt.title(name)
    plot_num += 1
plt.show()
```

data_blobs.csv

最后，参照各类方法锁输出的结果如下图：



By Genesis.Ling