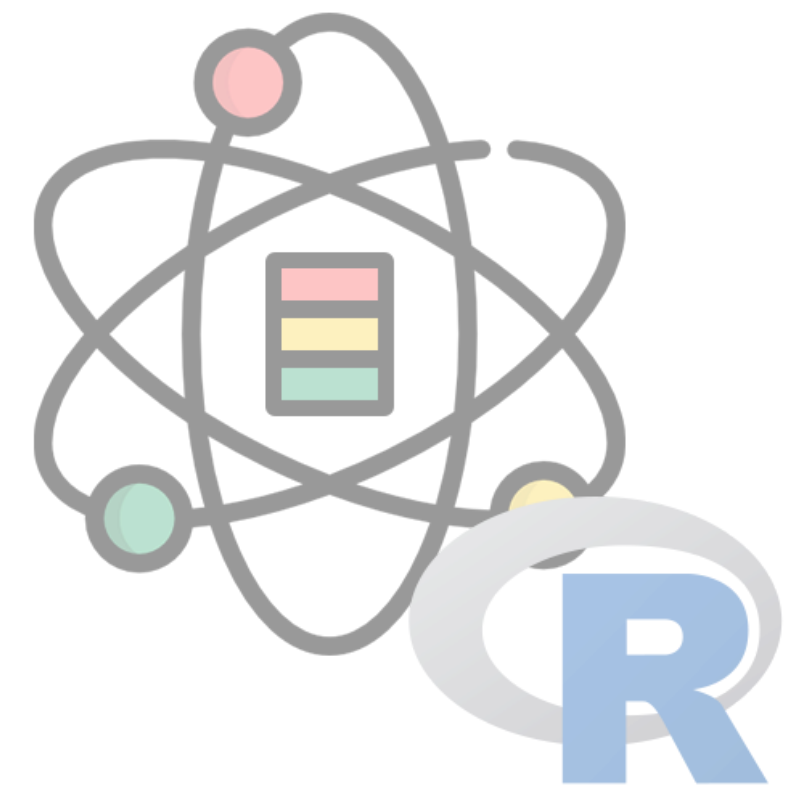


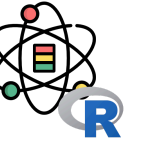
# 聚类算法

## Clustering Algorithms

范叶亮 Leo Van



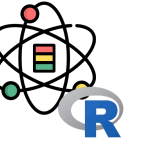
# 目录



- K-means
- 层次聚类
- 基于密度的聚类

# K-means

# K-means



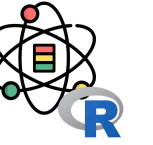
K-means 是一种简单的迭代性的聚类算法。对于数据集  $D = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ , 其中  $x_i \in \mathbb{R}^d$ , 需要指定利用 K-means 算法对数据划分成  $k$  个簇。对于数据集  $D$  的每个点  $x_i$  仅属于一个簇  $S_i$ , 则 K-means 算法的目标函数可以表示为:

$$\operatorname{argmin}_S \sum_{i=1}^k \sum_{x \in S_i} \|x - \mu_i\|_2^2 \quad (1)$$

其中  $\mu_i$  是簇  $S_i$  的均值向量。从目标函数不难看出, K-means 是通过一种“紧密程度”的形式对数据进行划分的, 衡量这种“紧密程度”一般我们会用到“距离”的概念。距离可以理解为在集合  $M$  上的一个度量 (Metric), 即

$$\operatorname{dist} : M \times M \rightarrow \mathbb{R} \quad (2)$$

# K-means



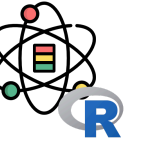
对于集合  $M$  中的  $x, y, z$ , 下列条件均成立:

1.  $dist(x, y) \geq 0$  (非负性)
2.  $dist(x, y) = 0$  当且仅当  $x = y$  (同一性)
3.  $dist(x, y) = dist(y, x)$  (对称性)
4.  $dist(x, z) \leq dist(x, y) + dist(y, z)$  (三角不等式)

对于点  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  和点  $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ , 常用的距离为  $p$  阶明可夫斯基距离 (Minkowski distance):

$$dist(x, y) = \left( \sum_{i=1}^n |x_i - y_i|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (3)$$

# K-means



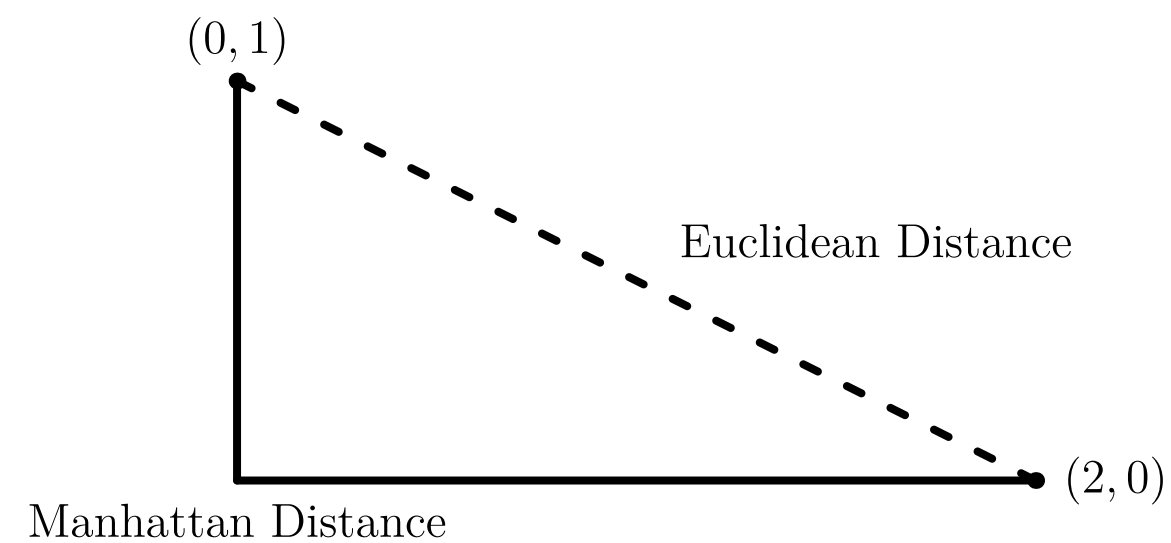
当  $p = 1$  时，称之为曼哈顿距离（Manhattan distance）或出租车距离：

$$dist_{man}(x, y) = \sum_{i=1}^n |x_i - y_i| \quad (4)$$

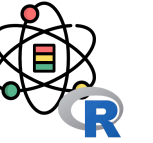
当  $p = 2$  时，称之为欧式距离（Euclidean distance）：

$$dist_{ed}(x, y) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2} \quad (5)$$

曼哈顿距离和欧式距离直观比较如图所示：



# K-means



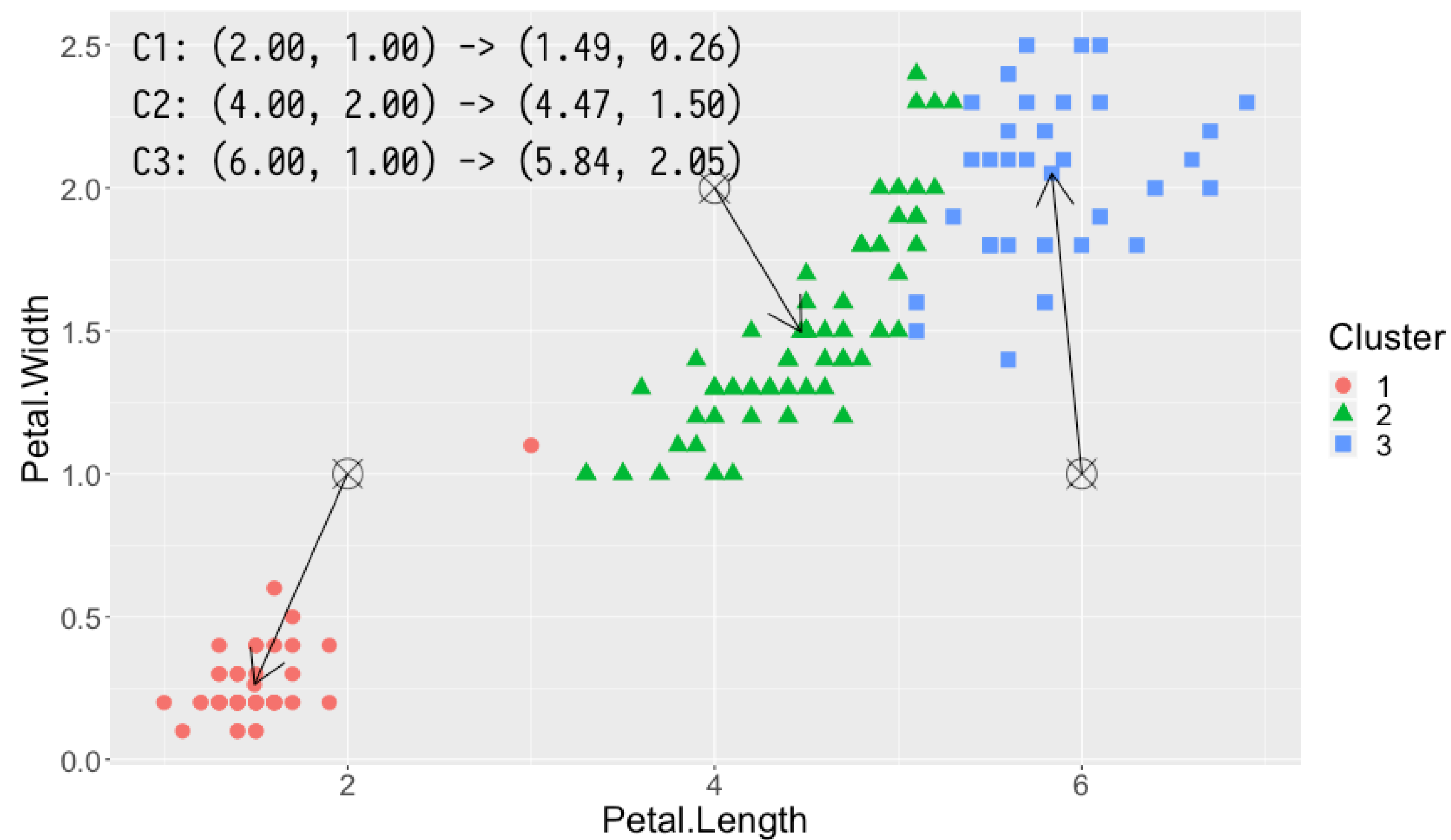
对于 K-means 算法，具体的计算过程如下：

1. 指定簇的个数为  $k$ ，并随机设置  $k$  个簇的中心，对于簇  $S_i$  其中心为  $\mu_i$ 。
2. 计算数据集  $D = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$  中的所有点  $x_j$  到每个簇的中心  $\mu_i$  的距离  $dist(x_j, \mu_i)$ 。
3. 对于点  $x_j$ ，从其到每个簇中心  $\mu_i$  的距离中选择距离最短的簇作为本轮计算中该点所隶属的簇。
4. 对于隶属于同一个簇的样本  $D_{S_i}$ ，计算这些样本点的中心，作为该簇新中心  $\mu_{i'}$ 。
5. 重复执行步骤 2 到步骤 4 直至簇中心不再发生变化或超过最大迭代次数。

通过上述步骤的计算，K-means 算法可以将样本点划分为  $k$  个簇，并得到每个簇的最终中心  $\mu_i$ 。

利用 K-means 算法，我们对 iris 数据集进行聚类分析。iris 数据集包含了 Sepal.Length, Sepal.Width, Petal.Length, Petal.Width 以及花的种类共 5 列数据。为了能够更直观的演示，我们仅采用 Petal.Length 和 Petal.Width 两列数据。K-means 是一种无监督的学习算法，因此我们并没有先验知识知道数据最适合分为几个簇，同时 K-means 算法又是一个对于聚类中心初始点敏感的算法，因此同样为了便于演示效果，在此我们设置簇的个数  $k = 3$ ，3 个簇对应的初始中心点分别为  $\mu_1 = (2, 1), \mu_2 = (4, 2), \mu_3 = (6, 1)$ 。

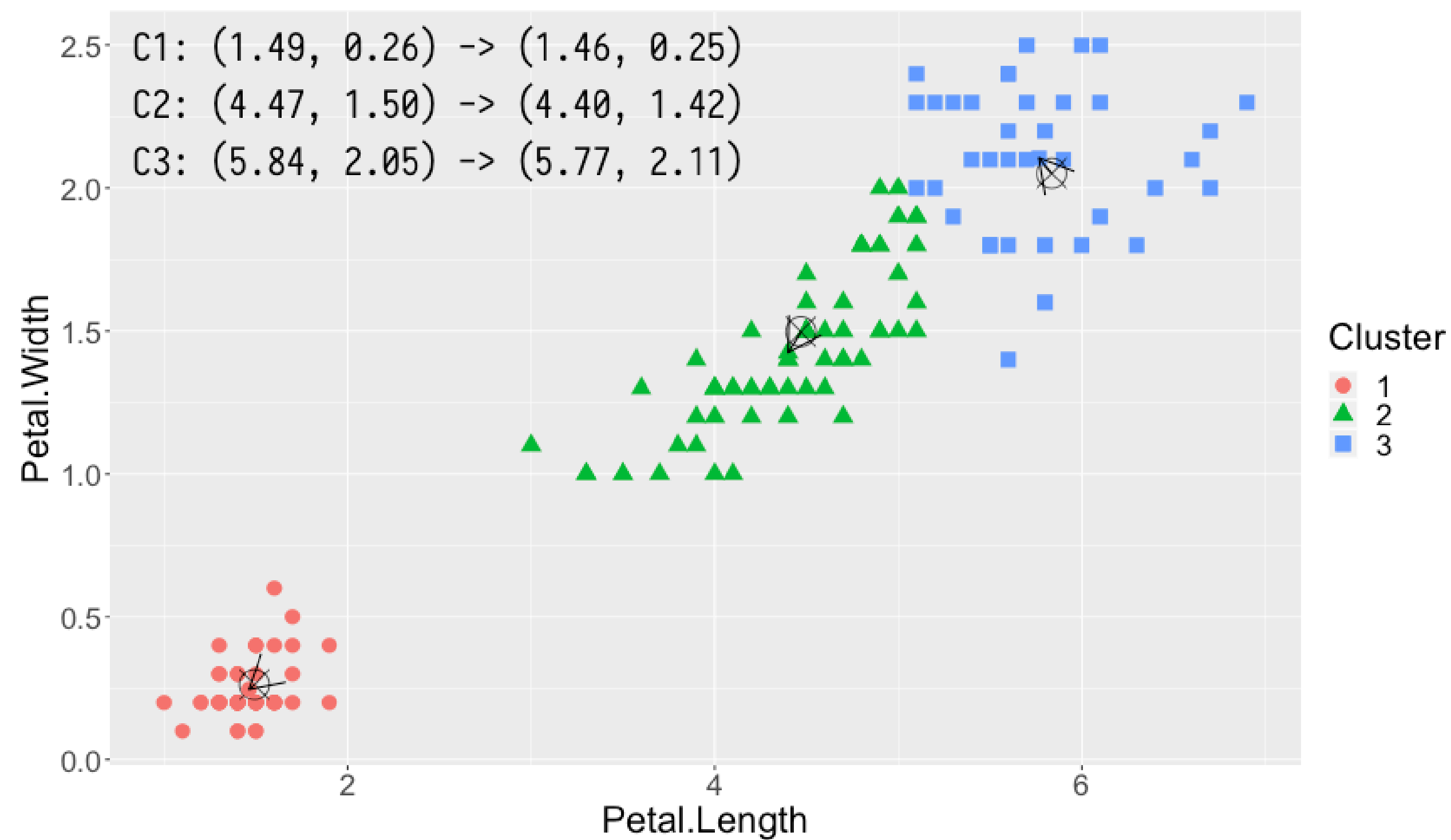
# K-means



K-means 第 1 轮

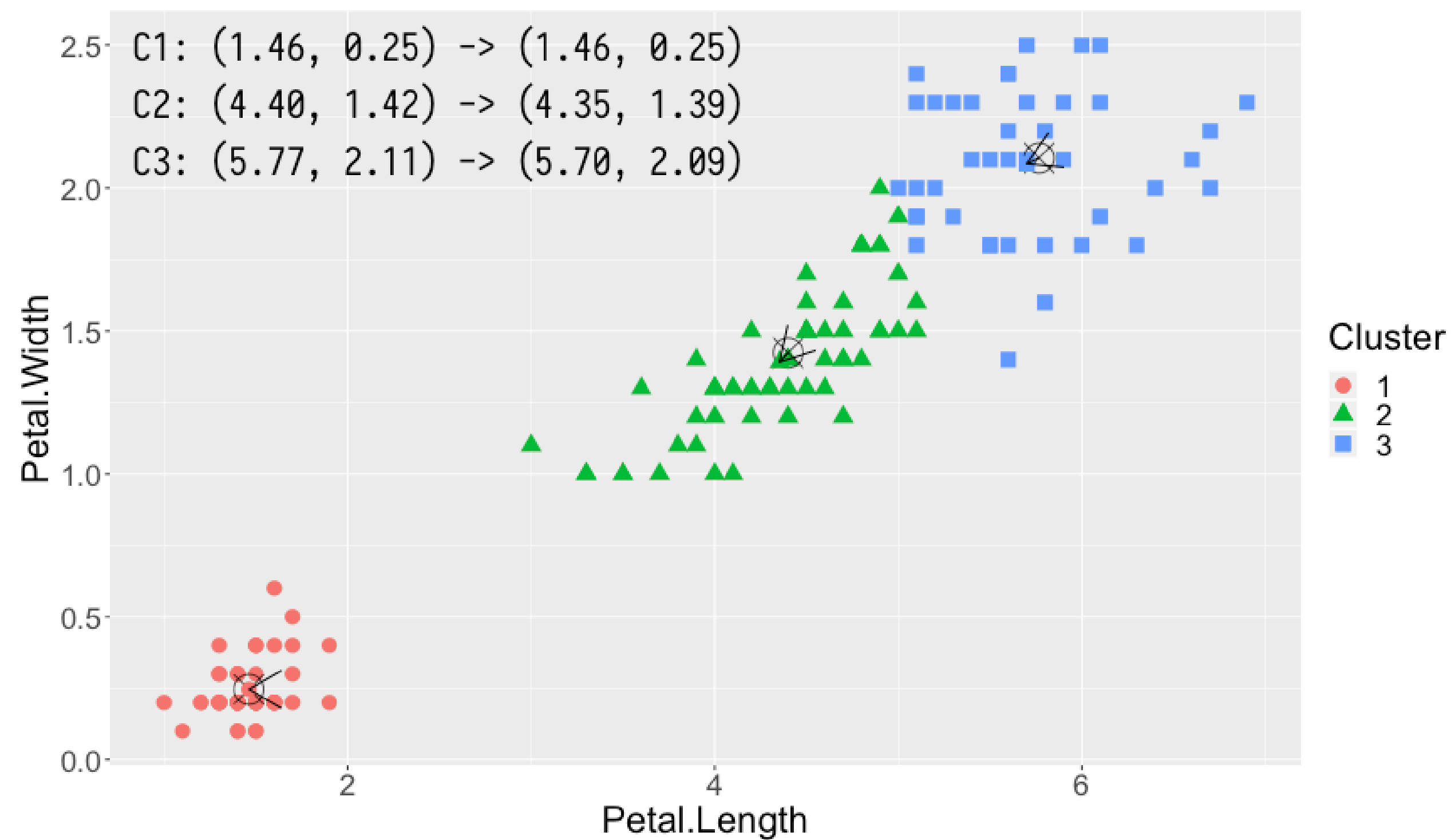


# K-means



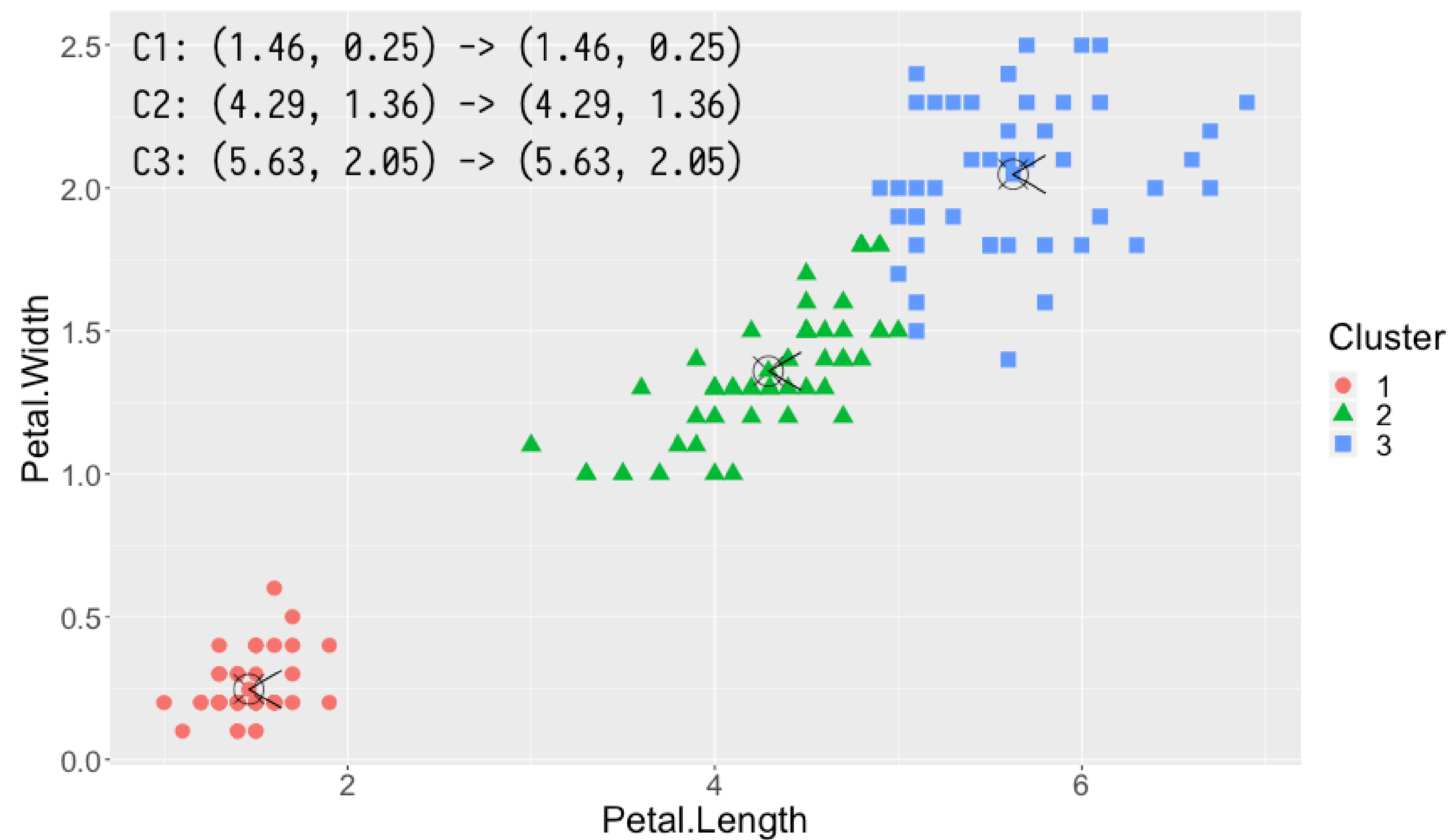
K-means 第 2 轮

# K-means



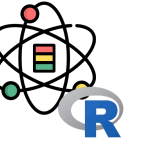
K-means 第 3 轮

# K-means



K-means 第 7 轮

# K-means



第 1 轮，第 2 轮，第 3 轮和第 7 轮（最终轮）计算得出的结果。其中每幅图左上角 3 组坐标分别表示了 3 个簇的中心更新前和更新后的位置。图中的  $\otimes$  号即为更新前簇的中心，箭头指向的方向即为更新后簇的中心，每轮计算中隶属不同簇的样本点利用颜色和形状加以了区分。

K-means 算法在一般数据集上可以得到较好的聚类效果，但同时也存在若干问题：

1. K-means 算法需要预先设置聚类个数  $k$ 。
2. K-means 是一个对于簇中心点起始位置敏感的算法，设置不同的簇中心点的起始位置可能得到不同的聚类结果。
3. 噪音数据对 K-means 算法的聚类结果影响较大。
4. 只能发现球状簇。

# K-means

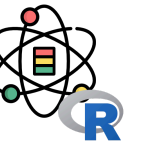


```
kmeans(x, centers, iter.max = 10, nstart = 1, algorithm = c("Hartigan-Wong", "Lloyd", "Forgy", "MacQueen"),
      trace = FALSE)
```

常用参数如下表所示：

参数	描述
x	数据
centers	聚类个数
iter.max	最大迭代次数
nstart	随机选择中心点的数量
algorithm	K-means 使用的算法, "Hartigan-Wong", "Lloyd", "Forgy", "MacQueen"

# K-means

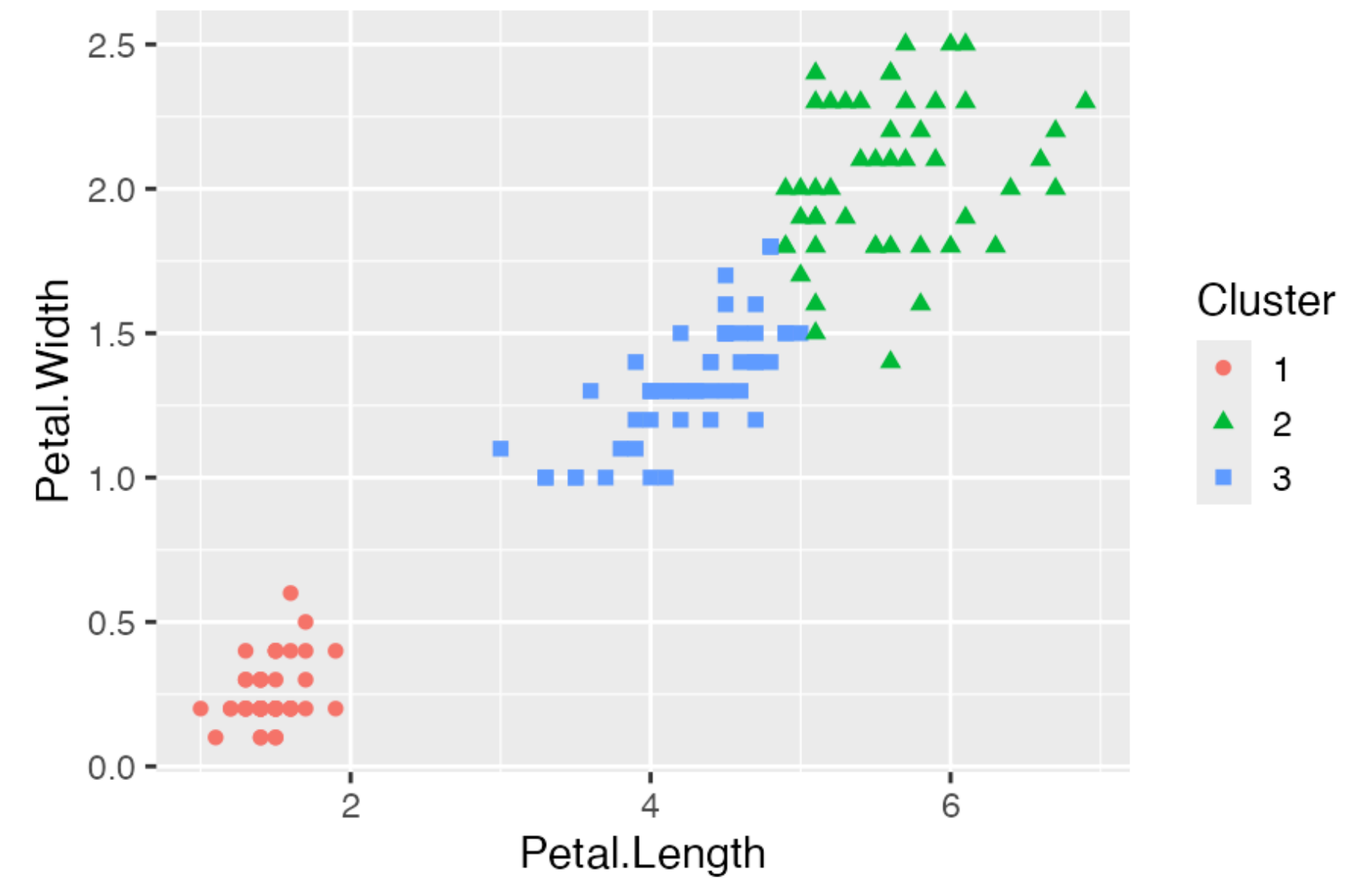


```
iris_ <- iris[, 3:4]

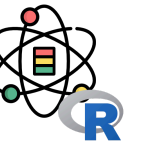
iris_kmeans <- kmeans(iris_, 3, nstart = 25)

iris_res <- dplyr::bind_cols(
  iris_,
  Cluster = as.factor(iris_kmeans$cluster)
)

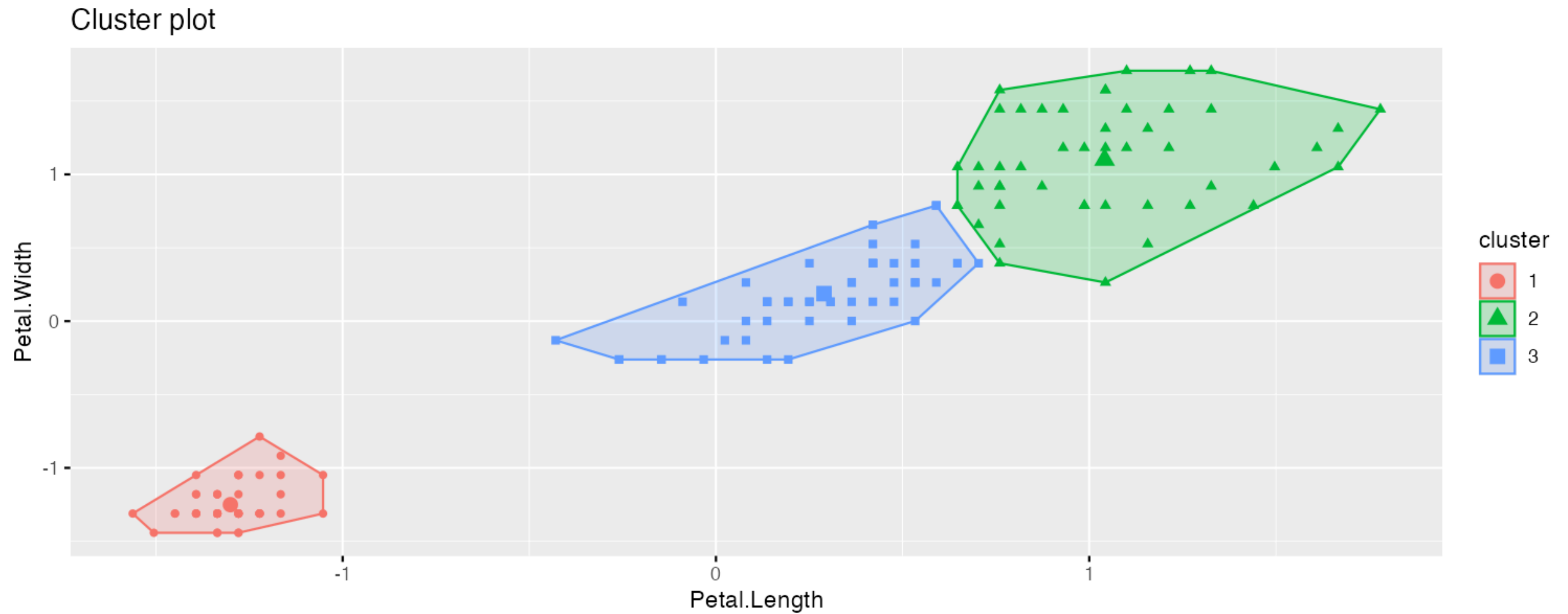
ggplot(iris_res, aes(Petal.Length, Petal.Width)) +
  geom_point(aes(color = Cluster, shape = Cluster))
```



# K-means



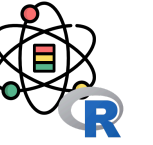
```
factoextra::fviz_cluster(iris_kmeans, data=iris_, geom=c("point"))
```



# 层次聚类



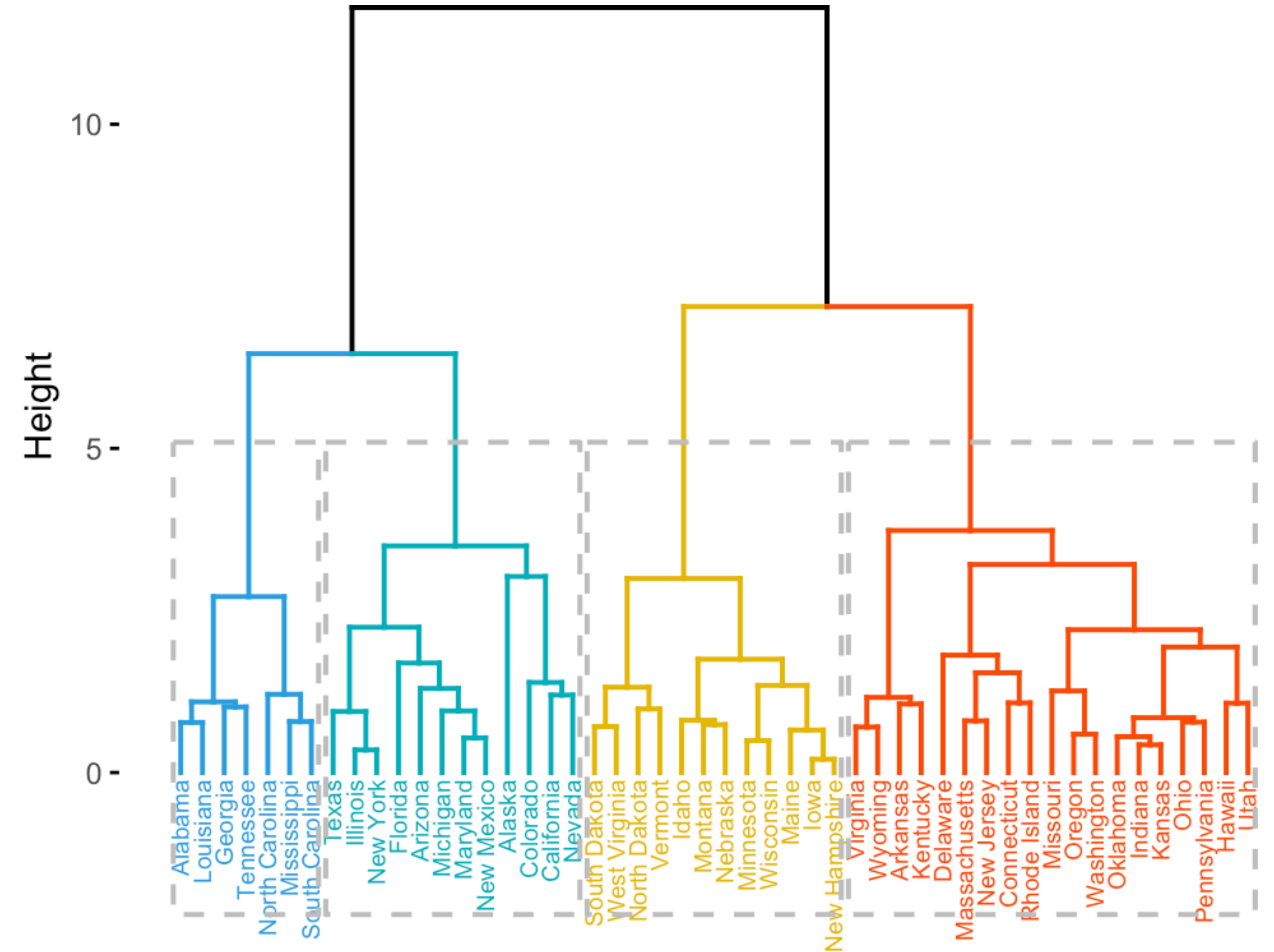
# 层次聚类



层次聚类（hierarchical clustering）不同于 K-means 那种基于划分的聚类，通过对数据集在不同层次上进行划分，直至达到某种条件。层次聚类根据分层的方法不同，可以分为凝聚（agglomerative）层次聚类和分裂（divisive）层次聚类。

AGNES（Agglomerative Nesting）算法是一种凝聚层次聚类算法，其基本思想如下：

1. 将数据集中每个样本作为一个簇。
2. 在每一轮计算中，找出两个距离最近的簇进行合并，生成一个新的簇。
3. 重复步骤 2，直至达到预设的聚类簇的个数。



图片来源：<https://www.datanovia.com/en/lessons/agglomerative-hierarchical-clustering/>

因此，对于 AGNES 算法而言，最关键的是如何计算两个簇之间的距离，对于簇  $C_i$  和簇  $C_j$ ，常用的距离计算方法有：

- 最小距离，即两个簇内部样本点之间距离的最小值：

$$dist_{min} = \min\{dist(x, y) | x \in C_i, y \in C_j\} \quad (6)$$

- 最大距离，即两个簇内部样本点之间距离的最大值：

$$dist_{max} = \max\{dist(x, y) | x \in C_i, y \in C_j\} \quad (7)$$

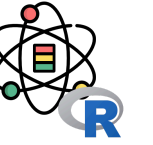
- 平均距离，即两个簇内部样本点之间距离的均值：

$$dist_{avg} = \frac{1}{|C_i||C_j|} \sum_{x \in C_i} \sum_{y \in C_j} dist(x, y) \quad (8)$$

- 重心距离，即两个簇重心之间的距离：

$$dist_{med} = dist(Median_{C_i}, Median_{C_j}) \quad (9)$$

# 层次聚类



DIANA (Divisive Analysis) 算法是一种分裂层次聚类算法，其基本思想如下：

1. 将数据集中全部样本作为一个簇。
2. 在每一轮计算中，对于“最大”的簇  $C$ ，找到  $C$  中与其他点的平均相异度最大的点  $p_0$ ，将其放在一个新的簇  $C_{new}$  中，剩余的点此时所组成的簇为  $C_{old}$ 。
3. 在簇  $C_{old}$  找到一个距离簇  $C_{new}$  最近，且距离小于到簇  $C_{old}$  的点  $p_i$ ，并将其加入到簇  $C_{new}$  中。
4. 重复步骤 3，直至无法找到符合条件的点  $p_i$ ，此时得到两个新簇  $C_{old}$  和  $C_{new}$ 。
5. 重复步骤 2 和步骤 3，直至达到预设的聚类簇的个数。

在 DIANA 算法中，衡量一个簇  $C$  的大小，一般利用簇的直径，即簇中任意两个样本之间距离的最大值；衡量簇  $C$  中一个点  $p$  的平均相异度，一般利用该点到簇中其他点距离的平均值。

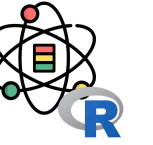
# 层次聚类



以 R 中 cluster 扩展包中的 animals 数据集为例，animals 数据集记录了 20 种不同昆虫和动物的 6 种属性值，数据示例如表所示，列分别为：温血， 会飞， 脊椎动物， 濒危， 群居动物， 有毛发：

样本 \ 特征	war	fly	ver	end	gro	hai
ant	1	1	1	1	2	1
bee	1	2	1	1	2	2
cat	2	1	2	1	1	2
...	...	...	...	...	...	...
spi	1	1	1	NA	1	2
wha	2	1	2	2	2	1

# 层次聚类

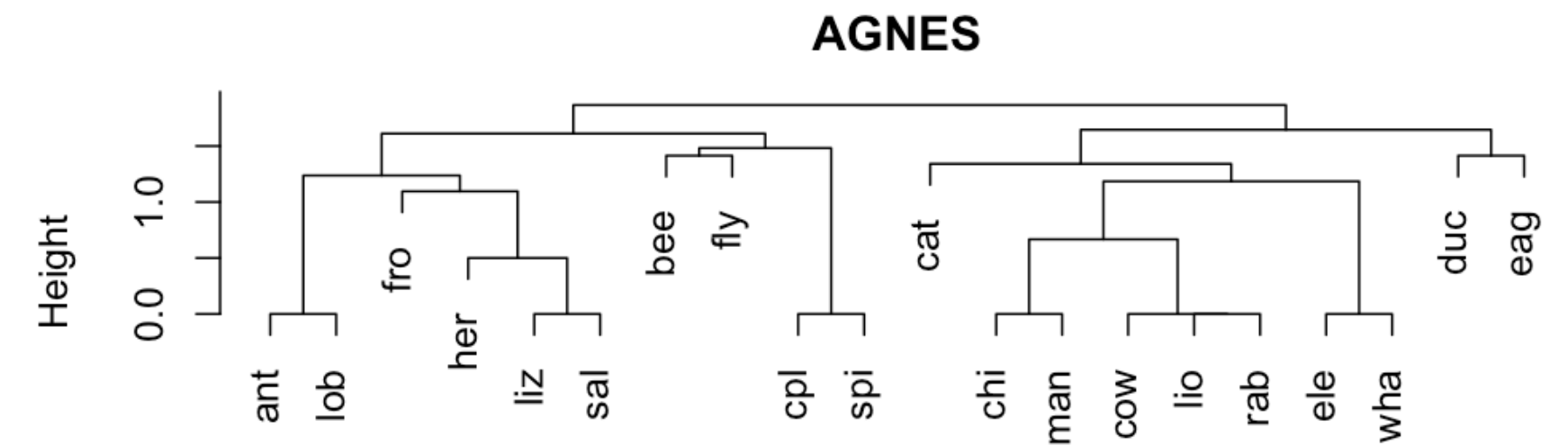


利用 AGNES 和 DIANA 算法对 animals 数据集进行层次聚类分析，可以得到层次聚类分析的树状图（dendrogram），如图所示：

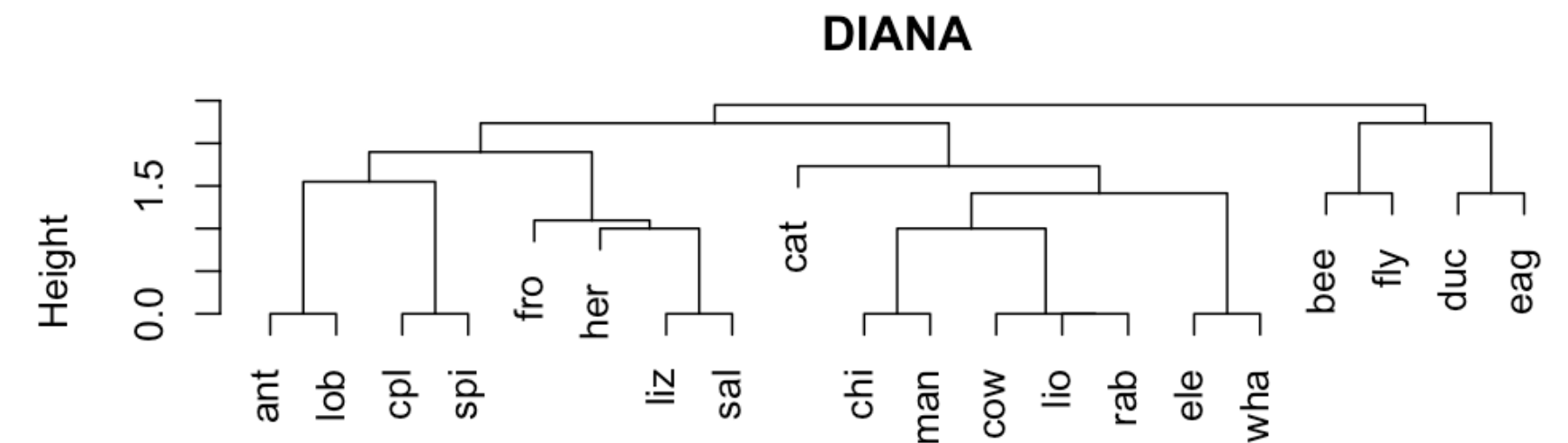
```
library(cluster)
data("animals")

animals_agnes ← agnes(animals)
plot(animals_agnes, which.plot = 2,
     main = "AGNES 算法")

animals_diana ← diana(animals)
plot(animals_diana, which.plot = 2,
     main = "DIANA 算法")
```



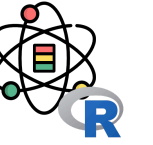
animals  
Agglomerative Coefficient = 0.77



animals  
Divisive Coefficient = 0.81

# 基于密度的聚类

# 基于密度的聚类



基于密度的聚类（density-based clustering）是一种通过样本的稠密程度划分聚类簇的方法。不同于基于距离的 K-means 和层次聚类方法往往只能生成球状的聚类簇，基于密度的聚类可以发现任意形状的聚类簇。

DBSCAN（density-based spatial clustering of applications with noise）是一种基于密度的聚类算法。DBSCAN 算法最重要的两个参数为  $\epsilon$  和  $MinPts$ ，两个参数分别确定了领域半径和定义了核心点的阈值，通过这两个参数可以刻画样本分布的稠密程度。对于数据集  $D = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ ，引入如下概念和记号：

- $\epsilon$  邻域（ $\epsilon$  neighborhood），对于  $x \in D$ ，称  $N_\epsilon(x)$  为  $x$  的  $\epsilon$  邻域。

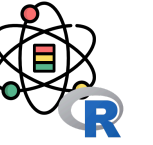
$$N_\epsilon(x) = \{y \in X | dist(x, y) \leq \epsilon\} \quad (10)$$

- 密度（density），对于  $x \in D$ ，称  $\rho(x)$  为  $x$  的密度。

$$\rho(x) = |N_\epsilon(x)| \quad (11)$$



# 基于密度的聚类



- 核心点 (core point)

对于  $x \in D$ , 若  $\rho(x) \geq MinPts$ , 则称  $x$  为一个核心点。  
假设  $D$  中所有核心点构成的集合为  $D_{core}$ , 记  
 $D_{n-core} = D \setminus D_{core}$  为所有非核心点的集合。

- 边界点 (border point)

对于  $x \in D_{n-core}$ , 且  $\exists y \in D$ , 满足

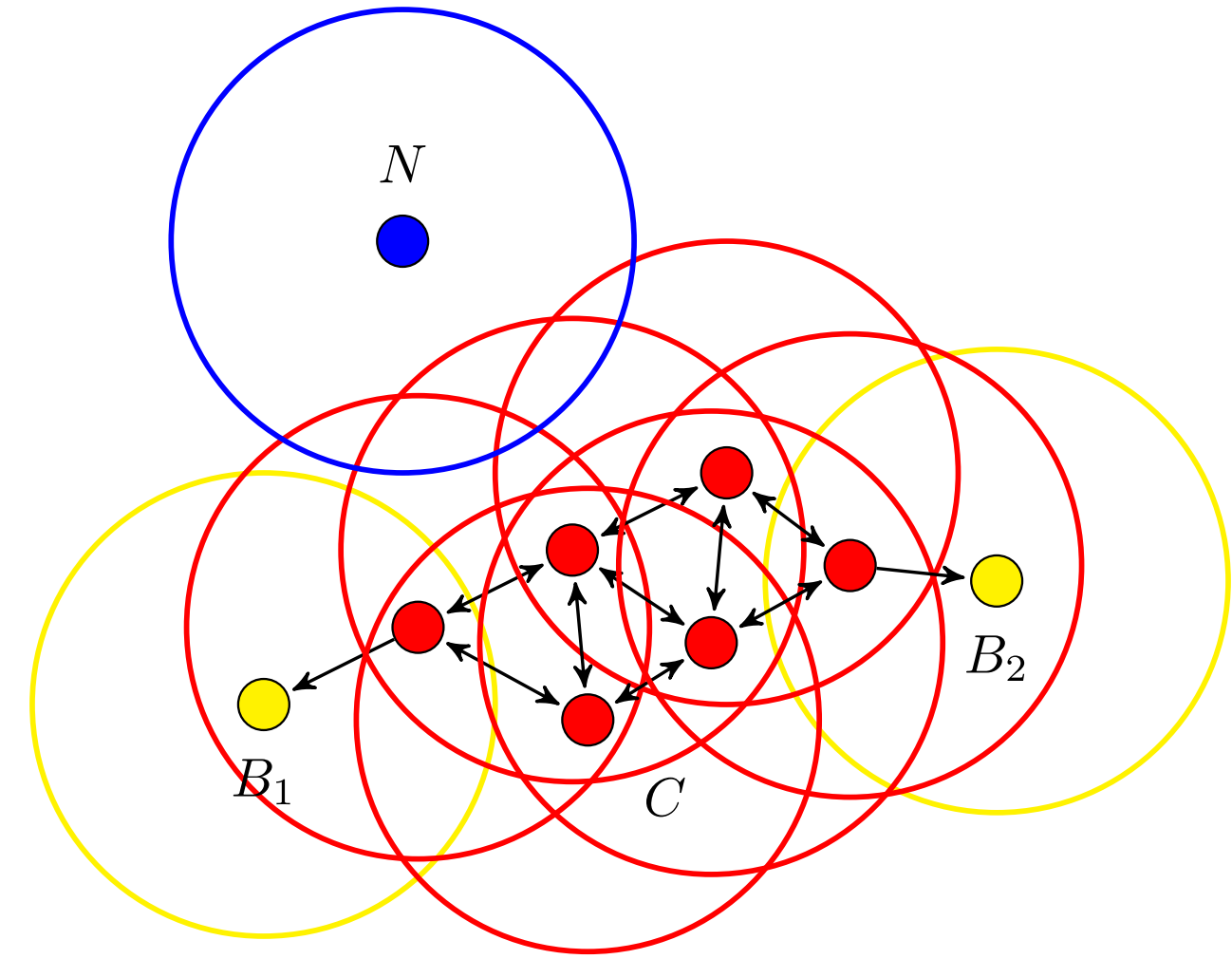
$$y \in N_{\epsilon}(x) \cap D_{core} \quad (12)$$

即点  $x$  所在的  $\epsilon$  邻域中存在核心点, 则称  $x$  为  $D$  的边界点, 记所有的边界点的集合为  $D_{border}$ 。

- 噪音点 (noise point)

记  $D_{noise} = D \setminus (D_{core} \cup D_{border})$ , 对于  $x \in D_{noise}$ , 则称  $x$  为噪音点。

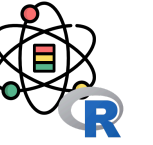
核心点, 边界点和噪音点示例如图所示:



其中  $C$  为 6 个核心点,  $B_1$  和  $B_2$  为 2 个边界点,  $N$  为 1 个噪音点。



# 基于密度的聚类



- 密度直达 (directly density-reachable)

对于  $x, y \in D$ , 若  $x \in D_{core}$ , 并且  $y \in N_{\epsilon}(x)$ , 则称  $y$  由  $x$  密度直达。

- 密度可达 (density-reachable)

若存在一个序列  $p_1, p_2, \dots, p_m \in D$ , 满足  $p_{i+1}$  由  $p_i$  密度直达, 则称  $p_m$  由  $p_1$  密度可达。

- 密度相连 (density-connected)

对于  $x, y, z \in D$ , 若  $y$  和  $z$  均由  $x$  密度可达, 则称  $y$  和  $z$  密度相连。

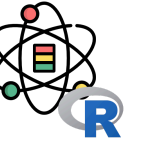
- 簇 (cluster)

对于非空子集  $C \in D$ , 如果称  $C$  为一个簇, 则对于  $x, y \in C$  满足:

1. 连接性 (connectivity): 对于  $x, y \in C$ , 则  $x$  和  $y$  密度相连。
2. 最大性 (maximality): 对于  $x \in C$ , 且  $y$  由  $x$  密度可达, 则  $y \in C$ 。

根据如上概念, DBSCAN 算法的基本为: 从一个核心点  $x$  出发, 寻找到  $x$  密度可达的所有样本点的集合  $X = \{x' \in D | x' \text{ 由 } x \text{ 密度可达}\}$ , 则  $X$  即为一个满足要求的簇。

# 基于密度的聚类



DBSCAN 算法如下:

---

## Algorithm 1 DBSCAN 算法

---

**Require:** 数据集  $D$ , 参数  $(\epsilon, MinPts)$

**Ensure:** 簇划分  $C = \{C_1, C_2, \dots, C_k\}$

```
1: procedure DBSCAN( $D, \epsilon, MinPts$ )
2:   初始化核心对象集合:  $I \leftarrow \emptyset$ 
3:   for  $i = 1$  to  $n$  do
4:     对于样本  $x_i$ , 生成  $\epsilon$  邻域  $N_\epsilon(x_i)$ 
5:     if  $\rho(x_i) \geq MinPts$  then
6:        $I \leftarrow I \cup \{x_i\}$ 
7:     end if
8:   end for
9:   初始化聚类个数:  $k \leftarrow 0$ 
10:  初始化未访问到集合:  $U \leftarrow D$ 
11:  //接下文
12: end procedure
```

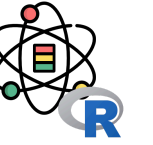
---

---

```
1: procedure DBSCAN( $D, \epsilon, MinPts$ )
2:   //接上文
3:   while  $I \neq \emptyset$  do
4:     当前为访问的样本集合:  $U_{old} \leftarrow U$ 
5:     随机选取核心点  $p \in I$ , 并初始化队列  $Q \leftarrow \{p\}$ 
6:      $U \leftarrow U \setminus \{p\}$ 
7:     while  $Q \neq \emptyset$  do
8:        $q \leftarrow Q$  的队首
9:       if  $\rho \geq MinPts$  then
10:         $R \leftarrow N_\epsilon(q) \cap U, Q \leftarrow Q \cup R, U \leftarrow U \setminus R$ 
11:       end if
12:     end while
13:      $k \leftarrow k + 1$ 
14:     生成簇  $C_k \leftarrow U_{old} \setminus U$ 
15:      $I \leftarrow I \setminus C_k$ 
16:   end while
17:   return  $C = \{C_1, C_2, \dots, C_k\}$ 
18: end procedure
```

---

# 基于密度的聚类

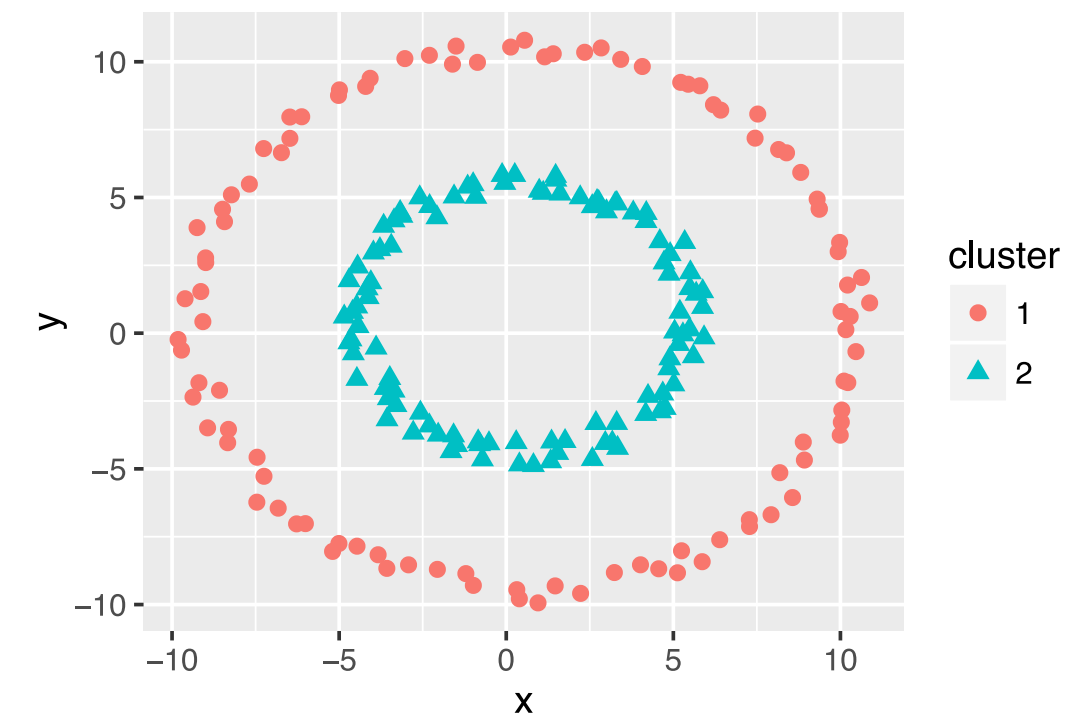
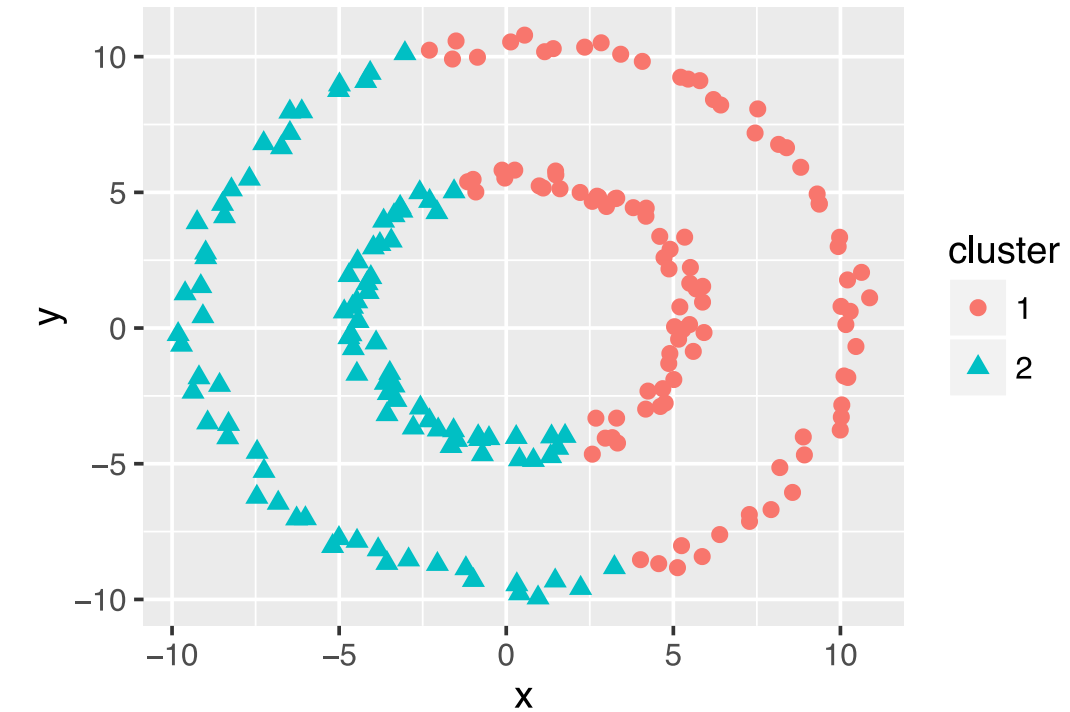


相比 K-means 算法，DBSCAN 算法有如下优势：

1. 不需要事先指定簇的个数  $k$ 。
2. 可以发现任意形状的簇。
3. 对噪音数据不敏感。

尽管相比 K-means，DBSCAN 算法有很多优势，但是对于不同的数据集，DBSCAN 算法的参数  $\epsilon$  和  $MinPts$  有时很难选取和优化。

一个非球形簇的数据分别利用 DBSCAN 算法和 K-means 算法进行聚类分析，对比结果如图所示：



# 基于密度的聚类

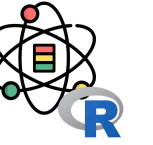


```
dbscan(x, eps, minPts = 5, weights = NULL, borderPoints = TRUE, ...)
```

常用参数如下表所示：

参数	描述
x	数据
eps	用于确定邻域的最小距离
minPts	用于确定一个点是否为核心点的样本个数
borderPoints	TRUE 则为一般 DBSCAN 算法，FALSE 则将边界点当作噪音处理

# 基于密度的聚类



```
library(dbscan)

set.seed(123)
a <- seq(0, 2*pi, by = pi/50)

x_1 <- 10 * cos(a) + runif(length(a), 0, 1)
y_1 <- 10 * sin(a) + runif(length(a), 0, 1)
x_2 <- 5 * cos(a) + runif(length(a), 0, 1)
y_2 <- 5 * sin(a) + runif(length(a), 0, 1)

points <- data.frame(
  x = c(x_1, x_2),
  y = c(y_1, y_2)
)
```

```
points_dbscan <- dbscan(
  points, eps = 3.5, minPts = 10)

points_dbscan
```

DBSCAN clustering for 202 objects.

Parameters: eps = 3.5, minPts = 10

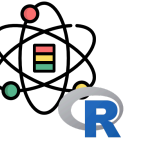
Using euclidean distances and borderpoints = TRUE

The clustering contains 2 cluster(s) and 0 noise points.

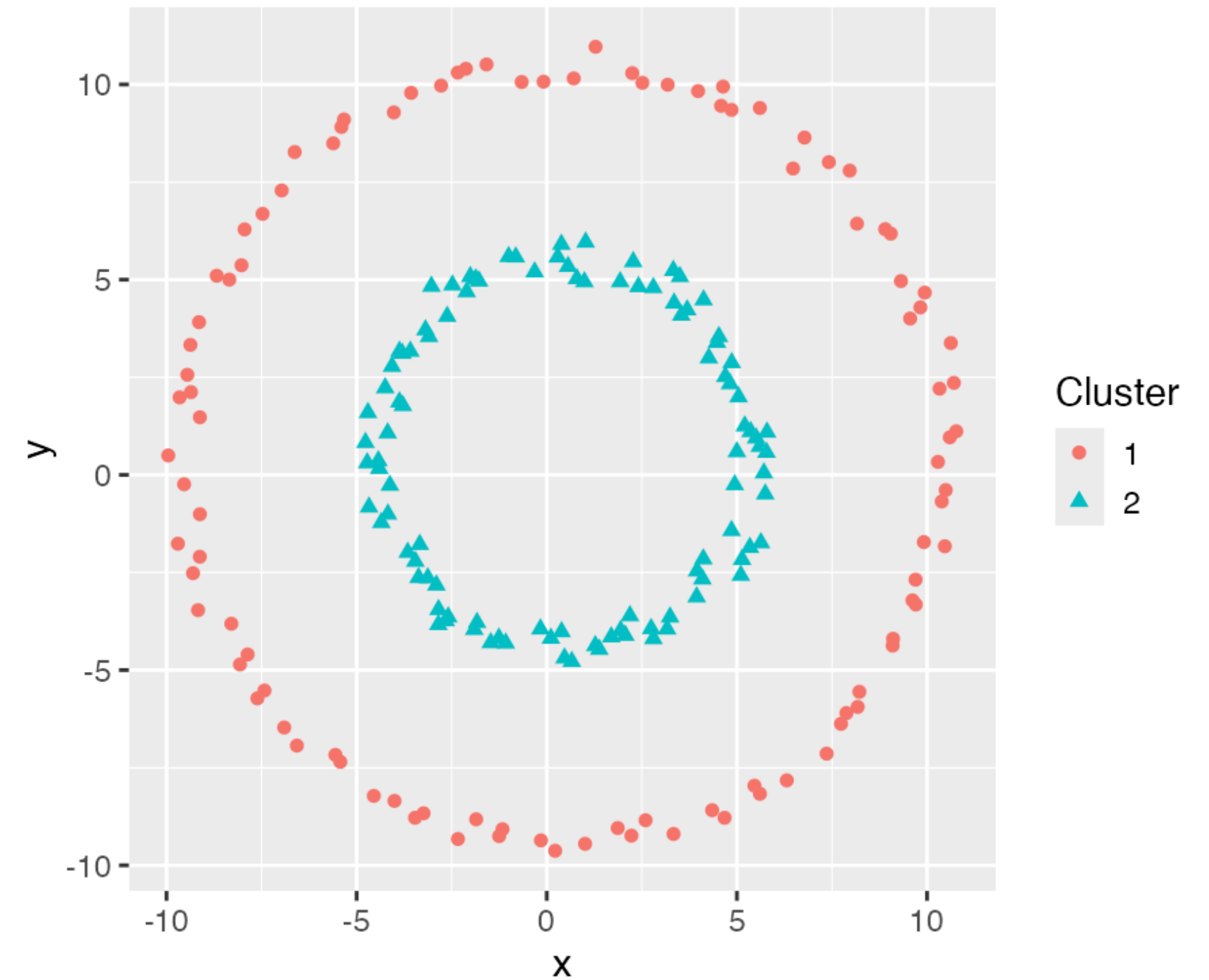
```
  1  2
101 101
```

Available fields: cluster, eps, minPts, metric, borderPoints

# 基于密度的聚类



```
points_plt <- dplyr::bind_cols(  
  points,  
  Cluster=as.factor(points_dbscan$cluster)  
)  
  
ggplot(points_plt, aes(x, y)) +  
  geom_point(aes(color = Cluster, shape = Cluster))
```



# 感谢倾听

本作品采用  授权

版权所有 © 范叶亮 Leo Van