深入剖析Mean Shift聚类算法原理

原创 石头 机器学习算法那些事 2019-06-20

Mean Shift（均值漂移）是基于密度的非参数聚类算法，其算法思想是假设不同簇类的数据集符合不同的概率密度分布，找到任一样本点密度增大的最快方向（最快方向的含义就是Mean Shift），样本密度高的区域对应于该分布的最大值，这些样本点最终会在局部密度最大值收敛，且收敛到相同局部最大值的点被认为是同一簇类的成员。

Mean Shift在计算机视觉领域的应用非常广，如图像分割，聚类和视频跟踪，小编曾经用Mean Shift实现目标跟踪，效果还不错。本文详细的总结了Mean Shift算法原理。

目录

1.核密度估计

Mean Shift算法用核函数估计样本的密度，最常用的核函数是高斯核。它的工作原理是在数据集上的每一个样本点都设置一个核函数，然后对所有的核函数相加，得到数据集的核密度估计（kernel density estimation）。

假设我们有大小为n的d维数据集$\{x_i\}$，核函数K的带宽为参数h。

数据集的核密度估计：

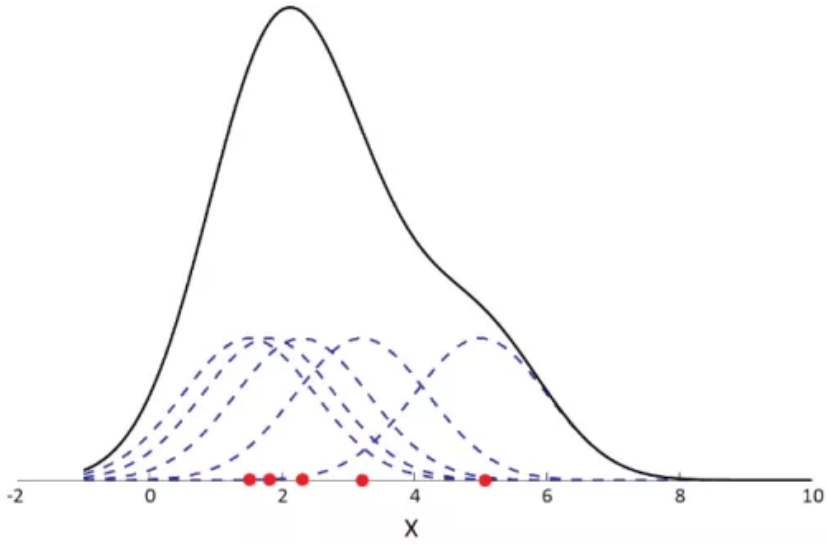
$$f(x)=\frac{1}{nh^d}\sum_{i=1}^{n}K(\frac{x-x_i}{h})$$

其中K(x)是径向对称函数（radially symmetric kernels），定义满足核函数条件的K(x)为：

$$K(x)=c_{k.d}k(\| x\|^2)$$

其中系数$c_{k,d}$是归一化常数，使K(x)的积分等于1。

如下图，我们用高斯核估计一维数据集的密度，每个样本点都设置了以该样本点为中心的高斯分布，累加所有的高斯分布，得到该数据集的密度。



其中虚线表示每个样本点的高斯核，实线表示累加所有样本高斯核后的数据集密度。因此，我们通过高斯核来得到数据集的密度。

2.Mean Shift算法

Mean Shift算法的基本目标是将样本点向局部密度增加的方向移动，我们常常所说的均值漂移向量就是指局部密度增加最快的方向。上节介绍了通过引入高斯核可以知道数据集的密度，梯度是函数增加最快的方向，因此，数据集密度的梯度方向就是密度增加最快的方向。

由上节可知，数据集密度：

$$f(x)=\frac{1}{nh^d}\sum_{i=1}^{n}K(\frac{x-x_i}{h}) \qquad (1)$$

上式的梯度为：

$$\nabla f(x)=\frac{2c_{k,d}}{nh^{d+2}}\sum_{i=1}^{n}(x_i-x)g\left(\left\|\frac{x-x_i}{h}\right\|^2\right)$$

$$=\frac{2c_{k,d}}{nh^{d+2}}\left[\sum_{i=1}^{n}g\left(\left\|\frac{x-x_i}{h}\right\|^2\right)\right]\left[\frac{\sum_{i=1}^{n}x_i g\left(\left\|\frac{x-x_i}{h}\right\|^2\right)}{\sum_{i=1}^{n}g\left(\left\|\frac{x-x_i}{h}\right\|^2\right)}-x\right] \qquad (2)$$

其中$g(s)=-k'(s)$，上式的第一项为实数值，因此第二项的向量方向与梯度方向一致，第二项的表达式为：

$$m_h(x)=\frac{\sum_{i=1}^{n}x_i g\left(\left\|\frac{x-x_i}{h}\right\|^2\right)}{\sum_{i=1}^{n}g\left(\left\|\frac{x-x_i}{h}\right\|^2\right)}-x$$

上式的含义就是本篇文章的主题：均值漂移。由上式推导可知：均值漂移向量所指的方向是密度增加最大的方向。

因此，Mean Shift算法流程为：

（1）计算每个样本的均值漂移向量$m_h(x)$

（2）对每个样本点以$m_h(x)$进行平移，即：

$$x_i = x_i + m_h(x_i)$$

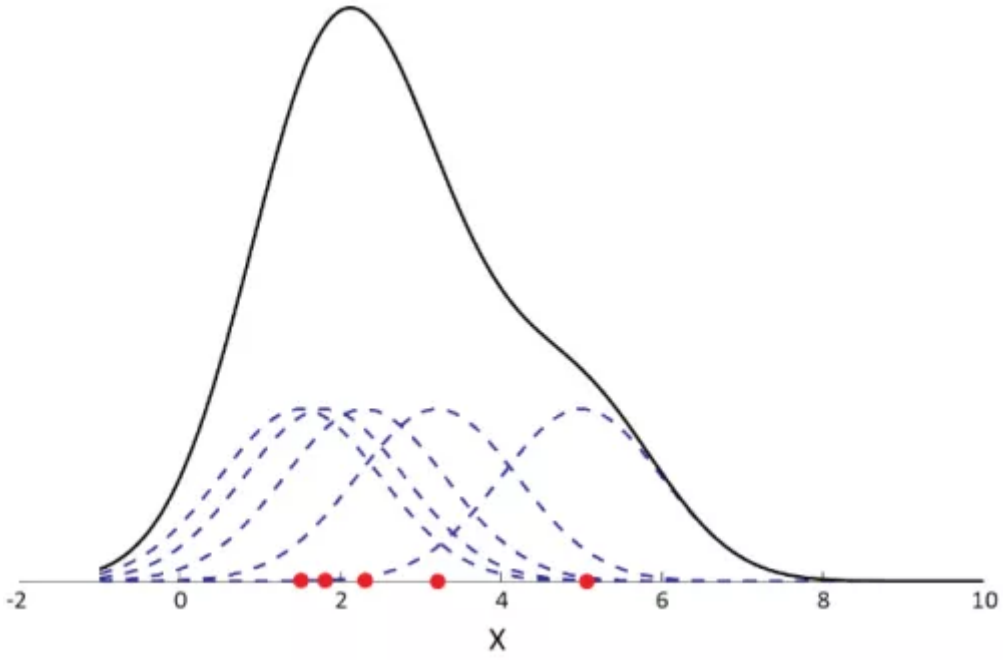
（3）重复（1）（2），直到样本点收敛，即：

$$m_h(x)=0$$

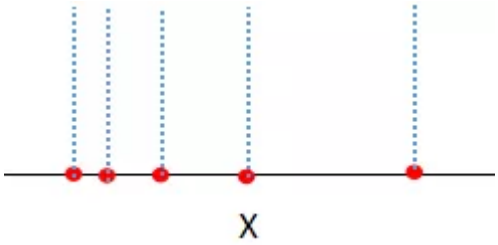
（4）收敛到相同点的样本被认为是同一簇类的成员

4.带宽对Mean Shift算法的影响

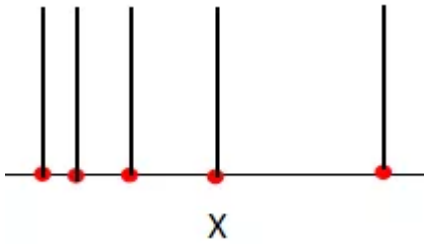
Mean Shift通过带宽来调节簇类的个数，本节用核概率密度的角度去理解带宽对Mean Shift算法的影响。如下图是一维数据集的核概率密度，其中虚线表示每个样本的核函数，实线是每个样本的核函数进行叠加，表示数据集的概率密度。该数据集的概率密度只有一个局部最大值，因此，mean shift算法的簇类个数是1。



若我们设置带宽的值接近于0，那么数据集样本的核函数类似于冲激函数，如下图：



累加每个样本的核函数，得数据集的概率密度：



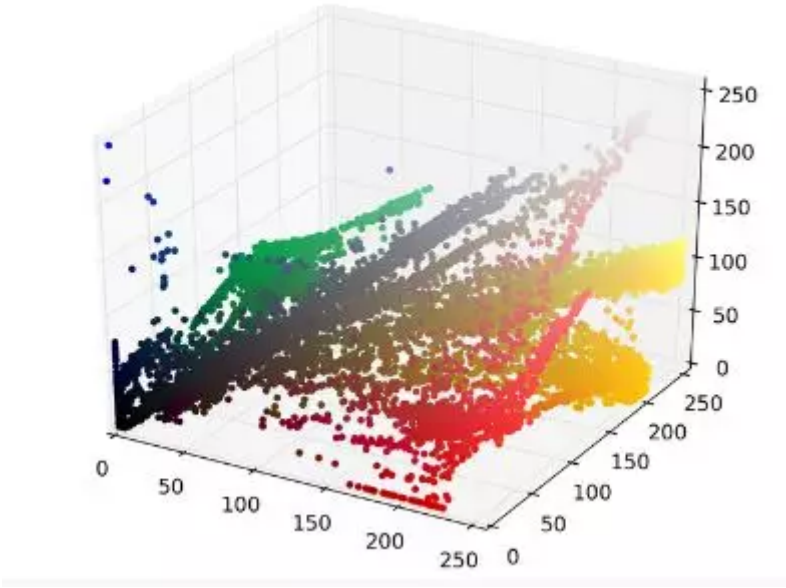
如上图，当带宽的值接近于0时，数据集的概率密度有5个局部最大值，mean shift算法的簇类个数是5。因此带宽决定了数据集的概率密度，进而影响了聚类结果。

5.图像分割

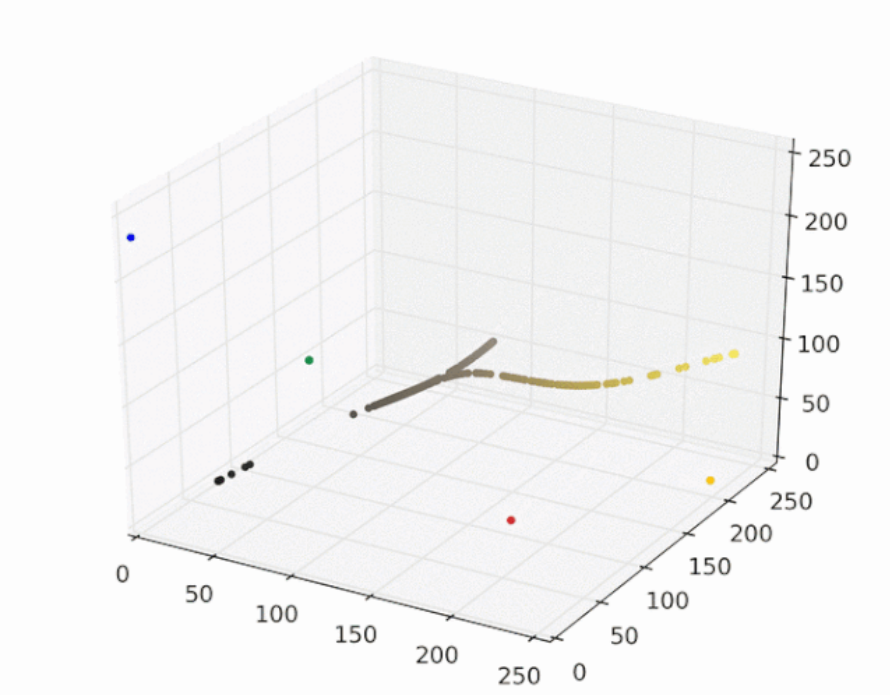
mean shift通过对像素空间进行聚类，达到图像分割的目的。

我们对下图进行图像分割：

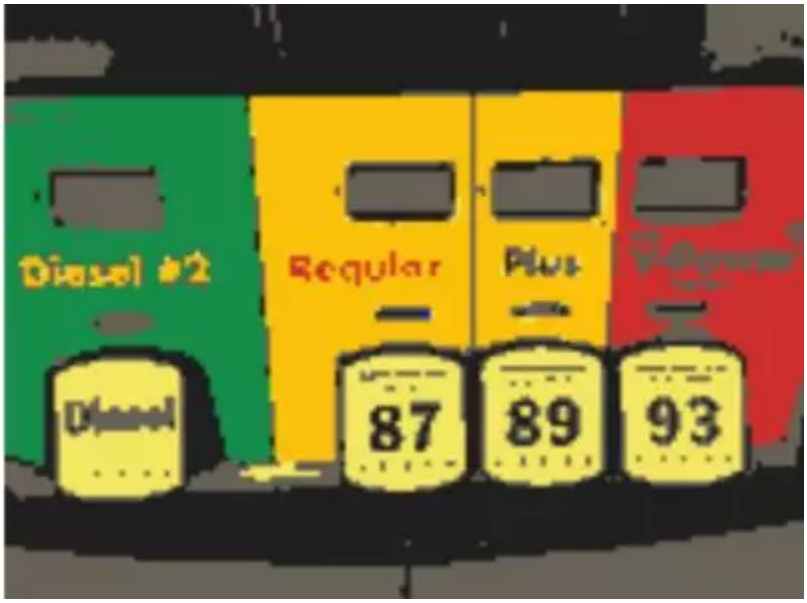
我们对上图的像素点映射为RGB三维空间：



然后运行mean shift算法，使用带宽为25的高斯核，如下gif给出每个样本收敛到局部最大核密度的过程：



每个样本点最终会移动到核概率密度的峰值，移动到相同峰值的样本点属于同一种颜色，下图给出图像分割结果：



图像分割代码请参考github：
https://github.com/mattnedrich/MeanShift_py。

6.聚类

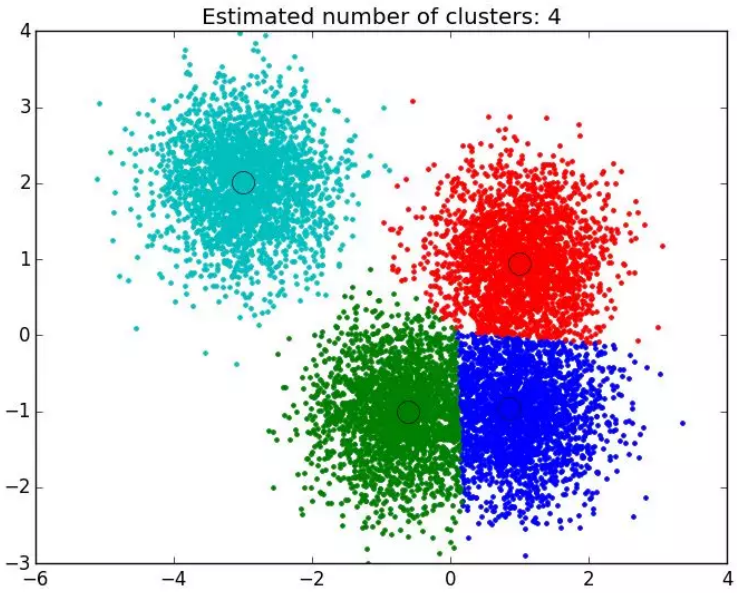
我们构建1000例4个簇类的样本数据：

```
#%% 产生样本数据
from sklearn.datasets import make_blobs
from itertools import cycle
from sklearn.cluster import MeanShift, estimate_bandwidth
centers = [[1, 1], [-.75, -1], [1, -1], [-3, 2]]
X, _ = make_blobs(n_samples=10000, centers=centers, cluster_std=0.6)
```

利用函数estimate_bandwidth估计核函数的带宽：

```
bandwidth = estimate_bandwidth(X, quantile=.1,n_samples=500)
```

运行mean shift算法，并可视化聚类结果：



8.Mean Shift算法的优缺点

优点：

不需要设置簇类的个数；

可以处理任意形状的簇类；

算法只需设置带宽这一个参数，带宽影响数据集的核密度估计

算法结果稳定，不需要进行类似K均值的样本初始化

缺点：

聚类结果取决于带宽的设置，带宽设置的太小，收敛太慢，簇类个数过多；带宽设置的太大，一些簇类可能会丢失。

对于较大的特征空间，计算量非常大。

参考：

https://spin.atomicobject.com/2015/05/26/mean-shift-clustering/

http://efavdb.com/mean-shift/

推荐阅读

k-means聚类算法原理总结

干货｜非常全面的谱聚类算法原理总结

DBSCAN聚类算法原理总结

聚类｜超详细的性能度量和相似度方法总结