

CS229 Lecture notes

原作者：[Andrew Ng](#) ([吴恩达](#))

翻译：[CycleUser](#)

k 均值聚类算法 (k-means clustering algorithm)

在聚类的问题中，我们得到了一组训练样本集 $\{x^{(1)}, \dots, x^{(m)}\}$ ，然后想要把这些样本划分成若干个相关的“类群 (clusters)”。其中的 $x^{(i)} \in \mathbb{R}^n$ ，而并未给出分类标签 $y^{(i)}$ 。所以这就是一个无监督学习的问题了。

K 均值聚类算法如下所示：

1. 随机初始化 (initialize) 聚类重心 (cluster centroids) $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k \in \mathbb{R}^n$ 。
2. 重复下列过程直到收敛 (convergence)：
对每个 i ，设

$$c^{(i)} := \arg \min_j ||x^{(i)} - \mu_j||^2$$

对每个 j , 设

$$\mu_j := \frac{\sum_{i=1}^m 1\{c^{(i)} = j\} x^{(i)}}{\sum_{i=1}^m 1\{c^{(i)} = j\}}$$

}

在上面的算法中, k 是我们这个算法的一个参数, 也就是我们要分出来的群组个数 (number of clusters) ; 而聚类重心 μ_j 表示的是我们对各个聚类的中心位置的当前猜测。在上面算法的第一步当中, 需要初始化 (initialize) 聚类重心 (cluster centroids), 可以这样实现: 随机选择 k 个训练样本, 然后设置聚类重心等于这 k 个样本 各自的值。(当然也还有其他的初始化方法。)

算法的第二步当中, 循环体内重复执行两个步骤: (i) 将每个训练样本 $x^{(i)}$ “分配 (assigning)” 给距离最近的聚类重心 μ_j ; (ii) 把每个聚类重心 μ_j 移动到所分配的样本点的均值位置。下面的 图1 就展示了运行 k 均值聚类算法的过程。

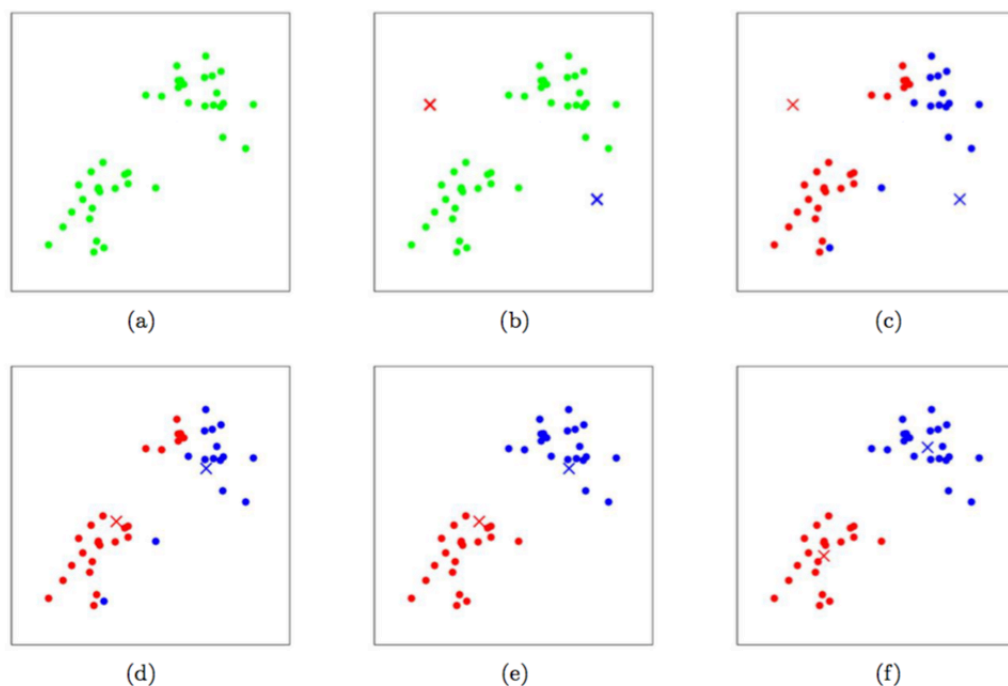


图1：k 均值聚类算法。图中的圆形点表示的是训练样本，交叉符号表示的是聚类重心。(a) 原始训练样本数据集。(b) 随机初始化的聚类重心（这里的初始化方法就跟我们上面说的不一样，并没有从训练样本中选择两个点）。(c-f) 运行 k 均值聚类算法中的两步迭代的示意图。在每一次迭代中，我们把每个训练样本分配给距其最近的聚类重心（用同样颜色标识出），然后把聚类重心移动到所分配的样本的均值位置。（用颜色区分效果最好了。）图片引用自 Michael Jordan。

K 均值聚类算法能保证收敛性么？可以的，至少在一定意义上能这么说。尤其是我们可以定义一个下面这样的函数作为失真函数（distortion function）：

$$J(c, \mu) = \sum_{i=1}^m ||x^{(i)} - \mu_{c(i)}||^2$$

这样就可以用 J 来衡量每个样本 $x^{(i)}$ 和对应的聚类重心 $\mu_{c^{(i)}}$ 之间距离的平方和。很明显能看出 k 均值聚类算法正好就是对 J 的坐标下降过程。尤其是内部的循环体中， k 均值聚类算法重复对 J 进行最小化，当 μ 固定的时候用 c 来最小化 J ，当 c 固定的时候则用 μ 最小化 J 。这样就保证了 J 是单调降低的（monotonically decrease），它的值也就必然收敛（converge）。（通常这也表明了 c 和 μ 也收敛。在理论上讲， k 均值可能会在几种不同的聚类之间摆动，oscillate，也就是说某些组不同值的 c 和/或 μ 对应完全相同的 J 值，不过在实践中这种情况几乎不会遇到。）

失真函数 J ，是一个非凸函数（non-convex function），所以对 J 进行坐标下降（coordinate descent）并不一定能够收敛到全局最小值（global minimum）。也就是说， k 均值聚类算法可能只是局部最优的（local optima）。通常除了这个问题之外， k 均值聚类效果都不错，能给出很好的聚类。如果你担心陷入到某些比较差的局部最小值，通常可以多次运行 k 均值距离（使用不同的随机值进行来对聚类重心 μ_j 进行初始化）。然后从所有的不同聚类方案（clusterings）中，选择能提供最小失真（distortion） $J(c, \mu)$ 的。