k-means聚类算法原理总结

石头 深度学习初学者 今天

k-means算法是非监督聚类最常用的一种方法，因其算法简单和很好的适用于大样本数据，广泛应用于不同领域，本文详细总结了k-means聚类算法原理 。

目录

1. k-means聚类算法原理

聚类算法性能度量的文章提到若簇类相似度好簇间的相似度差，则聚类算法的性能较好。我们基于此定义k-means聚类算法的目标函数：

$$J=\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{K}r_{ik}\parallel x_i-u_k\parallel^2 \quad (1.1)$$

其中 r_{ik} 表示当样本 x_i 划分为簇类k时为1，否则为0。

$$r_{ik} = \begin{cases} 1, x_i \in k \\ 0, x_i \notin k \end{cases}$$

u_k 表示簇类k的均值向量。

目标函数（1.1）在一定程度上刻画了簇内样本围绕簇均值向量的紧密程度，J值越小则簇内样本相似度越高。最小化目标函数是一个NP难题，k-means聚类运用EM算法思想实现模型的最优化。

1）初始化K个簇的均值向量，即 u_k 是常数，求J最小化时的 r_{ik} 。我们不难知道当数据点划分到离该数据点最近的簇类时，目标函数J取最小。

2）已知 r_{ik} ，求最小化J时相应的 u_k。令目标函数J对 u_k 的偏导数等于0：

$$\frac{\partial J}{\partial u_k} = \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} r_{ik}(x_i - u_k) = \sum_{i=1}^{N} r_{ik}(x_i - u_k) = 0$$

得：

$$u_k = \frac{\sum_{i=1}^{N} r_{ik} x_i}{\sum_{i=1}^{N} r_{ik}}$$

u_k 表达式的含义是簇类中心等于所属簇类样本的均值。

本节用EM算法思想解释了k-means聚类算法的参数更新过程，相信大家对k-means聚类算法有一个更清晰的认识。

2. k-means聚类算法步骤

k-means聚类算法步骤实质是EM算法的模型优化过程，具体步骤如下：

1）随机选择k个样本作为初始簇类的均值向量；

2）将每个样本数据集划分离它距离最近的簇；

3）根据每个样本所属的簇，更新簇类的均值向量；

4）重复（2）（3）步，当达到设置的迭代次数或簇类的均值向量不再改变时，模型构建完成，输出聚类算法结果。

3. k-means++聚类优化算法

若给定足够的迭代次数，k-means算法就能收敛，但是有可能在局部最小值点收敛。k-means收敛局部极值的原因很可能是初始化簇类中心的距离很接近，而且算法的收敛时间也加长了，为了避免这一情况，多次运行k-means聚类算法，每次运行初始化不同的簇类中心。

另一种解决k-means收敛局部极值的方法是k++聚类算法，k-means++通过让簇间中心互相远离的方案来初始化簇类中心。

具体算法步骤：

1）随机选择一个样本数据作为第一个簇类中心 C_1；

2）计算每一个样本 x_i 到簇类中心 C_j 的最小距离；

$$D(x_i) = \arg\min \| x_i - C_j \|_2^2 \quad j = 1,2,..,k$$

3）选择最大距离的样本点作为簇类中心；

4）重复（2）（3），直到达到簇类个数k；

5）利用这k个簇类中心作为初始化的簇类中心运行k-means算法；

4. 小批量处理的k-means聚类算法

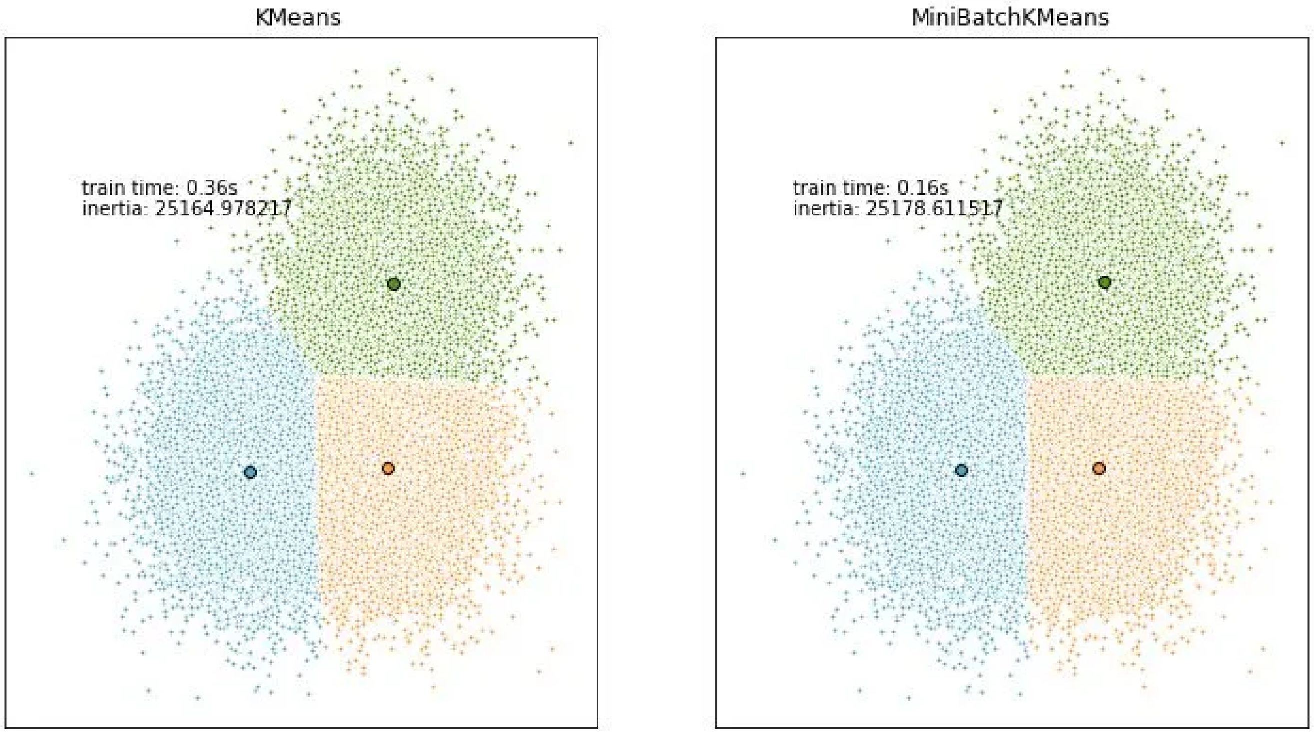
k-means聚类算法的时间复杂度随着样本数的增加而增大，若样本量达到上万时，k-means聚类算法非常耗时，因此对该数据集进行无放回随机抽样得到合适的小批量样本数据集，sklearn.cluster包提供了相应的实现方法MiniBatchKMeans。

小批量处理的k-means聚类算法在减少了收敛时间的同时，算法结果相差不大。如下结果用inertia评价k-means和MiniBatchKmeans的算法结果。

```
import time

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

from sklearn.cluster import MiniBatchKMeans, KMeans
from sklearn.metrics.pairwise import pairwise_distances_argmin
from sklearn.datasets.samples_generator import make_blobs

# Generate sample data
np.random.seed(0)
# minibatch随机抽样100例样本进行训练
batch_size = 100
centers = [[1, 1], [-1, -1], [1, -1]]
n_clusters = len(centers)
# 产生3个簇类的30000个样本数据
X, labels_true = make_blobs(n_samples=30000, centers=centers, cluster_std=0.7)

# k-means++算法
k_means = KMeans(init='k-means++', n_clusters=3, n_init=10)
t0 = time.time()
k_means.fit(X)
t_batch = time.time() - t0

# MiniBatchKMeans算法
mbk = MiniBatchKMeans(init='k-means++', n_clusters=3, batch_size=batch_size,
                      n_init=10, max_no_improvement=10, verbose=0)
t0 = time.time()
mbk.fit(X)
t_mini_batch = time.time() - t0

# 打印k-means++运行时间和性能度量
print("k-means++_runtime= ",t_batch)
print("k_means++_metics= ",k_means.inertia_)
```

```
# 打印minibatch_k_means++运行时间和性能度量值
print("MiniBatch_k_means++_runtime= ",t_mini_batch)
print("k_means_metics= ",mbk.inertia_)

#>
k-means++_runtime=  0.36002039909362793
k_means++_metics=  25164.97821695812
MiniBatch_k_means++_runtime=  0.15800929069519043
k_means_metics=  25178.611517320118
```

图形结果表示:



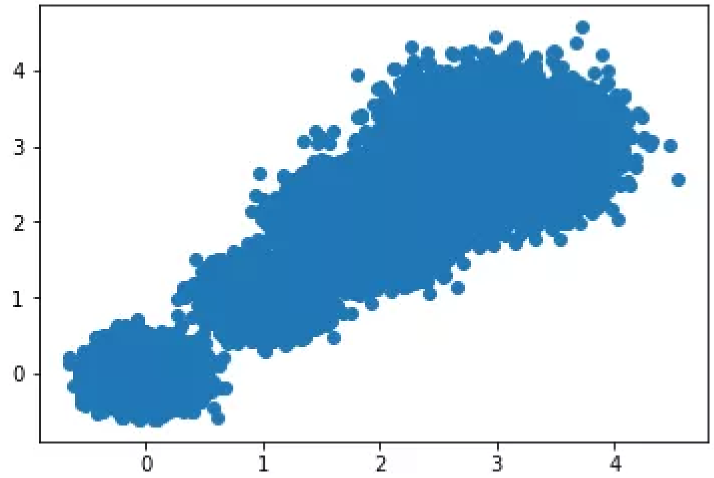
5. 簇类个数k的选取

我们运用Calinski-Harabasz分数作为评价聚类性能的标准，分数越大，聚类性能越好，Calinski-Harabasz的含义请参考该文，

我们首先构建四个不同标准差的二维样本数据：

```
from sklearn import metrics
# 定义四个簇类中心
centers1 = [[0,0],[1, 1],[1.9, 2],[3, 3]]
# 定义每个簇类的标准差
std1 = [0.19,0.2,0.3,0.4]
# 算法可重复性
seed1 =45
# 产生4个簇类的30000个样本数据
X, labels_true = make_blobs(n_samples=30000, centers=centers1, cluster_std=std1,random_state=seed1)
plt.scatter(X[:,0],X[:,1],marker='o')
plt.show()
```

数据散点图如下：

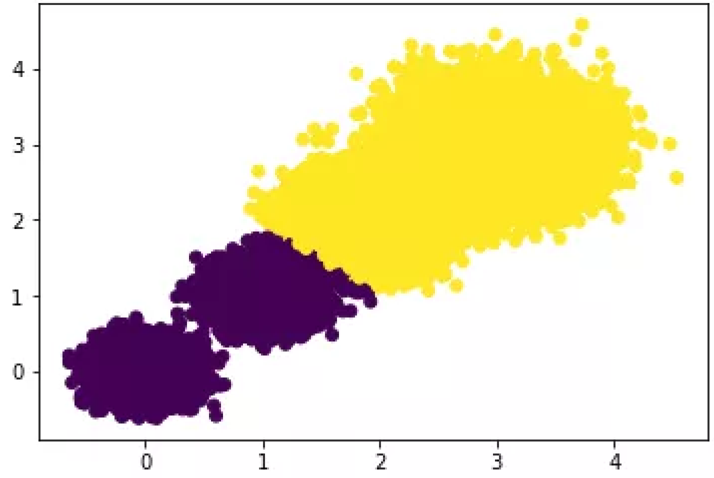


首先选择簇类个数为2，即K=2，查看聚类效果图和Calinski-Harabasz分数。

```
# 若我们选择k=2
k_means = KMeans(init='k-means++', n_clusters=2, n_init=10,random_state=10)
y_pred = k_means.fit_predict(X)
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y_pred)
plt.show()
```

```
scores2 = metrics.calinski_harabaz_score(X,y_pred)
print("the Calinski-Harabasz scores(k=2) is: ",scores2)
```

散点图效果:

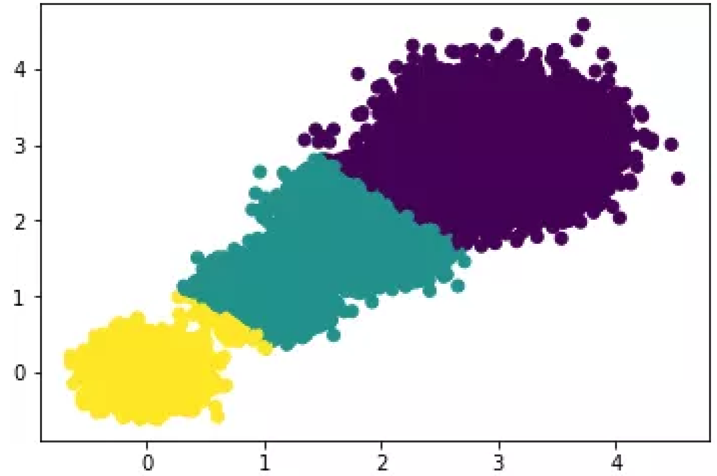


Calinski-Harabasz分数:

```
#> the Calinski-Harabasz scores(k=2) is:  85059.39875951338
```

选择簇类个数为3，即K=3，查看聚类效果图和Calinski-Harabasz分数。

散点图效果:

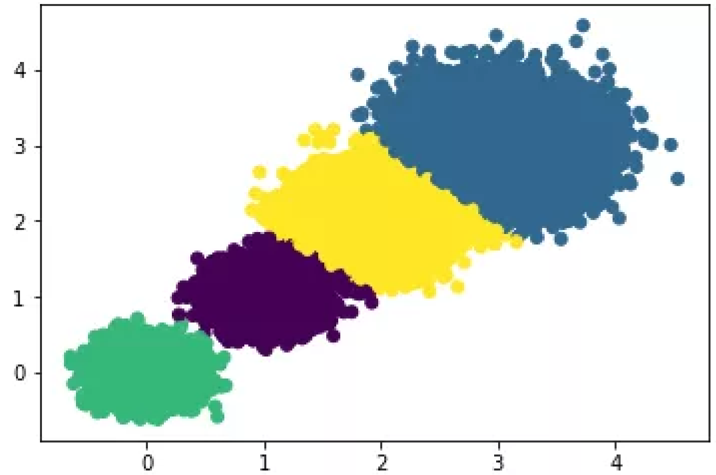


Calinski-Harabasz分数：

```
#> the Calinski-Harabasz scores(k=3) is:  92778.08155077342
```

选择簇类个数为4，即K=4，查看聚类效果图和Calinski-Harabasz分数。

散点图效果：



Calinski-Harabasz分数：

```
#> the Calinski-Harabasz scores(k=4) is:  158961.98176157777
```

有结果可知：k=4时的Calinski-Harabasz分数最高，因此选择簇类个数为4 。

6. k-means聚类算法不适用的几个场景

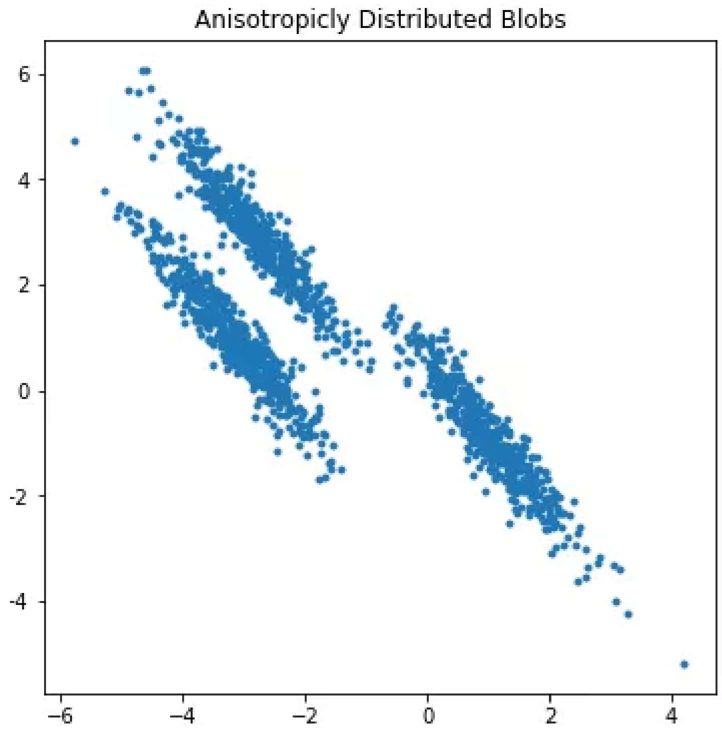
k_means算法假设数据是各向同性的，即不同簇类的协方差是相等的，通俗讲就是样本数据落在各个方向的概率是相等的。

1）若样本数据是各向异性的，那么k-means算法的效果较差。

生成一组各向异性的样本数据：

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

from sklearn.cluster import KMeans
from sklearn.datasets import make_blobs

plt.figure(figsize=(6, 6))

n_samples = 1500
random_state = 170
X, y = make_blobs(n_samples=n_samples, random_state=random_state)

# 生成各项异性的数据
transformation = [[0.60834549, -0.63667341], [-0.40887718, 0.85253229]]
X_aniso = np.dot(X, transformation)

plt.scatter(X_aniso[:, 0], X_aniso[:, 1], marker='.')
plt.title("Anisotropicly Distributed Blobs")

plt.show()
```

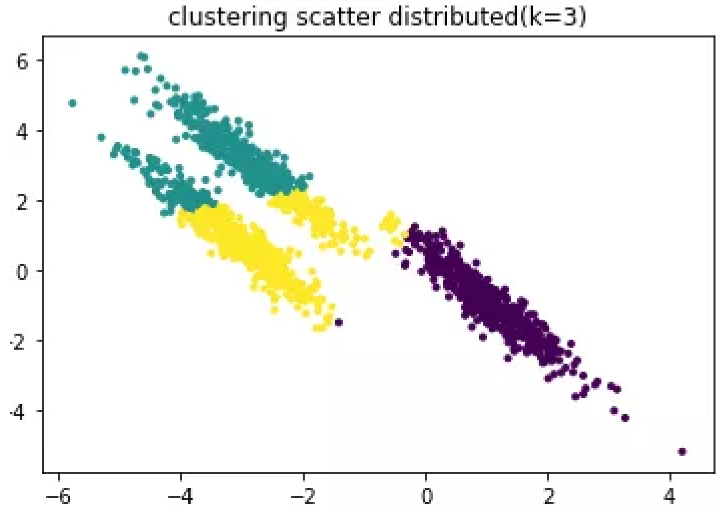
生成样本数据的散点图效果：



根据散点图分布，我们用簇类数k=3训练样本数据：

```
# k =3训练数据，输出散点效果图
y_pred = KMeans(n_clusters=3, random_state=random_state).fit_predict(X_aniso)
plt.scatter(X_aniso[:, 0], X_aniso[:, 1], marker='.',c=y_pred)
plt.title("clustering scatter distributed k=3")
plt.show()
```

聚类效果图：



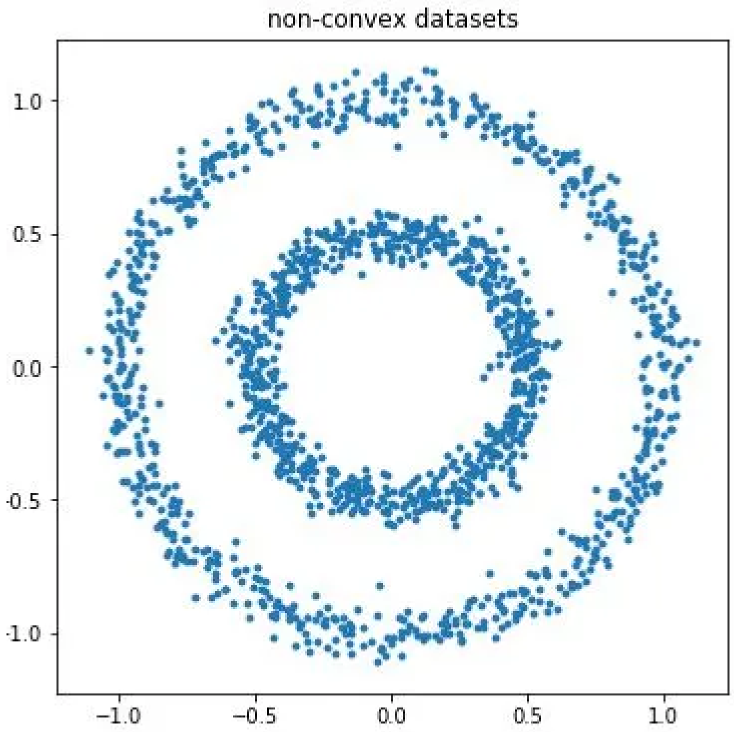
由上图可知聚类效果很差。

2）当样本数据集是非凸数据集时，k-means聚类效果较差：

首先生成非凸数据集：

```
# 非凸数据集
plt.figure(figsize=[6,6])
from sklearn import cluster,datasets
n_samples = 1500
noisy_circles = datasets.make_circles(n_samples=n_samples, factor=.5, noise=.05)
plt.scatter(noisy_circles[0][:,0],noisy_circles[0][:,1],marker='.')
plt.title("non-convex datasets")
plt.show()
```

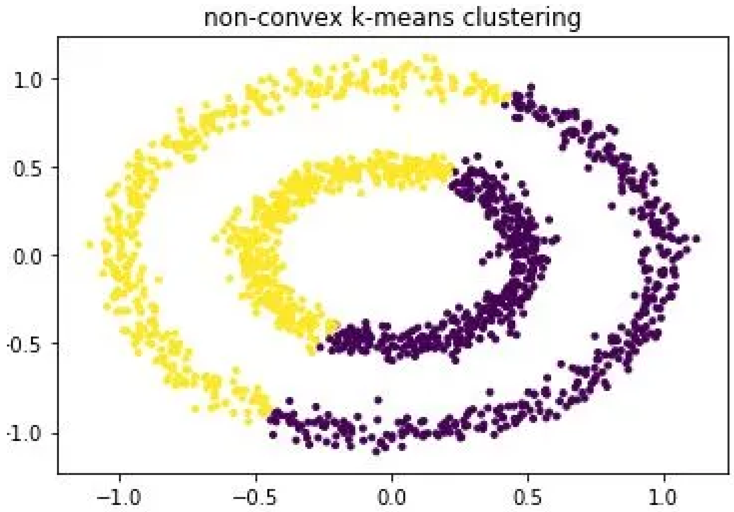
散点图效果：



根据散点图分布，我们用簇类数k=2训练样本数据：

```
# k=2训练数据
y_pred = KMeans(n_clusters=2, random_state=random_state).fit_predict(noisy_circles[0])
plt.scatter(noisy_circles[0][:, 0], noisy_circles[0][:, 1], marker='.',c=y_pred)
plt.title("non-convex k-means clustering")
plt.show()
```

散点图聚类效果：

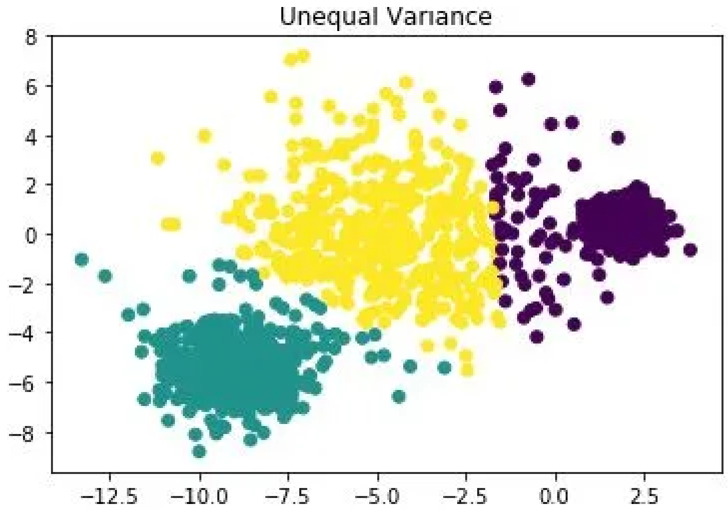


由上图可知聚类效果很差。

3）当训练数据集各个簇类的标准差不相等时，k-means聚类效果不好。

```
# 构建不同方差的各簇类数据，标准差分别为1.0,2.5,0.5
X_varied, y_varied = make_blobs(n_samples=n_samples,
                                cluster_std=[1.0, 2.5, 0.5],
                                random_state=random_state)
y_pred = KMeans(n_clusters=3, random_state=random_state).fit_predict(X_varied)

plt.scatter(X_varied[:, 0], X_varied[:, 1], c=y_pred)
plt.title("Unequal Variance")
plt.show()
```

由下图可知聚类效果不好：

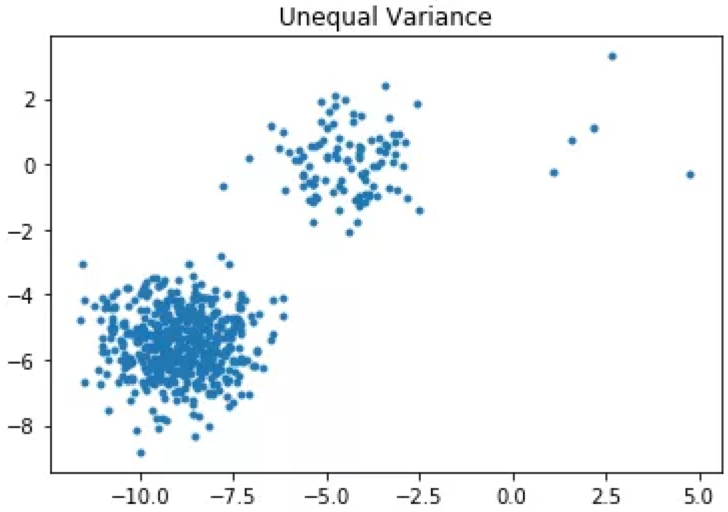


4）若各簇类的样本数相差比较大，聚类性能较差。

产生三个样本数分别为500,10,10的簇类：

```
n_samples = 1500
random_state = 170
# 产生三个簇类，每个簇类样本数是500
X, y = make_blobs(n_samples=n_samples, random_state=random_state)
# 三个簇类的样本数分别为500,100,10，查看聚类效果
X_filtered = np.vstack((X[y == 0][:500], X[y == 1][:100], X[y == 2][:5]))
plt.scatter(X_filtered[:, 0], X_filtered[:, 1], marker='.')
plt.title("Unequal Variance")
plt.show()
```

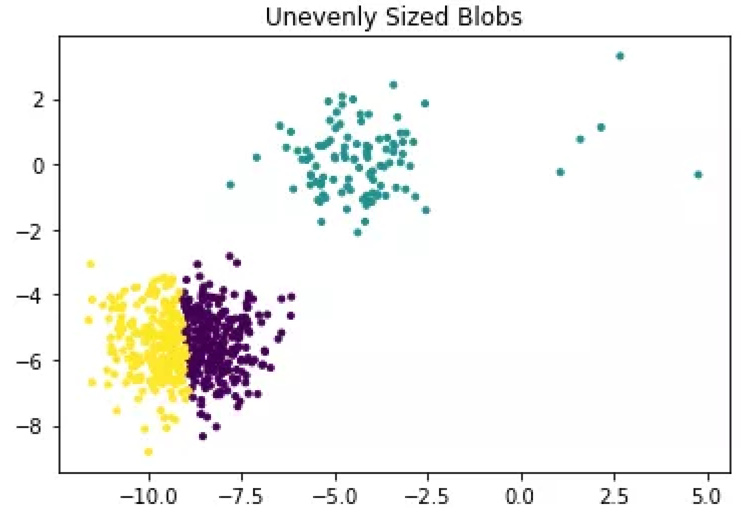
散点图分布：



运用k-means对其聚类：

```
y_pred = KMeans(n_clusters=3,
                random_state=random_state).fit_predict(X_filtered)
plt.scatter(X_filtered[:, 0], X_filtered[:, 1], c=y_pred,marker='.')
plt.title("Unevenly Sized Blobs")

plt.show()
```

效果图如下：



5） 若数据维度很大时，运行时间很长，可以考虑先用pca降维。

```
# 产生100维的15000个样本
n_samples = 15000
random_state = 170
plt.figure(figsize=[10,6])
t0=time.time()
# 产生三个簇类，每个簇类样本数是500
X, y = make_blobs(n_samples=n_samples, n_features=100,random_state=random_state)
y_pred = KMeans(n_clusters=3,
                random_state=random_state).fit_predict(X)
t1 =time.time()-t0
scores1 = metrics.calinski_harabaz_score(X,y)
print("no feature dimonsion reduction scores = ",scores1)
print("no feature dimonsion reduction runtime = ",t1)
```

输出聚类效果和运行时间：

```
no feature dimonsion reduction scores =  164709.2183791984
no feature dimonsion reduction runtime =  0.5700197219848633
```

数据先进行PCA降维再用k-means聚类，

```
# 数据先pca降维，再k-means聚类
from sklearn.decomposition import PCA
pca = PCA(n_components=0.8)
s=pca.fit_transform(X)
t0=time.time()
y_pred = KMeans(n_clusters=3,
                random_state=random_state).fit_predict(s)
t1 =time.time()-t0
print("feature dimonsion reduction scores = ",scores1)
print("feature dimonsion reduction runtime = ",t1)
```

输出聚类效果和运行时间：

```
feature dimonsion reduction scores =  164709.2183791984
feature dimonsion reduction runtime =  0.0630037784576416
```

由结果对比可知，聚类效果相差无几的情况下，运行时间大大降低了。

7. k-means与knn的区别

k-means是最简单的非监督分类算法，knn是最简单的监督分类算法，初学者学完监督学习章节再去学非监督章节会感觉似曾相识，原因可能都是用距离作为评价样本间的相似度。下面列举几个区别的地方：

1）knn是监督学习方法，k-means是非监督学习方法，因此knn需要样本的标记类，k-means不需要；

2）knn不需要训练，只要找到距离测试样本最近的k个样本，根据k个样本的类别给出分类结果；k-means需要训练，训练的目的是得到每个簇类的均值向量（质心），根据质心给出测试数据的分类结果；

8. 小结

k-means算法简单且在一些大样本数据表现较好而得到广泛的应用，本文也列举了k-means不适用的几个场景，其他聚类算法可能很好的解决k-means所不能解决的场景，不同的聚类算法有不同的优缺点，后续文章会持续介绍聚类算法，希望这篇k-means总结文章能帮到您。

参考

https://scikit-learn.org/stable/modules/clustering.html#clustering

https://www.cnblogs.com/pinard/p/6169370.html

推荐阅读

空洞深度卷积相关理论基础

人工智能感知信息处理算法研究院