机器学习算法：Kmeans 聚类算法及应用

课程大纲

Kmeans 聚类算法原理	Kmeans 聚类算法概述
	Kmeans 聚类算法图示
	Kmeans 聚类算法要点
Kmeans 聚类算法案例	需求
	用 Numpy 手动实现
	用 Scikili 机器学习算法库实现
Kmeans 聚类算法补充	算法缺点
	改良思路

课程目标：

1、理解 Kmeans 聚类算法的核心思想

2、理解 Kmeans 聚类算法的代码实现

3、掌握 Kmeans 聚类算法的应用步骤：数据处理、建模、运算和结果判定

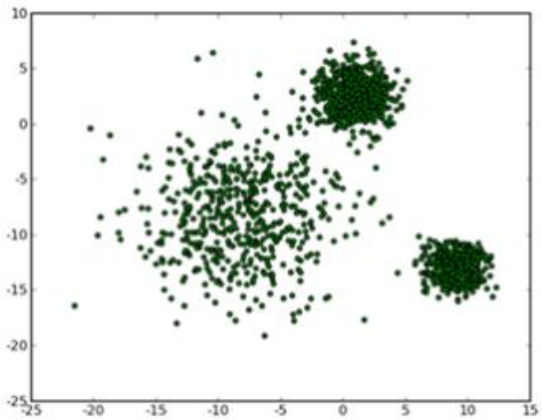
1. Kmeans 聚类算法原理

1.1 概述

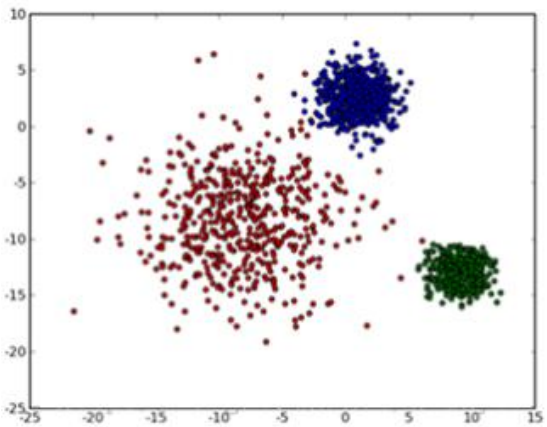
K-means 算法是集简单和经典于一身的**基于距离的聚类算法**
采用距离作为相似性的评价指标，即认为两个对象的距离越近，其相似度就越大。
该算法认为类簇是由距离靠近的对象组成的，因此把得到***紧凑且独立的簇作为最终目标。***

1.2 算法图示

假设我们的 n 个样本点分布在图中所示的二维空间。
从数据点的大致形状可以看出它们大致聚为三个 cluster，其中两个紧凑一些，剩下那个松散一些，如图所示：



我们的目的是为这些数据分组，以便能区分出属于不同的簇的数据，给它们标上不同的颜色，如图：



1.3 算法要点

1.3.1 核心思想

通过迭代寻找 k 个类簇的一种划分方案，使得用这 k 个类簇的均值来代表相应各类样本时所得的总体误差最小。

k 个聚类具有以下特点：各聚类本身尽可能的紧凑，而各聚类之间尽可能的分开。

k-means 算法的基础是*最小误差平方和准则*,

其代价函数是：

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

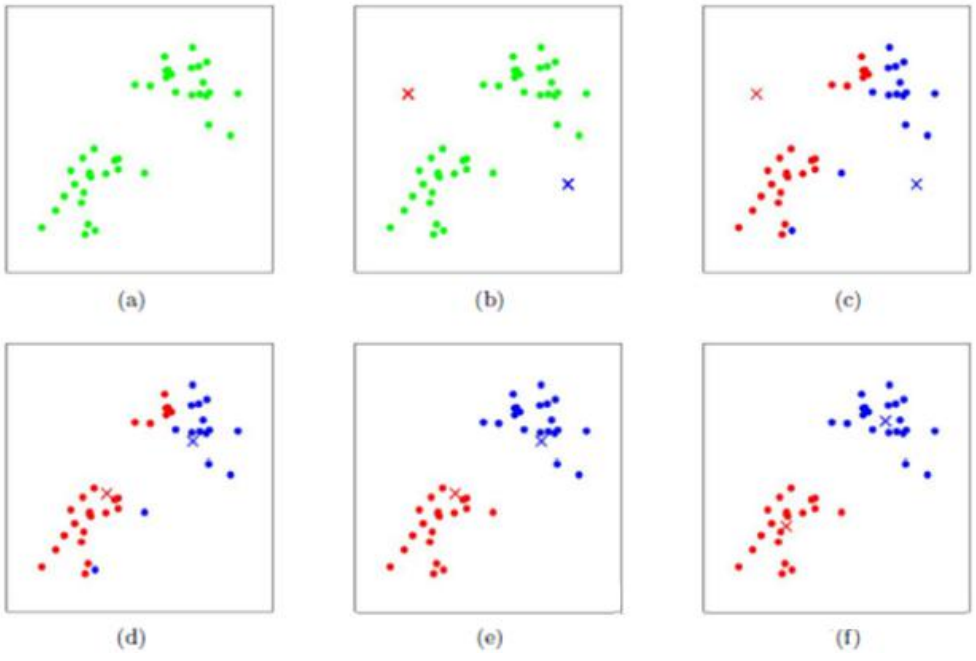
式中，μc(i)表示第 i 个聚类的均值。

各类簇内的样本越相似，其与该类均值间的误差平方越小，对所有类所得到的误差平方求和，即可验证分为 k 类时，各聚类是否是最优的。

上式的代价函数无法用解析的方法最小化，只能有迭代的方法。

1.3.2 算法步骤图解

下图展示了对 n 个样本点进行 K-means 聚类的效果，这里 k 取 2。



1.3.3 算法实现步骤

k-means 算法是将样本聚类成 k 个簇（cluster），其中 k 是用户给定的，其求解过程非常直观简单，具体算法描述如下：

1) 随机选取 k 个聚类质心点
2) 重复下面过程直到收敛 {

对于每一个样例 i，计算其应该属于的类：

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

对于每一个类 j，重新计算该类的质心：

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

}

其伪代码如下：

```
**********************************************************************
创建 k 个点作为初始的质心点（随机选择）
当任意一个点的簇分配结果发生改变时
    对数据集中的每一个数据点
        对每一个质心
            计算质心与数据点的距离
        将数据点分配到距离最近的簇
    对每一个簇，计算簇中所有点的均值，并将均值作为质心
```

2. Kmeans 分类算法 Python 实战

2.1 需求

对给定的数据集进行聚类
本案例采用二维数据集，共 80 个样本，有 4 个类。样例如下：
testSet.txt

```
1.658985	4.285136
-3.453687	3.424321
4.838138	-1.151539
-5.379713	-3.362104
0.972564	2.924086
-3.567919	1.531611
0.450614	-3.302219
-3.487105	-1.724432
2.668759	1.594842
-3.156485	3.191137
3.165506	-3.999838
-2.786837	-3.099354
4.208187	2.984927
-2.123337	2.943366
0.704199	-0.479481
-0.392370	-3.963704
2.831667	1.574018
-0.790153	3.343144
2.943496	-3.357075
```

2.2 python 代码实现

2.2.1 利用 numpy 手动实现

```
from numpy import *
#加载数据
def loadDataSet(fileName):
    dataMat = []
    fr = open(fileName)
    for line in fr.readlines():
        curLine = line.strip().split('\t')
        fltLine = map(float, curLine)       #变成 float 类型
```

```
            dataMat.append(fltLine)
    return dataMat

# 计算欧几里得距离
def distEclud(vecA, vecB):
    return sqrt(sum(power(vecA - vecB, 2)))

#构建聚簇中心，取 k 个(此例中为 4)随机质心
def randCent(dataSet, k):
    n = shape(dataSet)[1]
    centroids = mat(zeros((k,n)))     #每个质心有 n 个坐标值，总共要 k 个质心
    for j in range(n):
        minJ = min(dataSet[:,j])
        maxJ = max(dataSet[:,j])
        rangeJ = float(maxJ - minJ)
        centroids[:,j] = minJ + rangeJ * random.rand(k, 1)
    return centroids

#k-means 聚类算法
def kMeans(dataSet, k, distMeans =distEclud, createCent = randCent):
    m = shape(dataSet)[0]
    clusterAssment = mat(zeros((m,2)))       #用于存放该样本属于哪类及质心距离
    centroids = createCent(dataSet, k)
    clusterChanged = True
    while clusterChanged:
        clusterChanged = False;
        for i in range(m):
            minDist = inf; minIndex = -1;
            for j in range(k):
                distJI = distMeans(centroids[j,:], dataSet[i,:])
                if distJI < minDist:
                    minDist = distJI; minIndex = j
            if clusterAssment[i,0] != minIndex: clusterChanged = True;
            clusterAssment[i,:] = minIndex,minDist**2
        print centroids
        for cent in range(k):
            ptsInClust = dataSet[nonzero(clusterAssment[:,0].A == cent)[0]]      # 去第一列等
于 cent 的所有列
            centroids[cent,:] = mean(ptsInClust, axis = 0)
    return centroids, clusterAssment
```

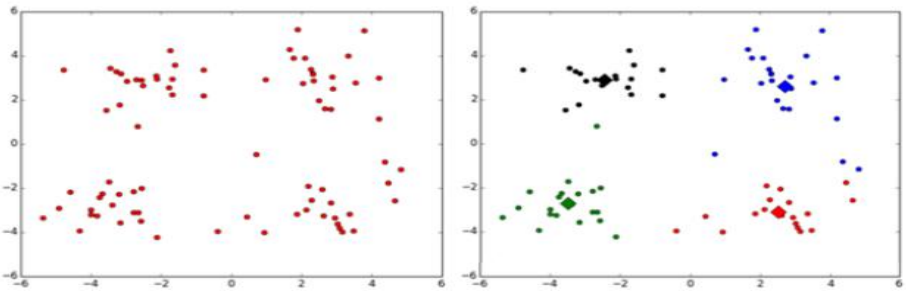
2.2.2 利用 scikili 库实现

Scikit-Learn 是基于 python 的机器学习模块，基于 BSD 开源许可证。
scikit-learn 的基本功能主要被分为六个部分，分类，回归，聚类，数据降维，模型选择，数据预处理。包括 SVM，决策树，GBDT，KNN，KMEANS 等等
Kmeans 在 scikit 包中即已有实现，只要将数据按照算法要求处理好，传入相应参数，即可直接调用其 kmeans 函数进行聚类

```
##############################################
# kmeans: k-means cluster
##############################################
from numpy import *
import time
import matplotlib.pyplot as plt
## step 1:加载数据
print "step 1: load data..."
dataSet = []
fileIn = open('E:/Python/ml-data/kmeans/testSet.txt')
for line in fileIn.readlines():
    lineArr = line.strip().split('\t')
    dataSet.append([float(lineArr[0]), float(lineArr[1])])
## step 2:  聚类
print "step 2: clustering..."
dataSet = mat(dataSet)
k = 4
centroids, clusterAssment = kmeans(dataSet, k)
## step 3:显示结果
print "step 3: show the result..."
showCluster(dataSet, k, centroids, clusterAssment)
```

2.2.3 运行结果

不同的类用不同的颜色来表示，其中的大菱形是对应类的均值质心点。

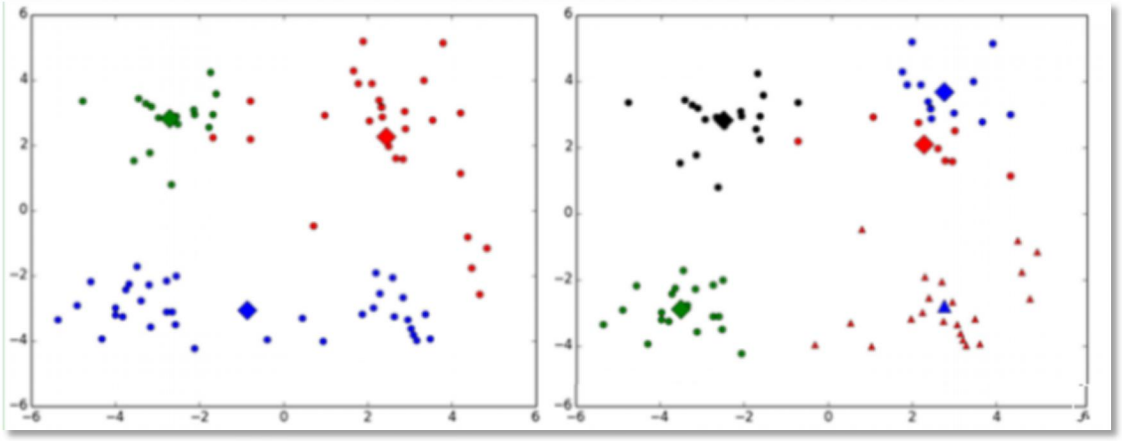


3、Kmeans 算法补充

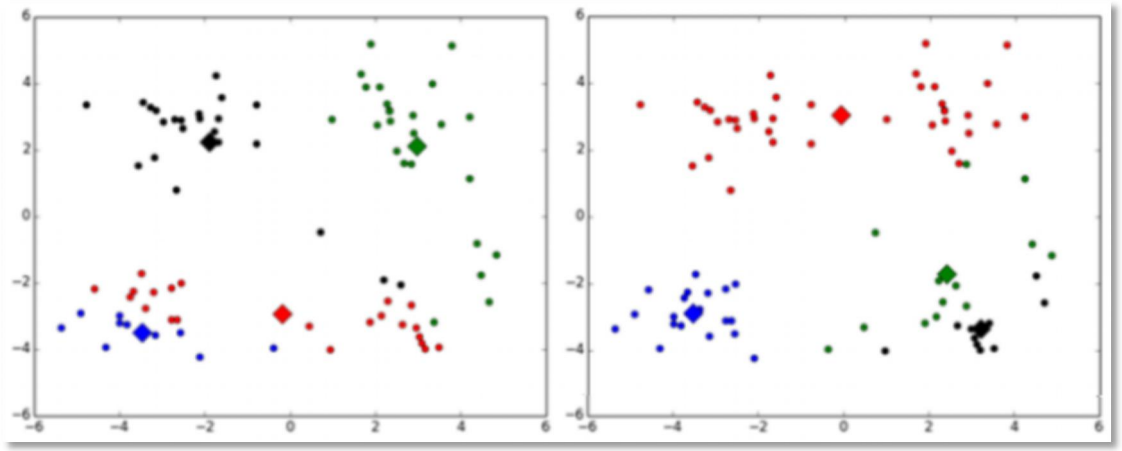
3.1 kmeans 算法缺点

k-means 算法比较简单，但也有几个比较大的缺点：

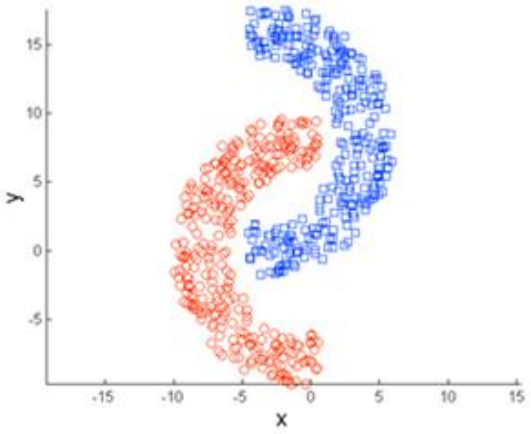
（1）k 值的选择是用户指定的，不同的 k 得到的结果会有挺大的不同，如下图所示，左边是 k=3 的结果，这个就太稀疏了，蓝色的那个簇其实是可以再划分成两个簇的。而右图是 k=5 的结果，可以看到红色菱形和蓝色菱形这两个簇应该是可以合并成一个簇的：

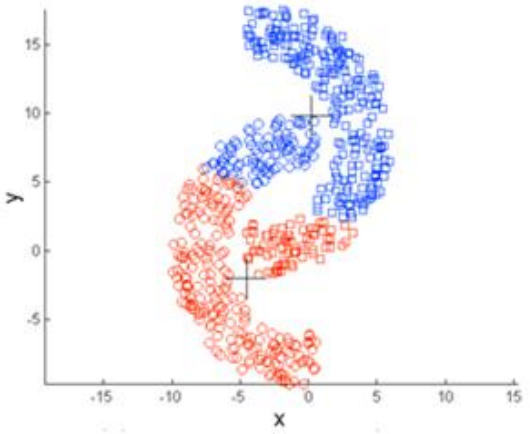


（2）对 k 个初始质心的选择比较敏感，容易陷入局部最小值。例如，我们上面的算法运行的时候，有可能会得到不同的结果，如下面这两种情况。K-means 也是收敛了，只是收敛到了局部最小值：



（3）存在局限性，如下面这种非球状的数据分布就搞不定了：





（4）数据集比较大的时候，收敛会比较慢。

3.2 改良思路

k-means 老早就出现在江湖了。所以以上的这些不足也已有了对应方法进行了某种程度上的改良。例如：

- ✓ 问题（1）对 k 的选择可以先用一些算法分析数据的分布，如重心和密度等，然后选择合适的 k
- ✓ 问题（2），有人提出了另一个成为二分 k 均值（bisecting k-means）算法，它对初始的 k 个质心的选择就不太敏感