山东大学

SHANDONG UNIVERSITY

山东大学机器学习课程

实验报告

——实验一：k-means 聚类法研究与实现

姓名：刘梦源

学院：计算机科学与技术学院

班级：计算机 14.4

学号：201400301007

一、实验目的：

（1）熟悉 matlab 实验软件及相关函数，
（2）学习以 k-means 为例的常见聚类方法的思想与算法
（3）根据已给数据集，用 k-means 方法实现聚类，并绘制图像

二、实验环境：

（1）硬件环境：
英特尔® 酷睿™ i7-7500U 处理器
512 GB PCIe® NVMe™ M.2 SSD
8 GB LPDDR3-1866 SDRAM
（2）软件环境：
Windows10 家庭版 64 位操作系统
Matlab R2016a

三、实验内容

3.1 聚类概述

聚类,简单地说就是把相似的东西分到一组,同 Classification(分类)不同，对于一个 classifier，通常需要你告诉它“这个东西被分为某某类”这样一些例子，理想情况下，一个 classifier 会从它得到的训练集中进行“学习”，从而具备对未知数据进行分类的能力，这种提供训练数据的过程通常叫做 supervised learning (监督学习)，而在聚类的时候，我们并不关心某一类是什么，我们需要实现的目标只是把相似的东西聚到一起，因此，一个聚类算法通常只需要知道如何计算相似 度就可以开始工作了,因此 clustering 通常并不需要使用训练数据进行学习，这在机器学习中被称作 unsupervised learning (无监督学习)。

我们经常接触到的聚类分析，一般都是数值聚类，一种常见的做法是同时提取 N 种特征，将它们放在一起组成一个 N 维向量，从而得到一个从原始数据集合到 N 维向量空间的映射——你总是需要显式地或者隐式地完成这样一个过程，然后基于某种规则进行分类，在该规则下，同组分类具有最大的相似性。

3.2 k-means 聚类算法

k-means 算法是一种很常见的聚类算法，它的基本思想是：通过迭代寻找 k 个聚类的一种划分方案,使得用这 k 个聚类的均值来代表相应各类样本时所得的总体误差最小。

k-means 算法的基础是最小误差平方和准则。其代价函数是：

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

式中， μc(i)表示第 i 个聚类的均值。我们希望代价函数最小，直观的来

说，各类内的样本越相似，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。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：

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

对于每一个类 j，重新计算该类的质心：

$$\mu_j := \frac{\sum_{i=1}^{m} 1\{c^{(i)} = j\} x^{(i)}}{\sum_{i=1}^{m} 1\{c^{(i)} = j\}} \qquad (3)$$

}

设计程序的伪代码，实现图 1 所示：

```
function KMeans(输入数据 data，中心点个数 K)
      获取输入数据的个数 m 和维数 n
      随机生成 K 个 n 维的点
      while(算法未收敛)
          对 m 个点：计算到各个中心点的距离，找到最近的一个
          对于 K 个中心点：
              找出所有属于自己这一类的所有数据点
              把自己的坐标修改为这些数据点的平均值坐标
      end
      输出结果
end
```

图 1. k-means 算法伪代码

四、实验结果

用上述设计算法分别对给定 k=5 的二维度数据集 2d-data 和给定 k=7 的三维数据集 3d-data 进行多次实验，绘制散点图如图 2，图 3 所示，聚类效果不随初始随机生成的中心点而改变，一直呈现较好的效果。至此用 k-means 方法完成聚类。

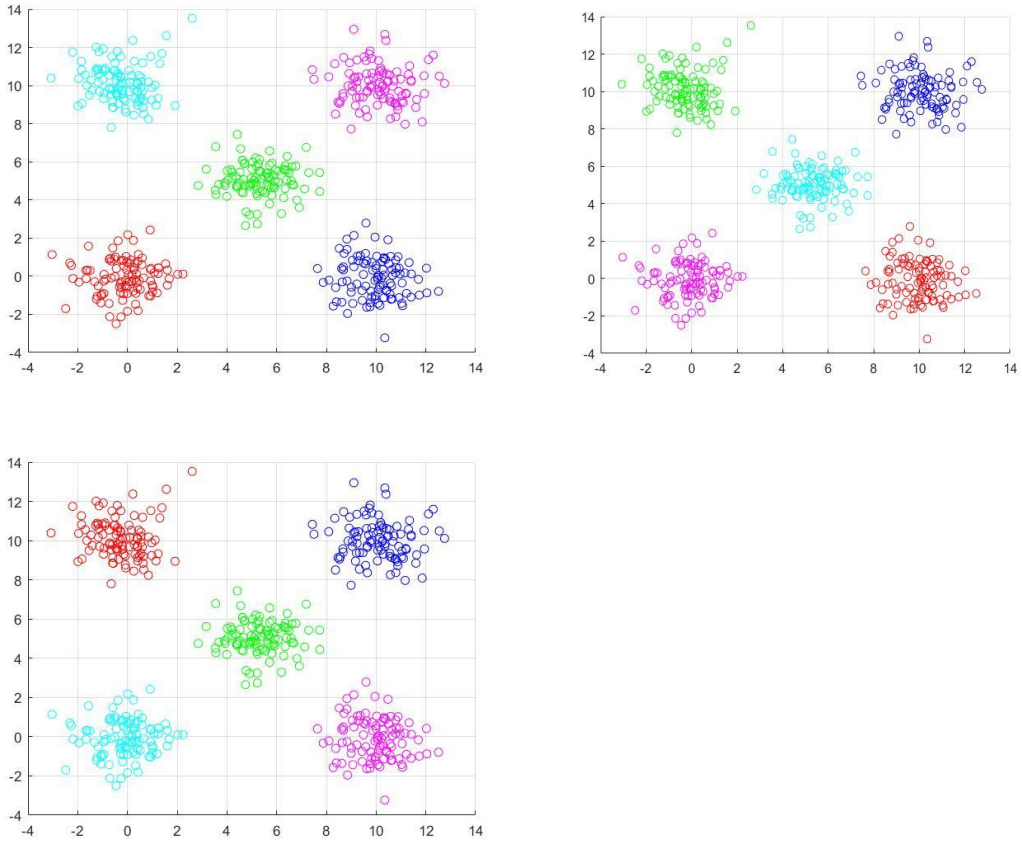
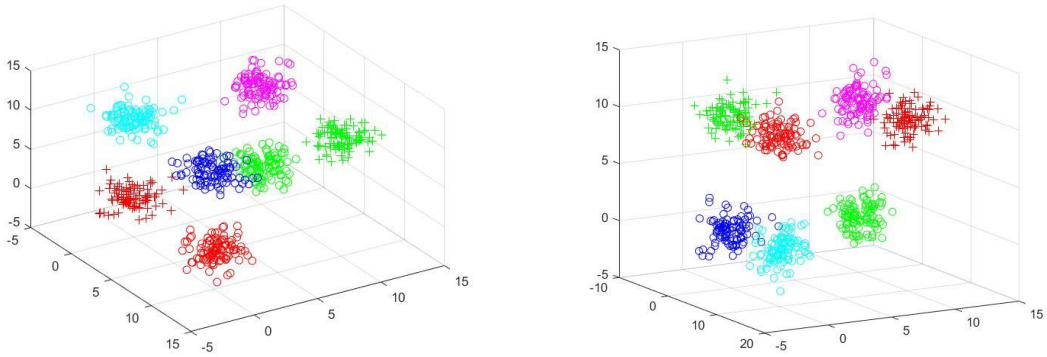


图 2. 2D-data 的实验效果图



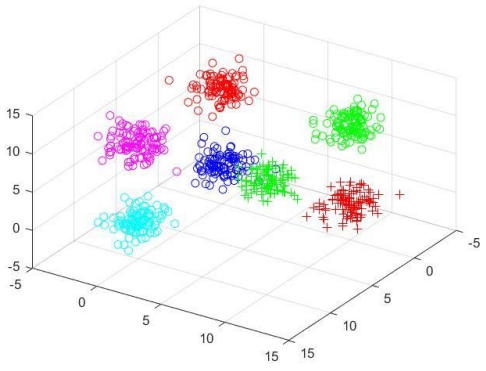


图 3. 3D-data 的实验效果图

五、k-means 聚类算法的优化

k-means 算法有个比较大的缺点就是对初始 k 个质心点的选取比较敏感。通过查阅资料，有人提出了一个二分 k 均值（bisecting k-means）算法，它的出现就是为了一定情况下解决这个问题的。也就是说它对初始的 k 个质心的选择不太敏感。

优化后的设计算法伪代码如图 4 所示

```
function KMeans(输入数据 data，中心点个数 K)
    对每一个簇

            计算总误差;

            在给定的簇上面进行 k-均值聚类（k=2）;

            计算将该簇一分为二后的总误差;

             选择使得误差最小的那个簇进行划分操作;

    end

end
```

图 4. 二分 k-means 算法伪代码

六、总结与归纳

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

（2）对 k 个初始质心的选择比较敏感，容易陷入局部最小值。

（3）数据库比较大的时候，收敛会比较慢。

k-means 是较为经典的聚类算法。所以以上的这些不足也被世人的目光敏锐的捕捉到，并融入世人的智慧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。而对问题（2），例如二分 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，较好的优化了问题。

七、附件

测试观察与绘图：testkmeans.m

```
clc;
clear;
load('2d-data.mat');
%load('3d-data.mat');
data=r;
[centor, re_data]=kmeans(data,5);
[m, n]=size(re_data);
figure;
hold on;
for i=1:m
    if re_data(i,3)==1
        plot3(re_data(i,1),re_data(i,2),re_data(i,3),'ro');
    elseif re_data(i,3)==2
        plot3(re_data(i,1),re_data(i,2),re_data(i,3),'go');
    elseif re_data(i,3)==3
         plot3(re_data(i,1),re_data(i,2),re_data(i,3),'bo');
    elseif re_data(i,3)==4
        plot3(re_data(i,1),re_data(i,2),re_data(i,3),'co');
   %elseif re(i,4)==5
        %plot3(re(i,1),re(i,2),re(i,3),'r+');
    %elseif re(i,4)==6
       %plot3(re(i,1),re(i,2),re(i,3),'g+');
    else
       plot3(re_data(i,1),re_data(i,2),re_data(i,3),'mo');

    end

end
grid on;
```

聚类算法：**kmeans.m**

```
function [centor, re_data]=KMeans(data,k)
    [num, dimension]=size(data);
    centor=zeros(k,dimension);
    random_top=zeros(dimension);
    random_bottom=zeros(dimension);
    for i=1:dimension
       random_top(i)=max(data(:,i));
       random_bottom(i)=min(data(:,i));
       for j=1:k
           centor(j,i)=random_top(i)+(random_bottom(i)-
random_top(i))*rand();
       end
    end
   t=3;
   while (t>0)
        pre_centor=centor;
       for i=1:k
           cell{i}=[];
           for j=1:num
               cell{i}=[cell{i};data(j,:)-centor(i,:)];
           end
       end

       whole=zeros(num,k);
       for i=1:num
           abs_cell=[];
           for j=1:k
               abs_cell=[abs_cell norm(cell{j}(i,:))];
           end
           [~, index]=min(abs_cell);
           whole(i,index)=norm(cell{index}(i,:));
       end

       for i=1:k
          for j=1:dimension

centor(i,j)=sum(whole(:,i).*data(:,j))/sum(whole(:,i));
          end
       end
```

```
        if norm(pre_centor-centor)<0.1
         break;
       end
   end

   re_data=[];
   for i=1:num
       cell=[];
       for j=1:k
           cell=[cell norm(data(i,:)-centor(j,:))];
       end
       [~, index]=min(cell);
       re_data=[re_data;data(i,:) index];
   end

end
```