2020 年春季学期
计算学部《机器学习》课程

Lab 1 实验报告

姓名	周牧云
学号	1180300315
班号	1803501
电子邮件	zhou_mu_yun@163.com
手机号码	13912263240

目录

建议写出：问题的描述，解决问题的思路，实验的做法，实验结果的分析，结论，自拟标题

1 实验目的

实现一个 k-means 算法和混合高斯模型，并且用 EM 算法估计模型中的参数。

2 实验要求

用高斯分布产生 k 个高斯分布的数据（不同均值和方差）（其中参数自己设定）。
（1）用 k-means 聚类，测试效果；
（2）用混合高斯模型和你实现的 EM 算法估计参数，看看每次迭代后似然值变化情况，考察 EM 算法是否可以获得正确的结果（与你设定的结果比较）。

应用：可以 UCI 上找一个简单问题数据，用你实现的 GMM 进行聚类。

3 设计思想

3.1 K-means 算法

k 均值聚类算法（k-means clustering algorithm）是一种迭代求解的聚类分析算法，其步骤是，预将数据分为 K 组，则随机选取 K 个对象作为初始的聚类中心，然后计算每个对象与各个种子聚类中心之间的距离，把每个对象分配给距离它最近的聚类中心。聚类中心以及分配给它们的对象就代表一个聚类。每分配一个样本，聚类的聚类中心会根据聚类中现有的对象被重新计算。这个过程将不断重复直到满足某个终止条件。终止条件可以是没有（或最小数目）对象被重新分配给不同的聚类，没有（或最小数目）聚类中心再发生变化，误差平方和局部最小。

算法为：先随机选取 K 个对象作为初始的聚类中心。然后计算每个对象与各个种子聚类中心之间的距离，把每个对象分配给距离它最近的聚类中心。聚类中心以及分配给它们的对象就代表一个聚类。一旦全部对象都被分配了，每个聚类的聚类中心会根据聚类中现有的对象被重新计算。这个过程将不断重复直到满足某个终止条件。终止条件可以是以下任何一个：

1)没有（或最小数目）对象被重新分配给不同的聚类。

2)没有（或最小数目）聚类中心再发生变化。

3)误差平方和局部最小。

3.2 GMM 算法

GMM，高斯混合模型，也可以简写为 MOG。高斯模型就是用高斯概率密度函数（正态分布曲线）精确地量化事物，将一个事物分解为若干的基于高斯概率密度函数（正态分布曲线）形成的模型。

GMM 相对 K-means 是比较复杂的 EM 算法的应用实现。与 K-means 不同的是，GMM 算法在 E 步时没有使用“最近距离法”来给每个样本赋类别（hard assignment)，而是增加了隐变量γ。γ是(N,K)的矩阵， γ[N,K]表示第 n 个样本是第 k 类的概率，因此， 具有归一性。即 的每一行的元素的和值为 1。

GMM 算法是用混合高斯模型来描述样本的分布，因为在多类情境中，单一高斯分布肯定是无法描绘数据分布。多个高斯分布的简单叠加也无法描绘数据分布的。只有混合高斯分布才能较好的描绘一组由多个高斯模型产生的样本。对

于样本中的任一个数据点，任一高斯模型能够产生该点的概率，也就是任一高斯模型对该点的生成的贡献（contribution）是不同的，但可以肯定的是，这些贡献的和值是 1。

4 实验过程

4.1 算法设计

高斯分布参数：

```
config = {
    'k':3,
    'n':200,
    'dim':2,
    'mus':np.array([
        [1,3], [7,8], [8,4]
    ]),
    'sigmas':np.array([
        [[1,0],[0,2]], [[3,0],[0,2]], [[3,0],[0,1]]
    ])
}
```

E 步：

```
def e_step(data, mus, sigmas, pis, N, K, dim):
    gammas = np.zeros((N, K))
    for n in range(N):
        marginal_prob = 0
        for j in range(K):
            marginal_prob += pis[j] * multivariate_normal.pdf(data[n], mean=mus[j], cov=sigmas[j])
        for j in range(K):
            gammas[n,j] = pis[j] * multivariate_normal.pdf(data[n], mean=mus[j], cov=sigmas[j]) / marginal_prob
    return gammas
```

M 步：

```
def m_step(data, gammas, mus, N, K, dim):
    mus_ = np.zeros((K, dim))
    sigmas_ = np.zeros((K, dim, dim))
    pis_ = np.zeros(K)
    for k in range(K):
        nk = 0
        for n in range(N):
            nk += gammas[n, k]
        mu_temp = np.zeros(dim)
        for n in range(N):
            mu_temp += gammas[n, k] * data[n]
        mus_[k] = mu_temp / nk

        sigma_temp = np.zeros(dim)
        for n in range(N):
            dis = data[n] - mus[k]  # one-dimension array can not be transposed
            sigma_temp += dis ** 2 * gammas[n, k]
        sigma_temp_ = np.eye(dim)
        sigma_temp_[0, 0] = sigma_temp[0]
        sigma_temp_[1, 1] = sigma_temp[1]
        sigmas_[k] = sigma_temp_ / nk

        pis_[k] = nk / N
    return mus_, sigmas_, pis_
```

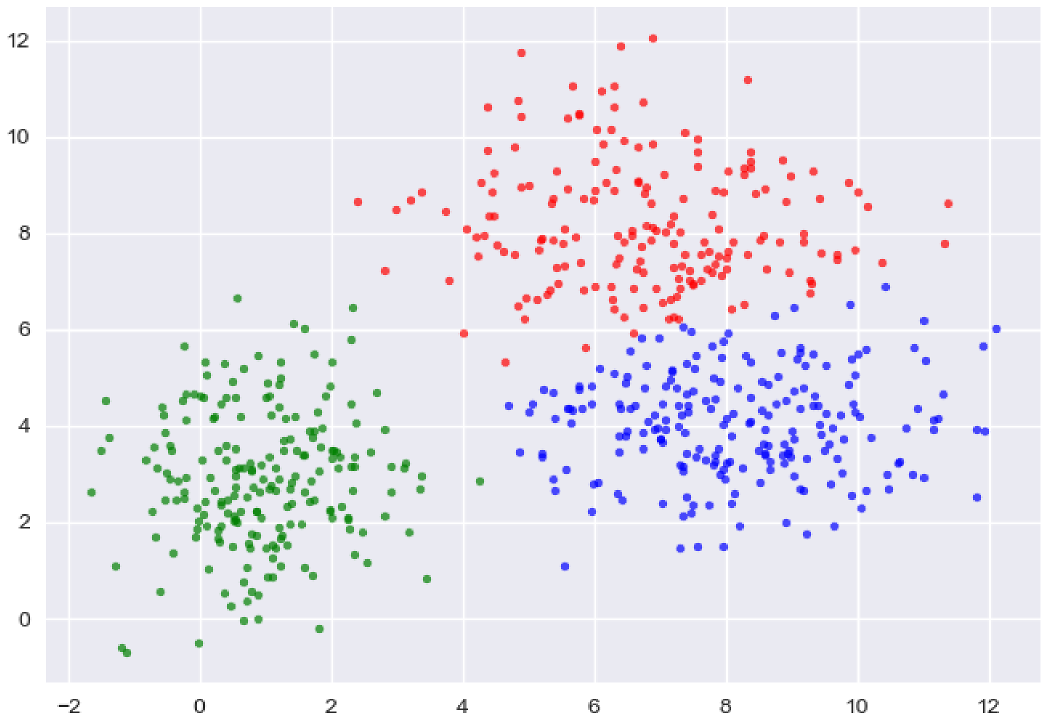
极大似然估计：

```
def log_likelihood(data, mus, sigmas, pis, N, K, dim):
    l = 0
    for n in range(N):
        temp = 0
        for k in range(K):
            temp += pis[k] * multivariate_normal.pdf(data[n], mean=mus[k], cov=sigmas[k])
        l += math.log(temp)
    return l
```

4.2 实验结果

自生成数据，K-means：

```
distance bias: 0.5380225938802193
distance bias: 0.4241112486944514
distance bias: 2.371514233934574
distance bias: 0.5008868256935806
distance bias: 0.12769771392278287
distance bias: 0.7906668487393956
distance bias: 0.17178824904265153
distance bias: 0.022911012311790532
distance bias: 0.2711106121704262
distance bias: 0.0697676570700028
distance bias: 0.0
1 groups converged
distance bias: 0.08598259357746565
distance bias: 0.020876660148758736
distance bias: 0.0
1 groups converged
distance bias: 0.024668096674963835
distance bias: 0.0
1 groups converged
distance bias: 0.0
2 groups converged
distance bias: 0.0
3 groups converged
```

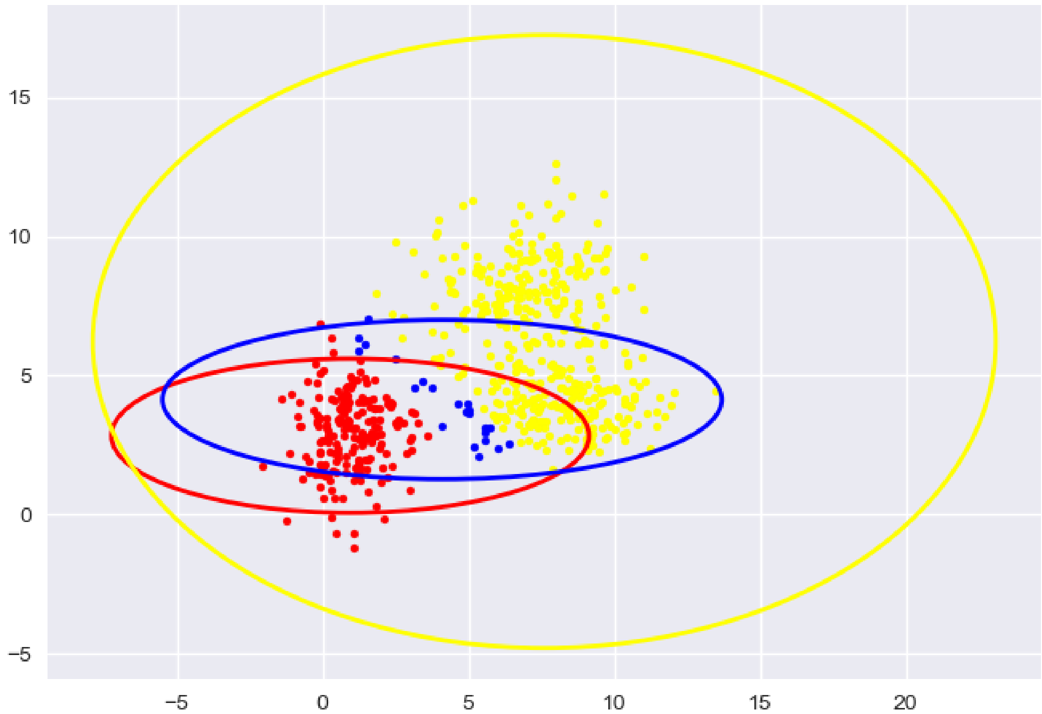


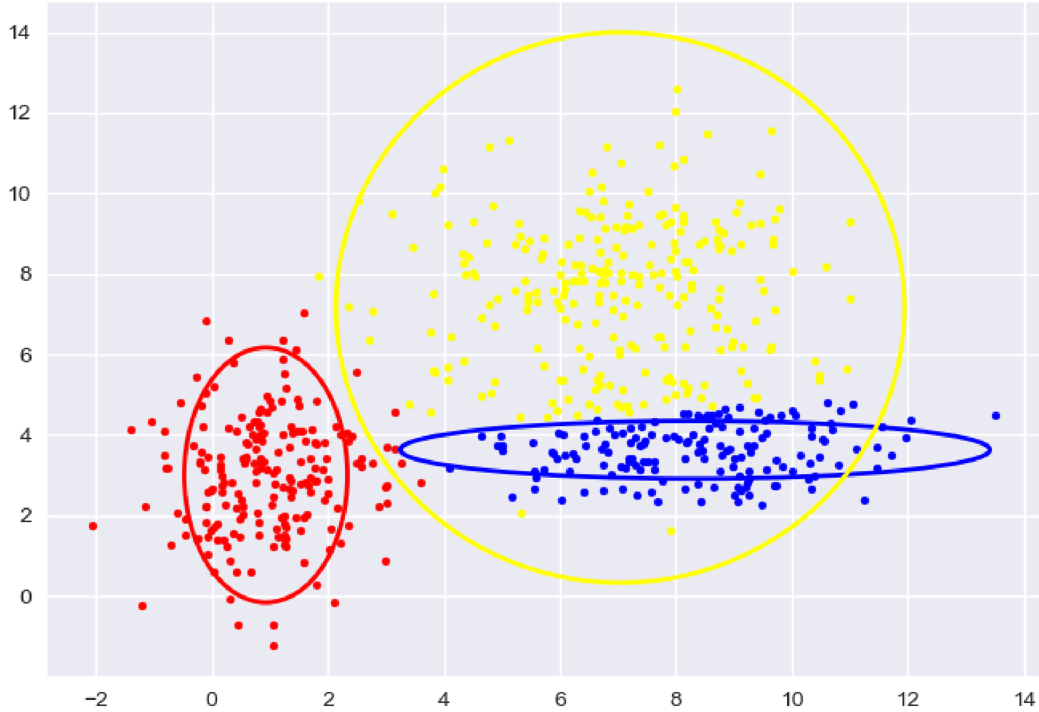
自生成数据，GMM：

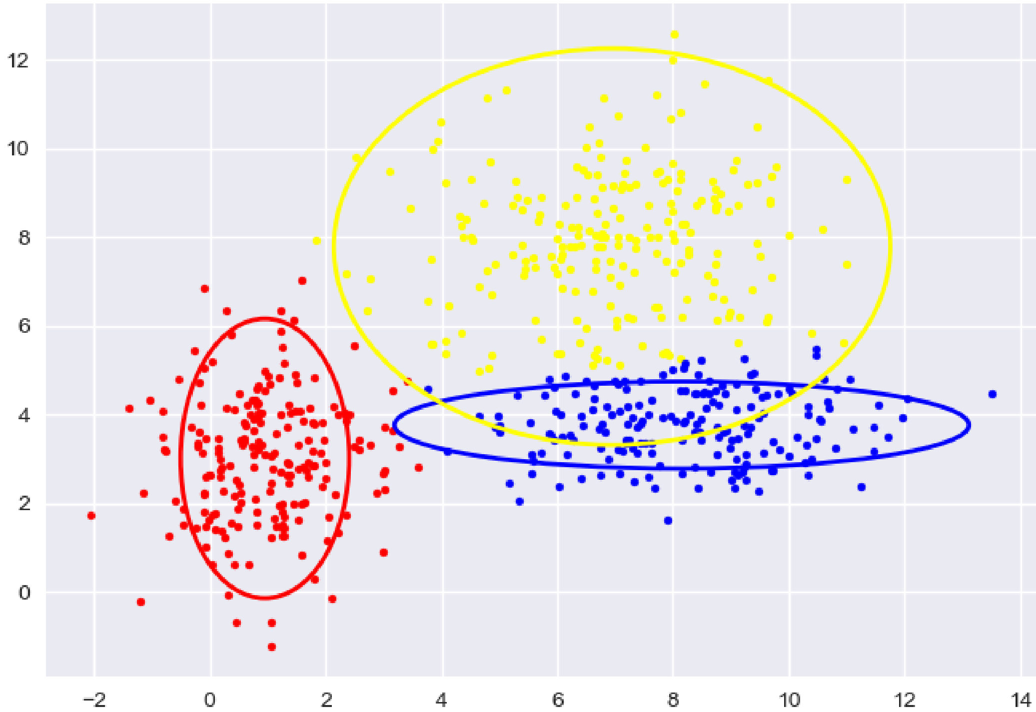
图中给出了每一阶段的样本分类情况和置信椭圆。

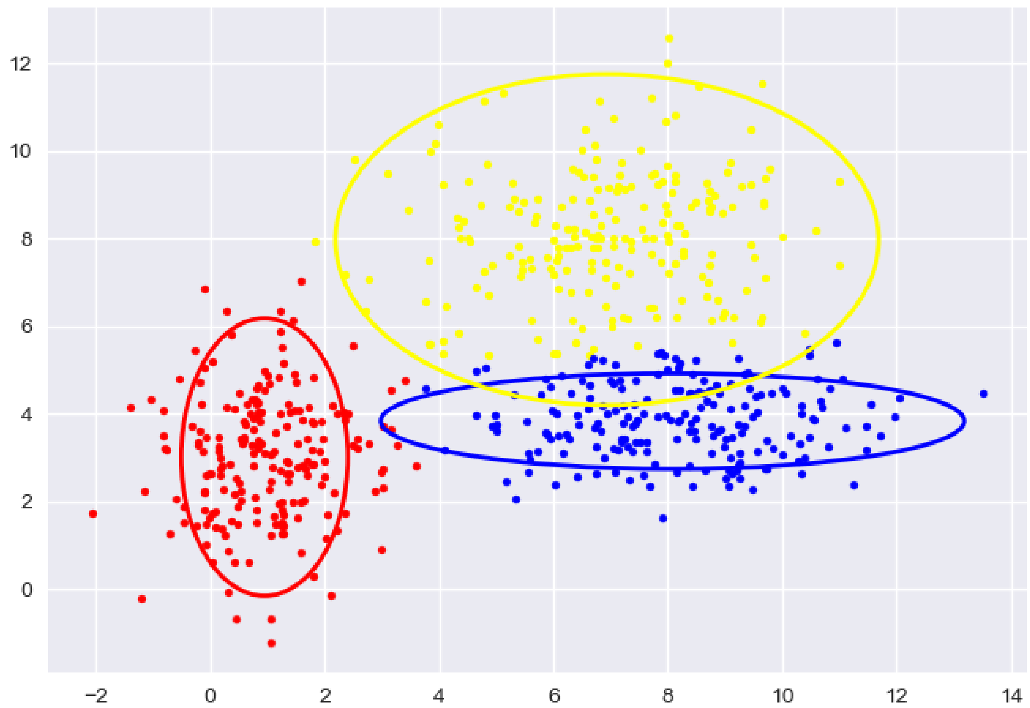
最后带有填充的透明置信椭圆为生成数据的真实椭圆。

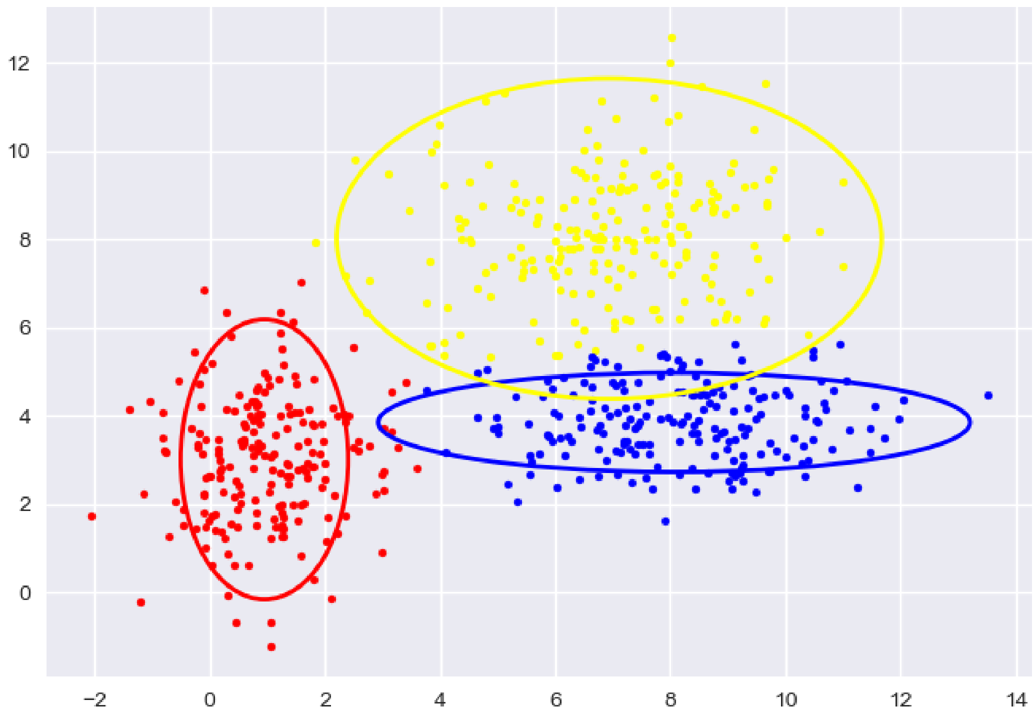
```
0 -2903.061230243483
10 -2690.5237513504208
20 -2681.654826945623
30 -2680.5382475434085
40 -2680.4709621967436
```

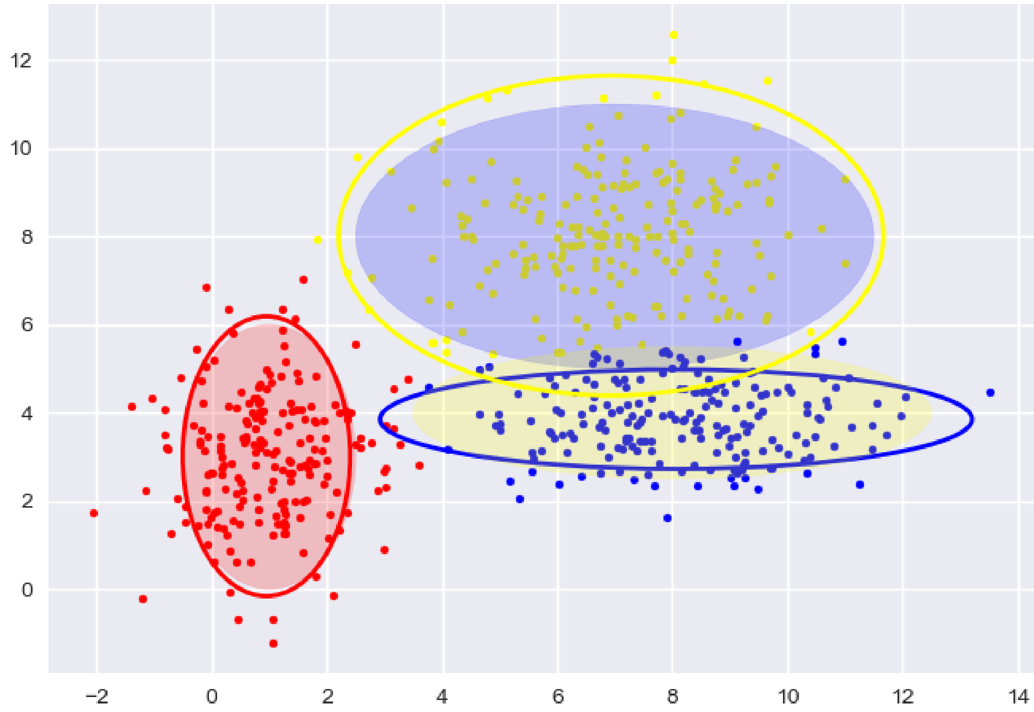



14
12
10
8
6
4
2
0
−2
0
2
4
6
8
10
12
14


12
10
8
6
4
2
0
−2
0
2
4
6
8
10
12
14


12
10
8
6
4
2
0
−2
0
2
4
6
8
10
12
14


12
10
8
6
4
2
0
−2
0
2
4
6
8
10
12
14



5 实验结论

K-means 和 GMM 都是 EM 算法的体现。两者共同之处都有隐变量，遵循 EM 算法的 E 步和 M 步的迭代优化。不同之处在于 K-means 给出了很多很强的假设，比如假设了所有聚类模型对总的贡献是相等的（平均的），假设一个样本由某一个特定聚类模型产生的概率是 1，其他为 0. 而 GMM 用混合高斯模型来描述聚类结果。假设多个高斯模型对总模型的贡献是有权重的，且样本属于某一类也是由概率的。两者都能较好的解决简单的分类问题，但存在着可能只取到局部最优的问题。

初值的选取对 K-means 和 GMM 的效果影响较大。K-means 的初值选取通常是给定聚类个数 k 和随机选取初始聚类中心。而对于 GMM 来说，如果初始高斯模型的均值和方差选取不好的话，可能会出现极大似然值为 0 的情况，即该样本几乎不可能由我们初始的高斯模型生成。另外在实验过程中还会出现协方差矩阵不可逆的情况。