清華大學
Tsinghua University

第十四章
聚类方法

相似度或距离

- 假设有n个样本，每个样本由m个属性的特征向量组成，样本合集可以用矩阵X表示

$$X = [x_{ij}]_{m\times n} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{m1} & x_{m2} & \cdots & x_{mn} \end{bmatrix}$$

- 聚类的核心概念是相似度（similarity）或距离（distance），有多种相似度或距离定义。因为相似度直接影响聚类的结果，所以其选择是聚类的根本问题。

闵可夫斯基距离

- 闵可夫斯基距离越大相似度越小，距离越小相似度越大。

- 给定样本集合X, X是m维实数向量空间R^m中点的集合，其中

$$x_i, x_j \in X,\ x_i = (x_{1i}, x_{2i}, \cdots, x_{mi})^{\mathrm{T}},\ x_j = (x_{1j}, x_{2j}, \cdots, x_{mj})^{\mathrm{T}}$$

- 样本x_i与样本x_j 的闵可夫斯基距离（Minkowski distance）定义为

$$d_{ij} = \left(\sum_{k=1}^{m} |x_{ki} - x_{kj}|^p \right)^{\frac{1}{p}} \qquad p \geqslant 1$$

闵可夫斯基距离

- 当p=2时称为欧氏距离（Euclidean distance)

$$d_{ij} = \left(\sum_{k=1}^{m} |x_{ki} - x_{kj}|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

- 当p=1时称为曼哈顿距离（Manhattan distance)

$$d_{ij} = \sum_{k=1}^{m} |x_{ki} - x_{kj}|$$

- 当p= ∞ 时称为切比雪夫距离（Chebyshev distance）

$$d_{ij} = \max_{k} |x_{ki} - x_{kj}|$$

马哈拉诺比斯距离

- 马哈拉诺比斯距离（Mahalanobis distance），简称马氏距离，也是另一种常用的相似度，考虑各个分量（特征）之间的相关性并与各个分量的尺度无关。
- 马哈拉诺比斯距离越大相似度越小，距离越小相似度越大。

- 给定一个样本集合X, X = $[x_{ij}]_{m\times n}$ ，其协方差矩阵记作S。样本x_i与样本x_j之间的马哈拉诺比斯距离d_{ij}定义为

$$d_{ij} = \left[(x_i - x_j)^{\mathrm{T}} S^{-1} (x_i - x_j)\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$x_i = (x_{1i}, x_{2i}, \cdots, x_{mi})^{\mathrm{T}}, \quad x_j = (x_{1j}, x_{2j}, \cdots, x_{mj})^{\mathrm{T}}$$

相关系数

- 样本之间的相似度也可以用相关系数（correlation coefficient）来表示。
- 相关系数的绝对值越接近于1，表示样本越相似
- 越接近于0，表示样本越不相似。

- 样本x_i与样本x_j之间的相关系数定义为

$$r_{ij}=\frac{\sum_{k=1}^{m}(x_{ki}-\bar{x}_i)(x_{kj}-\bar{x}_j)}{\left[\sum_{k=1}^{m}(x_{ki}-\bar{x}_i)^2\sum_{k=1}^{m}(x_{kj}-\bar{x}_j)^2\right]^{\frac{1}{2}}}$$

$$\bar{x}_i=\frac{1}{m}\sum_{k=1}^{m}x_{ki},\quad \bar{x}_j=\frac{1}{m}\sum_{k=1}^{m}x_{kj}$$

夹角余弦

- 样本之间的相似度也可以用夹角余弦（cosine）来表示。
- 夹角余弦越接近于1，表示样本越相似
- 越接近于0，表示样本越不相似。

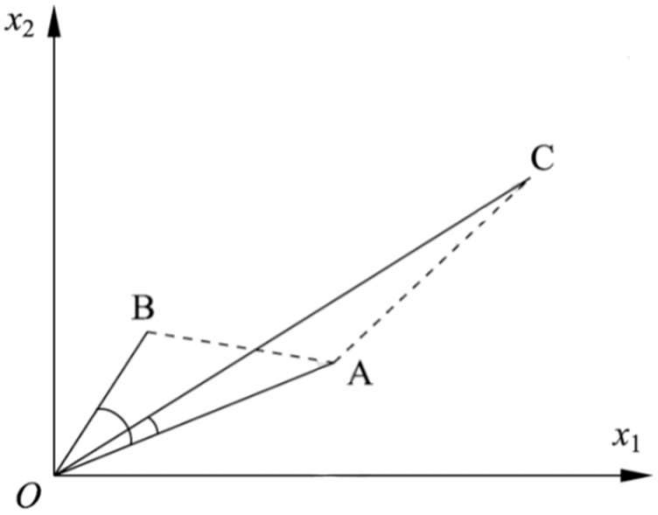
- 样本x_i与样本x_j之间的夹角余弦定义为

$$s_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^{m} x_{ki} x_{kj}}{\left[\sum_{k=1}^{m} x_{ki}^2 \sum_{k=1}^{m} x_{kj}^2\right]^{\frac{1}{2}}}$$

相似度

- 用距离度量相似度时，距离越小样本越相似
- 用相关系数时，相关系数越大样本越相似
- 注意不同相似度度量得到的结果并不一定一致。

- 从右图可以看出，如果从距离的角度看，
  A和B比A和C更相似
- 但从相关系数的角度看，
  - A和C比A和B更相似。



类或簇

- 通过聚类得到的类或簇，本质是样本的子集。
- 如果一个聚类方法假定一个样本只能属于一个类，或类的交集为空集，那么该方法称为硬聚类（hard clustering）方法。
- 如果一个样本可以属于多个类，或类的交集不为空集，那么该方法称为软聚类（soft clustering）方法。

类或簇

- 用G表示类或簇（cluster），用x_i, x_j表示类中的样本，用n_G表示G中样本的个数，用d_{ij}表示样本x_i与样本x_j之间的距离。

- 类或簇有多种定义，下面给出几个常见的定义。

类或簇

设 T 为给定的正数，若集合 G 中任意两个样本 x_i, x_j，有

$$d_{ij} \leqslant T$$

则称 G 为一个类或簇。

类或簇

设 T 为给定的正数，若对集合 G 的任意样本 x_i，一定存在 G 中的另一个样本 x_j，使得

$$d_{ij} \leqslant T$$

则称 G 为一个类或簇。

类或簇

设 T 为给定的正数，若对集合 G 中任意一个样本 x_i，G 中的另一个样本 x_j 满足

$$\frac{1}{n_G - 1} \sum_{x_j \in G} d_{ij} \leqslant T$$

其中 n_G 为 G 中样本的个数，则称 G 为一个类或簇。

类或簇

设 T 和 V 为给定的两个正数，如果集合 G 中任意两个样本 x_i, x_j 的距离 d_{ij} 满足

$$\frac{1}{n_G(n_G-1)}\sum_{x_i\in G}\sum_{x_j\in G} d_{ij} \leqslant T$$

$$d_{ij} \leqslant V$$

则称 G 为一个类或簇。

类或簇

- 类的特征可以通过不同角度来刻画，常用的特征有下面三种:

（1）类的均值 $\bar{x}_G$，又称为类的中心

$$\bar{x}_G = \frac{1}{n_G}\sum_{i=1}^{n_G} x_i$$

式中 n_G 是类 G 的样本个数。

类或簇

- 类的特征可以通过不同角度来刻画，常用的特征有下面三种:

（2）类的直径（diameter）D_G

类的直径 D_G 是类中任意两个样本之间的最大距离，即

$$D_G = \max_{x_i, x_j \in G} d_{ij}$$

类或簇

- 类的特征可以通过不同角度来刻画，常用的特征有下面三种:

（3）类的样本散布矩阵（scatter matrix）A_G 与样本协方差矩阵（covariance matrix）S_G

类的样本散布矩阵 A_G 为

$$A_G = \sum_{i=1}^{n_G} (x_i - \bar{x}_G)(x_i - \bar{x}_G)^{\mathrm{T}}$$

样本协方差矩阵 S_G 为

$$S_G = \frac{1}{m-1} A_G$$

$$= \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^{n_G} (x_i - \bar{x}_G)(x_i - \bar{x}_G)^{\mathrm{T}}$$

其中 m 为样本的维数（样本属性的个数）。

类与类之间的距离

- 下面考虑类G_p与类G_q之间的距离D(p,q)，也称为连接（linkage)。类与类之间的距离也有多种定义。

- 设类G_p包含 n_p个样本， G_q包含 n_q个样本，分别用 $\bar{x}_p$ 和 $\bar{x}_q$ 表示G_p和G_q的均值，即类的中心 。

类与类之间的距离

- 最短距离或单连接（single linkage)

- 定义类G_p的样本与G_q的样本之间的最短距离为两类之间的距离

$$D_{pq} = \min\{d_{ij} | x_i \in G_p, x_j \in G_q\}$$

类与类之间的距离

- 最长距离或完全连接（complete linkage)

- 定义类G_p的样本与G_q的样本之间的最长距离为两类之间的距离

$$D_{pq} = \max\{d_{ij} | x_i \in G_p, x_j \in G_q\}$$

类与类之间的距离

- 中心距离

- 定义类G_p与G_q的中心 $\bar{x}_p$ 与 $\bar{x}_q$ 之间的距离为两类之间的距离
-

$$D_{pq} = d_{\bar{x}_p \bar{x}_q}$$

类与类之间的距离

- 平均距离

- 定义类G_p与G_q任意两个样本之间距离的平均值为两类之间的距离

$$D_{pq} = \frac{1}{n_p n_q} \sum_{x_i \in G_p} \sum_{x_j \in G_q} d_{ij}$$

层次聚类

- 层次聚类假设类别之间存在层次结构，将样本聚到层次化的类中。
- 层次聚类又有聚合（agglomerative）或自下而上（bottom-up）聚类、分裂（divisive）或自上而下（top-down）聚类两种方法。
- 因为每个样本只属于一个类，所以层次聚类属于硬聚类

层次聚类

- 聚合聚类开始将每个样本各自分到一个类
- 之后将相距最近的两类合并，建立一个新的类
- 重复此操作直到满足停止条件
- 得到层次化的类别

- 分裂聚类开始将所有样本分到一个类
- 之后将已有类中相距最远的样本分到两个新的类
- 重复此操作直到满足停止条件
- 得到层次化的类别

聚合聚类的具体过程

- 对于给定的样本集合，开始将每个样本分到一个类
- 然后按照一定规则，例如类间距离最小，将最满足规则条件的两个类进行合并
- 如此反复进行，每次减少一个类，直到满足停止条件，如所有样本聚为一类。

聚合聚类

- 聚合聚类需要预先确定下面三个要素
  - 距离或相似度
    - 闵可夫斯基距离
    - 马哈拉诺比斯距离
    - 相关系数
    - 夹角余弦
  - 合并规则
    - 类间距离最小
    - 类间距离可以是最短距离、最长距离、中心距离、平均距离
  - 停止条件
    - 停止条件可以是类的个数达到闭值（极端情况类的个数是1)
    - 类的直径超过阂值

聚合聚类算法

输入：n 个样本组成的样本集合及样本之间的距离；

输出：对样本集合的一个层次化聚类。

（1）计算 n 个样本两两之间的欧氏距离 $\{d_{ij}\}$，记作矩阵 $D = [d_{ij}]_{n\times n}$。

（2）构造 n 个类，每个类只包含一个样本。

（3）合并类间距离最小的两个类，其中最短距离为类间距离，构建一个新类。

（4）计算新类与当前各类的距离。若类的个数为 1，终止计算，否则回到步 (3)。■

可以看出聚合层次聚类算法的复杂度是 $O(n^3m)$，其中 m 是样本的维数，n 是样本个数。

例

- 给定5个样本的集合，样本之间的欧氏距离由如下矩阵D表示

$$D = [d_{ij}]_{5\times 5} = \begin{bmatrix} 0 & 7 & 2 & 9 & 3 \\ 7 & 0 & 5 & 4 & 6 \\ 2 & 5 & 0 & 8 & 1 \\ 9 & 4 & 8 & 0 & 5 \\ 3 & 6 & 1 & 5 & 0 \end{bmatrix}$$

- 其中d_{ij}表示第i个样本与第j个样本之间的欧氏距离。
- 显然D为对称矩阵。应用聚合层次聚类法对这5个样本进行聚类。

例

- （1）
- 首先用5个样本构建5个类，$G_i = \{x_i\}, i = 1, 2, \cdots, 5,$
- 这样，样本之间的距离也就变成类之间的距离，所以5个类之间的距离矩阵亦为D

- （2）
- 由矩阵D可以看出，$D_{35} = D_{53} = 1$ 为最小，所以把G_3和G_5合并为一个新类，记作 $G_6 = \{x_3, x_5\}$.

例

- （3）
- 计算G_6与G_1, G_2, G_4之间的最短距离，有

$$D_{61} = 2, \quad D_{62} = 5, \quad D_{64} = 5$$

- 又注意到其余两类之间的距离是

$$D_{12} = 7, \quad D_{14} = 9, \quad D_{24} = 4$$

- 显然，D_{61}=2最小，所以将G_1与G_6合并成一个新类，记作

$$G_7 = \{x_1, x_3, x_5\}。$$

例

- （4）
- 计算G_7与G_2, G_4之间的最短距离，

$$D_{72} = 5, \quad D_{74} = 5$$

- 又注意到

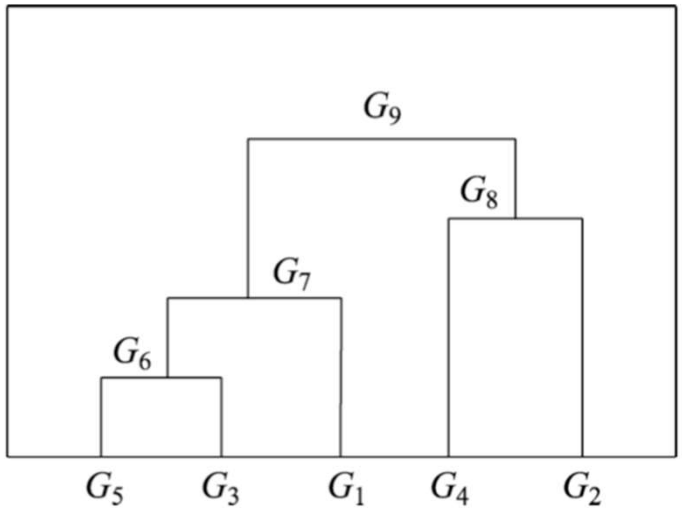
$$D_{24} = 4$$

- 显然，其中D_{24}=4最小，所以将G_2与G_4合并成一个新类，记作

$$G_8 = \{x_2, x_4\}$$

例

- （5）
- 将G_7与G_8合并成一个新类，记作 $G_9 = \{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\}$
- 即将全部样本聚成1类，聚类终止



k均值聚类

- k均值聚类是基于样本集合划分的聚类算法。
- k均值聚类将样本集合划分为k个子集，构成k个类，将n个样本分到k个类中，每个样本到其所属类的中心的距离最小。
- 每个样本只能属于一个类，所以k均值聚类是硬聚类。

模型

- 给定n个样本的集合 $X = \{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$
- 每个样本由一个特征向量表示，特征向量的维数是m。
- k均值聚类的目标是将n个样本分到k个不同的类或簇中，这里假设k < n。
- k个类$G_1, G_2, \cdots, G_k$形成对样本集合X的划分，其中

$$G_i \cap G_j = \varnothing, \bigcup_{i=1}^{k} G_i = X$$

- 用C表示划分，一个划分对应着一个聚类结果。

模型

- 划分C是一个多对一的函数
- k均值聚类的模型是一个从样本到类的函数。
- 划分或者聚类可以用函数 $l = C(i)$ 表示，其中样本用一个整数 $i \in \{1, 2, \cdots, n\}$ 表示，类用一个整数 $l \in \{1, 2, \cdots, k\}$ 表示

策略

- k均值聚类归结为样本集合X的划分，或者从样本到类的函数的选择问题。

- k均值聚类的策略是通过损失函数的最小化选取最优的划分或函数C^*

策略

- 首先，采用欧氏距离平方（squared Euclidean distance）作为样本之间的距离 $d(x_i, x_j)$

$$d(x_i, x_j) = \sum_{k=1}^{m} (x_{ki} - x_{kj})^2$$

$$= \|x_i - x_j\|^2$$

策略

- 然后，定义样本与其所属类的中心之间的距离的总和为损失函数，即

$$W(C)=\sum_{l=1}^{k}\sum_{C(i)=l}\|x_i-\bar{x}_l\|^2$$

- $\bar{x}_l=(\bar{x}_{1l},\bar{x}_{2l},\cdots,\bar{x}_{ml})^{\mathrm{T}}$ 是第l个类的均值或中心，$n_l=\sum_{i=1}^{n}I(C(i)=l)$
- $I(C(i)=l)$ 是指示函数，取值1或0
- 函数W(C也称为能量，表示相同类中的样 本相似的程度。

策略

- k均值聚类就是求解最优化问题:

$$C^* = \arg\min_C W(C)$$
$$= \arg\min_C \sum_{l=1}^{k} \sum_{C(i)=l} \|x_i - \bar{x}_l\|^2$$

- 相似的样本被聚到同类时，损失函数值最小，这个目标函数的最优化能达到聚类的目的。

策略

- 但是，这是一个组合优化问题，n个样本分到k类，所有可能分法的数目是:

$$S(n,k) = \frac{1}{k!}\sum_{l=1}^{k}(-1)^{k-l}\binom{k}{l}k^n$$

- 事实上，k均值聚类的最优解求解问题是NP困难问题。现实中采用迭代的方法求解。

算法

- k均值聚类的算法是一个迭代的过程，每次迭代包括两个步骤。
- 首先选择k个类的中心，将样本逐个指派到与其最近的中心的类中，得到一个聚类结果
- 然后更新每个类的样本的均值，作为类的新的中心
- 重复以上步骤，直到收敛为止。

算法

- 首先，对于给定的中心值（$m_1,m_2,\cdots,m_k$），求一个划分C，使得目标函数极小化：

$$\min_{C}\sum_{l=1}^{k}\sum_{C(i)=l}\|x_i-m_l\|^2$$

- 就是说在类中心确定的情况下，将每个样本分到一个类中，使样本和其所属类的中心之间的距离总和最小。
- 求解结果，将每个样本指派到与其最近的中心m_l的类G_l中。

算法

- 然后，对给定的划分C，再求各个类的中心（$m_1,m_2,\cdots,m_k$），使得目标函数极小化：

$$\min_{m_1,\cdots,m_k} \sum_{l=1}^{k} \sum_{C(i)=l} \|x_i - m_l\|^2$$

- 就是说在划分确定的情况下，使样本和其所属类的中心之间的距离总和最小
- 求解结果，对于每个包含n_l个样本的类G_l，更新其均值m_l

$$m_l = \frac{1}{n_l} \sum_{C(i)=l} x_i, \quad l = 1,\cdots,k$$

- 重复以上两个步骤，直到划分不再改变，得到聚类结果

k均值聚类算法

输入：n 个样本的集合 X；

输出：样本集合的聚类 $C^{\bullet}$。

（1）初始化。令 $t=0$，随机选择 k 个样本点作为初始聚类中心 $m^{(0)}=(m_1^{(0)},\cdots,m_l^{(0)},\cdots,m_k^{(0)})$。

（2）对样本进行聚类。对固定的类中心 $m^{(t)}=(m_1^{(t)},\cdots,m_l^{(t)},\cdots,m_k^{(t)})$，其中 $m_l^{(t)}$ 为类 G_l 的中心，计算每个样本到类中心的距离，将每个样本指派到与其最近的中心的类中，构成聚类结果 $C^{(t)}$。

（3）计算新的类中心。对聚类结果 $C^{(t)}$，计算当前各个类中的样本的均值，作为新的类中心 $m^{(t+1)}=(m_1^{(t+1)},\cdots,m_l^{(t+1)},\cdots,m_k^{(t+1)})$。

（4）如果迭代收敛或符合停止条件，输出 $C^*=C^{(t)}$。

否则，令 $t=t+1$，返回步 (2)。 ■

k 均值聚类算法的复杂度是 $O(mnk)$，其中 m 是样本维数，n 是样本个数，k 是类别个数。

例

- 给定含有5个样本的集合

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 5 & 5 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

- 试用k均值聚类算法将样本聚到2个类中。

例

（1）选择两个样本点作为类的中心。假设选择 $m_1^{(0)} = x_1 = (0,2)^{\mathrm{T}}$，$m_2^{(0)} = x_2 = (0,0)^{\mathrm{T}}$。

（2）以 $m_1^{(0)}$，$m_2^{(0)}$ 为类 $G_1^{(0)}$，$G_2^{(0)}$ 的中心，计算 $x_3 = (1,0)^{\mathrm{T}}$，$x_4 = (5,0)^{\mathrm{T}}$，$x_5 = (5,2)^{\mathrm{T}}$ 与 $m_1^{(0)} = (0,2)^{\mathrm{T}}$，$m_2^{(0)} = (0,0)^{\mathrm{T}}$ 的欧氏距离平方。

对 $x_3 = (1,0)^{\mathrm{T}}$，$d(x_3, m_1^{(0)}) = 5$，$d(x_3, m_2^{(0)}) = 1$，将 x_3 分到类 $G_2^{(0)}$。

对 $x_4 = (5,0)^{\mathrm{T}}$，$d(x_4, m_1^{(0)}) = 29$，$d(x_4, m_2^{(0)}) = 25$，将 x_4 分到类 $G_2^{(0)}$。

对 $x_5 = (5,2)^{\mathrm{T}}$，$d(x_5, m_1^{(0)}) = 25$，$d(x_5, m_2^{(0)}) = 29$，将 x_5 分到类 $G_1^{(0)}$。

例

（3）得到新的类 $G_1^{(1)} = \{x_1, x_5\}$，$G_2^{(1)} = \{x_2, x_3, x_4\}$，计算类的中心 $m_1^{(1)}$，$m_2^{(1)}$：

$$m_1^{(1)} = (2.5, 2.0)^{\mathrm{T}}, \quad m_2^{(1)} = (2, 0)^{\mathrm{T}}$$

（4）重复步骤 (2) 和步骤 (3)。

将 x_1 分到类 $G_1^{(1)}$，将 x_2 分到类 $G_2^{(1)}$，x_3 分到类 $G_2^{(1)}$，x_4 分到类 $G_2^{(1)}$，x_5 分到类 $G_1^{(1)}$。

得到新的类 $G_1^{(2)} = \{x_1, x_5\}$，$G_2^{(2)} = \{x_2, x_3, x_4\}$。

由于得到的新的类没有改变，聚类停止。得到聚类结果：

$$G_1^* = \{x_1, x_5\}, \quad G_2^* = \{x_2, x_3, x_4\}$$

算法特性

- 总体特点
  - 基于划分的聚类方法
  - 类别数k事先指定
  - 以欧氏距离平方表示样本之间的距离，以中心或样本的均值表示类别
  - 以样本和其所属类的中心之间的距离的总和为最优化的目标函数
  - 得到的类别是平坦的、非层次化的
  - 算法是迭代算法，不能保证得到全局最优。

算法特性

- 收敛性

- k均值聚类属于启发式方法，不能保证收敛到全局最优，初始中心的选择会直接影响聚类结果。

- 注意，类中心在聚类的过程中会发生移动，但是往往不会移动太大，因为在每一步，样本被分到与其最近的中心的类中。

算法特性

- 初始类的选择
- 选择不同的初始中心，会得到不同的聚类结果。
- 初始中心的选择，比如可以用层次聚类对样本进行聚类，得到k个类时停止。然后从每个类中选取一个与中心距离最近的点。

算法特性

- 类别数k的选择

- k均值聚类中的类别数k值需要预先指定，而在实际应用中最优的k值是不知道的。
- 尝试用不同的k值聚类，检验得到聚类结果的质量，推测最优的k值。
- 聚类结果的质量可以用类的平均直径来衡量。

- 一般地，类别数变小时，平均直径会增加
- 类别数变大超过某个值以后，平均直径会不变，而这个值正是最优的k值。实验时，可以采用二分查找，快速找到最优的k值。

算法特性