CS5487 编程作业2：聚类

安东尼·陈
香港城市大学计算机科学系

本次编程作业要求你实现并测试多种聚类算法，分别应用于合成数据与真实数据。给定数据集 $X = \{x_1, \cdots, x_n\}$（其中 $x_i \in \mathbb{R}^d$），任务目标是为每个数据点分配聚类标签 $y_i \in \{1, \cdots, K\}$，其中 K 为聚类数量。本次作业需研究以下三种聚类算法：

1. K-means算法

K-means算法通过当前各数据点的聚类分配结果计算聚类中心 μ_j（假设聚类数量 K 已知）。每次迭代包含以下两个步骤：

聚类分配：

$$z_{ij} = \begin{cases} 1, & j = \arg\min_{k \in \{1, \cdots, K\}} \|x_i - \mu_k\|^2 \\ 0, & \text{其他情况} \end{cases}$$

中心估计：

$$\mu_j = \frac{\sum_{i=1}^n z_{ij} x_i}{\sum_{i=1}^n z_{ij}} \tag{2}$$

数据点 x_i 的聚类标签为其距离最近的聚类中心对应的标签，即 $y_i = \arg\max_j z_{ij}$。

2. 高斯混合模型的EM算法（EM-GMM）

EM算法用于估计包含 K 个成分的高斯混合模型（GMM）的极大似然参数，模型参数为 $\{\pi_j, \mu_j, \Sigma_j\}_{j=1}^K$（同样假设 K 已知）。算法包含E步（期望步）和M步（最大化步）：

E步：

$$\hat{z}_{ij} = p(z_i = j \mid x_i) = \frac{\pi_j \mathcal{N}(x_i \mid \mu_j, \Sigma_j)}{\sum_{k=1}^K \pi_k \mathcal{N}(x_i \mid \mu_k, \Sigma_k)} \tag{3}$$

M步：

$$\hat{N}_j = \sum_{i=1}^{n} \hat{z}_{ij},\ \hat{\pi}_j = \frac{\hat{N}_j}{n},\ \hat{\mu}_j = \frac{1}{\hat{N}_j} \sum_{i=1}^{n} \hat{z}_{ij} x_i \tag{4}$$

$$\hat{\Sigma}_j = \frac{1}{\hat{N}_j} \sum_{i=1}^{n} \hat{z}_{ij} \left(x_i - \hat{\mu}_j\right) \left(x_i - \hat{\mu}_j\right)^T$$

算法收敛后，数据点 x_i 的聚类标签为后验概率最大的成分对应的标签，即 $y_i = \arg\max_j \hat{z}_{ij}$。课程网站上提供的“gmm-tips”文档包含EM-GMM实现的实用建议。

3. 均值漂移算法（Mean-shift）

均值漂移算法采用带有自适应步长的梯度上升法，在数据集 X 的核密度估计中寻找局部峰值。本次作业使用带宽为 h 的高斯核。给定初始点 $\hat{x}^{(0)}$（上标表示迭代次数），算法更新规则如下：

$$\hat{x}^{(t+1)} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i \mathcal{N}\left(x_i \mid \hat{x}^{(t)}, h^2 I\right)}{\sum_{i=1}^{n} \mathcal{N}\left(x_i \mid \hat{x}^{(t)}, h^2 I\right)} \tag{6}$$

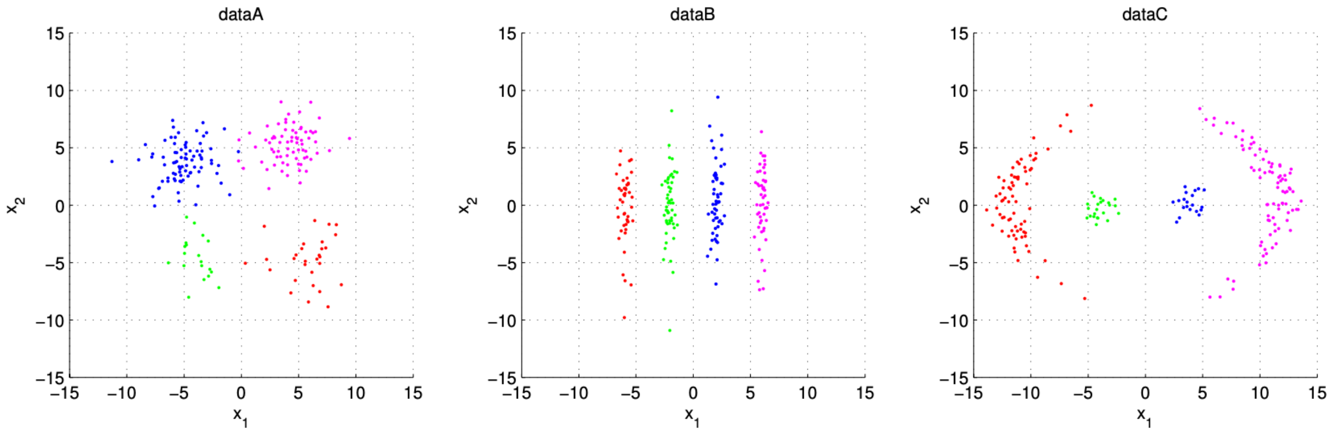
为完成聚类，需将每个数据点 x_i 作为初始点运行均值漂移算法。算法收敛后，收敛到同一局部峰值的数据点将被分配相同的聚类标签。此时，聚类数量 K 不固定（取决于所选带宽 h）。

问题1 合成数据聚类

在本问题中，你需在合成数据上测试上述三种聚类算法，并分析每种算法在不同数据分布下的表现。压缩文件PA2-cluster-data.zip包含合成数据文件，其中MATLAB数据文件cluster_data.mat（若不使用MATLAB，可使用cluster_data*.txt文件）包含三个数据集（数据点及真实标签），文件中的变量说明如下：

- dataA_X：数据集A的样本点，每一列代表一个数据点 $x_i \in \mathbb{R}^2$
- dataA_Y：数据集A的真实标签 $\{y_i\}$
- dataB_X：数据集B的样本点
- dataB_Y：数据集B的真实标签
- dataC_X：数据集C的样本点
- dataC_Y：数据集C的真实标签

下图展示了三个数据集的分布，颜色代表数据点的真实标签。



本问题目标是利用样本点 X 发现每个数据集中的聚类结构。

(a)

实现上述三种聚类算法。由于后续问题需复用这些算法，请尽量保证代码的通用性。

(b)

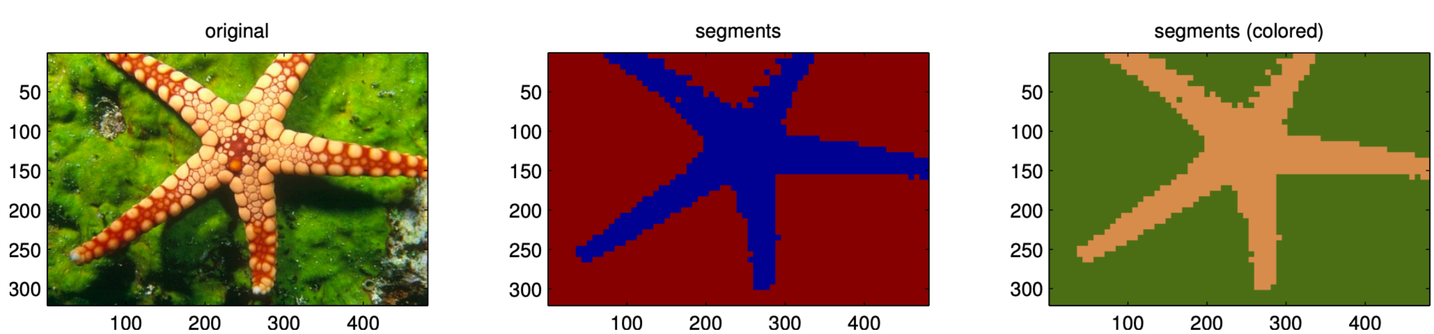
在三个合成数据集上运行三种算法。从定性角度分析，每种算法在各数据集上的表现如何？结合数据分布特点，评述每种算法的优势与局限性。

(c)

均值漂移算法对带宽参数 h 的敏感度如何？

问题2 真实场景聚类问题——图像分割

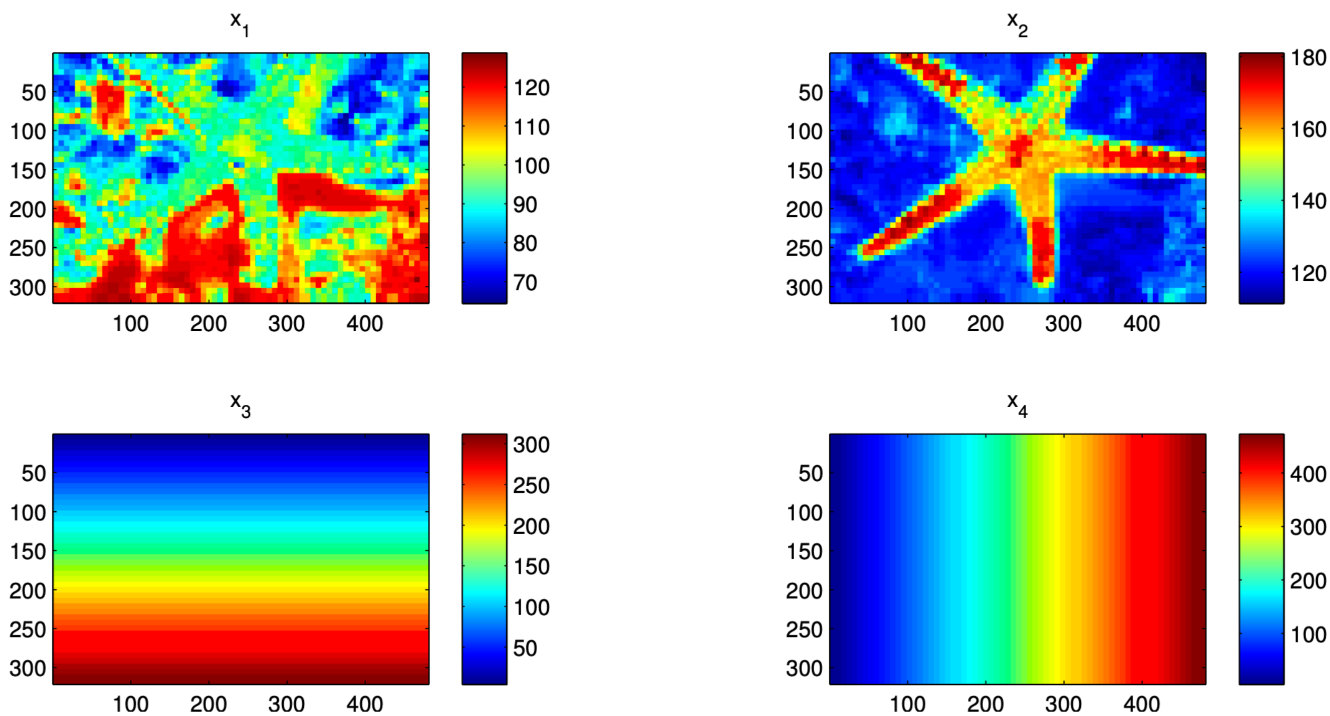
本问题将聚类应用于真实场景任务——图像分割。图像分割的目标是在图像中找到"同质区域"，这些区域通常对应物体或物体的组成部分。下图左侧为一幅测试图像，右侧为使用K-means算法得到的分割结果（右侧图像中，每个分割区域的颜色由该区域内的平均颜色决定）。



进行图像分割时，首先需从图像的每个像素（或规则网格上的部分像素）中提取特征向量。具体而言，以每个像素为中心构建窗口，提取四维特征向量 $x = [u, v, c_y, c_x]^T$，其中：

- (u, v)：窗口内的平均色度值（不含亮度的颜色信息）；
- (c_x, c_y)：像素位置（窗口在x-y坐标系中的中心）。

示例图像的特征值分布如下图所示（每个子图对应一个特征维度在整幅图像上的分布）。



接下来，使用聚类算法对特征向量进行分组，并为每个像素分配对应的聚类标签，最终形成分割结果。

压缩文件PA2-cluster-images.zip包含图像文件及MATLAB工具代码（用于提取特征、根据聚类标签生成分割图像），提供的MATLAB函数如下：

- getfeatures.m：从图像中提取特征的MATLAB函数；
- labels2segm.m：根据聚类标签生成分割图像的MATLAB函数；
- colorsegm.m：生成色彩美观的分割图像的MATLAB函数。

以下代码为生成上述分割图像的示例：

```matlab
% 读取图像并查看
img = imread('images/12003.jpg');
subplot(1,3,1); imagesc(img); axis image;

% 提取特征（步长=7）
[X, L] = getfeatures(img, 7);
XX = [X(1:2,:) ; X(3:4,:)/10]; % 对坐标特征进行降维缩放（见问题(b))

% 运行K-means算法——此处使用MATLAB自带函数，你需自行实现！
[Y, C] = kmeans(XX', 2);

% 根据标签生成分割图像
segm = labels2segm(Y, L);
subplot(1,3,2); imagesc(segm); axis image;

% 为分割图像着色
csegm = colorsegm(segm, img);
subplot(1,3,3); imagesc(csegm); axis image
```

在MATLAB中，可通过“help getfeatures”等命令查看各函数的文档说明。

对于Python用户，压缩文件PA2-cluster-python.zip包含上述演示代码及特征提取辅助函数的Python版本，该代码需依赖numpy、scipy、matplotlib和Image模块。此外，压缩文件PA2-cluster-imfeatures-txt.zip包含步长为7时提取的图像特征文本文件。

(a)

使用三种聚类算法对提供的部分图像进行分割。从定性角度分析，哪种算法的分割效果更好？聚类数量 K 或带宽 h 变化时，分割结果如何变化？哪种算法对参数变化的敏感度更低？评述观察到的算法特性与局限性。

(b)

特征向量 x 包含两种不同尺度的特征：色度值 (u, v) 的取值范围为0-255，而像素位置 (c_x, c_y) 的取值范围为0-512。EM-GMM算法可通过调整协方差矩阵适应不同特征的尺度差异，但K-means和均值漂移算法假设协方差矩阵为固定的各向同性矩阵。可通过以下方式修改这两种算法，以支持不同特征的尺度调整：

- **K-means算法**：修改数据点到聚类中心 x' 的距离计算方式，对不同类型特征施加权重：

$$d\left(x, x'\right)=\left\|\begin{bmatrix}u \\ v\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}u' \\ v'\end{bmatrix}\right\|^2+\lambda\left\|\begin{bmatrix}c_x \\ c_y\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}c_x' \\ c_y'\end{bmatrix}\right\|^2 \tag{7}$$

其中 $\lambda \geq 0$ 为权重控制参数。

- **均值漂移算法**：修改核函数，对不同类型特征使用独立带宽：

$$k(x, x')=\frac{1}{(2\pi)^2 h_p^2 h_c^2} \exp \left\{-\frac{1}{2 h_c^2}\left\|\begin{bmatrix}u \\ v\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}u' \\ v'\end{bmatrix}\right\|^2-\frac{1}{2 h_p^2}\left\|\begin{bmatrix}c_x \\ c_y\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}c_x' \\ c_y'\end{bmatrix}\right\|^2\right\} \tag{8}$$

其中 h_c 为颜色特征的带宽，h_p 为像素位置特征的带宽。

修改你的K-means和均值漂移算法实现，以支持不同特征的尺度调整（提示：修改公式(7)中的距离或公式(8)中的核函数，等价于对特征向量 x 的各维度进行适当缩放）。重新运行图像分割实验，分割效果是否有所提升？

问题3 聚类结果的定量评估（可选）

本可选问题要求你对问题1和问题2的聚类结果进行定量评估。考虑包含 n 个元素的集合 $S=\{s_1, \cdots, s_n\}$，以及该集合的两种划分方式 $y=\{Y_1, \cdots, Y_R\}$ 和 $Z=\{Z_1, \cdots, Z_C\}$，其中 Y_i 为划分 y 中的子集，Z_i 为划分 Z 中的子集。

兰德指数（Rand Index）

兰德指数用于定量衡量两种聚类划分结果的一致性。直观而言，兰德指数对应两种划分方式的“成对一致性概率”，即任意两个元素在“同属一个聚类”或“分属不同聚类”这两种判断上的一致概率。

兰德指数的定义

定义以下统计量：

- a：在划分 y 中同属一个子集，且在划分 Z 中也同属一个子集的元素对数量；
- b：在划分 y 中分属不同子集，且在划分 Z 中也分属不同子集的元素对数量；
- c：在划分 y 中同属一个子集，但在划分 Z 中分属不同子集的元素对数量；
- d：在划分 y 中分属不同子集，但在划分 Z 中同属一个子集的元素对数量。

则兰德指数为成对一致的元素对占总元素对的比例：

$$\text{Rand} = \frac{a+b}{a+b+c+d} = \frac{a+b}{\binom{n}{2}} \tag{9}$$

基于列联表的高效计算

兰德指数可通过列联表高效计算，列联表结构如下：

划分\类别	Z_1	Z_2	$\cdots$	Z_C	行和
Y_1	n_{11}	n_{12}	$\cdots$	n_{1C}	r_1
Y_2	n_{21}	n_{22}	$\cdots$	n_{2C}	r_2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$
Y_R	n_{R1}	n_{R2}	$\cdots$	n_{RC}	r_R
列和	c_1	c_2	$\cdots$	c_C	n

其中，n_{ij} 表示同时属于 Y_i（划分 y 的子集）和 Z_j（划分 Z 的子集）的元素数量；c_j 为第 j 列的和，r_i 为第 i 行的和。利用列联表，公式(9)中分子（一致的元素对数量）可通过以下公式计算：

$$a+b = \binom{n}{2} + \sum_{i=1}^{R}\sum_{j=1}^{C} n_{ij}^2 - \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{R} r_i^2 + \sum_{j=1}^{C} c_j^2\right)$$

(a)

针对问题1：使用兰德指数评估你的聚类结果与真实标签的一致性。哪种算法的整体表现最佳？每种算法在单个数据集上的表现如何？超参数（K 或 h）变化时，结果如何变化？（例如，绘制参数-兰德指数曲线）

(b)

针对问题2：图像的真实分割结果存储在压缩文件的“gtruth”目录中，文件名格式为“<图像名>-<用户ID>.png”，其中<图像名>为原始图像文件名，<用户ID>为标注真实分割结果的人员ID。在真实分割图像中，每个灰度值对应一个分割区域——注意，灰度值在0-255范围内均匀分布（以便查看），你可能需要将其重新映射为1-K 的标签。使用兰德指数评估你的分割结果：哪种算法的图像分割效果最佳？超参数（K 或 h）变化时，结果如何变化？（例如，绘制参数-兰德指数曲线）

兰德指数参考资料

- W. M. Rand. “Objective criteria for the evaluation of clustering methods”. *Journal of the American Statistical Association*, 66 (336): 846-850, 1971.
- Lawrence Hubert and Phipps Arabie. “Comparing partitions”. *Journal of Classification*, 2 (1): 193-218, 1985.

提交要求

你需提交以下材料：

1. 上述所有问题的答案、图表、分析与讨论等；
2. 源代码文件。

请通过Canvas网站提交作业：进入“Assignments”→“Programming Assignment 2”提交。

抄袭说明

你必须使用自己的代码实现每种聚类算法，不得使用他人编写的聚类算法实现（包括MATLAB自带的聚类函数）。使用通用的库组件和函数（如标准矩阵运算函数inv、eig等）是允许的。若使用特殊工具箱或库，请在报告中注明。

评分标准

本次作业的分数分布如下：

- 20%——K-means、EM和均值漂移算法的实现（问题1(a)）；
- 20%——合成数据集上的实验结果（问题1(b)）；
- 10%——算法对参数的敏感度分析（问题1(c)）；
- 20%——图像分割结果及参数敏感度分析（问题2(a)）；
- 10%——特征尺度调整后的实验结果（问题2(b)）；
- 20%——实验报告质量（见解深刻的观察与分析可获得更高分数）。

注：若确实无法正确实现算法，可使用第三方软件，但将无法获得“算法实现”部分的分数，其余部分（如结果展示）仍可得分。若使用第三方实现，必须在报告中注明来源。

可选问题说明

可选问题3（聚类定量评估）不计分。