5.2 聚类算法初步

一、 向量间的距离/度量

给定两个长度为p的向量$\mathbf{x}_i=(x_{i1},x_{i2},\cdots,x_{ip})$和 $\mathbf{x}_j=(x_{j1},x_{j2},\cdots,x_{jp})$,两者之间的距离人们往往用欧氏距离来进行度量：

$$d\left(x_i,x_j\right)=\left[\sum_{k=1}^{p}(x_{ik}-x_{jk})^2\right]^{\frac{1}{2}}$$

向量距离的概念在**机器学习**中有重要应用：

K-近邻(K-Nearest Neighbour, KNN)

即是给定一个训练数据集，对新的输入实例，在训练数据集中找到与该实例最邻近的K个实例，这K个实例的多数属于某个类，就把该输入实例分类到这个类中。这就类似于现实生活中少数服从多数的思想!

- **K=3（三局两胜，红），还是 K=5（五局三胜，蓝）？**

让我们先来看下引自维基百科上的一幅图:
avatar

样本数据分两类:

**** 蓝色的小正方形***

**** 红色的小三角形***

待分类数据

绿色的圆？(少数服从多数)

- **归一化的作用**

例：一个人身高(cm)与脚码（尺码）大小来作为特征值，类别为男性或者女性。我们现在如果有5个训练样本，分布如下：

A [(179,42), 男]

B [(178,43), 男]

C [(165,36), 女]

D [(177,42), 男]

E [(160,35), 女]

现在给定一个待测样本 **F(167,43)** ，问他是男性还是女性？

In [60]:

```
X = [179, 42; 178,43; 165,36; 177, 42; 160,35]
label = [1,1,0,1,0]'
```

```
X =

   179    42
   178    43
   165    36
   177    42
   160    35

label =

   1
   1
   0
   1
   0
```

注意到第一维身高特征是第二维脚码特征的4倍左右，那么在进行距离度量的时候，我们就会偏向于第一维特征。 这里，我们取$k = 3$来预测：

avatar

In [ ]:

```
Y = [167.0, 43.0];
dist = sqrt( ((X(:,1)-Y(1)).*(X(:,1)-Y(1))) +  ((X(:,2)-Y(2)).*(X(:,2)-Y(2))) );
```

- 由计算可以得到，最近的前三个分别是C,D,E三个样本，那么由C,E为女性，D为男性，女性多于男性得到我们要预测的结果为女性!
- **一个女性的脚43码的可能性，远远小于男性脚43码的可能性，那么为什么算法还是会预测F为女性呢？那是因为由于各个特征量纲的不同，在这里导致了身高的重要性已经远远大于脚码了，这是不客观的**

改进：Each Feature Matters!

假设样本特征为 $\{(x_{i1}, x_{x2}, \ldots, x_{im})\}_{i=1}^{m}$，每个特征的最值为：

$$M_j = \max_{i=1,2,\ldots m} x_{ij} - \min_{i=1,2,\ldots,m} x_{ij}$$

则在计算时, 将每个特征除以对应的 M_j , 来进行归一化, 即

$$d(X,Y) = \sqrt{\sum_{j=1}^{m}\left(\frac{X_j - Y_j}{M_j}\right)^2}$$

In [61]:

```
M1 = max(X(:,1)) - min(X(:,1))
M2 = max(X(:,2)) - min(X(:,2))
```

```
M1 =  19
M2 =  8
```

In [62]:

```
dist_norm = sqrt( ((X(:,1)-Y(1)).*(X(:,1)-Y(1)))/M1/M1 +  ((X(:,2)-Y(2)).*(X(:,2)-Y(2)))/M2/M2
);
[dist, dist_norm, label]
```

```
ans =

   12.04159    0.64383    1.00000
   11.00000    0.57895    1.00000
    7.28011    0.88131    0.00000
   10.04988    0.54096    1.00000
   10.63015    1.06571    0.00000
```

- 由第1列结果取最小的K=3个选项，为3-5行，两个0一个1，故判断结果为0，即女性
- 由第2列结果取最小的K=3个选项，为2-4行，两个1一个0，故判断结果为1，即男性

其算法的描述为：

- 计算测试数据与各个训练数据之间的距离；
- 按照距离的递增关系进行排序；
- 选取距离最小的K个点；
- 确定前K个点所在类别的出现频率；
- 返回前K个点中出现频率最高的类别作为测试数据的预测分类。

事实上，向量间举例的常用度量还有其他很多形式，如：

(2) 绝对距离

$$d\left(x_i, x_j\right) = \sum_{k=1}^{p} \left|x_{ik} - x_{jk}\right|$$

(3) 闵氏距离

$$d\left(x_i, x_j\right) = \left[\sum_{k=1}^{p} \left|x_{ik} - x_{jk}\right|^m\right]^{\frac{1}{m}}$$

(4) 切氏距离

$$d\left(x_i, x_j\right) = \max_{1 \leq k \leq p} \left|x_{ik} - x_{jk}\right|$$

(5) 方差加权距离

$$d\left(x_i, x_j\right) = \left[\sum_{k=1}^{p} (x_{ik} - x_{jk})^2 / s_k^2\right]^{\frac{1}{2}}, \qquad s_k^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^{n} (x_{jk} - \overline{x_k})^2, \overline{x_k} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} x_{jk}$$

(6) 马氏距离

$$d\left(x_i, x_j\right) = (x_i - x_j)^T \Sigma^{-1} (x_i - x_j)$$

此外，还有“余弦相似度”等以角度计算的度量，在推荐算法中也被经常适用。 在Octave中，计算距离的命令是pdist，调用格式为：

Y = pdist(X,distance)

可选的distance有：euclidean（欧氏距离）； cityblock（绝对距离）； minkowski（闵氏距离）； chebychev（切氏距离）； seuclidean（方差加权距离）； mahalanobis（马氏距离）等，在聚类分析中最常用的是欧氏距离。

In [3]:

```
pkg load statistics
```

In [4]:

```
pdist
```

```
error: Invalid call to pdist.  Correct usage is:

 -- Function File: Y = pdist (X)
 -- Function File: Y = pdist (X, METRIC)
 -- Function File: Y = pdist (X, METRIC, METRICARG, ...)

Additional help for built-in functions and operators is
available in the online version of the manual.  Use the command
'doc <topic>' to search the manual index.

Help and information about Octave is also available on the WWW
at http://www.octave.org and via the help@octave.org
mailing list.
```

例1：2008年我国5省、区、市城镇居民人均年家庭收入见表，为了研究上述5省、区、市城镇居民收入差异，需要利用统计资料对其进行分类，指标变量有4个，计算各省、区、市之间的前6中距离。

省（市、区）	工薪收入	经营净收入	财产性收入	转移性收入
北京	18738.96,	778.36	452.75	7707.87
上海	21791.11	1399.14	369.12	6199.77
安徽	9302.38	959.43	293.92	3603.72
陕西	8354.63	638.76	65.33	2610.61
新疆	9422.22	938.15	141.75	1976.49

In [6]:

```
x=[18738.96  778.36    452.75  7707.87; ...
   21791.11   1399.14   369.12   6199.77; ...
   9302.38   959.43   293.92   3603.72; ...
   8354.63   638.76  65.33  2610.61; ...
   9422.22    938.15   141.75    1976.49];
```

In [7]:

```
d1 = pdist(x)   % default option is 'Euclidean'
```

```
d1 =

 Columns 1 through 6:

   3.4616e+03   1.0293e+04   1.1575e+04   1.0944e+04   1.2763e+04   1.3932e+04

 Columns 7 through 10:

   1.3080e+04   1.4281e+03   1.6389e+03   1.2796e+03
```

In [10]:

```
d2 = pdist(x,'minkowski')   % try 'cityblock','minkowski', 'chebychev','seuclidean' and 'mahalanobis'
```

```
d2 =

 Columns 1 through 6:

   3.4616e+03   1.0293e+04   1.1575e+04   1.0944e+04   1.2763e+04   1.3932e+04

 Columns 7 through 10:

   1.3080e+04   1.4281e+03   1.6389e+03   1.2796e+03
```

二、聚类

2.1 谱系聚类

谱系聚类是根据生物分类学的思想对研究对象进行分类的方法。谱系聚类首先将每个样品看成一类，然后把最相似的的样品聚为小类，再将已聚合的小类按各类之间的相似性进行在聚合，随着相似性的减弱，最后将一切子类聚为一大类，从而得到一个按相似性大小聚结起来的谱系图。具体实施步骤如下：

（1） n 个样品开始作为 n 个类，计算两两之间的距离或相似系数，得到实对称矩阵

$$D_0 = \begin{pmatrix} d_{11} & \cdots & d_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{n1} & \cdots & d_{nn} \end{pmatrix}$$

（2） 从D_0 的非主对角线上找最小距离或最大相似系数，设该元素是D_pq ，则将G_p, G_q合并成一个新类$G_r = (G_p, G_q)$ ，在D_0 中去掉G_p, G_q 所在的两行、两列，并加上新类G_r 与其各类之间的距离或相似系数，得到 $n-1$ 阶矩阵D_1

（3） 从D_1 出发重复步骤2）的做法得到D_2 ，再由D_2 出发重复上述步骤，直到全部样品聚为一个大类为止。

（4）在合并过程中要记下合并样品的编号及两类合并时的水平，并绘制谱系聚类图。在Octave中：

```
谱系聚类命令为linkage,其调用格式为：  Z=linkage(Y,method)，  其中输入Y是一个距离矩阵，可由pdist()计算得到

做谱系聚类图命令为dendrogram,其调用格式为：H=dendrogram(Z,N)

输出聚类结果命令为cluster, 其调用格式为：T=cluster(Z,K)   %% 这个在Octave中尚未实现，参考help cluster
```

例2：利用谱系聚类对例1中的5个省、区、市进行聚类分析。

解：

In [23]:

```
%%% 注意：矩阵输入也可以这样子！！
x=[18738.96  778.36    452.75  7707.87
   21791.11   1399.14   369.12   6199.77
   9302.38   959.43   293.92   3603.72
   8354.63   638.76  65.33  2610.61
   9422.22    938.15   141.75   1976.49];
d = pdist(x);
```

```
d =

 Columns 1 through 6:

   3.4616e+03   1.0293e+04   1.1575e+04   1.0944e+04   1.2763e+04   1.3932e+04

 Columns 7 through 10:

   1.3080e+04   1.4281e+03   1.6389e+03   1.2796e+03
```

In [19]:

```
z1 = linkage(d)
```

```
z1 =

   4.0000e+00   5.0000e+00   1.2796e+03
   3.0000e+00   6.0000e+00   1.4281e+03
   1.0000e+00   2.0000e+00   3.4616e+03
   7.0000e+00   8.0000e+00   1.0293e+04
```

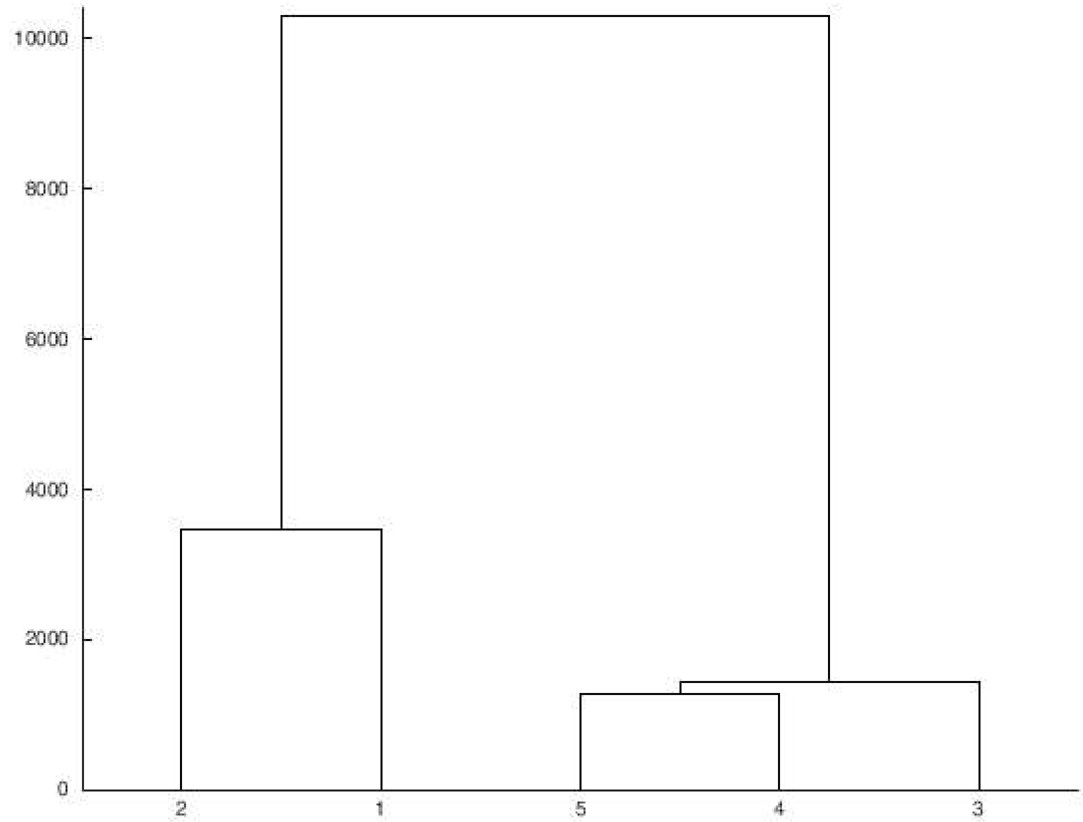
上述输出表明：在0.12796的水平下，第4和第5行可以合成第一类/行, ... 每一行都是如此。

In [20]:

```
H = dendrogram(z1)
```

```
H =

   2.0000e+00   0.0000e+00
   1.0000e+00   0.0000e+00
   5.0000e+00   0.0000e+00
   4.0000e+00   0.0000e+00
   3.0000e+00   0.0000e+00
   3.5000e+00   1.2796e+03
   4.2500e+00   1.4281e+03
   1.5000e+00   3.4616e+03
   2.8750e+00   1.0293e+04
```



In [17]:

```
help cluster
```

error: help: the 'cluster' function belongs to the statistics package from Octave Forge but has not yet been implemented.

Please read <http://www.octave.org/missing.html> to learn how you can contribute missing functionality.

2.2 K均值聚类

K均值(K-means)聚类是最著名的划分聚类算法，给定一个数据点集合和需要的聚类数目K，K由用户指定，K均值算法根据某个距离函数反复把数据分入K个聚类中。 在运用K均值聚类法之前，要根据实际问题先确定分类数 ，在每一类中选择有代表性的样品，这样的样品称为聚点。

若将n个样品分为k 类，则先选择所有样品中距离最远的两个样品x_{i1}, x_{i2} 为聚点，使得

$$d\left(x_{i1}, x_{i2}\right)=d_{i1i2}=\max \left\{d_{ij}\right\}$$

然后选择第3个聚点x_{i3} ，使得x_{i3} 与前两个聚点的距离最小者等于所有其余的与x_{i1}, x_{i2} 的较小距离中最大的，即

$$\min \left\{d\left(x_{i3}, x_{ir}\right), r=1,2\right\}=\max \left\{\min \left\{d\left(x_{j}, x_{ir}\right), r=1,2\right\}, j \neq i1, i2\right\}$$

最后按相同的原则选取x_{ik} ，重复前面的步骤，直至确定k 个聚点$x_{i1}, x_{i2}, \ldots x_{ik}$ 。

K均值聚类的步骤（样品之间的距离采用欧氏距离）如下:

（1）设第 个初始聚点的集合是

$$L^{(0)}=\left\{x_{1}^{(0)}, x_{2}^{(0)}, \ldots, x_{k}^{(0)}\right\}$$

记

$$G_{i}^{(0)}=\left\{x: d\left(x, x_{i}^{(0)}\right) \leq d\left(x, x_{j}^{(0)}\right), j=1,2, \ldots, k, j \neq i\right\}(i=1,2, \ldots, k)$$

于是，将样品分成不相交的k 类，得到一个初始分类

$$G^{(0)}=\left\{G_{1}^{(0)}, G_{2}^{(0)}, \ldots, G_{k}^{(0)}\right\}$$

（2）从初始类$G^{(0)}$ 开始计算新的聚点集合$L^{(1)}$ ，计算

$$x_{i}^{(1)}=\frac{1}{n_{i}} \sum_{x l \in G_{i}^{(0)}} x_{l}(i=1,2, \ldots, k)$$

其中n_i 是类$G^{(0)}$ 中的样品数，得到一个新的集合

$$L^{(1)}=\left\{x_{1}^{(1)}, x_{2}^{(1)}, \ldots, x_{k}^{(1)}\right\}$$

从 $L^{(1)}$ 开始再进行分类，记

$$G_{i}^{(1)}=\left\{x: d\left(x, x_{i}^{(1)}\right) \leq d\left(x, x_{j}^{(1)}\right), j=1,2, \ldots, k, j \neq i\right\}(i=1,2, \ldots, k)$$

得到一个新的类

$$G^{(1)}=\left\{G_{1}^{(1)}, G_{2}^{(1)}, \ldots, G_{k}^{(1)}\right\}$$

（3） 重复上述步骤m 次得

$$G^{(m)}=\left\{G_{1}^{(m)}, G_{2}^{(m)}, \ldots, G_{k}^{(m)}\right\}$$

其中$x_i^{(m)}$ 是类$G_i^{(m-1)}$ 的重心。$x_i^{(m)}$ 不一定是样品。当 m 逐渐增大时，分类趋于稳定。同时 $x_i^{(m)}$可以近似地看作是$G_i^{(m)}$ 的重心，即

$$x_{i}^{(m+1)} \approx x_{i}^{(m)}, G_{i}^{(m+1)} \approx G_{i}^{(m)}$$

此时结束计算。

（4）若对某一个m，

$$G^{(m+1)}=\left\{G_1^{(m+1)},G_2^{(m+1)},\ldots,G_k^{(m+1)}\right\}$$

与

$$G^{(m)}=\left\{G_1^{(m)},G_2^{(m)},\ldots,G_k^{(m)}\right\}$$

相同，则结束计算。

K均值聚类步骤概要

目标：给定一个数据集,根据某个\alert{距离函数}把数据分成K类。步骤：

- 需事先确定分类数，并选择有代表性的**聚点**
- 选择所有样品中距离最远的两个样品x_{i1},x_{i2}为聚点，使得
$$d\left(x_{i1},x_{i2}\right)=d_{i1i2}=\max\left\{d_{ij}\right\}$$
- 选择第3个聚点x_{i3}，使得x_{i3}与前两个聚点的距离最小者等于所有其余的与x_{i1},x_{i2}满足较小距离最大化:
$$\max\left\{\min\left\{d\left(x_j,x_{ir}\right),r=1,2\right\},j\neq i1,i2\right\}$$
- 按相同的原则选取x_{ik}，重复步骤直至确定k个聚点$x_{i1},x_{i2},\ldots x_{ik}$

Octave中实现K均值聚类的命令是kmeans，其调用格式为：

In [ ]:

```
help kmeans
```

例3：利用K均值聚类再根据例1中5个省、区、市的相关数据，对他们进行聚类分析。

In [29]:

```
x = [18738.96    778.36     452.75    7707.87
     21791.11   1399.14     369.12    6199.77
      9302.38    959.43     293.92    3603.72
      9794.82    544        151.46    3356.85
      9422.22    938.15     141.75    1976.49];
```

In [30]:

```
[a,b] = kmeans(x,3)
```

```
a =

   2
   3
   1
   1
   1

b =

   9.5065e+03    8.1386e+02    1.9571e+02    2.9790e+03
   1.8739e+04    7.7836e+02    4.5275e+02    7.7079e+03
   2.1791e+04    1.3991e+03    3.6912e+02    6.1998e+03
```

二 案例研究：利用K-means实施图像分割

如下是一个针对图像数据I像素的K-means计算程序，请阅读：

In [1]:

```
function [F,C] = imkmeans(I,C)
if nargin~=2
    error('只能有两个输入参数');
end
if isempty(C)
    K=2;
    C=[];
elseif isscalar(C)
    K=C;
    C=[];
else
    K=size(C,1);
end
X = exactvecotr(I);
if isempty(C)
    C = searchintial(X,'sample',K);
end
Cprev=rand(size(C));
while true
    D = sampledist(X,C,'euclidean');
    [~,locs]=min(D,[],2);
    for i=1:K
        C(i,:)=mean(X(locs==i,:),1);
    end
    if norm(C(:)-Cprev(:))<eps
        break
    end
    Cprev=C;
end
[m,n,~]=size(I);
F=reshape(locs,[m,n]);
endfunction
```

In [2]:

```
function vec = exactvecotr(img)
[m,n,~] = size(img);
vec=zeros(m*n,3);
img=double(img);
for j=1:n
    for i=1:m
        color=img(i,j,:);
        wx=1;wy=1;
        dist=[wx*j/n,wy*i/m];
        dist=[];
        texture=[];
        vec((j-1)*m+i,:)=[color(:);dist(:);texture(:)];
    end
end
endfunction
```

In [3]:

```
function C = searchintial(X,method,varargin)
switch lower(method(1))
    case 's'
        K=varargin{1};
        C=X(randsample(size(X,1),K),:);
    case 'u'
        Xmins=min(X,[],1);
        Xmaxs=max(X,[],1);
        K=varargin{1};
        C=unifrnd(Xmins(ones(K,1),:),Xmaxs(ones(K,1),:));
end
endfunction
```

In [4]:

```
function D=sampledist(X,C,method,varargin)
[n,p]=size(X);
K=size(C,1);
D=zeros(n,K);
switch lower(method(1))
    case 'e'
        for i =1:K
            D(:,i)=(X(:,1)-C(i,1)).^2;
            for j=2:p
                D(:,i)=D(:,i)+(X(:,j)-C(i,j)).^2;
            end
        end
    case 'c'
        for i=1:K
            D(:,i)=abs(X(:,1)-C(i,1));
            for j=2:p
                D(:,i)=D(:,i)+abs(X(:,j)-C(i,j));
            end
        end
end
endfunction
```

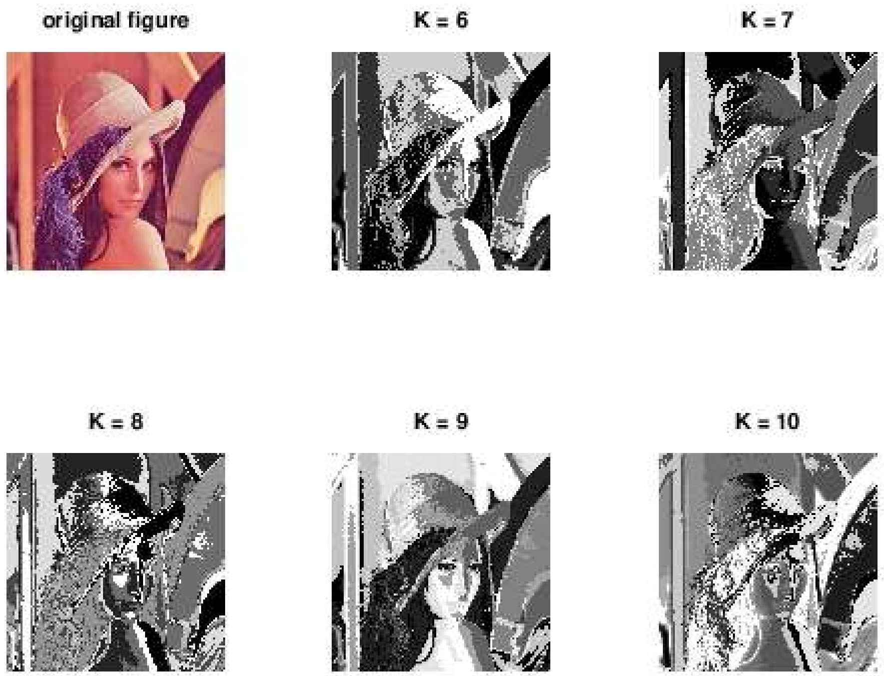
主程序:

In [6]:

```
pkg load statistics
```

In [9]:

```
I=imread('figs/lena.jpg');
I=double(I)/255;
figure;subplot(2,3,1)
imshow(I)
title('original figure')
for i=6:10
    F = imkmeans(I,i);
    subplot(2,3,i-4);
    imshow(F,[]);
    title(['K = ',num2str(i)])
end
print -dpng lena-clustering.png
```



练习：请用matlab或octave重新绘制不同K值结果图（Jupyter中并不是太清晰），并将算法学习笔记和程序以及结果记录在文档中。