1. 聚类分析 (Cluster Analysis)

定义:聚类分析是一种无监督学习方法,旨在将数据集中的对象根据特征相似性划分成若干个组 (簇)。同一簇内的对象相似度较高,簇与簇之间相似度较低。

常见聚类算法:

1. K-means聚类

该算法通过迭代地将数据点分配到K个簇中,使得每个簇内的点之间的距离最小化,而簇之间的 距离最大化。

算法步骤:

- 随机选择K个初始质心 (每个簇的中心点)。
- 将每个数据点分配到距离其最近的质心的簇中。
- 计算每个簇的新质心 (每个簇的平均值)。
- 重复以上步骤直到质心不再变化或达到预设的迭代次数。

公式:

1. 计算每个数据点 x_i 到簇质心 c_k 的距离:

$$d(x_i, c_k) = ||x_i - c_k||^2$$

2. 更新质心:

$$c_k = rac{1}{|C_k|} \sum_{i \in C_k} x_i$$

其中, C_k 表示簇 k 中的所有数据点, $|C_k|$ 是簇的大小。

2. 层次聚类 (Hierarchical Clustering)

- 凝聚型 (自下而上): 每个数据点最初被视为一个独立的簇,逐步合并相似的簇,直到所有数据点都在一个簇中。
- 分裂型 (自上而下): 将整个数据集视为一个簇, 逐步分裂成更小的簇。

聚合规则:

• 单链接: 簇之间的距离为最短的点对之间的距离。

• 完全链接: 簇之间的距离为最远的点对之间的距离。

• 平均链接: 簇之间的距离为簇内所有点对的平均距离。

应用: 客户细分、市场分析等。

2. 判别分析 (Discriminant Analysis)

定义:判别分析是一种用于分类的统计方法,它试图通过找到不同类别之间的区分边界来进行分类。 其目标是最大化类别之间的差异,并最小化同一类别内部的差异。

1. 线性判别分析 (LDA)

LDA是最常用的判别分析方法,它假设每个类别的样本都服从高斯分布,并且所有类别的协方差 矩阵相同。

步骤:

• **计算类内散度矩阵** S_W 和类间散度矩阵 S_B 。

$$S_W = \sum_{i=1}^k \sum_{x_j \in C_i} (x_j - \mu_i) (x_j - \mu_i)^T$$

其中, μ_i 是类 C_i 的均值, x_i 是类 C_i 中的样本点。

$$S_B = \sum_{i=1}^k n_i (\mu_i - \mu) (\mu_i - \mu)^T$$

其中, n_i 是第 i 类的样本数, μ 是所有样本的总体均值。

• 计算判别函数: LDA通过最大化类间散度与类内散度的比值来构造判别函数。

$$w = S_W^{-1}(\mu_1 - \mu_2)$$

• 分类决策:通过判别函数将样本归类。

2. 二次判别分析 (QDA)

QDA与LDA的区别在于, QDA假设每个类别的协方差矩阵不同。其判别函数为:

$$g_i(x) = \ln |\Sigma_i| - rac{1}{2} (x - \mu_i)^T \Sigma_i^{-1} (x - \mu_i) + \ln P(C_i)$$

其中, Σ_i 是第 i 类的协方差矩阵, $P(C_i)$ 是类别 C_i 的先验概率。

3. 主成分分析 (PCA)

定义: 主成分分析 (PCA) 是一种降维技术,旨在通过线性变换将数据映射到新的坐标系统,使得最大方差方向上的投影成为数据的新特征。

步骤:

1. 标准化数据:将每个特征减去均值并除以标准差,使得每个特征的均值为0,方差为1。

2. **计算协方差矩阵**: 计算标准化数据的协方差矩阵 Σ :

$$\Sigma = rac{1}{n} X^T X$$

其中 X 是标准化后的数据矩阵。

3. **特征值分解**:求解协方差矩阵的特征值和特征向量,特征向量代表数据的主成分方向,特征值表示主成分的方差。

4. 选择主成分:根据特征值的大小选择前K个主成分。K通常根据累积方差解释比例来选择。

5. 降维: 将原始数据投影到前K个特征向量构成的空间上。

公式:

• 协方差矩阵 Σ 的特征值分解:

$$\Sigma v_i = \lambda_i v_i$$

其中 λ_i 是特征值, v_i 是特征向量。

4. 因子分析 (Factor Analysis)

定义: 因子分析是一种探索数据中潜在结构的降维方法,它试图用少数几个因子来解释数据集中的方差。

模型公式:

$$X = \Lambda F + \epsilon$$

其中,X 是观测数据, Λ 是因子载荷矩阵,F 是因子得分, ϵ 是误差项。

步骤:

1. 选择因子数:可以使用碎石图、最大似然估计等方法来确定因子的个数。

2. 提取因子: 可以使用主成分分析 (PCA) 或最大似然法来提取因子。

3. 旋转因子: 为了解释的方便性,通常会对因子进行旋转(如正交旋转或斜交旋转)。

应用:用于心理学、市场研究等领域,通过发现潜在的隐含变量(因子)来解释多个观察变量之间的关系。

1. K-means聚类 (K-means Clustering)

```
matlab

% 生成示例数据
data = [randn(100,2)+2; randn(100,2)-2; randn(100,2)+[5 5]];
% 执行K-means聚类,假设分为3类
k = 3;
[idx, C] = kmeans(data, k);

% 绘制聚类结果
figure;
gscatter(data(:,1), data(:,2), idx);
hold on;
plot(C(:,1), C(:,2), 'kx', 'MarkerSize', 12); % 聚类中心
title('K-means Clustering');
xlabel('Feature 1');
ylabel('Feature 2');
legend('Cluster 1', 'Cluster 2', 'Cluster 3', 'Centroids');
```

解释:

- data 是输入的二维数据集。
- kmeans 函数执行K-means聚类, idx 是数据点的簇标签, c 是簇中心。
- 绘图显示了数据点的分类和每个簇的中心。

2. 线性判别分析 (LDA, Linear Discriminant Analysis)

```
matlab
% 生成示例数据
n = 100;
```

```
data = [randn(n,2)+2; randn(n,2)-2]; % 两个类别的二维数据
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             □ 复制代码
  labels = [ones(n,1); 2*ones(n,1)]; % 类别标签
  % 执行LDA
  lda = fitcdiscr(data, labels);
  % 查看LDA模型
  disp(lda);
% 绘制LDA分类结果
  figure;
  gscatter(data(:,1), data(:,2), labels);
  hold on;
  \texttt{h} = \texttt{ezplot}(@(\texttt{x},\texttt{y})) \\ \texttt{lda.Coeffs}(\texttt{1},\texttt{2}). \\ \texttt{Linear}(\texttt{1}) \\ \texttt{*x} + \texttt{lda.Coeffs}(\texttt{1},\texttt{2}). \\ \texttt{Linear}(\texttt{1}) \\ \texttt{L
  set(h, 'LineWidth', 2);
 title('LDA Classification');
xlabel('Feature 1');
 ylabel('Feature 2');
 legend('Class 1', 'Class 2', 'Decision Boundary');
```

解释:

- fitcdiscr 函数用于执行线性判别分析,返回的 lda 对象包含分类模型。
- 使用 ezplot 函数绘制LDA的决策边界。

3. 主成分分析 (PCA, Principal Component Analysis)

```
matlab
% 生成示例数据
data = randn(100, 3);
```

```
% 标准化数据(每个特征减去均值并除以标准差)
data = (data - mean(data)) ./ std(data);

% 执行PCA
[coeff, score, latent] = pca(data);

% 绘制前两个主成分
figure;
scatter(score(:,1), score(:,2));
title('PCA: First Two Principal Components');
xlabel('Principal Component 1');
ylabel('Principal Component 2');
```

解释:

- 使用 pca 函数进行主成分分析, coeff 是主成分载荷矩阵, score 是降维后的数据, latent 是每个主成分的方差。
- 绘制了前两个主成分的投影结果。

4. 因子分析 (Factor Analysis)

```
matlab

% 生成示例数据
data = randn(100, 5); % 5维数据

% 执行因子分析
[lambda, psi, T, stats] = factoran(data, 2); % 假设提取2个因子

% 查看因子载荷矩阵
disp('Factor Loadings:');
disp(lambda);
```

```
% 绘制因子得分图
figure;
scatter(T(:,1), T(:,2));
title('Factor Analysis: Factor Scores');
xlabel('Factor 1');
ylabel('Factor 2');
```

解释:

- 使用 factoran 函数进行因子分析, lambda 是因子载荷矩阵, T 是因子得分。
- 绘制因子得分的二维投影。

5. 层次聚类 (Hierarchical Clustering)

```
matlab

% 生成示例数据
data = [randn(100,2)+2; randn(100,2)-2; randn(100,2)+[5 5]];

% 计算数据的欧氏距离
distances = pdist(data);

% 执行层次聚类
tree = linkage(distances, 'ward'); % 使用ward链接方法

% 绘制树状图
figure;
dendrogram(tree);
title('Hierarchical Clustering Dendrogram');
xlabel('Sample Index');
ylabel('Distance');
```

解释:

- pdist 函数计算样本间的距离,linkage 函数进行层次聚类,ward 是常用的最小方差链接方法。
- 使用 dendrogram 绘制树状图,展示聚类的层次结构。