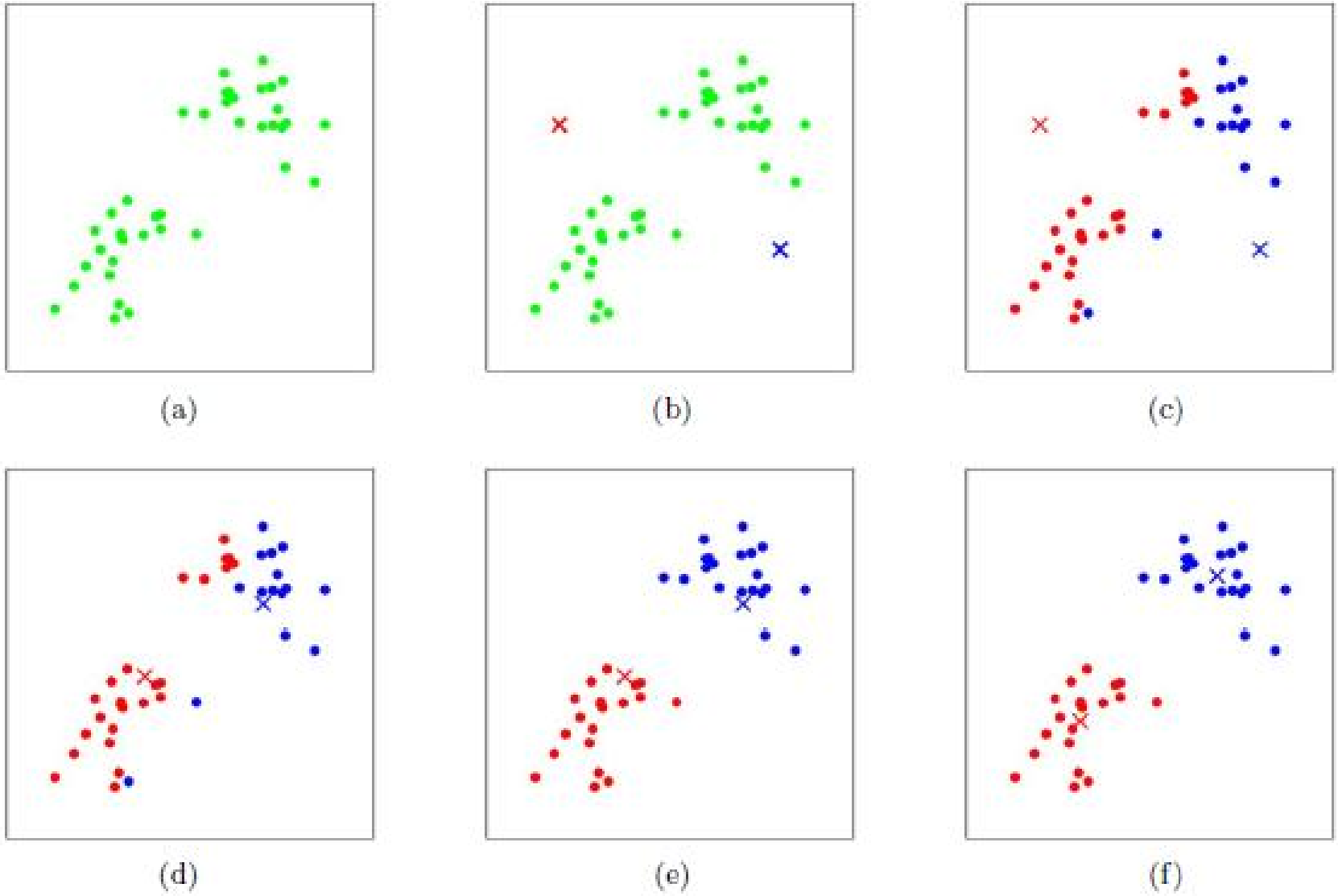
人工智能之机器学习

聚类算法

主讲人：李老师

K-means直观理解



Kmeans演示：https://www.naftaliharris.com/blog/visualizing-k-means-clustering/

K均值聚类（K-means）介绍

- 历史渊源
  - 虽然其思想能够追溯到1957年的Hugo Steinhaus，术语“k-均值”于1967年才被James MacQueen首次使用。标准算法则是在1957年被Stuart Lloyd作为一种脉冲码调制的技术所提出，但直到1982年才被贝尔实验室公开出版。在1965年，E.W.Forgy发表了本质上相同的方法，所以这一算法有时被称为Lloyd-Forgy方法。更高效的版本则被Hartigan and Wong提出（1975/1979）
- 介绍
  - K-Means算法是无监督的聚类算法，算法简单，聚类效果好，即使是在巨大的数据集上也非常容易部署实施。正因为如此，它在很多领域都得到的成功的应用，如市场划分、机器视觉、 地质统计学、天文学和农业等。K-Means算法有大量的变体，包括初始化优化K-Means++以及大数据应用背景下的k-means||和Mini Batch K-Means

K均值聚类（K-means）介绍

- K-Means算法的思想很简单，对于给定的样本集，按照样本之间的距离大小，将样本集划分为K个簇。让簇内的点尽量紧密的连在一起，而让簇间的距离尽量的大。
- 如果用数学表达式表示，假设簇划分为(C_1,C_2,...C_k)，则我们的目标是最小化平方误差E：

$$E = \sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in C_i} \left\| x - \mu_i \right\|_2^2$$

其中 μ_i 是簇 C_i 的均值向量，有时也称为质心，表达式为：

$$\mu_i = \frac{1}{|C_i|} \sum_{x \in C_i} x$$

- 开头的那组图就可以形象描述K-Means的迭代求解过程。

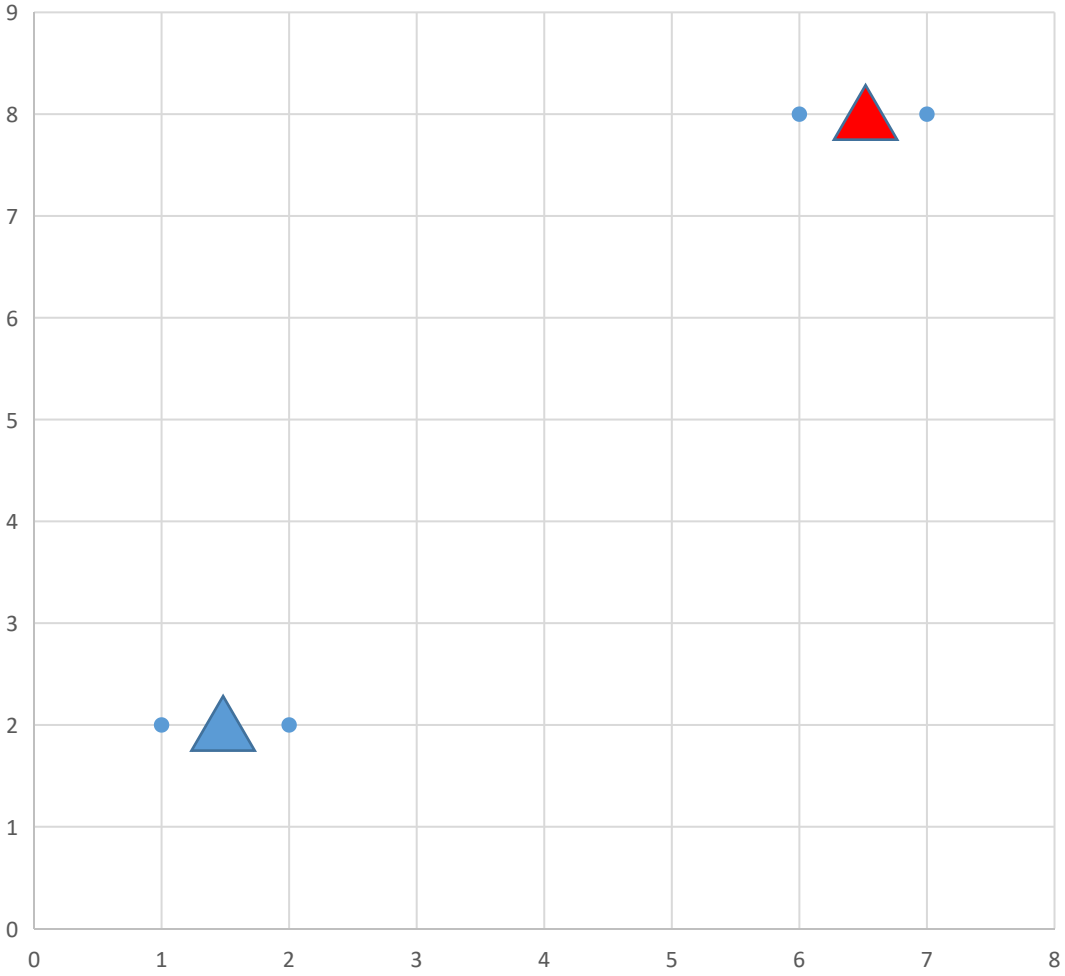
K-means算法流程

- 输入是样本集D={$x_1,x_2,...x_N$}，聚类的簇数k，最大迭代次数T
- 输出是簇划分C={$C_1,C_2,...C_k$}
- 1）从数据集D中随机选择k个样本作为初始的k个质心向量：{$\mu_1,\mu_2,...,\mu_k$}，将每个簇初始化为空集
- 2）对于t=1,2,...,T
- a) 对于i=1,2...N，计算样本 x_i 和各个质心向量 μ_j，j=1,2,...k的欧式距离，将 x_i 划分到最近的簇中，即更新$C_j=C_j \cup \{x_i\}$
- b) 对于j=1,2,...,k,对C_j中所有的样本点重新计算新的质心
- c) 如果所有的k个质心向量都没有发生变化，则转到步骤3)
- 3） 输出簇划分C={$C_1,C_2,...C_k$}

$$\mu_j = \frac{1}{|C_j|}\sum_{x \in C_j} x$$

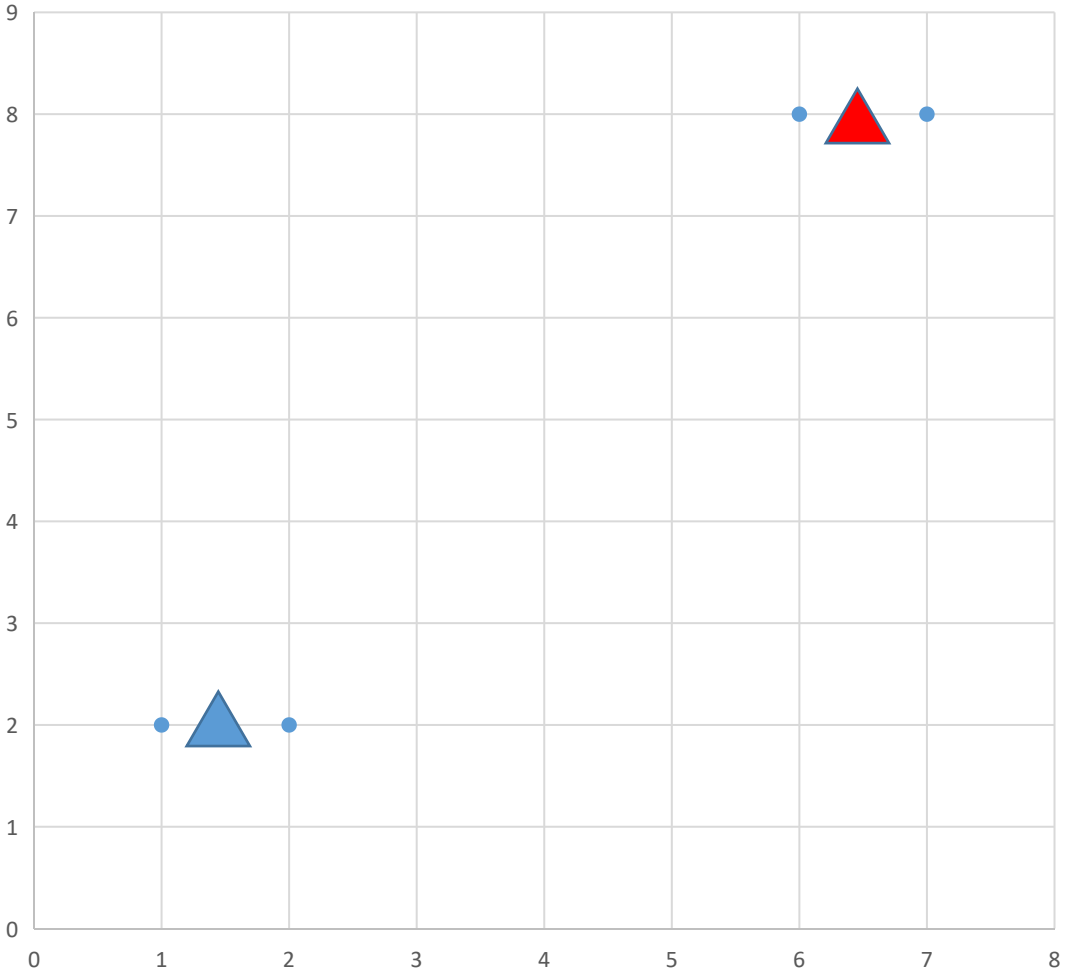
编程K-means

- 对数据集X = np.array([[1, 2], [2, 2], [6, 8],[7 ,8]])聚类，K=2，初始聚类中心为C = np.array([[1, 2], [2, 2]])
- 要求：打印每次迭代聚类中心的位置



调库——编程K-means

- 对数据集X = np.array([[1, 2], [2, 2], [6, 8],[7 ,8]])聚类，K=2，初始聚类中心为C = np.array([[1, 2], [2, 2]])
- 要求：打印每次迭代聚类中心的位置



Kmeans算法的缺点

- 缺点一：聚类中心的个数K需要事先给定，但在实际中K值的选定是非常困难的，很多时候我们并不知道给定的数据集应该聚成多少个类别才最合适
- 缺点二：k-means算法需要随机地确定初始聚类中心，不同的初始聚类中心可能导致完全不同的聚类结果，有可能导致算法收敛很慢甚至出现聚类出错的情况
- 针对第一个缺点：很难在k-means算法以及其改进算法中解决，一般来说，我们会根据对数据的先验经验选择一个合适的k值，如果没有什么先验知识，则可以通过“肘方法”选择一个合适的k值
- 针对第二个缺点：可以通过k-means++算法来解决

第一个缺点解决方案之一——肘方法

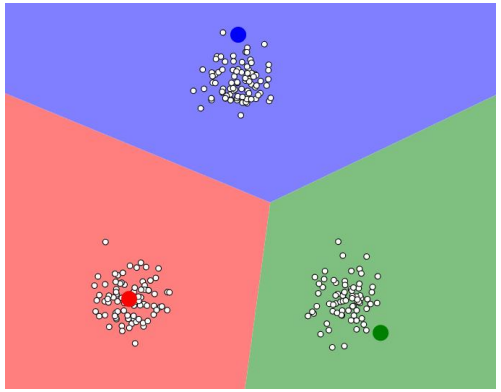
- We then compute Within Set Sum of Squared Error (WSSSE). You can reduce this error measure by increasing k. In fact the optimal k is usually one where there is an "elbow" in the WSSSE graph.

肘方法（elbow method）基于如下观察：增加簇数有助于降低每个簇的簇内方差之和。这是因为有更多的簇可以捕获更细的数据对象簇，簇中对象之间更为相似。然而，如果形成太多的簇，则降低簇内方差和的边缘效应可能下降，因为把一个凝聚的簇分裂成两个只引起簇内方差和的稍微降低。因此，一种选择正确的簇数的启发式方法是，使用簇内方差和关于簇数的曲线的拐点。

严格地说，给定 $k>0$，我们可以使用一种像 k - 均值这样的算法对数据集聚类，并计算簇内方差和 $var(k)$。然后，我们绘制 var 关于 k 的曲线。曲线的第一个（或最显著的）拐点暗示"正确的"簇数。

第二个缺点解决方案之一——K-means++

- K-Means++的对于初始化质心的优化策略，如下：
- a) 从输入的数据点集合中随机选择一个点作为第一个聚类中心 μ_1
- b) 对于数据集中的每一个点x_i，计算它与已选择的聚类中心中最近聚类中心的距离D
- c) 选择一个新的数据点作为新的聚类中心，选择的原则是：D较大的点，被选取作为聚类中心的概率较大。
- d) 重复b和c直到选择出k个聚类质心
- e) 利用这k个质心来作为初始化质心去运行标准的K-Means算法
- 思考：
  - 1.c步骤如何来实现呢？（编程）
  - 2.c步为什么不直接取最大的，而是要按照概率来取？



如果最远的点是噪声点，就会选到错误的聚类中心，造成聚类出错

K-means++的缺点

- 虽然k-means++算法可以确定地初始化聚类中心，但是从可扩展性来看，它存在一个缺点？？。
- 解决方案：针对这种缺陷，k-means||算法提供了解决方法。

它内在的有序性特性：
下一个中心点的选择依
赖于已经选择的中心点

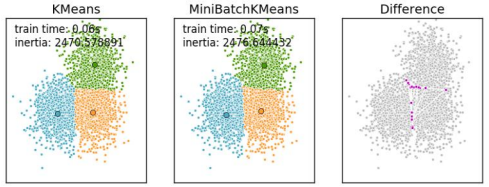
K-means||

- k-means||是k-means++的变体，k-means||在初始化中心点时对kmeans++的缺点做了规避，主要体现在不需要根据k的个数严格地寻找k个点，突破了算法在大规模数据集上的应用瓶颈，同时初始化的中心点更加健壮
- 参考论文
- http://theory.stanford.edu/~sergei/papers/vldb12-kmpar.pdf

K-Means||算法

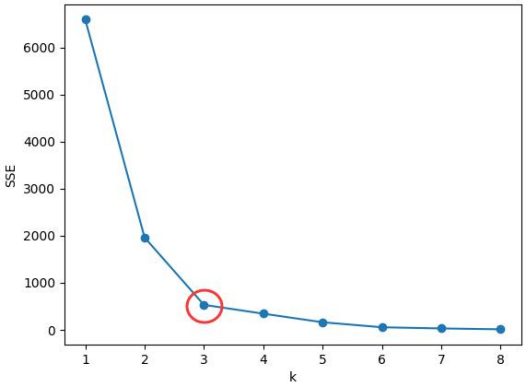
- 解决K-Means++算法缺点而产生的一种算法；主要思路是改变每次遍历时候的取样规则，并非按照K-Means++算法每次遍历只获取一个样本，而是每次获取K个样本，重复该取样操作O(logn)次，然后再将这些抽样出来的样本聚类出K个点，最后使用这K个点作为K-Means算法的初始聚簇中心点。实践证明：一般5次重复采用就可以保证一个比较好的聚簇中心点。

Mini Batch K-Means*



- 在传统的K-Means算法中，要计算所有的样本点到所有的质心的距离。如果样本量非常大，比如达到10万以上，特征有100以上，此时用传统的K-Means算法非常的耗时，就算加上elkan K-Means优化也依旧。在大数据时代，这样的场景越来越多。此时Mini Batch K-Means应运而生。
- 顾名思义，Mini Batch，也就是用样本集中的一部分的样本来做传统的K-Means，这样可以避免样本量太大时的计算难题，算法收敛速度大大加快。当然此时的代价就是我们的聚类的精确度也会有一些降低。一般来说这个降低的幅度在可以接受的范围之内。
- 在Mini Batch K-Means中，我们会选择一个合适的批样本大小batch size，我们仅仅用batch size个样本来做K-Means聚类。那么这batch size个样本怎么来的？一般是通过无放回的随机采样得到的。
- 为了增加算法的准确性，我们一般会多跑几次Mini Batch K-Means算法，用得到不同的随机采样集来得到聚类簇，选择其中最优的聚类簇。

评估方法——肘方法



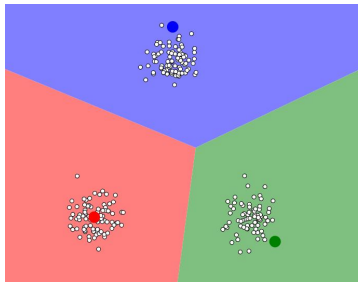
- 手肘法的核心指标是SSE(sum of the squared errors，误差平方和)，

$$SSE = \sum_{i=1}^{k} \sum_{x \in C_i} \left\| x - \mu_i \right\|^2$$

- 其中，Ci是第i个簇，x是Ci中的样本点，μi是Ci的质心（Ci中所有样本的均值），SSE是所有样本的聚类误差，代表了聚类效果的好坏。
- 手肘法的核心思想是：随着聚类数k的增大，样本划分会更加精细，每个簇的聚合程度会逐渐提高，那么误差平方和SSE自然会逐渐变小。并且，当k小于真实聚类数时，由于k的增大会大幅增加每个簇的聚合程度，故SSE的下降幅度会很大，而当k到达真实聚类数时，再增加k所得到的聚合程度回报会迅速变小，所以SSE的下降幅度会骤减，然后随着k值的继续增大而趋于平缓，也就是说SSE和k的关系图是一个手肘的形状，而这个肘部对应的k值就是数据的真实聚类数。当然，这也是该方法被称为手肘法的原因。

评估方法——轮廓系数法

- **簇内不相似度**：计算样本i到同簇其它样本的平均距离为a_i，a_i越小，表示样本i越应该被聚类到该簇，簇C中的所有样本的a_i的均值被称为簇C的凝聚度。



- **簇间不相似度**：计算样本i到其它簇C_j的所有样本的平均距离b_{ij}，$b_i=\min\{b_{i1},b_{i2},\ldots,b_{ik}\}$；$b_i$越大，表示样本i越不属于其它簇。
- **轮廓系数**：s_i值取值范围为[-1,1]，越接近1表示样本i聚类越合理，越接近-1，表示样本i应该分类到另外的簇中，近似为0，表示样本i应该在边界上；所有样本的s_i的均值被称为聚类结果的轮廓系数。

$$s(i)=\frac{b(i)-a(i)}{\max\{a(i),b(i)\}}$$

$$s(i)=\begin{cases}1-\dfrac{a(i)}{b(i)}, & a(i)<b(i)\\ 0, & a(i)=b(i)\\ \dfrac{b(i)}{a(i)}-1, & a(i)>b(i)\end{cases}$$