

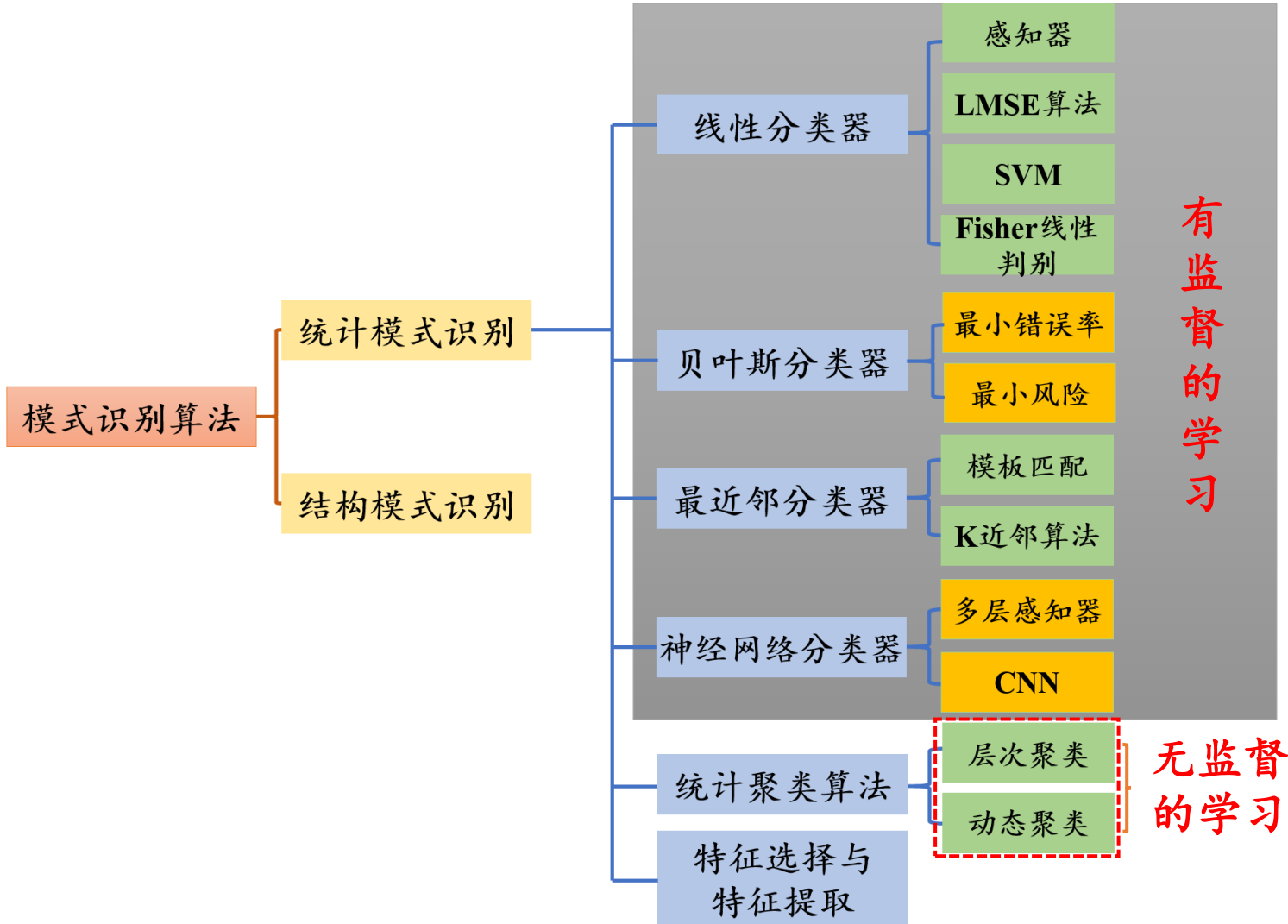
统计聚类算法
张俊超

中南大学
航空航天学院





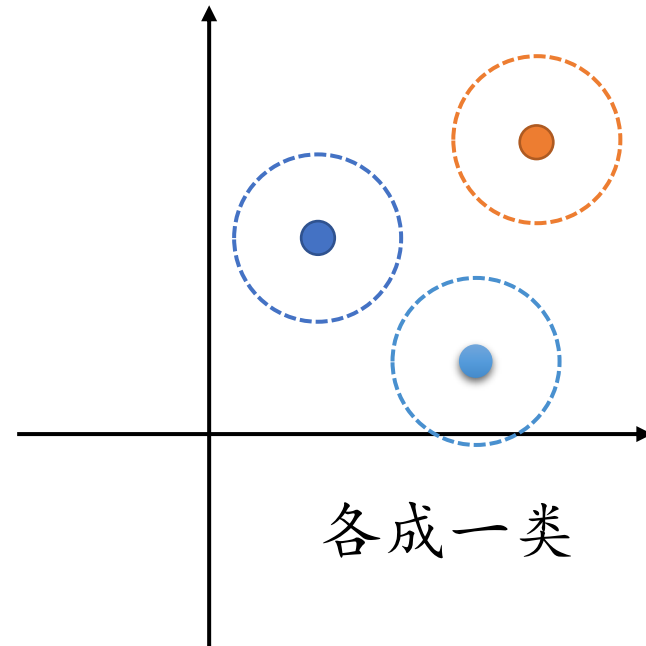
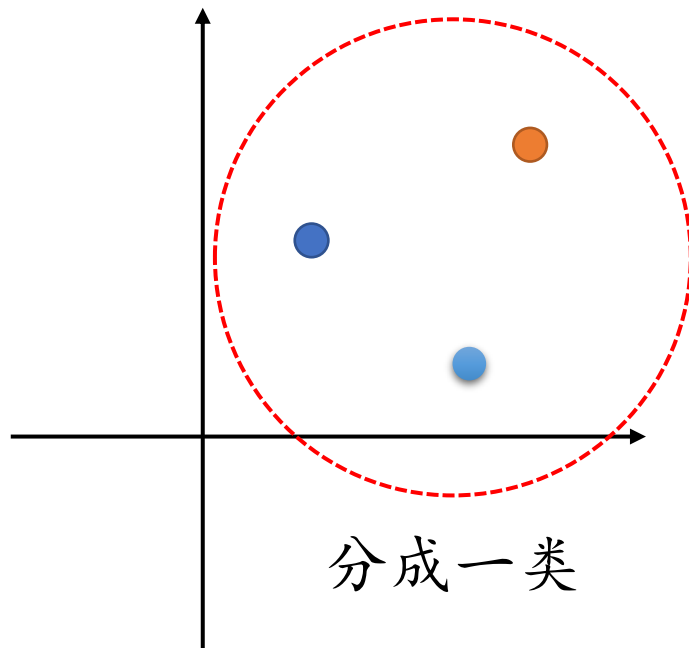
模式识别-统计聚类算法





模式识别-统计聚类算法

② 层次聚类





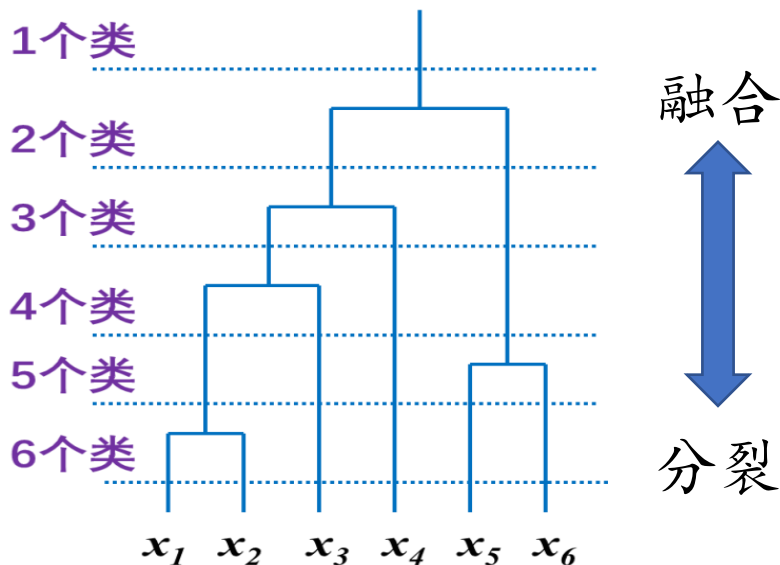
模式识别-统计聚类算法

层次聚类：

➤融合：从 N 类 $\rightarrow 1$ 类

➤分裂：从 1 类 $\rightarrow N$ 类

本质：从多到少(或从少到多)进行类别划分，求得一系列类别数的划分方案，基于聚类准则，选择适当的划分方案作为聚类的结果。





模式识别-统计聚类算法

层次聚类算法的融合算法流程为：

- 对于含 n 个样本的样本集，**先令每个样本自成一类**，总分类数 $c = n$
- 计算类间距离，**将距离最小(最相似)的两个类合并**，总分类数减少为 $c = n - 1$
- 继续合并类，直至总分类数 c 或类间距离满足要求

层次聚类算法的分裂算法流程为：

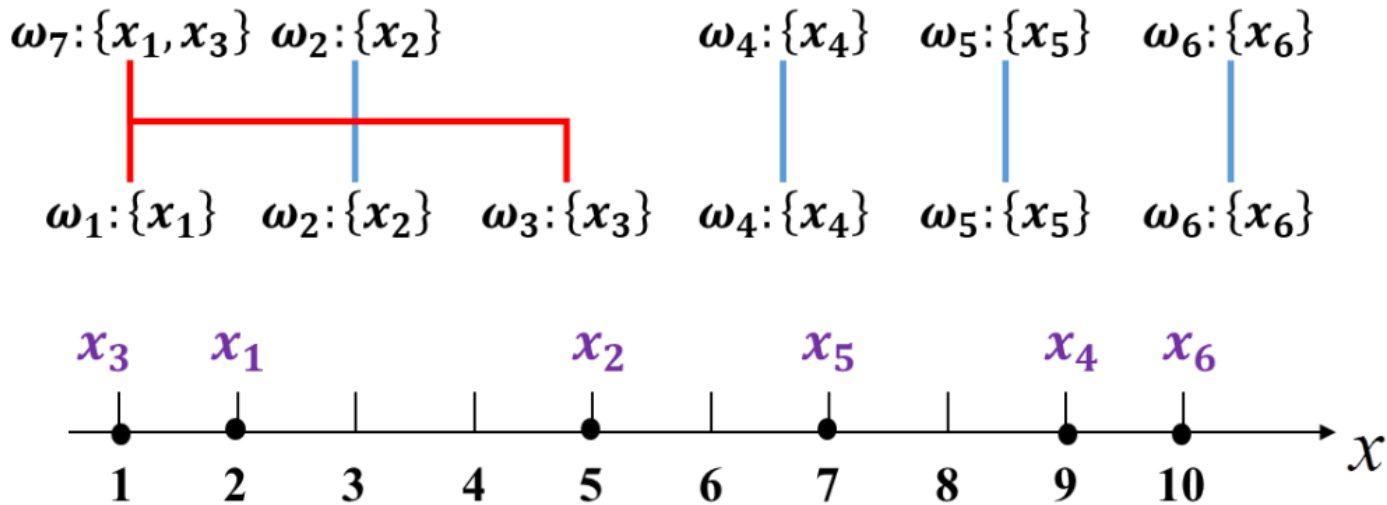
- 对于含 n 个样本的样本集，**先将所有样本作为一类**，总分类数 $c = 1$
- 将已得到的类分成两类，计算类间距离，**将类间距离最大(最不相似)的分类方法作为本级分类结果**，总分类数增加为 $c = c + 1$
- 对每一个得到的类再进行分类，直至总分类数 c 或类间距离满足要求



模式识别-统计聚类算法

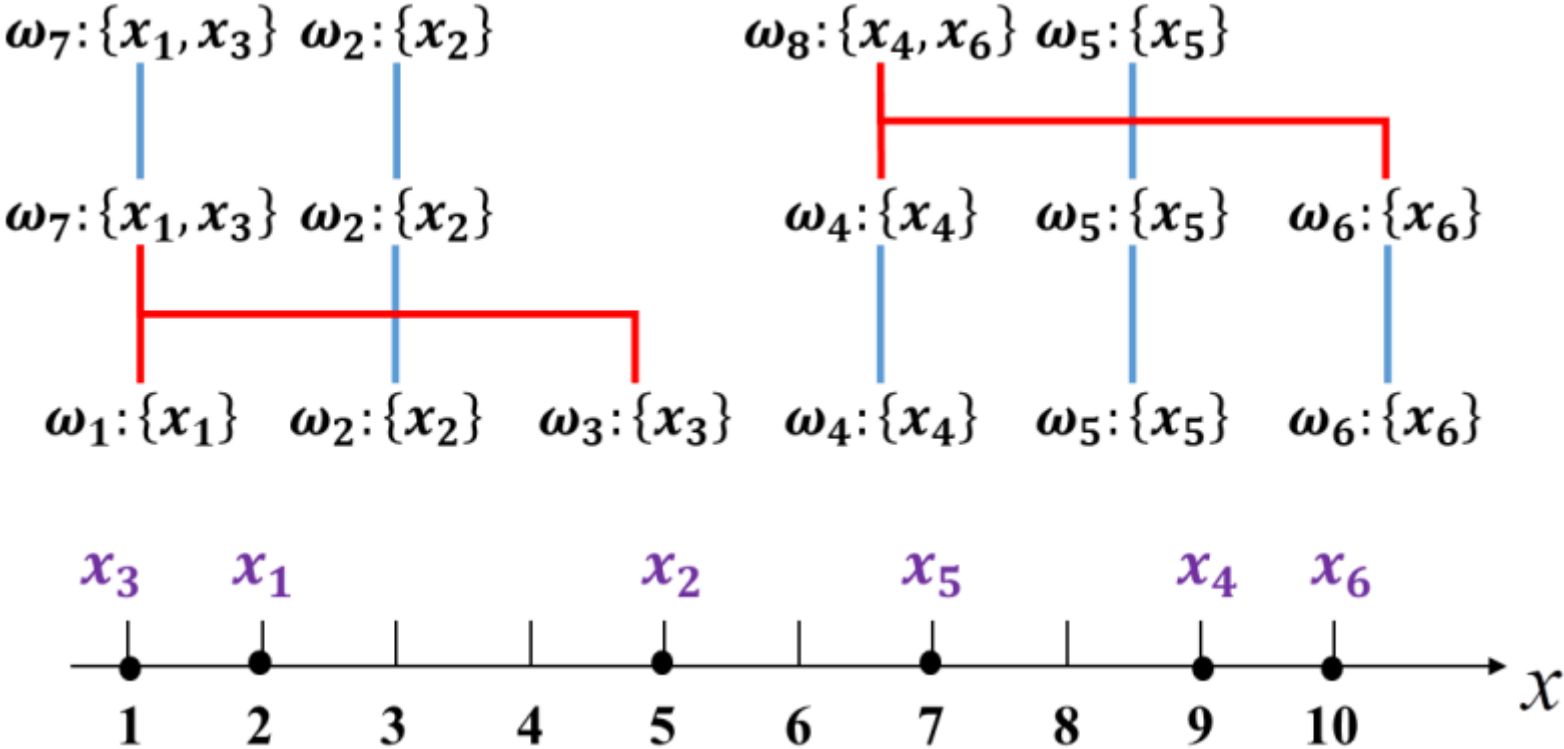
融合算法【举例】

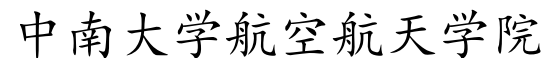
	ω_1	ω_2	ω_3	ω_4	ω_5
ω_2	3				
ω_3	1	4			
ω_4	7	4	8		
ω_5	5	2	6	2	
ω_6	8	5	9	1	3





模式识别-统计聚类算法



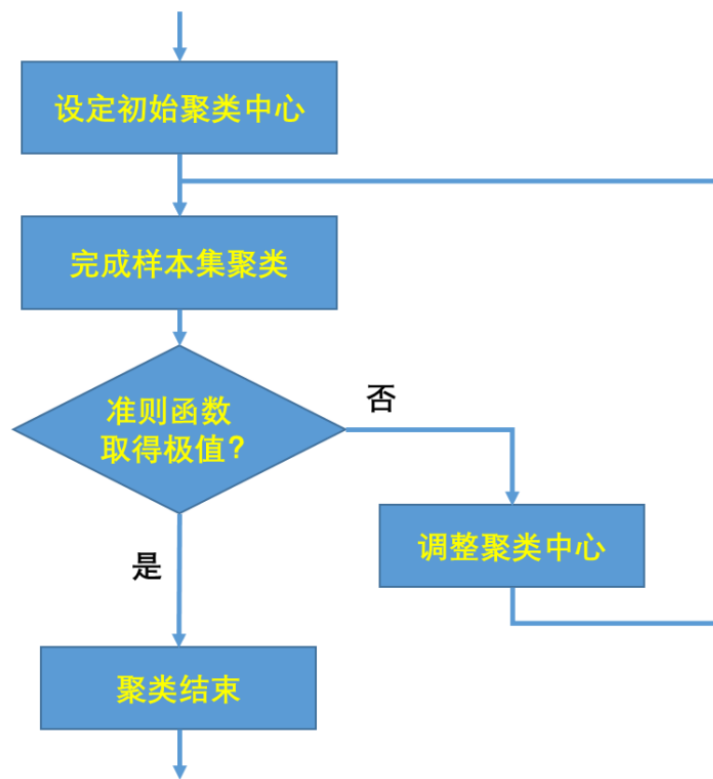




模式识别-统计聚类算法

③ 动态聚类

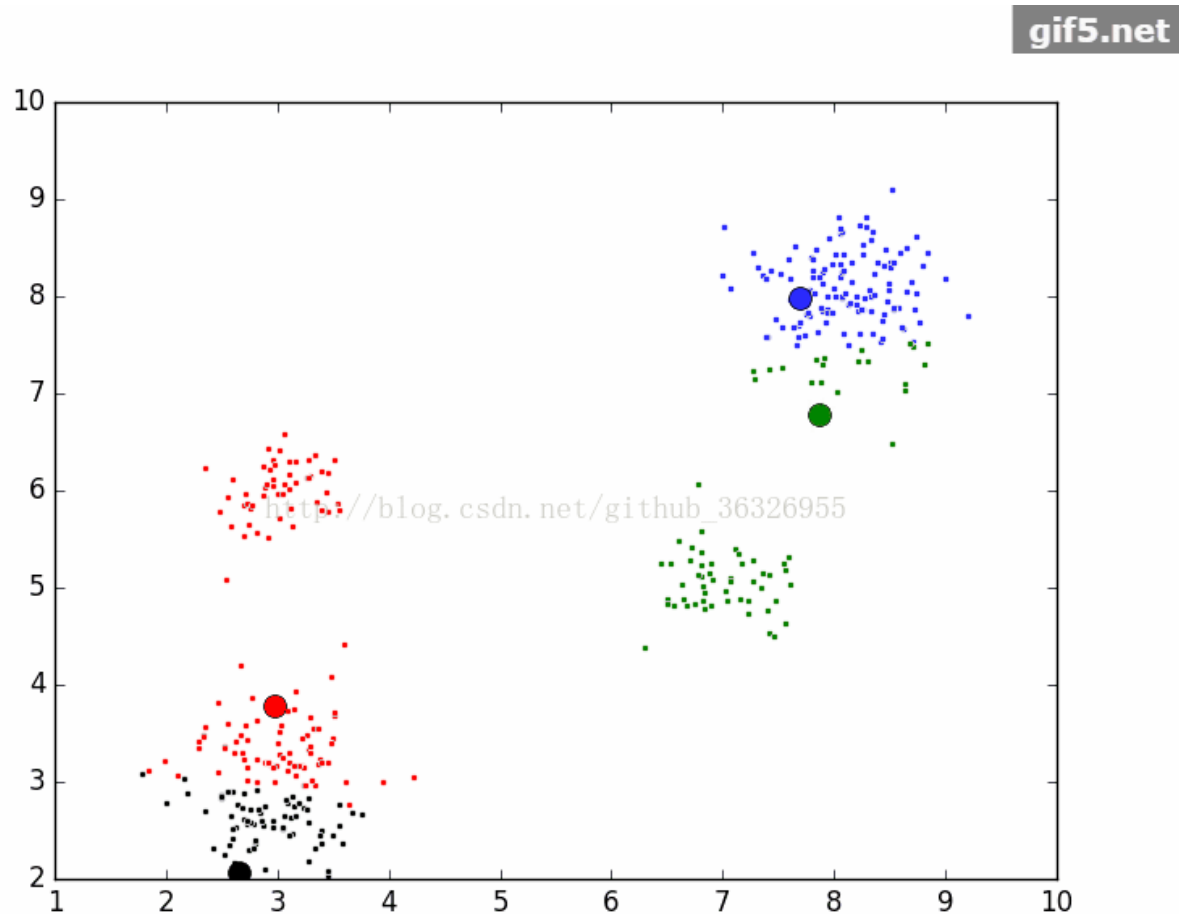
动态聚类算法是一种迭代算法，通过反复修改聚类结果来进行优化，以达到最满意的聚类结果。





模式识别-统计聚类算法

- K-Means算法(C均值算法)





模式识别-统计聚类算法

- K-means算法的基础是：最小误差平方和准则

误差平方和的准则函数：
$$J_e = \sum_{i=1}^c \sum_{k=1}^{n_i} \left\| \mathbf{x}_k^{(i)} - \mathbf{m}_i \right\|^2$$

n_i : 类别 ω_i 的样本总数

$\mathbf{x}_k^{(i)}$: 类别 ω_i 的第 k 个样本

\mathbf{m}_i : 类别 ω_i 的样本均值,
$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{k=1}^{n_i} \mathbf{x}_k^{(i)}$$



模式识别-统计聚类算法

①类别 ω_i 中的 $\mathbf{x}_k^{(i)}$ (记为 \mathbf{y})移到类别 ω_j 中, 则两类的均值变为:

$$\overline{\mathbf{m}}_i = \mathbf{m}_i + \frac{1}{n_i - 1} (\mathbf{m}_i - \mathbf{y})$$

$$\overline{\mathbf{m}}_j = \mathbf{m}_j + \frac{1}{n_j + 1} (\mathbf{y} - \mathbf{m}_j)$$

②两类各自的误差平方和变为:

$$\overline{J}_i = J_i - \frac{n_i}{n_i - 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{m}_i\|^2$$

$$\overline{J}_j = J_j + \frac{n_j}{n_j + 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{m}_j\|^2$$



模式识别-统计聚类算法

$$\overline{J}_i = J_i - \frac{n_i}{n_i - 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{m}_i\|^2$$

$$\overline{J}_j = J_j + \frac{n_j}{n_j + 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{m}_j\|^2$$

如果减少量大于增加量，则有利于总体误差平方和的减少。即：

$$\frac{n_i}{n_i - 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{m}_i\|^2 > \frac{n_j}{n_j + 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{m}_j\|^2$$

针对多类情况，将样本 \mathbf{y} 移到剩余类别中，其中误差平方和的**最小增加量** $<$ **减少量**，则把样本 \mathbf{y} 归属于最小增加量的类别中。



模式识别-统计聚类算法

- K-means算法的步骤:

(1)初始划分 c 个聚类中心

(2)任取一个样本 \mathbf{y} , 设 $\mathbf{y} \in \omega_i$

(3)若 $n_i=1$,则转(2);否则继续

(4)计算 ρ_j

$$\begin{cases} \rho_j = \frac{n_j}{n_j + 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{m}_j\|^2, j \neq i \\ \rho_i = \frac{n_i}{n_i - 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{m}_i\|^2 \end{cases}$$

(5)考查 ρ_j 中的最小值 ρ_k ,若 $\rho_k < \rho_i$,则把 \mathbf{y} 归属于 ω_k

(6)重新计算 $\mathbf{m}_i, i = 1, 2, \dots, c$ 和误差平方和 J_e

(7)若连续 N 次迭代 J_e 不改变, 则停止; 否则转(2)



模式识别-统计聚类算法

- K-means 算法II的步骤:

(1)初始划分 c 个聚类中心

(2)从样本集中依次选取一个样本 \mathbf{y} , 计算相似度 $d(\mathbf{y}, \mathbf{m}_i), i = 1, 2, \dots, c$

若 $d(\mathbf{y}, \mathbf{m}_k) = \min_{i=1,2,\dots,c} \{d(\mathbf{y}, \mathbf{m}_i)\}$, 则 $\mathbf{y} \in \omega_k$

(3)重新计算 $\mathbf{m}_i, i = 1, 2, \dots, c$

若聚类中心 $\mathbf{m}_i, i = 1, 2, \dots, c$ 不再改变, 迭代终止; 否则转(2)



模式识别-统计聚类算法

```
%% K-means
C = 2;%类别数
start_L = randperm(N);
Z = Data(start_L(1:C),:);%初始聚类中心
Labels = zeros(N,1);
Cluster=cell(C,1);
Je=0;
Itera = 1;
Center_pt{Itera} = Z;
while(1)
    Je_old = Je;
    for j = 1:C
        Cluster{j}=[];
    end
    for i = 1:N
        dist = Z - repmat(Data(i,:),[C,1]);
        dist = sum(dist.^2,2);
        [minv,idx] = min(dist);
        Cluster{idx} = [Cluster{idx};Data(i,:)];
    end
    Je = sum(dist(idx,:).^2,2);
    if abs(Je - Je_old) < 0.0001
        break;
    end
    Itera = Itera + 1;
    Center_pt{Itera} = [Cluster{1};Cluster{2}];
end
```

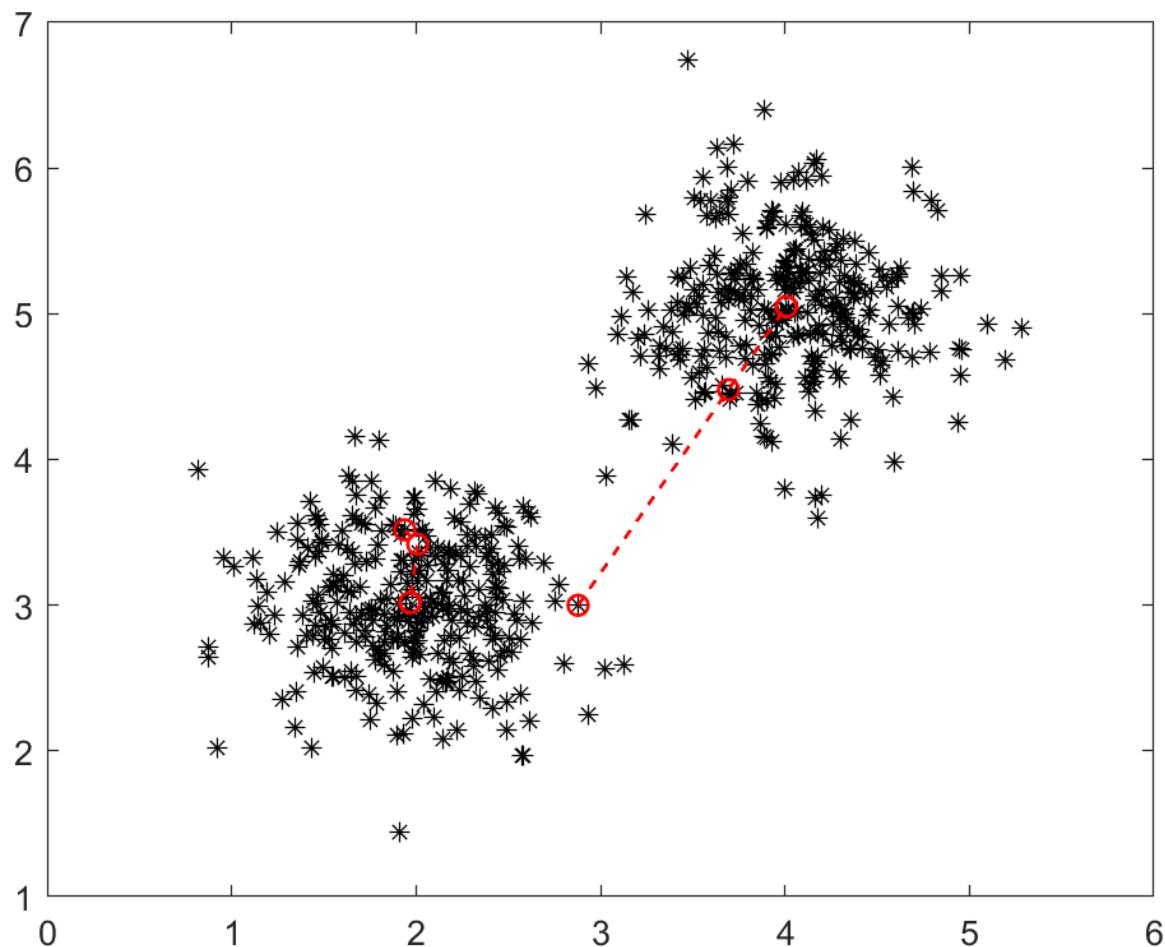


模式识别-统计聚类算法

```
for i = 1:N
    dist = Z - repmat(Data(i,:), [C, 1]);
    dist = sum(dist.^2, 2);
    [minv, idx] = min(dist);
    Cluster{idx} = [Cluster{idx}; Data(i, :)];
    Labels(i) = idx;
end
S = 0;
for k = 1:C
    Z(k, :) = mean(Cluster{k});
    tmp=bsxfun(@minus, Cluster{k}, Z(k, :));
    tmp = sum(sum(tmp.^2));
    S = S+tmp;
end
Itera = Itera + 1;
Center_pt{Itera} = Z;
Je = S;
if abs(Je-Je_old) < 1e-5
    break;
end
end
```

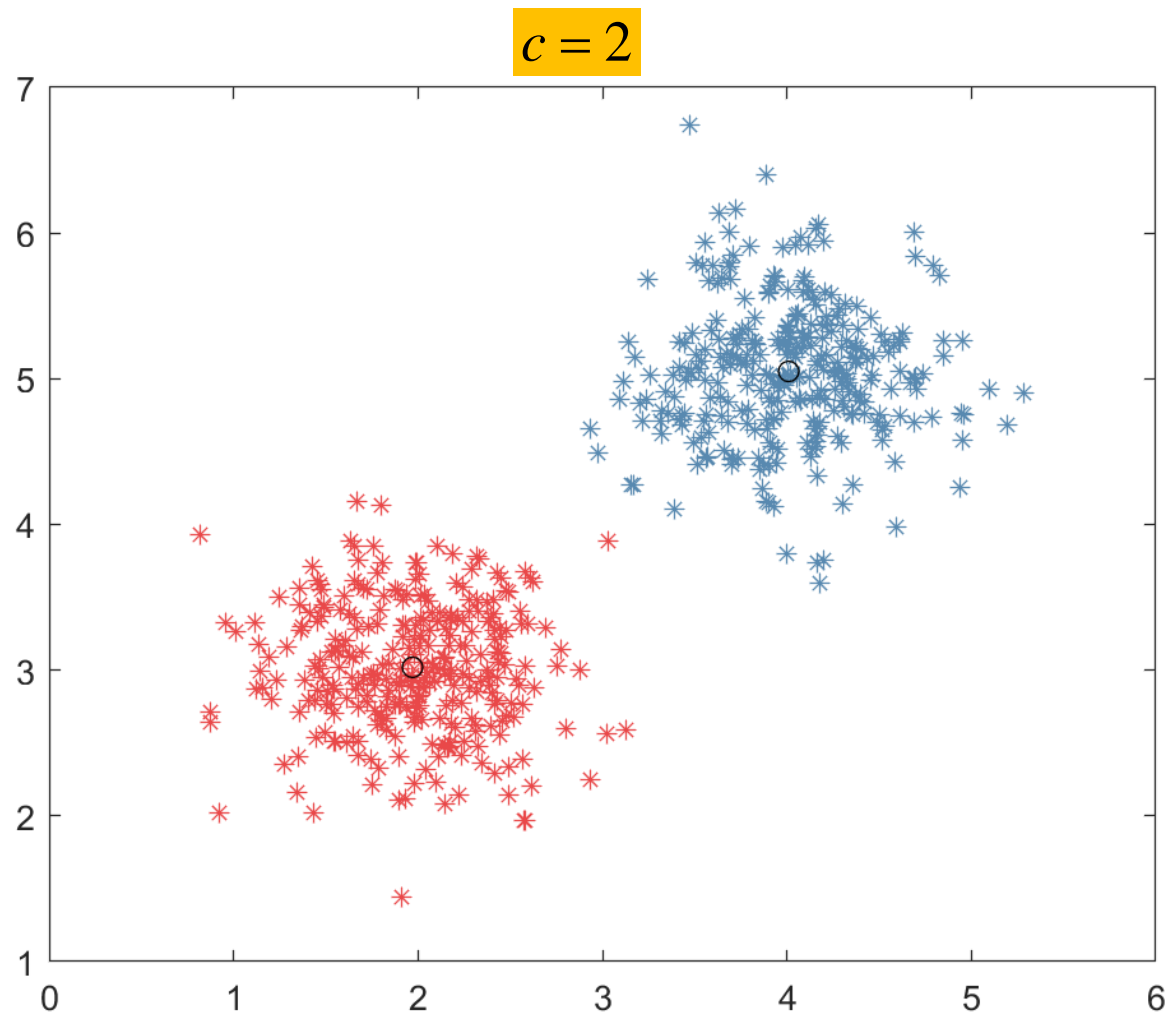


模式识别-统计聚类算法





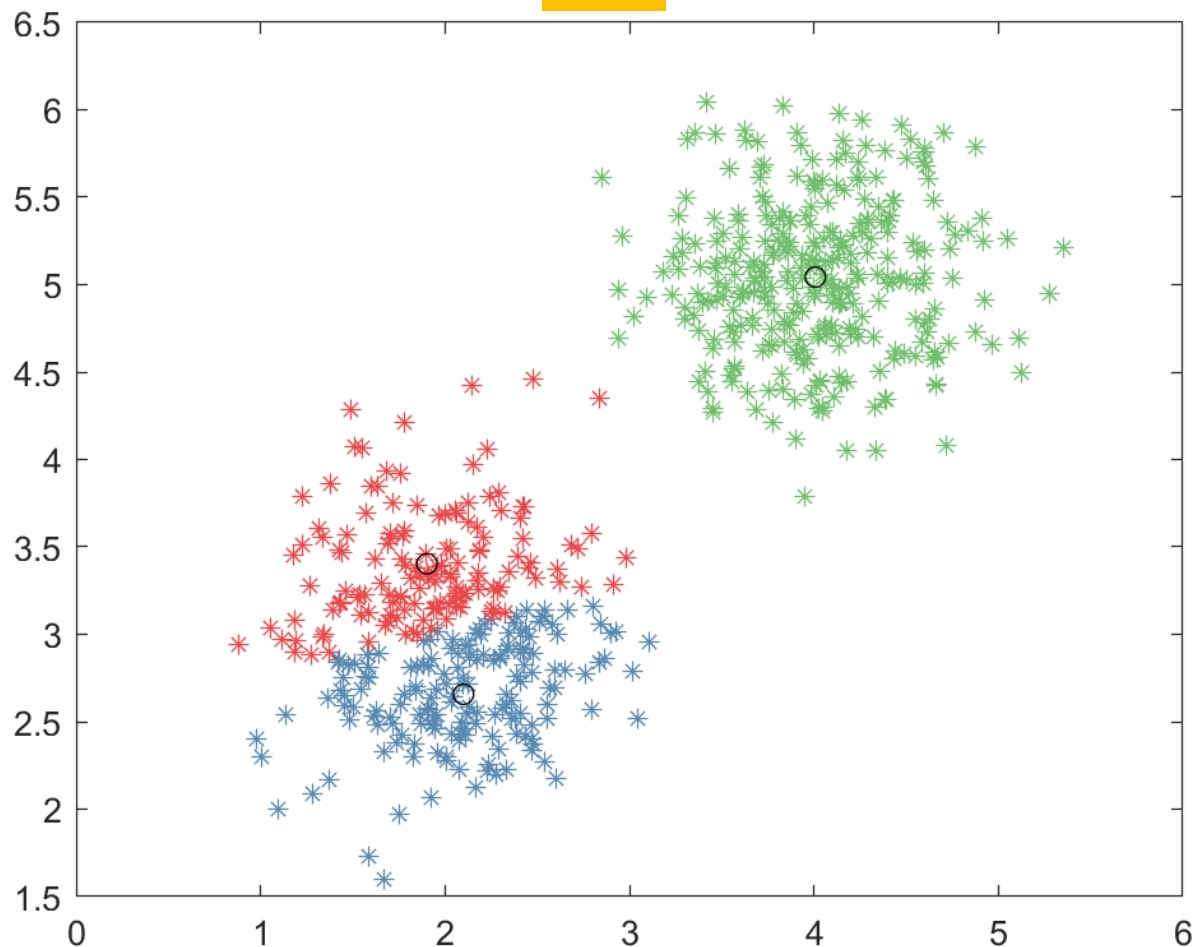
模式识别-统计聚类算法





模式识别-统计聚类算法

$c = 3$





模式识别-统计聚类算法

- K-means: K需要事先确定, 且一旦确定, 不再改变。
- ISODATA: 动态调整K的值



模式识别-统计聚类算法

若干素材取自网络，特此致谢！





模式识别-统计聚类算法

谢谢聆听！

