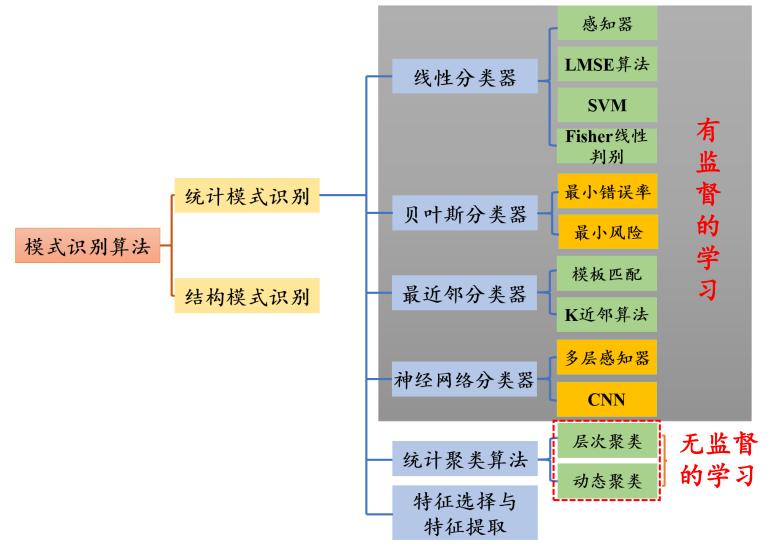
统计聚类算法 张俊超

中南大学航空航天学院



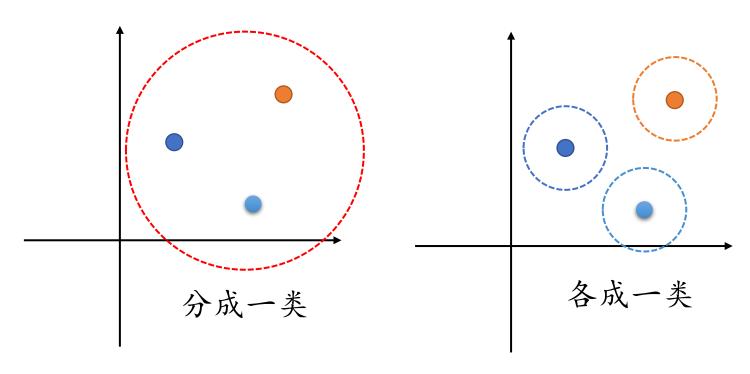




中南大学航空航天学院



② 层次聚类



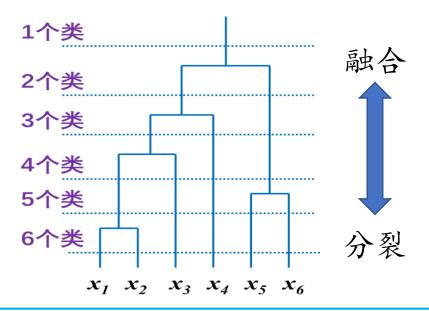


层次聚类:

▶融合: 从*N*类→1类

▶分裂: 从1类→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。





层次聚类算法的融合算法流程为:

- \triangleright 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
- \triangleright 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

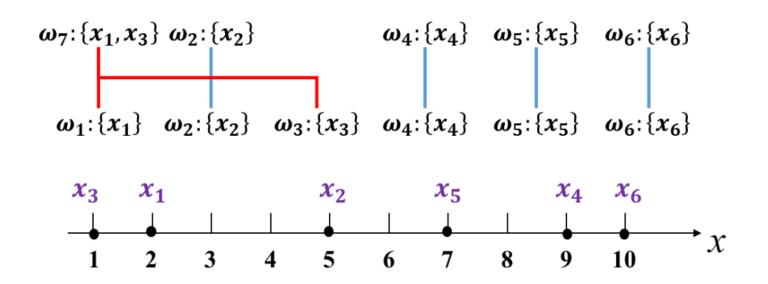
层次聚类算法的分裂算法流程为:

- \triangleright 对于含n个样本的样本集,<mark>先将所有样本作为一类</mark>,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
- \triangleright 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

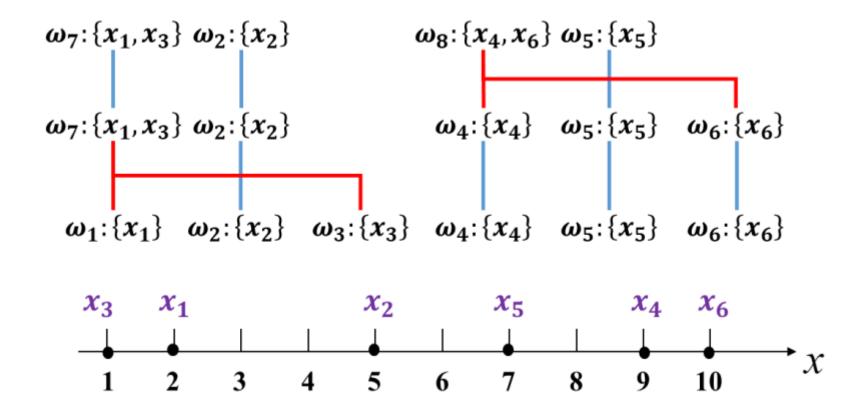


融合算法【举例】

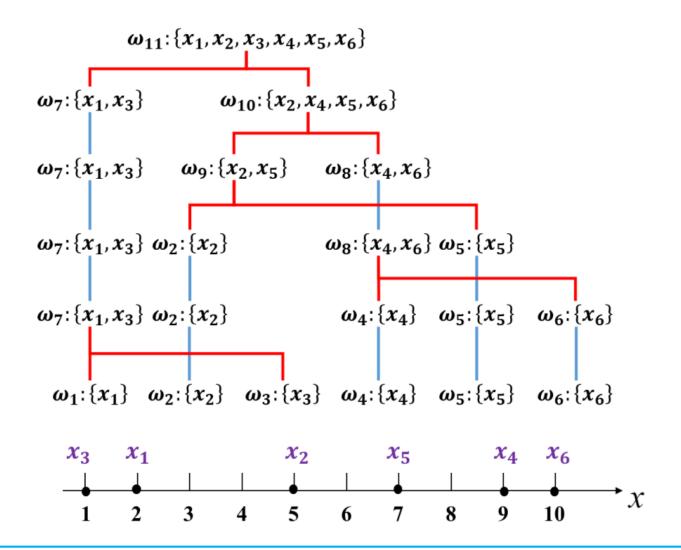
	ω_1	ω_2	ω_3	$\omega_{\scriptscriptstyle 4}$	ω_5
ω_2					
ω_3	1	4			
ω_4	7	4	8		
ω_5	5	2	6	2	
ω_6	8	5	9	1	3







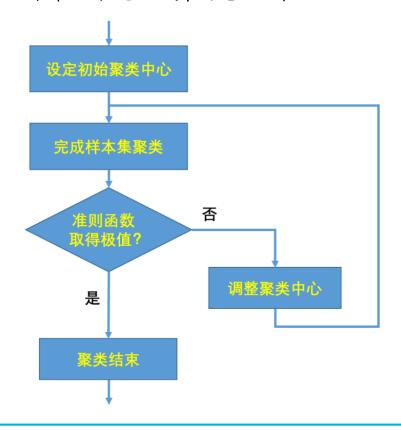






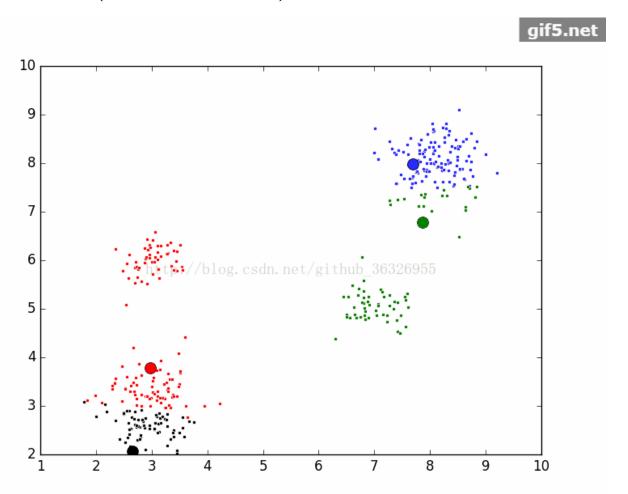
③ 动态聚类

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。





• K-Means 算法(C均值算法)





· 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:
$$J_e = \sum_{i=1}^c \sum_{k=1}^{n_i} \|\mathbf{x}_k^{(i)} - \mathbf{m}_i\|^2$$

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



①类别 ω_i 中的 $\mathbf{x}_k^{(i)}$ (记为 \mathbf{y})移到类别 ω_i 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:

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

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



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

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

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y归属于最小增加量的类别中。



• 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**y**,设**y** $\in \omega_i$
- (3)若 n_i =1,则转(2);否则继续
- (4)计算 ρ_i

$$\begin{cases}
\rho_{j} = \frac{n_{j}}{n_{j} + 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{m}_{j}\|^{2}, j \neq i \\
\rho_{i} = \frac{n_{i}}{n_{i} - 1} \|\mathbf{y} - \mathbf{m}_{i}\|^{2}
\end{cases}$$

- (5)考查 ρ_i 中的最小值 ρ_k ,若 $\rho_k < \rho_i$,则把**y**归属于 ω_k
- (6)重新计算 \mathbf{m}_i , i = 1, 2, ..., c和误差平方和 J_e
- (7)若连续N次迭代J。不改变,则停止;否则转(2)



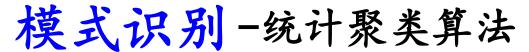
• K-means 算法II的步骤:

- (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,...,c 若 $d(\mathbf{y},\mathbf{m}_k) = \min_{i=1,2} \left\{ d(\mathbf{y},\mathbf{m}_i) \right\}$,则 $\mathbf{y} \in \omega_k$
- (3)重新计算 \mathbf{m}_{i} , i = 1, 2, ..., c 若聚类中心 \mathbf{m}_{i} , i = 1, 2, ..., c不再改变,迭代终止;否则转(2)





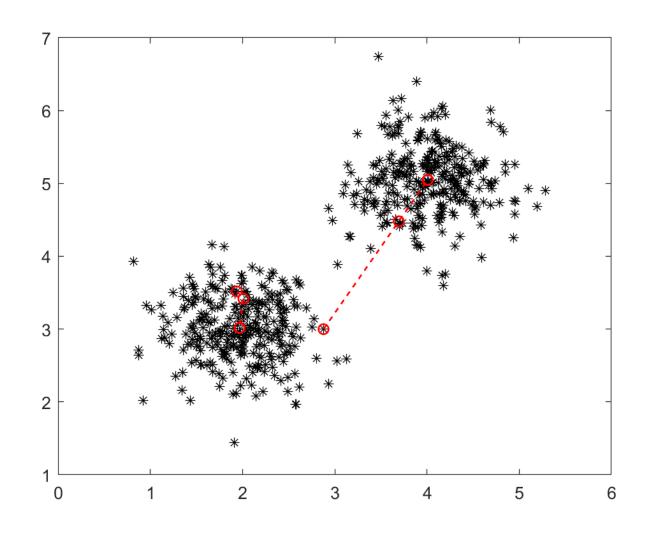
```
%% K-means
C = 2;%类别数
start L = randperm(N);
Z = Data(start L(1:C),:);%初始聚类中心
Labels = zeros(N, 1):
Cluster=cell(C, 1):
Je=0;
Itera = 1:
Center_pt{Itera} = Z;
lwhile(1)
    Je old = Je;
  for j = 1:C
        Cluster { j} = []:
    end
    for i = 1:N
        dist = Z - repmat(Data(i, :), [C, 1]):
        dist = sum(dist.^2, 2);
        [minv, idx] = min(dist);
        Cluster{idx} = [Cluster{idx}; Data(i,:)];
```



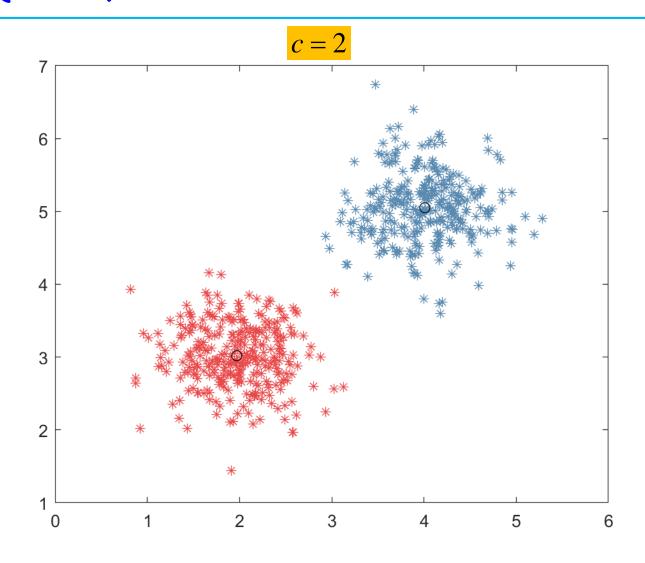


```
for i = 1:N
        dist = Z - repmat(Data(i, :), [C, 1]):
        dist = sum(dist.^2, 2):
        [minv, idx] = min(dist);
        Cluster {idx} = [Cluster {idx}; Data(i,:)];
        Labels(i) = idx;
    end
    S = 0:
    for k = 1:C
        Z(k, :) = mean(Cluster\{k\}):
        tmp=bsxfun(@minus,Cluster\{k\},Z(k,:));
        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
```



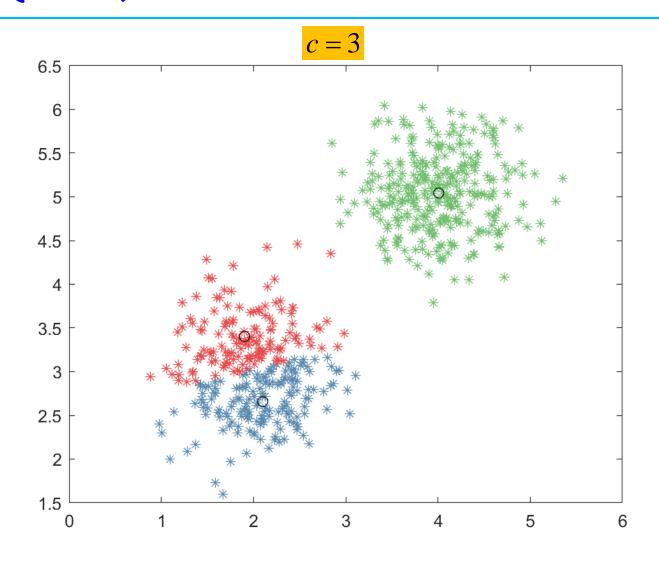






模式识别中南大学







• 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







