第一次作业

李子龙
上海交通大学
计算机科学与工程系
logcreative@outlook.com

1 k-mean 算法

证明. 对两步分别证明。

(a) **E 步** 如果将每一个点 x_n 赋予类 k'_n 使得其相对于其他所有的类最近，即

$$\|x_n - \mu_{k'_n}\| = \min_k \|x_n - \mu_k\|$$

就意味着它将比上一次赋予的类 k_n 在现在的这种聚类分布下距离不会增加：

$$\|x_n - \mu_{k'_n}\| \leq \|x_n - \mu_{k_n}\|$$

那么在对这个点求和的时候，根据指示函数 r_{nk} 的定义，该项也不会增加：

$$j_n = \sum_{k=1}^{K} r'_{nk}\|x_n - \mu_k\|^2 \leq \sum_{k=1}^{K} r_{nk}\|x_n - \mu_k\|^2$$

这里

$$r_{nk} = \begin{cases} 1, & x_n \text{ 属于类 } k; \\ 0, & \text{其他情况.} \end{cases}$$

那么损失函数也不会增加：

$$J(\mu_1, \cdots, \mu_K) = \sum_{n=1}^{N} j_n \tag{1.1}$$

(b) **M 步** 记每个聚类 k 内的点损失函数贡献值为

$$j_k = \sum_{n=1}^{N} r_{nk}\|x_n - \mu_k\|^2 \tag{1.2}$$

求和可以交换，损失函数改写为

$$J(\mu_1, \cdots, \mu_K) = \sum_{k=1}^{K} j_k \tag{1.3}$$

将用引理 1 证明，使用聚类内点的平均点作为新的聚类点将不会增加该项。

引理 1 (距离平方和最小)**.** 当 μ 是所有数据点的均值时，距离平方和

$$f = \sum_{t=1}^{N} \|\mu - x_t\|^2 \tag{1.4}$$

最小。

证明. 将公式 (1.4) 改写

$$\begin{aligned} f &= \sum_{t=1}^{N} \|\mu - x_t\|^2 \\ &= \sum_{t=1}^{N} (\mu - x_t)^T (\mu - x_t) \\ &= \sum_{t=1}^{N} \left(\mu^T \mu - 2x_t^T \mu + x_t^T x_t\right) \end{aligned}$$

对其求导，

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \mu} &= \sum_{t=1}^{N} (2\mu^T - 2x_t^T) = 0 \\ \mu &= \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N} x_t \end{aligned} \tag{1.5}$$

公式 (1.5) 表明当 μ 是所有数据点的均值时，导数为 0，距离平方和最小。 □

由于对于每一类而言，公式 (1.2) 都不会增加，而类别指示函数 r_{nk} 不会改变，所以损失函数 (1.3) 不会增加。

□

2 k-mean 与 GMM 之间

解. 为了将 GMM 退化为 k-mean，需要对 GMM 有三个方面的特殊化处理：

$$\pi_k = \frac{1}{K} \tag{2.1}$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{I} \tag{2.2}$$

$$p(k|x_n) = \begin{cases} 1, & \text{如果 } k = \arg\max_k \mathcal{N}(x_n|\mu_k, \Sigma_k) \\ 0, & \text{其他情况.} \end{cases} \tag{2.3}$$

公式 (2.1) 是混合权重的归一，公式 (2.2) 是协方差一致使得其只计算欧氏距离，公式 (2.3) 是硬赋值只取可能性最大的那个聚类 k。

为了得到其中一个中间变种，这里我们只退化 (2.1)，使 GMM 中的 $\pi_k = \frac{1}{K}$，就可以得到一个更加一般的带方差项软赋值的 k-mean 算法 1。此时的对数似然值定义为

$$\ln p(\boldsymbol{X}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \sum_{n=1}^{N} \left[-\ln K + \ln \sum_{k=1}^{K} \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n|\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) \right] \tag{2.4}$$

优点 这种算法可以很好地拓展 k-mean 算法，使其能够具有方差项（引入高斯分布），并且软赋值可以更好地考虑多个聚类。

缺点 这种算法无疑增加了一定的计算量。

Algorithm 1: 含方差软赋值的 k-mean 算法

Input: 数据点 $\boldsymbol{X} = \{\boldsymbol{x}_n\}_{n=1}^N$, 聚类数目 K

Output: 聚类的分类结果 $\boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j, \quad \forall j \in \mathbb{N} \cap [1, K]$

初始化均值矩阵 $\boldsymbol{\mu}_k$，协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_k$，根据公式 (2.4) 初始化对数似然值;

repeat

  for $n \leftarrow 1$ *to* N **do**

    for $k \leftarrow 1$ *to* K **do**

$$\gamma_{nk}^{(t)} \leftarrow \frac{\mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n|\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)}{\sum_{j=1}^K \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_n|\boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)} \tag{2.5}$$

  for $k \leftarrow 1$ *to* K **do**

$$\boldsymbol{\mu}_k^{(t+1)} \leftarrow \frac{\sum_{n=1}^N \gamma_{nk}^{(t)} \boldsymbol{x}_n}{\sum_{n=1}^N \gamma_{nk}} \tag{2.6}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_k^{(t+1)} \leftarrow \frac{\sum_{n=1}^N \gamma_{nk}^{(t)} (\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k^{(t+1)})(\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k^{(t+1)})^T}{\sum_{n=1}^N \gamma_{nk}} \tag{2.7}$$

until 公式 (2.4) 中的值没有明显变化;

return $\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}$

---

3 k-mean 与 CL

3.1 k-mean 与 CL 的比较

见表 1。以及，如果将 k-mean 按照 CL 的方法以在线版本的视角去看，可以看到两者在公式上的联系。

对于一个聚类 k 的前 N 个数据点，获得该聚类的均值点

$$\mu_k^{(N)} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n \tag{3.1}$$

表 1: k-mean 与 CL 的比较

	k-mean	CL
算法类型	批学习算法	在线学习算法
超参数	不需要	需要学习率 η
更新方法	每次需要遍历	每次只更新一个点
复杂度	高	相对低
聚类数目	无法决定	
初始化	收敛速度依赖初始化	

如果该聚类在下一轮后多了一个点，那么更新该聚类的均值点后

$$\begin{aligned}\mu_k^{(N+1)} &= \frac{1}{N+1}\sum_{n=1}^{N+1} x_n \\ &= \frac{1}{N+1}\left(N\mu_k^{(N)} + x_{N+1}\right) \\ &= \mu_k^{(N)} + \frac{1}{N+1}\left(x_{N+1} - \mu_k^{(N)}\right)\end{aligned} \tag{3.2}$$

对比与 CL 的更新公式

$$\mu_k^{(N+1)} = \mu_k^{(N)} + \eta p_{k,n}\left(x_{N+1} - \mu_k^{(N)}\right) \tag{3.3}$$

这里

$$p_{k,n} = \begin{cases} 1, & \text{如果 } k = \arg\min_j \|x_n - \mu_k\|^2 \\ 0, & \text{其他情况.} \end{cases} \tag{3.4}$$

可见公式 (3.2) 是公式 (3.3) 在 $\eta = \frac{1}{N+1}$ 和该点被选中时 $p_{k,n} = 1$ 的特殊情形。

3.2 RPCL 版本的 k-mean

RPCL 改变了公式 (3.4) 使其疏远竞争点

$$p_{k,n} = \begin{cases} 1, & \text{如果 } k = c = \arg\min_j \|x_n - \mu_k\|^2 \\ -\gamma, & \text{如果 } k = r = \arg\min_{j\neq c} \|x_n - \mu_k\|^2 \\ 0, & \text{其他情况.} \end{cases} \tag{3.5}$$

这里 γ 为可变参量，一般范围是 $[0.05, 0.1]$。

在第 3.1 节我们了解到 k-mean 是 CL 的一个特殊情形，为了将 RPCL 适配 k-mean，将公式 (3.5) 适配进去，得到算法 2。这个算法每次会进行批量运算，但会增加移开竞争对手的这个过程。

3.3 训练结果

生成数据的细节见第 4.1 节，设定生成参数样本总量 $N = 1000$，随机种子 20。

Algorithm 2: RPCL 版本的 k-mean 算法

Input: 数据点 $\boldsymbol{X} = \{x_n\}_{n=1}^N$，最大聚类数目 K，疏远参量 γ

Output: 聚类的分类结果 $\boldsymbol{\mu}_j, \quad \forall j \in \mathbb{N} \cap [1, K]$

初始化均值 $\boldsymbol{\mu}_k$，学习率 $\eta = 0.01K$;
repeat
  for $n \leftarrow 1$ *to* N **do**
    计算到每个聚类的距离$\boldsymbol{E} = \{\|\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k\|\}_{k=1}^K$;
    $c \leftarrow \arg\min_k \boldsymbol{E}, r \leftarrow \arg\min_{k \neq c} \boldsymbol{E}$;
    for $k \leftarrow 1$ *to* K **do**
      按照公式 (3.5) 计算 $p_{k,n}$;
  for $k \leftarrow 1$ *to* K **do**
    if 聚类 k 不包含任何点 **then**
      本轮结束移除聚类 k;
    else

$$\boldsymbol{\mu}_k^{(t)} = \frac{\sum_n p_{k,n} \boldsymbol{x}_n}{\sum_n p_{k,n}} \qquad \forall n : p_{k,n} = 1 \qquad (3.6)$$

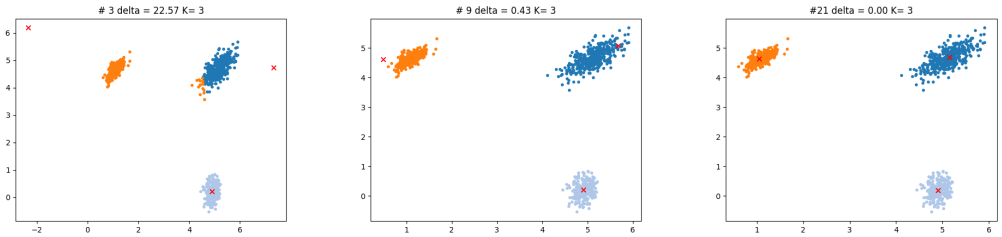
$$\boldsymbol{\mu}_k^{(t+1)} = \boldsymbol{\mu}_k^{(t)} + \eta \sum_n p_{k,n} \left(\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k^{(t)} \right) \qquad \forall n : p_{k,n} < 0 \qquad (3.7)$$

    ;
  if 聚类数目有变动 **then**
    衰减学习率; /* 防止早期学习率过高 */
  按时间阶梯衰减学习率; /* 防止末期学习率过高 */
until $\boldsymbol{\mu}_k$没有明显变化;
return $\boldsymbol{\mu}$;

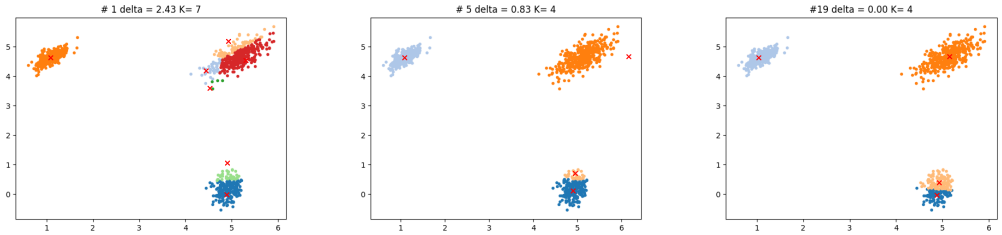
训练代码见 `src/rpclk.py` 。

如图 1(a)，对于 $K = 3$ 的等量聚类，可以较好地分类。如图 1(b)，对于 $K = 12$ 的余量聚类，较小的 γ 可能会导致不好的结果，这种没有办法完全竞争的情形可以通过调高 γ 如图 1(c) 实现。

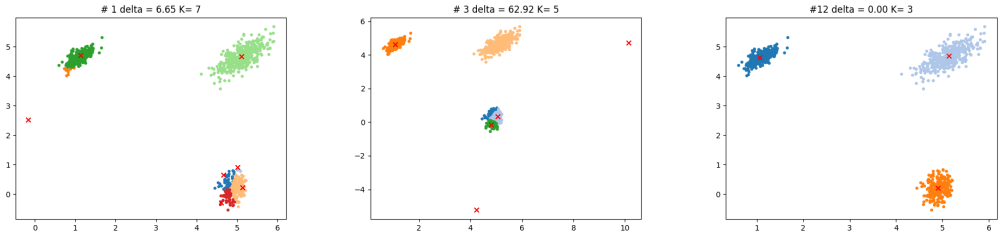
请注意，由于 k-mean 和 RPCL 算法都依赖于初始化，所以分类结果的好坏也会与初始化相关。RPCL 化后一定程度上可以减少聚类数目至期望值。



(a) $K = 3, \gamma = 0.05$



(b) $K = 12, \gamma = 0.05$



(c) $K = 12, \gamma = 0.1$

图 1: RPCL 版本的 k-mean 算法训练结果

4 GMM 模型选择

4.1 生成 GMM 数据

对于 L 维、K 个子模型的高斯混合模型（GMM），其概率密度函数定义为

$$p(\boldsymbol{x}) = \sum_{k=1}^{K} w_k \mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) \tag{4.1}$$

其中

$$\sum_{k=1}^{K} w_k = 1 \tag{4.2}$$

算法 3 展示了通过随机化参量、多项分布获得每个子模型的样本数、多维高斯分布采样得到 GMM 的过程[1]。生成数据代码见 `src/datagen.py` 。

Algorithm 3: 生成 GMM 数据

1 如果指定随机种子，则初始化随机种子;
2 随机生成权重 w_k，归一化以满足公式 (4.2) 中的条件;
3 借助 numpy 库生成随机的 K 个 $L \times (K+1)$ 矩阵，计算协方差矩阵作为 GMM 数据的随机参量 $\mathbf{\Sigma}_k$（这一步主要为了保证协方差矩阵的对称正定[2]），对于均值 $\boldsymbol{\mu}_k$ 直接随机坐标并扩大 $2K$ 倍以保持一定的距离;
4 通过多项分布得到每个子模型的样本数 N_k;
5 对每个子模型通过多维高斯模型采样对应的样本数次数，合并得到全部的样本;

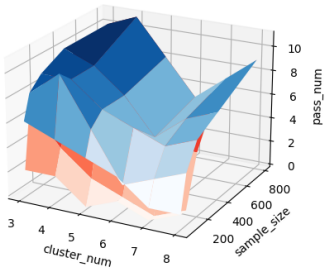


图 2: AIC (红色) 与 BIC (蓝色) 比较的实验结果

参量	范围
目标聚类数目	(3,4,5,6,7,8)
样本数量	(50,100,200,400,800)
随机种子	11 个
最大聚类数目	目标聚类数目 + 3

表 2: 实验参量

4.2 AIC 和 BIC

首先计算出所有聚类数目取值 k 下的模型，按照公式 (4.3) 通过 AIC (4.4) 或 BIC (4.5) 的标准筛选最优聚类数目。采用 sklearn 的 `sklearn.mixture.GaussianMixture` 实现 GMM 模型[3]。

$$k^* = \arg\max_{k=1,\cdots,K} J(k) \tag{4.3}$$

$$J_{\mathrm{AIC}}(k) = \ln[p(X|\hat{\Theta}_k)] - d_m \tag{4.4}$$

$$J_{\mathrm{BIC}}(k) = \ln[p(X|\hat{\Theta}_k)] - \frac{\ln N}{2} d_m \tag{4.5}$$

对每一个二元组 (目标聚类数目, 样本数量) 采用不同的随机种子分别对 AIC 和 BIC 进行多轮实验，代码见 `src/em.py`，参量范围如表 2 所示，结果如图 2 所示，红色曲面为 AIC 的结果，蓝色曲面为 BIC 的结果。

对于正确率的统计表明，大部分情况下 BIC 比 AIC 的表现更好（仅有少数样本数量 N 较低的时候 AIC 偶尔比 BIC 表现好一次）。当数据数量较大时这种差距不会特别明显。

详细地查看错分类情形，如图 3 所示：

(a) AIC 与 BIC 均分类错误，一般由于样本量较少，目标聚类数目较大，导致有些类别的样本数量不足，且距离较近，这种情形属于数据集本身的缺陷。

(b) BIC 正确分类的时候，AIC 分类错误，这种情形 AIC 倾向于分类数目更多，这主要是由于没有被公式 (4.4) 中没有由样本数量 N 控制，任由自由参数数量的控制的话，会导致更多的分类得到更低的得分。

(c) AIC 正确分类，BIC 分类错误，这种情形 BIC 倾向于将两个粘合的类别认为一个类别。公式 (4.5) 的第一项会因为更少的分类而更少，抵过了第二项的效果。

4.3 VBEMGMM

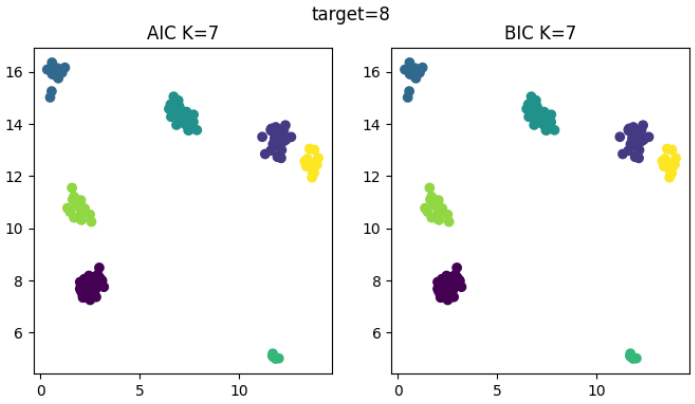
VBEMGMM (Variational Bayesian estimation of a Gaussian mixture) 采用了 Bayesian 推理，遵循 Occam 准则选择最优的聚类数目。采用 sklearn 的 `sklearn.mixture.BayesianGuassianMixture` 实现 VBEMGMM 模型[4]。

向上面的测试方法中加入 VBEMGMM 的结果，正确率对比如图 5 所示，绿色曲面代表 VBEMGMM 的结果。结果显示样本数量较少时，并不如 BIC 的分类正确率高；当样本数量变大后，与前两者的分类正确准确率基本一致。

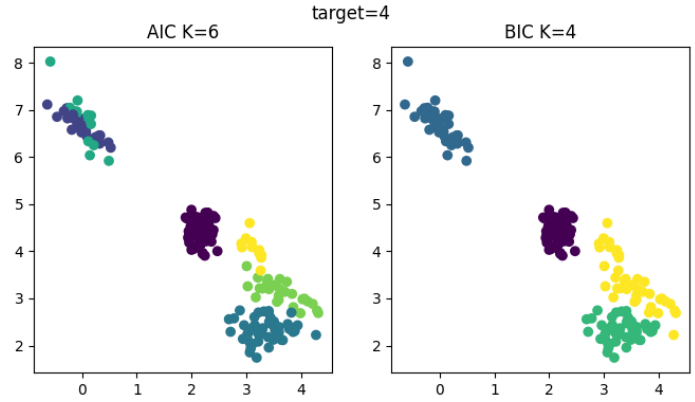
查看其中一个 VBEMGMM 错误分类的情形，如图 4 所示。可以看到有一个类别由于点较少，导致可能会由于 Occam 准则被错误分类为另一组。也就意味着 VBEMGMM 对于每个聚类内样本数量较少的情况可能表现不会那么理想。

4.4 模型选择小结

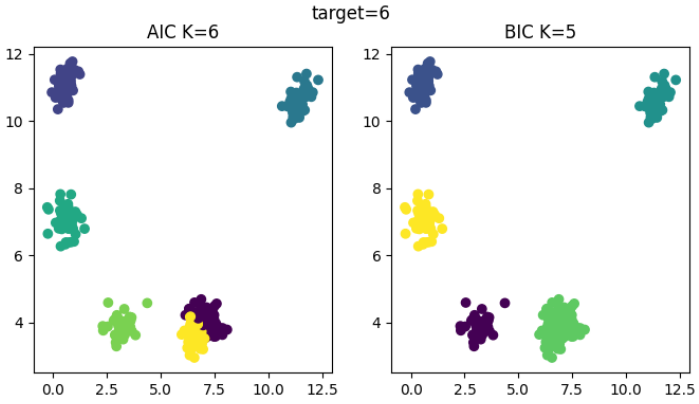
当每个聚类的样本数量充足时，可以考虑使用 VBEMGMM 自动得到聚类数目，而不用跑很多次聚类过程。而当每个聚类的样本数量不充足时，如果聚类的分离比较明确，则可以使用 BIC 来得到更少的聚类数目；如果聚类有粘合时，则可以使用 AIC 来得到更多的聚类数目，获取隐性的分类信息。



(a) AIC 与 BIC 均错误，数据集分离性差 $K = 8, N = 200$



(b) BIC 正确，AIC 错误地倾向于较多类别 $K = 4, N = 200$



(c) AIC 正确，BIC 错误地倾向于较少类别 $K = 6, N = 400$

图 3: AIC 与 BIC 错分类情形

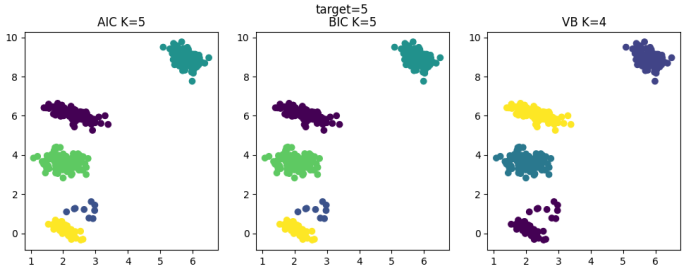


图 4: VBEMGMM 分类错误情形 $K = 5, N = 400$

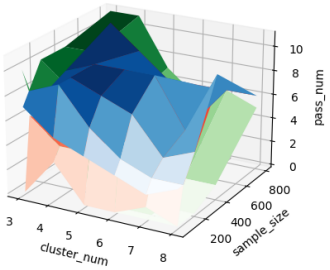


图 5: AIC (红色), BIC (蓝色), VBEMGMM (绿色) 的正确分类情况曲面图

表 3: AIC, BIC, VBEMGMM 的正确分类情况表，随机种子数为 11

K	N	AIC	BIC	VB
3	50	0	7	10
3	100	6	8	8
3	200	5	7	10
3	400	7	8	10
3	800	10	10	11
4	50	3	5	4
4	100	4	9	8
4	200	6	9	8
4	400	9	9	10
4	800	8	8	11
5	50	0	4	2
5	100	4	6	2
5	200	6	8	4
5	400	7	9	6
5	800	6	6	7
6	50	0	3	0
6	100	6	4	0
6	200	7	7	4
6	400	8	9	5
6	800	6	6	5
7	50	1	2	0
7	100	3	3	0
7	200	4	4	0
7	400	5	5	1
7	800	6	6	6
8	50	0	3	0
8	100	3	3	0
8	200	5	5	0
8	400	9	10	1
8	800	6	6	5

References

[1] 派大西. 高斯混合模型(GMM)：样本生成与参数估计.py[EB/OL]. 2021. https://zhuanlan.zhihu.com/p/411925257.

[2] NumPy Developers. numpy.random.multivariate_normal—numpy v1.23.dev0 manual [M/OL]. 2022. https://numpy.org/devdocs/reference/random/generated/numpy.random.multivariate_normal.html.

[3] Sklearn Developers. sklearn.mixture.GaussianMixture — scikit-learn 1.0.2 documentation [EB/OL]. 2022. https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.mixture.BayesianGaussianMixture.html#sklearn.mixture.BayesianGaussianMixture.

[4] Sklearn Developers. sklearn.mixture.BayesianGaussianMixture — scikit-learn 1.0.2 documentation[EB/OL]. 2022. https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.mixture.GaussianMixture.html#sklearn.mixture.GaussianMixture.