中国科学院大学

University of Chinese Academy of Sciences

模式识别与机器学习

081203M04004H

Chap 8 课程作业解答

2022 年 11 月 24 号

Professor: 黄庆明

学生: 周胤昌
学号: 202228018670052
学院: 网络空间安全学院
所属专业: 网络空间安全
方向: 安全协议理论与技术

Problem 1

下图1给出 6 个数据集 $A-F$ 分别用两种算法得到的聚类结果, 其中一种是 K 均值聚类. 请问哪些最可能是 K 均值聚类的结果? 如果 K 均值聚类结果不够理想, 建议采用哪种聚类算法?

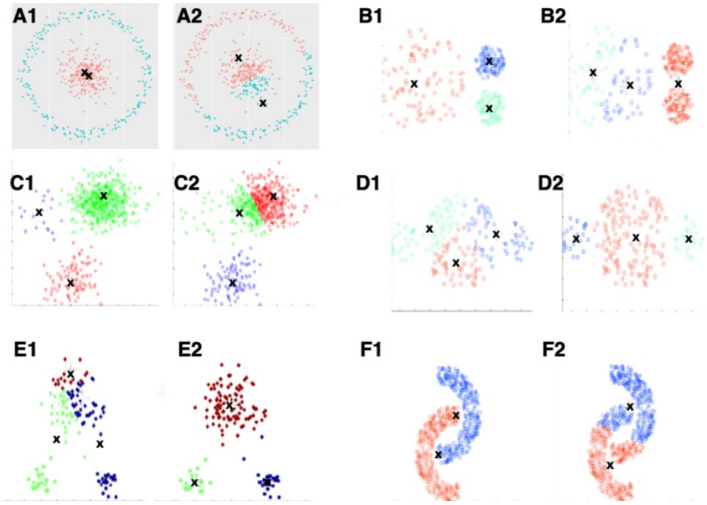


图 1: 聚类结果

Solution:

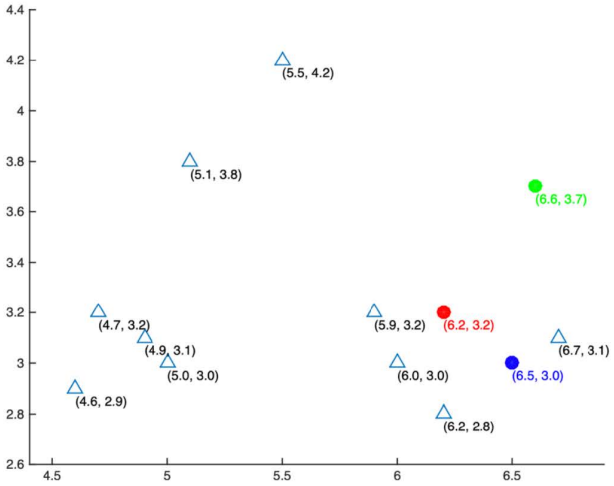
- 对于 A, 其中 A_2 很可能是 K 均值的聚类结果, 因为 A_1 的是非球形簇而 A_2 是球形簇. 由于图中的簇形状较为任意, 所以应该采用 DBSCAN 聚类算法;
- 对于 B, 其中 B_2 最可能是 K 均值的聚类结果, 因为 K 均值聚类会受到不同密度的影响, 故应该采用 DBSCAN 聚类算法;
- 对于 C, 其中 C_2 最可能是 K 均值的聚类结果, 因为 K 均值聚类会受到不同密度的影响, 故应该采用 DBSCAN 聚类算法;
- 对于 D, 其中 D_1 最可能是 K 均值的聚类结果, 因为 K 均值聚类会受到不同尺寸 (即先验概率) 的影响, 而且簇都是球形簇, 故应该采用 GMM-EM 聚类算法;
- 对于 E, 其中 E_1 最可能是 K 均值的聚类结果, 因为 K 均值聚类会受到不同尺寸 (即先验概率) 的影响, 而且簇都是球形簇, 故应该采用 GMM-EM 聚类算法;
- 对于 F, 其中 F_2 很可能是 K 均值的聚类结果 (这是由于 K 均值聚类只能针对球形/凸簇), 因为图中的簇形状较为任意, 所以应该采用 DBSCAN 聚类算法.

Problem 2

对如下图2所示的数据集, 采用 K 均值聚类. 设 $K=3$, 3 个聚类中心分别为

$$\mu_1=(6.2,3.2)^{\mathrm{T}}\ (\text{红色}),\quad \mu_2=(6.6,3.7)^{\mathrm{T}}\ (\text{绿色}),\quad \mu_3=(6.5,3.0)^{\mathrm{T}}\ (\text{蓝色})$$

请给出一次迭代后属于第一簇的样本以及更新后的簇中心 (保留两位小数).



$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}5.9 & 3.2\\ 4.6 & 2.9\\ 6.2 & 2.8\\ 4.7 & 3.2\\ 5.5 & 4.2\\ 5.0 & 3.0\\ 4.9 & 3.1\\ 6.7 & 3.1\\ 5.1 & 3.8\\ 6.0 & 3.0\end{bmatrix}$$

图 2: 聚类数据集

Solution: K-means 聚类算法的流程见如下伪代码1:

Algorithm 1 K-means 算法

Input: 给定 N 个样本点 $\mathcal{D}=\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N\}$
Output: K 个簇

```
初始化选择 K 个种子数据点 (seeds) 作为 K 个簇的中心;
while 当前簇中心仍在更新 do
    for each x_i ∈ D do
        计算 x_i 与每一个簇中心的距离;
        将 x_i 指配到距离最近的簇中心;
    end for
    用当前簇内点重新计算 K 个簇中心位置;
end while
end {K-means}
```

我们可以写出对应的 C++ 代码来自动求出结果, 对应结果如下:
第一轮迭代后属于第一簇的样本有

$$\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_4,\boldsymbol{x}_6,\boldsymbol{x}_7,\boldsymbol{x}_9,\boldsymbol{x}_{10}$$

且更新后的簇中心坐标为

$$\mu_1=(5.17,3.17)^{\mathrm{T}},\quad \mu_2=(5.50,4.20)^{\mathrm{T}},\quad \mu_3=(6.45,2.95)^{\mathrm{T}}$$

具体的 C++ 代码如下:

```cpp
#include <bits/stdc++.h> //万能头，刷题可以用，大型项目不要用
using namespace std;
double Distan(vector<double> &X, vector<double> &Y) {
    int L = X.size();
    double sum = 0;
    for(int i = 0; i < L; i++) {
        sum += pow(X[i] - Y[i], 2);
    }
    return sqrt(sum);
}

vector<int> ClusterLabel(vector<vector<double>> &Data, vector<vector<double>> &center) {
    vector<int> res;
    for(int i = 0; i < Data.size(); i++) {
        double dis1 = Distan(Data[i], center[0]);
        double dis2 = Distan(Data[i], center[1]);
        double dis3 = Distan(Data[i], center[2]);
        double dis = min(dis1, min(dis2, dis3));
        if(dis == dis1) res.push_back(1);
        else if(dis == dis2) res.push_back(2);
        else res.push_back(3);
    }
    return res;
}

vector<vector<double>> ClusterCenter(vector<vector<double>> &Data, vector<int> &label) {
    double cen1_x = 0, cen1_y = 0, cen2_x = 0, cen2_y = 0, cen3_x = 0, cen3_y = 0;
    int cnt1 = 0, cnt2 = 0, cnt3 = 0;
    for(int i = 0; i < Data.size(); i++) {
        if(label[i] == 1) {
            cen1_x += Data[i][0];
            cen1_y += Data[i][1];
            cnt1++;
        }
        else if(label[i] == 2){
            cen2_x += Data[i][0];
            cen2_y += Data[i][1];
            cnt2++;
        }
        else {
            cen3_x += Data[i][0];
            cen3_y += Data[i][1];
            cnt3++;
        }
    }
    return {
        {cen1_x / cnt1, cen1_y / cnt1},
        {cen2_x / cnt2, cen2_y / cnt2},
        {cen3_x / cnt3, cen3_y / cnt3}
    };
}
```

主函数执行如下:

```cpp
int main() {
    vector<vector<double>> Data = {
        {5.9, 3.2}, {4.6, 2.9}, {6.2, 2.8}, {4.7, 3.2}, {5.5, 4.2},
        {5.0, 3.0}, {4.9, 3.1}, {6.7, 3.1}, {5.1, 3.8}, {6.0, 3.0}
    };
    vector<vector<double>> center = {
        {6.2, 3.2}, {6.6, 3.7}, {6.5, 3.0}
    };
    vector<int> label = ClusterLabel(Data, center);
    for(int i = 0; i < Data.size(); i++) {
        cout << " 第" << i + 1 << " 个样本 (" << Data[i][0] << ","
        << Data[i][1] << ") 属于第" << label[i] << " 个簇" << endl;
    }
    vector<vector<double>> NewCenter = ClusterCenter(Data, label);
    for(int i = 0; i < 3; i++) {
        cout << " 第" << i + 1 << " 个簇中心坐标为 ("
        << setprecision(3) << NewCenter[i][0] <<"," <<
        setprecision(3) << NewCenter[i][1] << ")" << endl;
    }
}
```

具体的 C++ 代码输出如下:

```
开始运行...
第 1 个样本(5.9,3.2)属于第 1 个簇
第 2 个样本(4.6,2.9)属于第 1 个簇
第 3 个样本(6.2,2.8)属于第 3 个簇
第 4 个样本(4.7,3.2)属于第 1 个簇
第 5 个样本(5.5,4.2)属于第 2 个簇
第 6 个样本(5,3)属于第 1 个簇
第 7 个样本(4.9,3.1)属于第 1 个簇
第 8 个样本(6.7,3.1)属于第 3 个簇
第 9 个样本(5.1,3.8)属于第 1 个簇
第 10 个样本(6,3)属于第 1 个簇
第 1 个簇中心坐标为(5.17,3.17)
第 2 个簇中心坐标为(5.5,4.2)
第 3 个簇中心坐标为(6.45,2.95)
运行结束.
```

Problem 3

简答题:

- **问题 1: K-means 聚类算法暗含了对簇的什么假设?**

  解答: K-means 聚类算法暗含了各个簇种的数据具有一样的先验概率并且呈现球形分布.

- **问题 2: K-means 迭代一定会收敛么?**

  解答: 一定会, 这是因为损失函数是单调递减的, 所以使用坐标轴下降法是可以使得损失函数收敛 (但不一定收敛到全局极小值) 且聚类结果也会收敛.

- **问题 3: K-means 算法的初始化参数 (中心) 如何选取?**

  解答: 采用启发式做法, 即随机确定第一个类的中心, 其他类中心的位置尽量远离已有类中心. 具体做法是在 Scikit-Learn 里 K-means 的参数 init 中设置“k-means++”(默认值) 来使得初始化的质心彼此远离.

- **问题 4: K-means 算法的超参数 K 如何选取?**

  解答: 可以用手肘法, 观察出损失函数的拐点 (急速下降和平稳的交界处), 对应的横坐标值即可作为 K 值. 此外还可以用间隔统计法来获取合适的 K 值, 具体代码可见**Python implementation of the Gap Statistic**.

- **问题 5: K 均值算法有何局限性? 可以用什么方法改进?**

  解答: K-means 的局限性在于它假定了簇为球形并且各个簇的先验概率相等. 当各个簇是具有不同尺寸、密度的非球形簇时, 聚类效果不理想, 并且该算法易受到离群点的影响. 为此, 可以用簇的中位点来替代作为中心的均值点, 以免算法受到脏数据的干扰. 而针对先验概率相等的假设问题, 我们可以使用高斯混合模型来解决.

- **问题 6: 基于 GMM 的 EM 聚类算法为何要引入隐变量 z?**

  解答: 不引入隐变量 z 的话, 对数似然函数求导困难从而使得函数优化困难. 因此引入隐变量 z, 从而给出隶属度 $\gamma(z_{ik})$ 以求得对数似然的极大估计 $\boldsymbol{\mu}_k, \pi_k, \boldsymbol{\Sigma}_k$. 于是可以引出解的迭代方案 (即 EM 算法在 GMM 下的实例).

- **问题 7: K-means 和 EM 算法有什么共通之处?**

  解答: GMM 的 E 步时软划分版本的 K-means, 当所有 π_k 相等 (即 $1/k$) 且 $\boldsymbol{\Sigma}_k = \boldsymbol{O}, r_{ik} \in \{0, 1\}$ 时, 则 GMM 的 EM 算法退化为 K-means 算法.

- **问题 8: 如何度量簇的相似性? 不同度量方法的优缺点?**

  解答: 簇的相似性可以用 *Minkowski* 距离、余弦相似度、*Pearson* 相关系数以及 *Jaccard* 相似系数来度量. 其中 *Minkowski* 距离的优点在于对样本特征的旋转和平移比较鲁棒, 但缺点在于对数据尺度比较敏感. 余弦相似度的优势在于文本分析, 缺点是没有考虑向量模长的大小, 而只考虑它们的方向. 其中数据中心化后的 *Pearson* 相关系数就是余弦相似度, 优缺点是一致的. *Jaccard* 相似系数 (即交比并) 的优势在于处理图像分割问题 (如实例和语义分割), 缺点在于它容易受到数据规模的影响.

- **问题 9: 层次聚类的限制有哪些?**

  解答: 簇的合并/拆分过程不可逆、没有对应优化一个全局目标函数、对离群点和噪声不鲁棒.

- **问题 10: 请简述 PCA 流程.**

  解答: PCA 流程如算法2中所示:

Algorithm 2 PCA 算法

Input: 训练数据集 $\boldsymbol{X} = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N\}$, 低维空间的维度 D'

Output: $\boldsymbol{W} = (\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \cdots, \boldsymbol{w}_{D'})$

1: 对样本中心化: $\boldsymbol{x}_i \leftarrow \boldsymbol{x}_i - \dfrac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{x}_j, i = 1, \cdots, N$;

2: 再计算协方差矩阵 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$;

3: 对 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 作特征分解: $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{W}^{-1}$;

4: D' 最大特征值对应的特征向量: $\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \cdots, \boldsymbol{w}_{D'}$;

5: **end {PCA}**

改进后的 PCA 流程如算法3中所示:

Algorithm 3 改进 **PCA** 算法

Input: 训练数据集 $\boldsymbol{X} = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N\}$, 低维空间的维度 D'

Output: $\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_{D'})$

1: 对样本中心化: $\boldsymbol{x}_i \leftarrow \boldsymbol{x}_i - \dfrac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{x}_j, i = 1, \cdots, N$;

2: 对 $\boldsymbol{X}$ 作奇异值分解: $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{U}_{D\times D}\boldsymbol{\Sigma}_{D\times N}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}_{N\times N}$;

3: D' 个奇异值对应的左奇异向量: $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_{D'}$;

4: **end {Improved PCA}**

KPCA 流程如算法4中所示:

Algorithm 4 KPCA 算法

Input: 训练数据集 $\boldsymbol{X} = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N\}$, 低维空间的维度 D', 核函数 $k(\cdot,\cdot)$

Output: $\boldsymbol{z}^{(i)} = \left(\boldsymbol{z}_1^{(i)}, \boldsymbol{z}_2^{(i)}, \cdots, \boldsymbol{z}_{D'}^{(i)}\right), i = 1, \cdots, N$

1: 计算核矩阵 $\boldsymbol{K}$: $k_{ij} = k(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$ 并对 $\boldsymbol{K}$ 中心化得到 $\overline{\boldsymbol{K}}$;

2: 对 $\overline{\boldsymbol{K}}$ 作特征分解: $\overline{\boldsymbol{K}} = \boldsymbol{\mathcal{A}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\mathcal{A}}^{-1}$;

3: 选择 D' 个最大特征值对应的特征向量: $\boldsymbol{\alpha}_1, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_{D'}$; ▷ $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^{N\times 1}$, 通常对 $\boldsymbol{\alpha}$ 进行归一化, 模长为 1

4: 对于新样本 $\boldsymbol{x}$, 可得到其低维表示 (D' 维)$\boldsymbol{z}$ 为: ▷ 对所有样本求和开销大

$$\boldsymbol{z} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{N} \alpha_{1i} k\left(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}\right) \\ \sum_{i=1}^{N} \alpha_{2i} k\left(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}\right) \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{N} \alpha_{D'i} k\left(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}\right) \end{pmatrix}$$

5: **end {KPCA}**