# 模式识别第九章非监督学习方法

北京航空航天大学计算机学院

# 引言

- \* 监督学习(supervised learning): 用已知类别的样本训练分类器,以求对训练集数据达到某种最优,并能推广到对新数据的分类
- \* 非监督学习(unsupervised learning): 样本数据类别未知,需要根据样本间的相似性对样本集进行分类(聚类, clustering)

# 监督与非监督学习方法比较

- \* 监督学习方法必须要有训练集与测试样本。在训练集中找规律,而对测试样本使用这种规律;而非监督学习只有一组数据,在该组数据集内寻找规律。
- \* 监督学习方法的目的是识别事物,给待识别数据加上标注(label),因此训练样本集必须由带标注的样本组成。而非监督学习方法只有要分析的数据集本身,没有标注。如果发现数据集呈现某种聚集性,则可按自然的聚集性分类,但不以与某种预先的分类标注对上号为目的。

# 主要的非监督学习方法

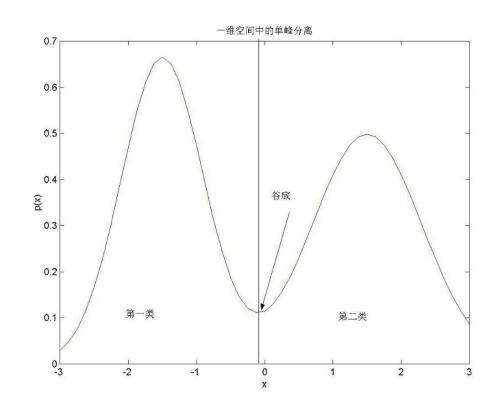
- \*基于概率密度函数估计的直接方法:设法找到各类别在特征空间的分布参数再进行分类,如直方图方法。
- \*基于样本间相似性度量的间接聚类方法:设法定出不同类别的核心或初始类核,然后依据样本与这些核心之间的相似性度量将样本聚集成不同类别。

#### 基于概率密度函数估计的直接方法

\*划分整个空间为N个区域,使得每个区域的概率

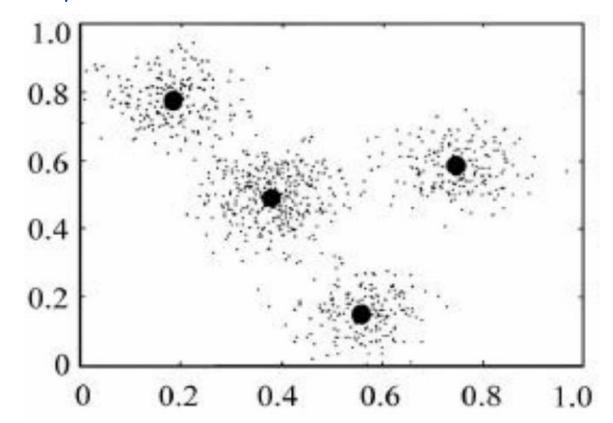
密度函数是单峰的

\*例: 玉米与杂草



## 基于概率密度函数估计的直接方法

#### \* 多维分布



#### 基于相似性度量的间接聚类方法

- \*根据样本间的相似性,使某种准则函数最大(小)
- \* C均值方法(K均值方法),使下述准则最小:

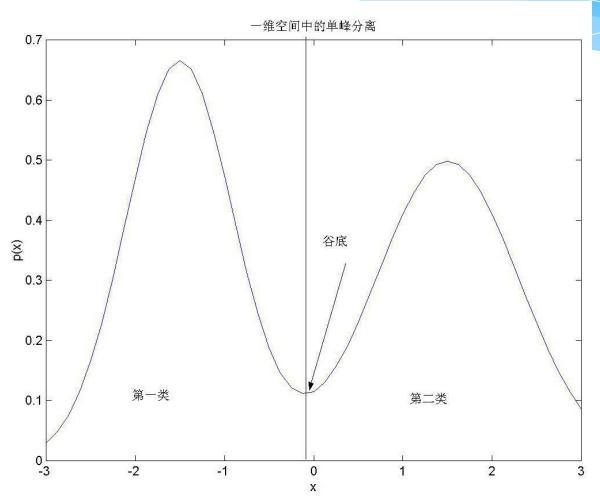
$$J = \sum_{i=1}^{C} \sum_{y \in \Gamma_i} ||y - m_i||^2$$

# 单峰子集的分离方法

\*思想:把特征空间分为若干个区域,在每个 区域上混合概率密度函数是单峰的,每个单 峰区域对应一个类别。

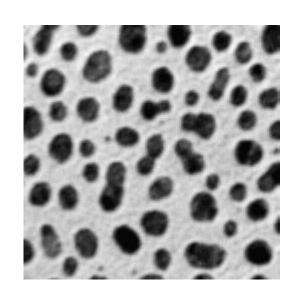
\*一维空间中的单峰分离:对样本集K<sub>N</sub>={x<sub>i</sub>}应用 直方图/Parzen窗方法估计概率密度函数,找 到概率密度函数的峰以及峰之间的谷底,以 谷底为阈值对数据进行分割。

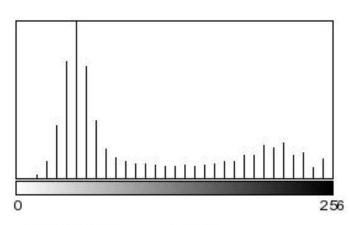
# 一维空间中的单峰子集分离

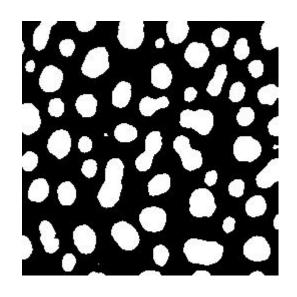


 $\underset{k=1,...,L}{\operatorname{argmin}} p(k)$ 

# 灰度图像二值化算法示例





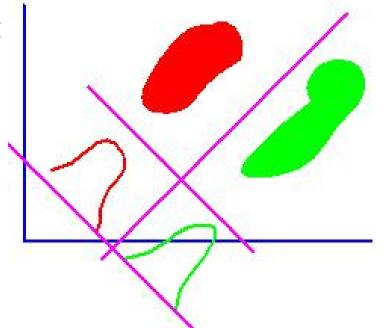


Count: 65024 Min: 8 Mean: 103.269 Max: 248

StdDev: 71.057 Mode: 48 (10396)

# 多维空间投影方法

- \*多维空间y中直接划分成单峰区域比较困难, 把它投影到一维空间x中来简化问题。
- \* 投影方法举例:

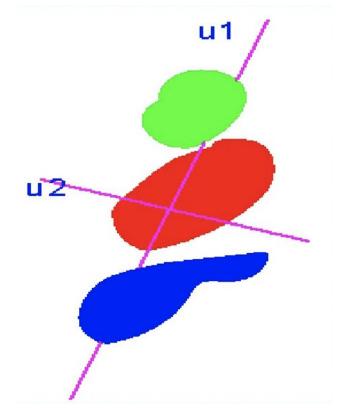


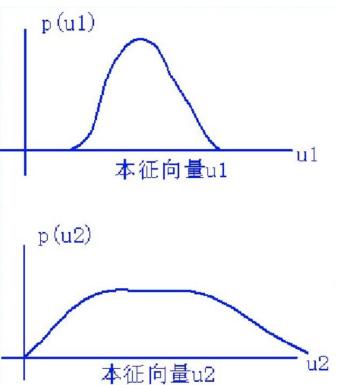
#### 如何确定合适的投影方向U

- \*使投影{x=u<sup>T</sup>y}的方差最大:方差越大,类之间分离的程度也可能越大
- \* 样本协方差矩阵的最大本征值对应的本征向量满足这样的要求
- \*存在问题:这样投影有时并不能产生多峰的边缘密度函数

## 如何确定合适的投影方向U

\*存在问题:这样投影有时并不能产生多峰的边缘密度 函数





# 投影方法算法步骤

- \* 计算样本y协方差矩阵的最大本征值对应的本征向量u,把样本数据投影到u上,得到v=uTy
- \* 用直方图/Parzen窗法求边缘概率密度函数p(v)
- \* 找到边缘概率密度函数的各个谷点,在这些谷点 上作垂直于u的超平面把数据划分成几个子集
- \*如果没有谷点,则用下一个最大的本征值代替
- \* 对所得到的各个子集进行同样的过程,直至每个子集都是单峰为止

- \* 设数据集Y划分为c个子集 $\Gamma_i$ , i=1,2,...,c
- \*每个子集中样本数为 $N_i$ ,总样本数为N
- \*考查类条件概率密度的加权估计值:

$$f(y|\Gamma_i) = \frac{N_i}{N} p(y|\Gamma_i)$$

\* 定义指标

$$J = \frac{1}{2} \int \sum_{i=1}^{c} \sum_{j=1}^{c} \left[ f(y|\Gamma_i) - f(y|\Gamma_j) \right]^2 p(y) \, dy$$
它反映了 $f(y|\Gamma_i)$ 和 $f(y|\Gamma_j)$ 之间的"距离"

\*目标:求使】最大的子集划分

$$f(y|\Gamma_i) = \frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{N_i} k(y, y_i), y \in \Gamma_i$$
 (Parzen窗法)

\* 考查某个样本 $y_k$ ,若它原属于 $\Gamma_j$ ,从 $\Gamma_j$ 移入  $\Gamma_i$ ,得到新的 $\Gamma_j$ 和 $\Gamma_i$ ,则显然

$$f(y|\widetilde{\Gamma}_i) \geq f(y|\Gamma_i)$$
  $f(y|\widetilde{\Gamma}_j) \leq f(y|\Gamma_j)$  记  $f(y|\widetilde{\Gamma}_i) = f(y|\Gamma_i) + \Delta f_i$ , 例  $\Delta f_i = -\Delta f_j = \frac{1}{N} k(y, y_k)$ 

\*把 $y_k$ 从 $\Gamma_j$ 移入 $\Gamma_i$ 引起的指标变化量:

$$\Delta J = \int \left\{ \left[ f(y|\widetilde{\Gamma}_i) - f(y|\widetilde{\Gamma}_j) \right]^2 - \left[ f(y|\Gamma_i) - f(y|\Gamma_j) \right]^2 \right.$$

$$\left. + \sum_{k=1, k \neq i, j}^c \left[ \left( f(y|\Gamma_k) - f(y|\widetilde{\Gamma}_j) \right)^2 - \left( f(y|\Gamma_k) - f(y|\Gamma_j) \right)^2 \right.$$

$$\left. + \left( f(y|\Gamma_k) - f(y|\widetilde{\Gamma}_i) \right)^2 - \left( f(y|\Gamma_k) - f(y|\Gamma_i) \right)^2 \right] \right\} p(y) dy$$

$$= \int \left[ 2c\Delta f_i \right]^2 p(y) dy + 2c \int \left[ f(y|\Gamma_i) - f(y|\Gamma_j) \right] \Delta f_i p(y) dy$$

第一项恒大于0,第二项差越大,ΔJ越大

- \* 通过把 $y_k$ 从 $\Gamma_j$ 移入 $\Gamma_i$ ,使J增大,故应选择使 $\Delta J$ 尽可能大的 $\Gamma_i$ 移入,即选择  $f(y_k|\Gamma_i) = \max_l f(y_k|\Gamma_l)$ 以使 $|f(y|\Gamma_i) f(y|\Gamma_i)|$ 最大,从而使 $\Delta J$ 最大。
- \* 若存在两个(或以上)子集的 $f(y_k|\Gamma_i)$ 最大(相等),则可移入其中任一类。

#### \* 算法步骤:

- (1) 初始划分Y
- (2) 对每个样本  $y_k$ , k = 1, ..., N, 逐一计算  $f(y_k | \Gamma_i)$ , 并 归入使  $f(y_k | \Gamma_i)$  最大的子集中
- (3) 重复(2), 直到不再有样本发生转移

# 类别分离的间接方法

- \* 目标: 类内元素相似性高, 类间元素相似性低
- \* 该类方法的两个要点:
  - \*相似性度量
  - \* 准则函数
- \* 相似性度量:

样本间相似性度量: 特征空间的某种距 离度量

样本与样本聚类间 相似性度量

$$\delta(x_i, x_j) = (x_i - x_j)^T (x_i - x_j)$$

$$\delta(x_i, K_j)$$

#### 总结

- \* 不同的聚类方法实际上反映了对聚类(及数据)的不同理解:
  - \* 混合模型: 数据服从混合分布, 聚类对应于各分布
  - \*单峰子集:聚类即概率分布中的单峰,即样本分布相对集中的区域
  - \* 间接方法: 相似的样本聚类,不同聚类的样本不相似

#### 动态聚类方法

\* 距离函数: 进行相似性度量

\*准则函数:评价聚类结果的质量

\* 迭代, 直到准则函数取得极值

# K均值算法

- \* 给定D维空间上的数据集 $\{x_1,...,x_N\}$ , 并不知道这些数据集所对应的类型和标号, 通过聚类方法将这些数据集划分成K类。
- \*对于K个聚类中的每一类k,分别建立一个代表点 $\mu_k$ ,将每一个样本划归到离该样本最近的 $\mu_k$ 所代表的聚类。
- \*目的:最小化一个准则函数]

\*对于样本 $x_n$ ,定义一个聚类标注 $r_n$ ,即如果样本 $x_n$ 属于第k个聚类,则:

$$r_{nk}=1$$
,  $r_{nj}=0$  for  $j\neq k$ 

\*希望每个样本与最接近它的聚类代表点之间的距离尽可能小,定义准则函数:

$$J = \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} r_{nk} ||x_n - \mu_k||^2$$
 $r_{nk}$ 

#### \* 两步走策略

- \* 初始化: 对聚类代表点µk进行初始化
- \* 迭代进行下述步骤, 直至收敛:
  - \* 第一步: 根据 $\mu_k$ , 按照最优化准则计算 $r_{nk}$

$$J = \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} r_{nk} ||x_n - \mu_k||^2 \qquad r_{nk} = \begin{cases} 1 & \text{if } k = \underset{j}{\operatorname{argmin}} ||x_n - \mu_j||^2 \\ 0 & \text{otherwhise.} \end{cases}$$

\* 第二步:根据 $r_{nk}$ ,按照最优准则计算 $\mu_k$ 

$$J = \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} r_{nk} ||x_n - \mu_k||^2 \longrightarrow 2 \sum_{n=1}^{N} r_{nk} (x_n - \mu_k) = 0 \longrightarrow \mu_k = \frac{\sum_{n=1}^{N} r_{nk} x_n}{\sum_{n=1}^{N} r_{nk}}$$

迭代 $r_{nk}$  **Expectation** 迭代 $\mu_k$  **Maximization** 

- \*初始划分:一般可先选代表点,再进行初始分类
- \* 代表点选择方法:
  - \* 1. 经验选择
  - \* 2. 随机分成c类, 选各类重心作为代表点
  - \* 3. "密度"法
    - \* 计算每个样本的一定球形领域内的样本数作为"密度",选"密度"最大的样本点作为第一个代表点,在离它一定距离之外选最大"密度"点作为第二个代表点,…,依次类推

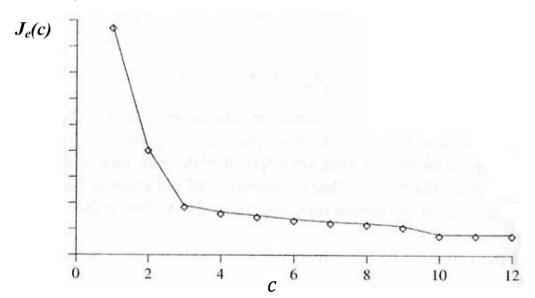
- \* 4. 用前c个样本点作为代表点
- \*5. 用c-1聚类求c个代表点:各类中心外加离它们最远的样本点,从1类开始
- \* •••••

- \* K均值聚类方法用于非监督模式识别的问题:
  - \*1.要求类别数已知;
  - \* 2. 是最小方差划分,并不一定能反映内在分布;
  - \* 3. 与初始划分有关,不保证全局最优。

## 如何获取类别C

- \*一种实验确定方法:
  - \* 对c = 1, 2, 3, ...,取类,求 $J_e(c)$ ,如图找其中的拐点(图中 $\hat{c} = 3$ )

(此方法并不总有效,并非所有情况都能找到明显的转折点)



- \* 迭代自组织数据分析算法
- \* ISODATA算法功能于K均值算法相比,在以下几方面有所改进:
  - \*考虑了类别的合并与分裂,因而有自我调整类别数的能力。合并主要发上在某一类内样本个数太少的情况,或两类聚类中心之间的距离太小的情况
  - \* 算法具有自我调整的能力

- \* ISODATA算法与K均值算法有相似之处,即聚类中心根据样本的均值来修改。
- \*不同的是,这种算法进行的过程中聚类中心的数目不是固定不变、而是反复进行修改。聚类既有合并也有分裂,合并与分裂是在一组预先选定的参数指导下进行的。

#### \* 算法步骤:

- \*(1)初始化,聚类数c,中心 $m_i$ , i=1,...,c (期望聚类数k)
- \* (2) 把所有样本分到距离最近的类中, $\Gamma_i$ ,i=1,...,c
- \*(3) 若某个类 $\Gamma_j$ 中样本数过少( $N_j < \theta_N$ ),则去掉这一类(合入其他类),置c = c 1
- \* (4) 重新计算均值  $m_j = \frac{1}{N_j} \sum_{y \in \Gamma_j} y$ , y = 1, ..., c

\* (5) 计算第 j 类样本与其中心的平均距离

$$\overline{\delta}_j = \frac{1}{N_j} \sum_{y \in \Gamma_j} \|y - m_j\|, \quad j = 1, ..., c$$

和总平均距离  $\overline{\delta} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{c} N_j \, \overline{\delta}_j$ 

\*(6)若是最后一次迭代(由参数I确定),则程序停止;

若 $c \le k/2$ ,则转(7)(分裂)(聚类中心小于或等于希望数的一半):

若 $c \geq 2k$ , 或是偶数次迭代,则转(8)(合并)(聚类中心数目大于或等于希望数的两倍)。

#### \*(7)(分裂)

7-1 对每个类,求各维标准偏差 $\sigma_j = [\sigma_{j1}, \sigma_{j2}, ..., \sigma_{jd}]^T$ 

$$\sigma_{ji} = \sqrt{\frac{1}{N_j} \sum_{y_k \in \Gamma_j} (y_{ki} - m_{ji})^2}, j = 1, ..., c, i = 1, ..., d$$

7-2 对每个类, 求出标准偏差最大的分量 $\sigma_{i \max}$ , j=1,...,c

7-3 若对 $\sigma_{j \max}$ , j=1,...,c, 存在 $\sigma_{j \max} > \theta_s$  (标准偏差参数,即该类样本在 $\sigma_{j \max}$ 对应方向上的标准偏差大于允许的值)

且  $\overline{\delta_j} > \overline{\delta}$  且  $N_j > 2(\theta_N + 1)$ (类内平均距离大于总体平均距离,并且该类中样本数很大)

或  $c \leq k/2$  (聚类数小于或等于希望数目的一半)

则 $\Gamma_j$ 分裂为两类,中心分别为 $m_j^+$ 和 $m_j^-$ ,置c=c+1

$$m_j^+ = m_j + r_j, \qquad m_j^- = m_j - r_j$$
  
其中  $r_j = k\sigma_{j\, ext{max}}, \quad 0 < k \le 1$ 

- \*(8)(合并)
  - 8-1 计算各类中心之间的距离

$$\boldsymbol{\delta_{ij}} = \|\boldsymbol{m_i} - \boldsymbol{m_j}\|, i, j = 1, ..., c, i \neq j$$

8-2 比较 $\delta_{ij}$ 与 $\theta_c$ (合并参数),对小于 $\theta_c$ 者排序:

$$\delta_{i_1j_1} < \delta_{i_2j_2} < ... < \delta_{i_lj_l}$$

8-3 把 $m_{i_l}$ 和 $m_{j_l}$ 合并:

$$m_l = \frac{1}{N_{i_l} + N_{j_l}} [N_{i_l} m_{i_l} + N_{j_k} m_{j_k}]$$

并置c=c-1。每次迭代中避免同一类被合并两次。

#### ISODATA分法

\*(8)若是最后一次迭代,则终止。

否则转(2)。(必要时可调整算法参数)

# 基于样本与聚类间相似性度量的动态聚类算法

- \* C均值方法的缺点:用均值代表类,适用于近似球状分布的类
- \* 改进:
  - \* 用核 $K_j = k(y, V_j)$ 来代表一个类 $\Gamma_j$ 。  $V_j$ 是参数集。核  $k_j$ 可以是一个函数、一个点集或某种分类模型
  - \* 定义样本y到类 $\Gamma_j$ (核 $k_j$ )之间的相似性度量 $\Delta(y,k_j)$  准则函数  $J_k = \sum_{j=1}^c \sum_{y=\Gamma_i} \Delta(y,k_j)$

# 基于样本与聚类间相似性度量的动态聚类算法

- \* (1) 初始划分,得到初始核 $k_i$ , j=1,...,c
- \* (2) 按以下规则把各样本分类:

若
$$\Delta(y, k_j) = \min_{h=1,...,c} \Delta(y, k_h)$$
  
则 $y \in \Gamma_j$ 

\* (3) 更新 $k_j$ , j = 1, ..., c, 若 $k_j$ 不变,则终止; 否则 转 (2)

C均值可看作 $k_i$ 为 $m_i$ , $\Delta$ 为欧氏距离下的特例

#### 核函数示例

\* 1. 正态核函数:

$$k(y, v_j) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} |\widehat{\Sigma}_j|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2} (y - m_j)^T \widehat{\Sigma}_j^{-1} (y - m_j)\right\}$$
$$\Delta(y, k_j) = \frac{1}{2} (y - m_j)^T \widehat{\Sigma}_j^{-1} (y - m_j) + \frac{1}{2} \log|\widehat{\Sigma}_j|$$

\* 2. 主轴核函数:

用K-L变换得到样本子集的主轴方向作为核:

$$k(y, V_j) = U_j^T y$$
 ( $V_j$  表示参数集)

 $U_j^T = \begin{bmatrix} u_1, u_2, ..., u_{d_j} \end{bmatrix}$ 是样本协方差矩阵 $\hat{\Sigma}_j$ 的 $d_j$ 个最大本征值的本征向量系统,则样本到核的相似性度量为:

$$\Delta(y, k_j) = \left[ \left( y - m_j \right) - U_j V_j^T (y - m_j) \right]^T \left[ \left( y - m_j \right) - U_j V_j^T (y - m_j) \right]$$

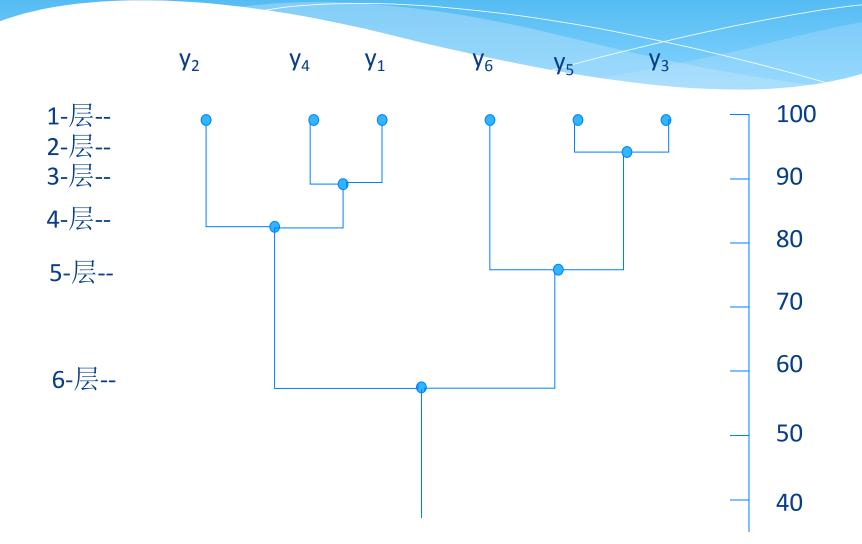
- \* 在人类认识客观世界过程中,将事物分级分类是一种很有效的手段。
  - \* 最典型的例子就是生物学上对物种的分类,将所有生物按照界、门、纲、目、科、属、种等级别进行分类。 越相似的物种就在越低的层次上被归为一类;最相似的物种被分在同一个"种",相似的种又被分在同一个"属",以此类推
- \* 这种思想也可以自然运用到聚类分析中,即分级聚类 (hierarchical clustering) 方法

- \* 聚类分析是把N个没有类别标签的样本分成一些合理的类,在极端的情况下,最多可以分成N类,即每个样本自成一类;最少可以只有一个类,即全部样本都归为一类。
- \*可以从N类到1类逐级地进行类别划分,求得一系列 类别数从多到少的划分方案,然后根据一定的指标 选择中间某个适当的划分方案作为聚类的结果,这 就是分级聚类的基本思想

- \* 聚类划分序列: N个样本自底向上逐步合并成一类, 算法步骤为
  - \*(1)初始化,每个样本自成一类(划分水平1)
  - \*(2) K水平划分的进行(合并): 计算已有的c=N-K+1个类的类间距离矩阵 $\mathbf{D}^{(K-1)}=[d_{ij}]^{(K-1)}$ ,其最小元素记作 $\mathbf{d}^{(K-1)}$ ,相应的两个类合并成一类
  - \*(3) 重复第2步,直至形成包含所有样本的类(划分水平N)

- \* 划分处于K水平时,类数c=N-K+1,类间距离矩阵  $\mathbf{D}^{(K)}=[d_{ii}]^{(K)}$ ,其最小元素记作 $\mathbf{d}^{(K)}$
- \*如果d(K)>阈值dT,则说明此水平上的聚类是适宜的

### 分级聚类树表示方法



### 两聚类间的距离度量

- \* 聚类 $K_i$ 与 $K_j$ 间的距离度量
  - \* 最近距离:  $\Delta(K_i, K_j) = \min_{x \in K_i, y \in K_j} \delta(x, y)$
  - \* 最远距离:  $\Delta(K_i, K_j) = \max_{x \in K_i, y \in K_j} \delta(x, y)$

\* 均值距离:  $\Delta(K_i, K_j) = \delta(m_i, m_j)$ 

#### 非监督学习的一些问题

- \* 非监督学习存在更大的不确定性: 可利用信息少
  - \* 相似性度量一般对数据尺度较敏感
- \*影响聚类结果的因素:样本的分布、样本数量、聚类准则、相似性度量、预分类数等
- \*针对不同数据、不同目标选择不同的聚类算法
- \*动态聚类算法计算效率高,实际应用多

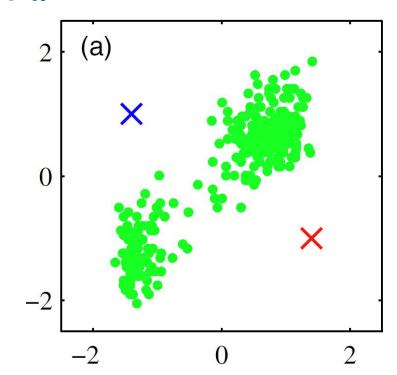
#### 非监督学习的一些问题

- \*一些解决办法:
  - \* 先验知识
  - \* 多次试算
  - \* 改进算法(如自组织映射SOM, 模糊C均值方法Fuzzy C-means)
    - \*实现确定类别数
    - \* 对相似性度量的依赖性

#### 具体实现及应用

- \* K均值聚类算法具体实现
- \* K均值聚类算法的应用
  - \* 基于K均值聚类的图像分割

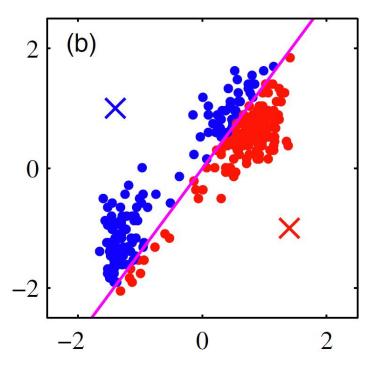
- \*以K=2为例,说明K均值的实现过程
- \*初始化:对聚类代表点µk进行初始化
  - \*图中蓝色及红色的x: 初始化的两个聚类代 表点μ<sub>1</sub>及μ<sub>2</sub>



- \* 迭代进行下述步骤, 直至收敛:
  - \* 第一步:根据 $\mu_k$ ,按照最优化准则计算 $r_{nk}$

$$r_{nk} = \begin{cases} 1 & \text{if } k = \underset{j}{\operatorname{argmin}} \|x_n - \mu_j\|^2 \\ 0 & \text{otherwhise.} \end{cases}$$

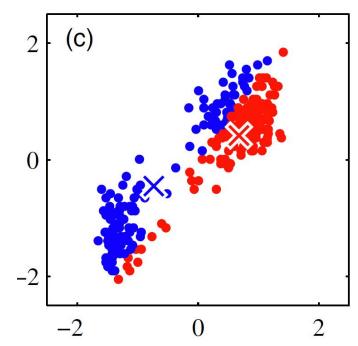
- \* 对每个蓝色圆点代表的 样本n,有 $r_{n1} = 1$ 且 $r_{n2} = 0$
- \* 对每个红色圆点代表的 样本n,有 $r_{n1}=0$ 且 $r_{n2}=1$



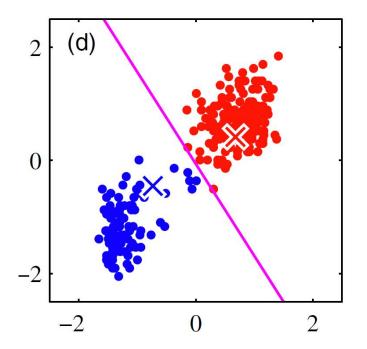
- \* 迭代进行下述步骤, 直至收敛:
  - \* 第二步:根据 $r_{nk}$ ,按照最优准则计算 $\mu_k$

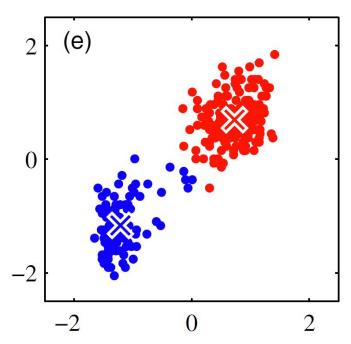
$$\mu_k = \frac{\sum_n r_{nk} x_n}{\sum_n r_{nk}}$$

\*图中蓝色及红色x: 更新后的两个类别的 代表点µ<sub>1</sub>及µ<sub>2</sub>

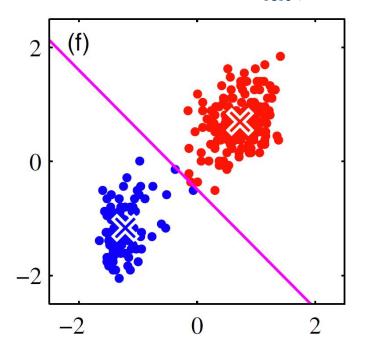


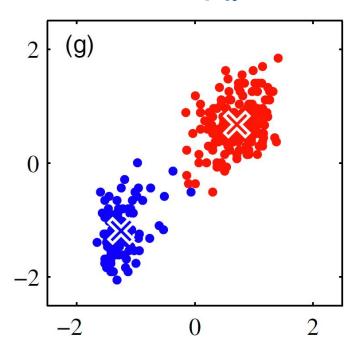
- \* 迭代进行两步走策略
  - \* 第一步: 根据 $\mu_k$ , 按照最优化准则计算 $r_{nk}$
  - \* 第二步:根据 $r_{nk}$ ,按照最优准则计算 $\mu_k$



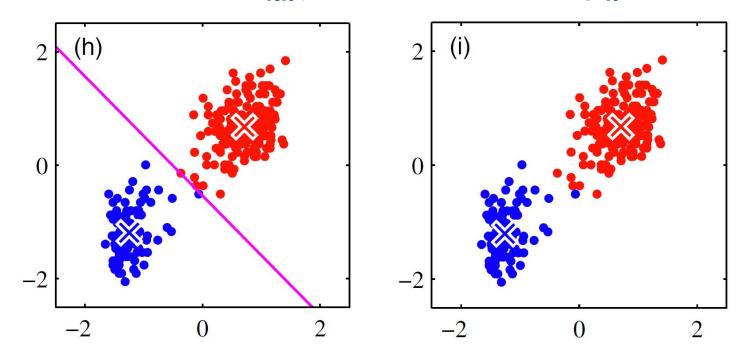


- \* 迭代进行两步走策略
  - \* 第一步: 根据 $\mu_k$ , 按照最优化准则计算 $r_{nk}$
  - \* 第二步: 根据 $r_{nk}$ , 按照最优准则计算 $\mu_k$



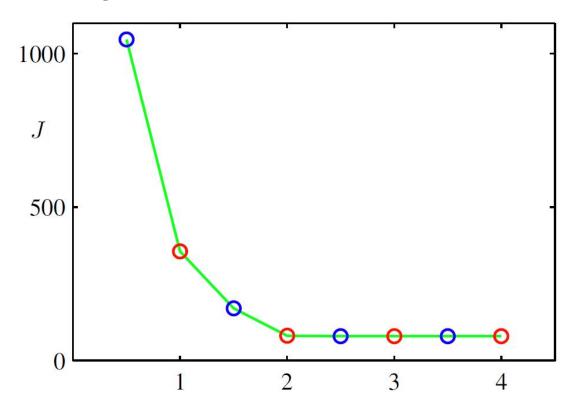


- \* 迭代进行两步走策略
  - \* 第一步: 根据 $\mu_k$ , 按照最优化准则计算 $r_{nk}$
  - \* 第二步: 根据 $r_{nk}$ , 按照最优准则计算 $\mu_k$



- \* 迭代何时停止?
  - \*判断聚类代表点µk是否改变
  - \*判断准则函数/是否收敛
  - \* 迭代超过一定的次数
  - \*

#### \*准则函数]的变化曲线



- \* 数字图像
  - \* M行N列构成的一个像素矩阵 (M×N)
- \* 像素
  - \* R, G, B
- \* 数字图像就是一个三维矩阵 (M×N×3)
- \* 图像分割就是把图像分成若干个特定的、 具有独特性质的区域的过程,而分割的目 的是将图像分解不同部分,这些分解结果 对于特定应用具有意义
- \* 我们可以将每个像素视为是一个样本点, 利用K均值聚类算法,得到每个像素点对 应的聚类标注,那么就可以得到图像的分 割结果



\* K=2时图像的分割结果 (蓝色及黄色分别对应两个聚 类,显示了所有对应像素的均值)



原始图像



图像分割结果 (K=2)

\* K=3时图像的分割结果



原始图像



图像分割结果 (K=3)

#### \* K=10时图像的分割结果



原始图像



图像分割结果 (K=10)

- 可以通过图像分割,对图像进行压缩
- 当图像分割的目标时图像压缩时,在聚类时,需要对压缩率和压缩后的图像质量进行权衡。聚类数K值越大,压缩率越低,压缩后的图像质量越高,越接近原始图像







K=2

K=3

K=10

原始图像

## 谢谢