

2020 年春季学期 计算学部《机器学习》课程

Lab 3 实验报告

姓名	赵仁杰
学号	1180300113
班号	1803001
电子邮件	<u>1579974122@qq.com</u>
手机号码	15122925619

目录

1	实验目的	2
2	实验要求、环境	3
	2.1 实验要求	3
	2.2 实验环境	3
3	算法原理	3
	3.1 k-means 聚类	3
	3.2 GMM:	4
	3.3 高斯混合模型参数估计的 EM 算法:	4
4	算法实现:	6
	4.1 k-means 聚类实现:	6
	4.1.1 随机选取样本作为初始均值向量	6
	4.1.2 利用最大化初始均值向量之间距离方式进行选择	7
	4.2 GMM 算法实现	7
5	: 实验结果分析:	7
	5.1: 按照生成的数据测试	7

1 实验目的

理解 k-means 聚类过程 理解混合高斯模型(GMM)用 EM 估计参数的实现过程 掌握 k-means 和混合高斯模型的联系 学会 EM 估计参数的方法和代码实现 学会用 GMM 解决实际问题

2 实验要求、环境

2.1 实验要求

实现一个 k-means 算法和混合高斯模型,并且用 EM 算法估计模型中的蚕食。测试:用高斯分布产生的 k 个高斯分布的数据。

用 k-means 聚类,测试效果。

用混合高斯模型和你实现的 EM 算法估计参数,看看每次迭代后似然值变化情况,管擦和 EM 算法是否可以获得正确结果。

应用:在 UCI 上找一个简单问题数据,用你实现的 GMM 进行聚类。

2.2 实验环境

Win10, x86-64

Pycharm 2019.1

python 3.7.1

使用 python 库: numpy (计算), sklearn(用于聚类验证), matplotlib.pyplot(用于可视化)

3 算法原理

3.1 k-means 聚类

K-Means 算法的思想很简单,对于给定的样本集,按照样本之间的距离大小,将样本集划分为 K 个簇。让簇内的点尽量紧密的连在一起,而让簇间的距离尽量的大。

k-means 聚类就是根据某种度量方式(常用欧氏距离,如欧氏距离越小,相关性越大),将相关性较大的一些样本点聚集在一起,一共聚成 k 个堆,每一个堆我们称为一 "类"。k-means 的过程为: 先在样本点中选取 k 个点作为暂时的聚类中心,然后依次计算每一个样本点与这 k 个点的距离,将每一个与距离这个点最近的中心点聚在一起,这样形成 k 个类 "堆",求每一个类的期望,将求得的期望作为这个类的新的中心点。一直不停地将所有样本点分为 k 类,直至中心点不再改变停止。

给定样本集 $D=\{\mathbf{x_1,x_2,\ldots,x_m}\}$ 和划分聚类的数量k,给出一个簇划分 $C=\{\mathbf{C_1,C_2,\ldots,C_k}\}$,使得该簇划分的**平方误差**E最小化,其中E如式(1)

$$E = \sum_{i=1}^{k} \sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{C_i}} ||\mathbf{x} - \mu_i||_2^2$$

$$\tag{1}$$

式(1)中, $\mu_{\mathbf{i}} = \frac{1}{|\mathbf{C}_{\mathbf{i}}|} \sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{C}_{\mathbf{i}}} \mathbf{x}$ 是簇 $\mathbf{C}_{\mathbf{i}}$ 的均值向量。E刻画了簇内样本的内聚的紧密程度,其值越小,则簇内样本的相似度越高。

3.2 GMM:

首先给出 维样本空间中的随机变量 服从高斯分布的密度函数:

$$p(\mathbf{x}|\mu,\Sigma) = rac{1}{(2\pi)^{rac{n}{2}}|\Sigma|^{rac{1}{2}}}exp\left(-rac{1}{2}(\mathbf{x}-\mu)^T\Sigma^{-1}(\mathbf{x}-\mu)
ight)$$

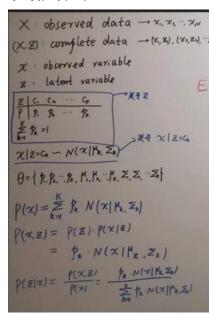
 $_{
m 其中}\;\mu=\{\mu_1,\mu_2,\ldots,\mu_n\}$ 为 n 维的均值向量, Σ 是 N*N 的协方差阵。 之后可以引出:

$$p_{\mathcal{M}} = \sum_{i=1}^k lpha_i p(\mathbf{x}|\mu_{\mathbf{i}}, \Sigma_i)$$

这个分布由 k 个混合成分构成,每个混合成分对应一个高斯分布。由 1->k 的系数 和为 1。

通常将 (α, Σ, μ) 记为 θ ,是高斯混合模型中的隐变量,由于隐变量的存在,高斯混合模型无法求出解析解,但是可以用 EM 算法迭代求解隐变量,并完成分类。

手写推导如下:



3.3 高斯混合模型参数估计的 EM 算法:

初始化响应度矩阵 γ , 协方差矩阵,均值和 α E步: 定义响应度矩阵 γ , 其中 γ jk 表示第 j 个样本属于第 k 类的概率,计算式如下

$$\gamma_{jk} = rac{lpha_k arphi(y_j| heta_k)}{\sum_{k=1}^K lpha_k arphi(y_j| heta_k)}, j=1,2,...,N; k=1,2,...,K$$

M 步: 将响应度矩阵视为定值, 更新均值, 协方差矩阵和 α

$$\mu_k = rac{\sum_{k=1}^{N} \gamma_{jk} y_j}{\sum_{j=1} N \gamma_{jk}}, k = 1, 2, ..., K$$

$$\Sigma_k = rac{\sum_{j=1}^{N} \gamma_{jk} (y - \mu_k) (y - \mu_k)^T}{\sum_{j=1}^{N} \gamma_{jk}}, k = 1, 2, .., K$$

重复: EM 步-直至收敛。

具体推到过程如下:

E-step

$$Q(\theta, \theta^{(\theta)}) = \int_{\mathbb{Z}} \log P(X, \mathbb{Z}|\theta) \cdot P(\mathbb{Z}|X, \theta^{(\theta)}) dX$$

$$= \int_{\mathbb{Z}} \sum_{i=1}^{N} \log P_{z_i} \cdot N(X_i | H_{z_i}, \Sigma_{z_i}) \cdot \frac{P_{z_i} \cdot N(X_i | H_{z_i}, \Sigma_{z_i})}{\sum_{k=1}^{N} N(X_i | H_{z_i}, \Sigma_{z_i})}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \sum_{i=1}^{N} \log P_{z_i} \cdot N(X_i | H_{z_i}, \Sigma_{z_i}) \cdot P(\mathbb{Z}_i | X_i, \theta^{(\theta)})$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \sum_{i=1}^{N} \log P_{z_i} \cdot N(X_i | H_{z_i}, \Sigma_{z_i}) \cdot P(\mathbb{Z}_i | X_i, \theta^{(\theta)})$$

$$= \sum_{k=1}^{N} \sum_{i=1}^{N} \log P_{z_i} \cdot N(X_i | H_{z_i}, \Sigma_{z_i}) \cdot P(\mathbb{Z}_i = G_i | X_i, \theta^{(\theta)})$$

$$= \sum_{k=1}^{N} \sum_{i=1}^{N} \log P_{z_i} \cdot N(X_i | H_{z_i}, \Sigma_{z_i}) \cdot P(\mathbb{Z}_i = G_i | X_i, \theta^{(\theta)})$$

$$= \sum_{k=1}^{N} \sum_{i=1}^{N} \log P_{z_i} \cdot N(X_i | H_{z_i}, \Sigma_{z_i}) \cdot P(\mathbb{Z}_i = G_i | X_i, \theta^{(\theta)})$$

$$= \sum_{k=1}^{N} \sum_{i=1}^{N} \log P_{z_i} \cdot N(X_i | H_{z_i}, \Sigma_{z_i}) \cdot P(\mathbb{Z}_i = G_i | X_i, \theta^{(\theta)})$$

$$= \sum_{k=1}^{N} \sum_{i=1}^{N} \log P_{z_i} \cdot N(X_i | H_{z_i}, \Sigma_{z_i}) \cdot P(\mathbb{Z}_i = G_i | X_i, \theta^{(\theta)})$$

$$= \sum_{k=1}^{N} \sum_{i=1}^{N} \log P_{z_i} \cdot N(X_i | H_{z_i}, \Sigma_{z_i}) \cdot P(\mathbb{Z}_i = G_i | X_i, \theta^{(\theta)})$$

$$= \sum_{k=1}^{N} \sum_{i=1}^{N} \log P_{z_i} \cdot N(X_i | H_{z_i}, \Sigma_{z_i}) \cdot P(\mathbb{Z}_i = G_i | X_i, \theta^{(\theta)})$$

M-step:

$$\theta^{(4n)} = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}} Q(\theta, \theta^{(4n)})$$

$$\overline{\chi} \; f_{k}^{(4n)}$$

$$\overline{\chi} \; f_{k}^{(4n)} = \underset{k=1}{\operatorname{argmax}} \underset{i=1}{\overset{K}{\sum}} \; \underset{k=1}{\overset{N}{\sum}} \; \underset{i=1}{\operatorname{log}} \; f_{k} \cdot P(\overline{z}_{i} = C_{k} \mid x_{i}, \theta^{(4)}), \; \text{s.t.} \; \underset{k=1}{\overset{K}{\sum}} \; f_{k} = 1$$

即每个高斯成分的混合系数由样本属于该成分的平均后验概率确定。

4 算法实现:

4.1 k-means 聚类实现:

算法步骤:

- 1. (随机)选择 K 个聚类的初始中心;
- 2.对任意一个样本点,求其到K个聚类中心的距离,将样本点归类到距离最小的中心的聚类, 如此迭代 n 次;
- 3.每次迭代过程中,利用均值等方法更新各个聚类的中心点(质心);
- 4.对 K 个聚类中心,利用 2,3 步迭代更新后,如果位置点变化很小(可以设置阈值),则认为 达到稳定状态, 迭代结束, 对不同的聚类块和聚类中心可选择不同的颜色标注。 优点:
- 1) 原理比较简单,实现也是很容易,收敛速度快。
- 2) 聚类效果较优。
- 3) 算法的可解释度比较强。
- 4) 主要需要调参的参数仅仅是簇数 k。

缺点:

- 1) K 值的选取不好把握
- 2) 对于不是凸的数据集比较难收敛
- 3) 如果各隐含类别的数据不平衡,比如各隐含类别的数据量严重失衡,或者各隐含类别的 方差不同,则聚类效果不佳。
- 4) 最终结果和初始点的选择有关,容易陷入局部最优。
- 5) 对噪音和异常点比较的敏感。

有关 k-means 的优化这里就不具体阐述了,下面介绍这次实验使用的两种方法。

4.1.1 随机选取样本作为初始均值向量

从样本 D 中随机选择 k 个样本作为初始化的假设均值向量 $\{\mu_1,\mu_2,\ldots,\mu_k\}$ 重复迭代直至收敛:

$$\Box$$
 1. 初始化 $\mathbf{C_i} = \emptyset, i = 1, 2, \ldots, k$

- 2. 对 $\mathbf{x_i}, j=1,2,\ldots,m$ 标记为 λ_i ,使得 $\lambda_i=\mathbf{arg}\ \mathbf{min}_i||\mathbf{x_i}-\mu_i||$,即使得每个 $\mathbf{x_i}$ 都是属 于距离其最近的均值向量所在的簇
- 3. 将样本 $\mathbf{x_j}$ 划分到相应的簇 $\mathbf{C}_{\lambda \mathbf{j}} = \mathbf{C}_{\lambda \mathbf{j}} \cup \{\mathbf{x_j}\}$ 4. 重新计算每个簇的均值向量 $\hat{\mu_i} = \frac{1}{|\mathbf{C_i}|} \sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{C_i}} \mathbf{x}$
- 5. 如果对于所有的 $i\in 1,2,\ldots,k$,均有 $\hat{\mu_{\mathbf{i}}}=\mu_{\mathbf{i}}$,则终止迭代;否则将重新赋值 $\mu_{\mathbf{i}}=\hat{\mu_{\mathbf{i}}}$ 进 行迭代

这样产生的聚类结果会严重依赖于初始化的中心,所以如果初始化的中心不算很好的时候, 可能会产生局部最优解。

4.1.2 利用最大化初始均值向量之间距离方式进行选择

因此用如下算法进行优化:

- 首先随机选择一个样本作为均值向量
- 进行迭代,直到选择到k个均值向量:
 - 。 假设当前已经选择到i个均值向量 $\{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_i\}$,则在D $\{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_i\}$ 选择距离已选出的i个均值向量距离最远的样本
 - 。 将其加入初始均值向量,得到 $\{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_i, \mu_{i+1}\}$ 通过这种初始化均值向量的方式,能够有效降低初始簇中心的"集中程度",在一定程度上避免结果陷入局部最优解。

4.2 GMM 算法实现

GMM 因为隐变量的存在,无法求出解析解,所以 EM 算法进行迭代优化求解是一种十分"优美"的解决方式,其中每次迭代---先根据当前参数计算每个样本数据每个高斯分布的后验概率(E-step),之后进行参数的更新(M-step)。

给定样本集 D 和高斯混合成分数 k:

- 1: 随机初始化参数
- 2: 迭代到(迭代次数或者参数值不变化) E/M
- 3: 加入相对应簇

5: 实验结果分析:

5.1: 按照生成的数据测试

在生成数据的时候,我们使用的是二维空间的数据,便于数据可视化;利用高斯分布,按照给定的均值生成相对应的数据。

5.1.1 在上述 K-means 用两种方法设置初始值对比

因为上面已经阐述了相关的情况,如果初始值随机选取,会产生局部最优解的情况, 使得聚类的效果变得很差-----解决方法便是重新运行即可。

K-Means:randomlyK-Means:max distances 4 2 -1 1 2 2 0 0 -3 3 × center center -2 -2 -2 -

2.5

-2.5

左面的图便是随机选取的,可以观察到由于初始中心的问题,产生了局部最优解的情况,聚类的结果与实际相差甚远。

0.0

2.5

作为对比的右图,便是采用了选择最远的 k 个初始化中心,将产生的点有效的分为实际的三种聚类。

解决方法: 优化方法可以二分-k-means 即可, 亦或者重新运行随机取初始中心簇。

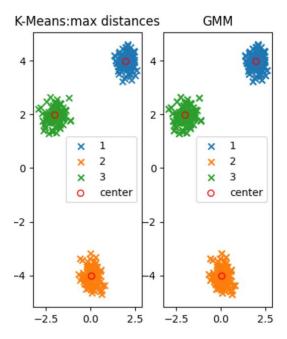
5.1.2 K-means AND GMM

-4

-2.5

采用相同的二维数据,两种方法对比结果如下:

0.0



如上图所示:两种方法在生成数据的表现类似,可以实现想要的结果。

EM 的参数如下:

```
cov:[[[ 1.30173831 -0.00645367]
   [-0.00645367 0.73356964]]
 [[ 0.84010918  0.30144325]
[ 0.30144325  1.41324357]]
 [[ 1.02343547 -0.20477765]
[-0.20477765 1.02313077]]
 [[ 0.79549756  0.33641743]
[ 0.33641743  1.10474447]]]
```

与库函数的聚类进行对比, 差距不大。

5.2 UCI 数据测试

这里使用的 UCI 数据是 Github 上学长的数据,有关鸢尾花,其中包括(花萼长度、花 萼宽度、花瓣长度、花瓣宽度)--来预测属于哪一种聚类(共三种)。 将测试产生的结果与原数据 label 进行对比,得出正确率:

0.7888888812888

除此之外,在 GMM 算法中会产生迭代变化,GMM 初始参数的初始化与 k-means 类似,选取 k 个距离最远的均值,协方差初始化为 N*N 的对角阵,对角元素为 0.1,可 以观察到似然值随着迭代次数的增多而变大。

6 结论分析

- 1: GMM-EM 以及 k-means 算法可以达到很高的准确度,与库函数的聚类算法非常接近。
- 2: 有关 k-means 的随机取初始簇中心,会产生局部最优解,我们可以通过一些求均值或者 使用最大化初始均值向量改良寻找初始点来尽量减少这种影响。除此之外, GMM-EM 对初 始值也比较敏感,某些值的时候也会使得聚类结果比较奇怪,我们可以用 k-means 的结果作 为初值。

3: K-means 与 GMM 进行对比:

我们其实可以吧 K-means 看作一种比较特殊的 GMM,假设每种聚类在样本中出现的概率都一样=1/K(高斯模型中的每一个变量是独立的,and 变量间的协方差矩阵是对角阵),因此欧氏距离作为 K-means 的协方差去衡量相似性;

K-means 对其中系数做了简化,对于样本来说,每一个样本都只属于一个类, if 属于,则系数为 1,其余都为 0.

对于 GMM,每个类的数据出现在样本中的概率为 a,用协方差代替上述的欧氏空间去度量相似度,系数也由 0.1 变成了所谓的全概率公式计算。

GMM 没有增加 k-means 那麽多的假设,分类比 k-means 优秀,但是容易被噪声影响,作为优化算法更好。

7参考文献:

统计学习方法-李航 西瓜书-周志华

8源代码:

```
'''读取数据'''
import numpy as np
import pandas as pd
import itertools

class IrisProcessing(object):
    def __init__(self):
        self.data_set = pd.read_csv("./iris.csv")
        # self.data_set['class'] = self.data_set['class'].map(
        # {'Iris-setosa': 1, 'Iris-versicolor': 2, 'Iris-virginica': 3}).astype(int)
        self.x = self.data_set.drop('class', axis=1)
        self.y = self.data_set['class']
        self.classes = list(itertools.permutations(['Iris-setosa', 'Iris-versicolor', 'Iris-virginica'], 3))

def get_data(self):
    return np.array(self.x, dtype=float)

def acc(self, y_label):
    """ 用于测试聚类的正确率 """
    number = len(self.y)
    counts = []
```

```
for i in range(len(self.classes)):
    count = 0
    for j in range(number):
        if self.y[j] == self.classes[i][y_label[j]]:
            count += 1
    counts.append(count)
    return np.max(counts) * 1.0 / number
```

```
import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt
```

```
def generate data(sample means, sample number, number k):
   :argument number k k 类
   :argument sample means k 类数据的均值 以 list 的形式给出 如[[1, 2],[-1,
   :argument sample number k 类数据的数量 以list的形式给出 如[10, 20, 30]
          sample data.append(np.random.multivariate normal(
means = [[2, 4], [0, -4], [-2, 2]]
number = [100, 100, 100]
data = generate data(means, number, k)
km = k means.KMeans(data, k)
mu random, c random = km.k means random center()
mu normal, c normal = km.k means not random center()
plt.title("K-Means:randomly")
plt.scatter(mu_random[:, 0], mu_random[:, 1], facecolor="none",
```

```
plt.legend()
plt.subplot(132)
plt.title("K-Means:max distances")
plt.scatter(mu normal[:, 0], mu normal[:, 1], facecolor="none",
plt.legend()
gmm = GMM.GaussianMixtureModel(data, k=k)
mu gmm, c gmm = gmm.predict()
plt.subplot(133)
plt.title("GMM")
plt.scatter(mu gmm[:, 0], mu gmm[:, 1], facecolor="none",
plt.legend()
plt.show()
iris = read.IrisProcessing()
iris data = iris.get data()
0.8166666666666
gmm iris = GMM.GaussianMixtureModel(iris data, k)
mu iris, c iris = gmm iris.predict()
print(mu iris)
km iris = k means.KMeans(iris data, 3)
km mu iris, km c iris = km iris.k means not random center()
print(km mu iris)
print(iris.acc(km iris.sample assignments))
# TODO 对iris 数据集,使用 GMM 得到的正确率低于使用 k-means 正确率
```

```
import numpy as np
import collections
```

```
temp ans.append(np.sum([self. euclidean distance(
mu.append(self.data[np.argmax(temp ans)])
c = collections.defaultdict(list)
   c[lambda j].append(self.data[i].tolist())
```

```
import numpy as np
import random
from scipy.stats import multivariate_normal
import collections

class GaussianMixtureModel(object):
    """ 高斯混合聚类 EM 算法 """

def __init__(self, data, k=3, delta=1e-12, max_iteration=1000):
    self.data = data
    self.k = k
    self.delta = delta
    self.max_iteration = max_iteration
    self.data_rows, self.data_columns = self.data.shape
    self.__alpha = np.ones(self.k) * (1.0 / self.k)
    self.__mu, self.__sigma = self.__init_params()
```

```
self.c = collections.defaultdict(list)
def euclidean distance(x1, x2):
          temp ans.append(np.sum([self. euclidean distance(
      mu.append(self.data[np.argmax(temp ans)])
def __init_params(self):
```

```
return likelihoods
  def expectation(self):
     print(np.log(np.prod(sum likelihoods))) # 输出似然值
self.c[self.sample assignments[i]].append(self.data[i].tolist())
         gamma = np.expand dims(self. gamma[:, i], axis=1) # 提取
  def converged(self):
      # 迭代终止条件 参数 sigma mu 和 alpha 几乎不变化
     if diff > self.delta:
```

```
else:
    return True

def predict(self):
    print("GMM")
    for i in range(self.max_iteration):
        print(i)
        self.__expectation()
        self.__maximization()
        if self.__converged():
            break

self.__expectation()
    return self.__mu, self.c
```