机器学习导论 (2016 春季学期)

九、聚类

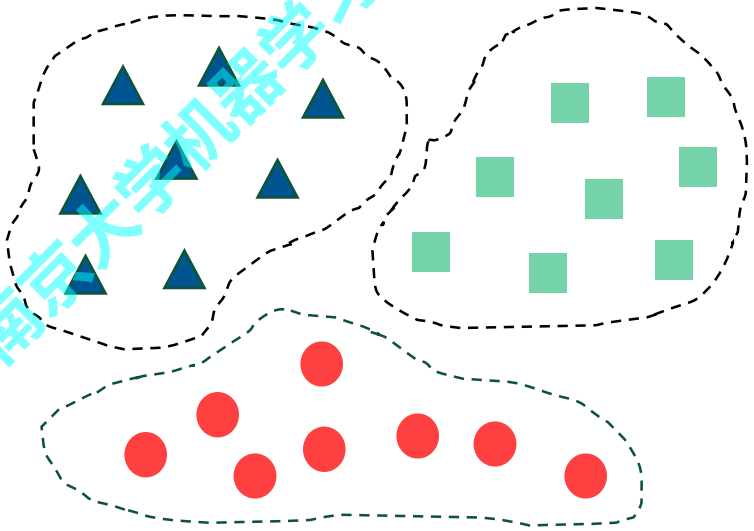
主讲教师：周志华

聚类 (Clustering)

在“无监督学习”任务中研究最多、应用最广

目标：将数据样本划分为若干个通常不相交的“簇”(cluster)

既可以作为一个单独过程（用于找寻数据内在的分布结构）
也可作为分类等其他学习任务的前驱过程



性能度量

聚类性能度量，亦称聚类“有效性指标”(validity index)

- 外部指标 (external index)

  将聚类结果与某个“参考模型”(reference model) 进行比较

  如 Jaccard 系数，FM 指数，Rand 指数

- 内部指标 (internal index)

  直接考察聚类结果而不用任何参考模型

  如 DB 指数，Dunn 指数等

基本想法：

- “簇内相似度”（intra-cluster similarity）高，且
- “簇间相似度”（inter-cluster similarity）低

距离计算

距离度量 (distance metric) 需满足的基本性质：

非负性: $\mathrm{dist}(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) \geqslant 0$;

同一性: $\mathrm{dist}(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = 0$ 当且仅当 $\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{x}_j$;

对称性: $\mathrm{dist}(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \mathrm{dist}(\boldsymbol{x}_j, \boldsymbol{x}_i)$;

直递性: $\mathrm{dist}(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) \leqslant \mathrm{dist}(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_k) + \mathrm{dist}(\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{x}_j)$.

常用距离形式：

闵可夫斯基距离 (Minkowski distance)

$$\mathrm{dist}_{\mathrm{mk}}(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \left(\sum_{u=1}^{n} |x_{iu} - x_{ju}|^p \right)^{\frac{1}{p}}$$

$p = 2$: 欧氏距离(Euclidean distance)

$p = 1$: 曼哈顿距离(Manhattan distance)

距离计算(续)

- 对无序(non-ordinal)属性，可使用 VDM (Value Difference Metric)

  令 $m_{u,a}$ 表示属性 u 上取值为 a 的样本数，$m_{u,a,i}$ 表示在第 i 个样本簇中在属性 u 上取值为 a 的样本数，k 为样本簇数，则属性 u 上两个离散值 a 与 b 之间的 VDM 距离为

$$VDM_p(a,b) = \sum_{i=1}^{k} \left| \frac{m_{u,a,i}}{m_{u,a}} - \frac{m_{u,b,i}}{m_{u,b}} \right|^p$$

- 对混合属性，可使用 MinkovDM

$$\mathrm{MinkovDM}_p(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \left(\sum_{u=1}^{n_c} |x_{iu} - x_{ju}|^p + \sum_{u=n_c+1}^{n} \mathrm{VDM}_p(x_{iu}, x_{ju}) \right)^{\frac{1}{p}}$$

必须记住

聚类的“好坏”不存在绝对标准

the goodness of clustering depends on the opinion of the user

故事一则

聚类的故事：

老师拿来苹果和梨，让小朋友分成两份。

小明把大苹果大梨放一起，小个头的放一起，老师点头，恩，体量感。

小芳把红苹果挑出来，剩下的放一起，老师点头，颜色感。

小武的结果？不明白。小武掏出眼镜：最新款，能看到水果里有几个籽，左边这堆单数，右边双数。

老师很高兴：新的聚类算法诞生了

聚类也许是机器学习中“新算法”出现最多、最快的领域
总能找到一个新的“标准”，使以往算法对它无能为力

常见聚类方法

- 原型聚类
  - 亦称“基于原型的聚类”(prototype-based clustering)
  - 假设：聚类结构能通过一组原型刻画
  - 过程：先对原型初始化，然后对原型进行迭代更新求解
  - 代表：k均值聚类，学习向量量化(LVQ)，高斯混合聚类
- 密度聚类
  - 亦称“基于密度的聚类”(density-based clustering)
  - 假设：聚类结构能通过样本分布的紧密程度确定
  - 过程：从样本密度的角度来考察样本之间的可连接性，并基于可连接样本不断扩展聚类簇
  - 代表：DBSCAN, OPTICS, DENCLUE
- 层次聚类 (hierarchical clustering)
  - 假设：能够产生不同粒度的聚类结果
  - 过程：在不同层次对数据集进行划分，从而形成树形的聚类结构
  - 代表：AGNES (自底向上)，DIANA (自顶向下)

k-means

每个簇以该簇中所有样本点的“均值”表示

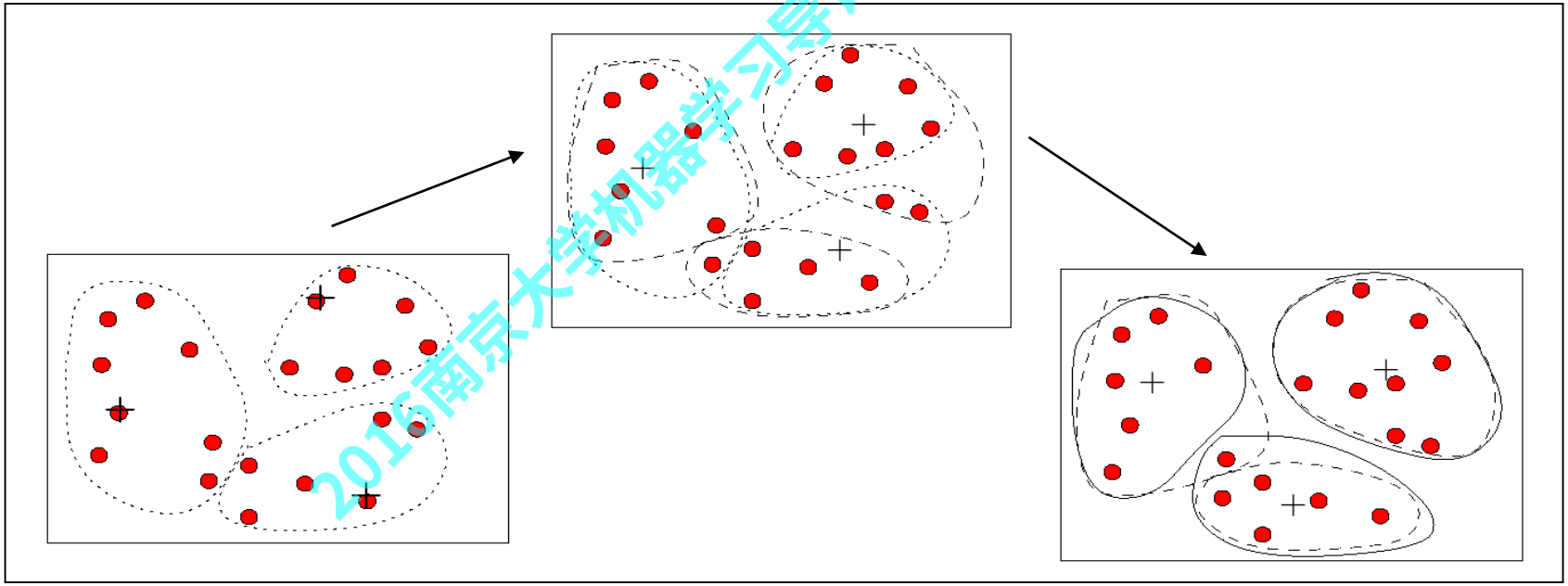
若不以均值向量为原型，而是以距离它最近的样本点为原型，则得到 k-medoids算法

Step1: 随机选取k个样本点作为簇中心

Step2: 将其他样本点根据其与簇中心的距离，划分给最近的簇

Step3: 更新各簇的均值向量，将其作为新的簇中心

Step4: 若所有簇中心未发生改变，则停止；否则执行 Step 2



学习向量量化 (Learning Vector Quantization, LVQ)

也是试图找到一组原型向量来刻画聚类结构，但假设数据样本带有类别标记

实际上是通过聚类来形成类别的“子类”结构，每个子类对应一个聚类簇

输入： 样本集 $D = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \ldots, (\boldsymbol{x}_m, y_m)\}$;
原型向量个数 q, 各原型向量预设的类别标记 $\{t_1, t_2, \ldots, t_q\}$;
学习率 $\eta \in (0, 1)$.

过程：

初始化一组原型向量 $\{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots, \boldsymbol{p}_q\}$
repeat
  从样本集 D 随机选取样本 $(\boldsymbol{x}_j, y_j)$;
  计算样本 $\boldsymbol{x}_j$ 与 $\boldsymbol{p}_i$ $(1 \leqslant i \leqslant q)$ 的距离: $d_{ji} = ||\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{p}_i||_2$;
  找出与 $\boldsymbol{x}_j$ 距离最近的原型向量 p_{i^*}, $i^* = \arg\min_{i \in \{1,2,\ldots,q\}} d_{ji}$;
  if $y_j = t_{i^*}$ **then**
    $\boldsymbol{p}' = \boldsymbol{p}_{i^*} + \eta \cdot (\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{p}_{i^*})$ $\boldsymbol{x}_j$ 与 $\boldsymbol{p}_{i^*}$ 的类别相同
  else
    $\boldsymbol{p}' = \boldsymbol{p}_{i^*} - \eta \cdot (\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{p}_{i^*})$ $\boldsymbol{x}_j$ 与 $\boldsymbol{p}_{i^*}$ 的类别不同
  end if
  将原型向量 $\boldsymbol{p}_{i^*}$ 更新为 $\boldsymbol{p}'$
until 满足停止条件

输出： 原型向量 $\{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots, \boldsymbol{p}_q\}$

高斯混合聚类 (Gausian Mixture Clustering, GMM)

采用概率模型来表达聚类原型

n 维样本空间中的随机向量 $\boldsymbol{x}$ 若服从高斯分布，则其概率密度函数为

$$p(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})}$$

假设样本由下面这个高斯混合分布生成：

生成式模型

$$p_{\mathcal{M}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \cdot p(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)$$

- 根据 $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_k$ 定义的先验分布选择高斯混合成分，其中 α_i 为选择第 i 个混合成分的概率；
- 然后，根据被选择的混合成分的概率密度函数进行采样，从而生成相应的样本

高斯混合聚类（续）

样本 $\boldsymbol{x}_j$ 由第 i 个高斯混合成分生成的后验概率为：

$$p_{\mathcal{M}}(z_j = i \mid \boldsymbol{x}_j) = \frac{P(z_j = i) \cdot p_{\mathcal{M}}(\boldsymbol{x}_j \mid z_j = i)}{p_{\mathcal{M}}(\boldsymbol{x}_j)} = \frac{\alpha_i \cdot p(\boldsymbol{x}_j \mid \boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)}{\sum_{l=1}^{k} \alpha_l \cdot p(\boldsymbol{x}_j \mid \boldsymbol{\mu}_l, \boldsymbol{\Sigma}_l)}$$

简记为 γ_{ji} $(i = 1, 2, \ldots, k)$

参数估计可采用极大似然法，考虑最大化对数似然

$$LL(D) = \ln \left(\prod_{j=1}^{m} p_{\mathcal{M}}(\boldsymbol{x}_j) \right) = \sum_{j=1}^{m} \ln \left(\sum_{i=1}^{k} \alpha_i \cdot p(\boldsymbol{x}_j \mid \boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i) \right)$$

EM 算法：

- (E步) 根据当前参数计算每个样本属于每个高斯成分的后验概率 γ_{ji}
- (M步) 更新模型参数 $\{(\alpha_i, \boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i) \mid 1 \leqslant i \leqslant k\}$

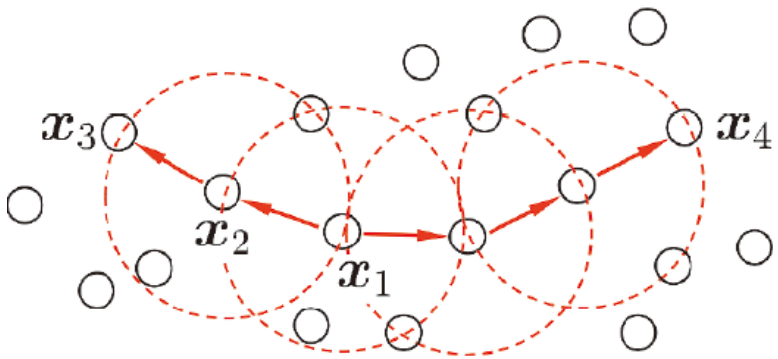
DBSCAN

关键概念：

- 核心对象(core object)：若 $\boldsymbol{x}_j$ 的 ϵ-邻域至少包含 $MinPts$ 个样本，即 $|N_\epsilon(\boldsymbol{x}_j)| \geqslant MinPts$，则 $\boldsymbol{x}_j$ 是一个核心对象；
- 密度直达(directly density-reachable)：若 $\boldsymbol{x}_j$ 位于 $\boldsymbol{x}_i$ 的 ϵ-邻域中，且 $\boldsymbol{x}_i$ 是核心对象，则称 $\boldsymbol{x}_j$ 由 $\boldsymbol{x}_i$ 密度直达；
- 密度可达(density-reachable)：对 $\boldsymbol{x}_i$ 与 $\boldsymbol{x}_j$，若存在样本序列 $\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots, \boldsymbol{p}_n$，其中 $\boldsymbol{p}_1 = \boldsymbol{x}_i$，$\boldsymbol{p}_n = \boldsymbol{x}_j$ 且 $\boldsymbol{p}_{i+1}$ 由 $\boldsymbol{p}_i$ 密度直达，则称 $\boldsymbol{x}_j$ 由 $\boldsymbol{x}_i$ 密度可达；
- 密度相连(density-connected)：对 $\boldsymbol{x}_i$ 与 $\boldsymbol{x}_j$，若存在 $\boldsymbol{x}_k$ 使得 $\boldsymbol{x}_i$ 与 $\boldsymbol{x}_j$ 均由 $\boldsymbol{x}_k$ 密度可达，则称 $\boldsymbol{x}_i$ 与 $\boldsymbol{x}_j$ 密度相连.

令$MinPts = 3$，
虚线显示出ϵ 邻域
x_1 是核心对象

x_2 由 x_1 密度直达
x_3 由 x_1 密度可达
x_3 与 x_4 密度相连

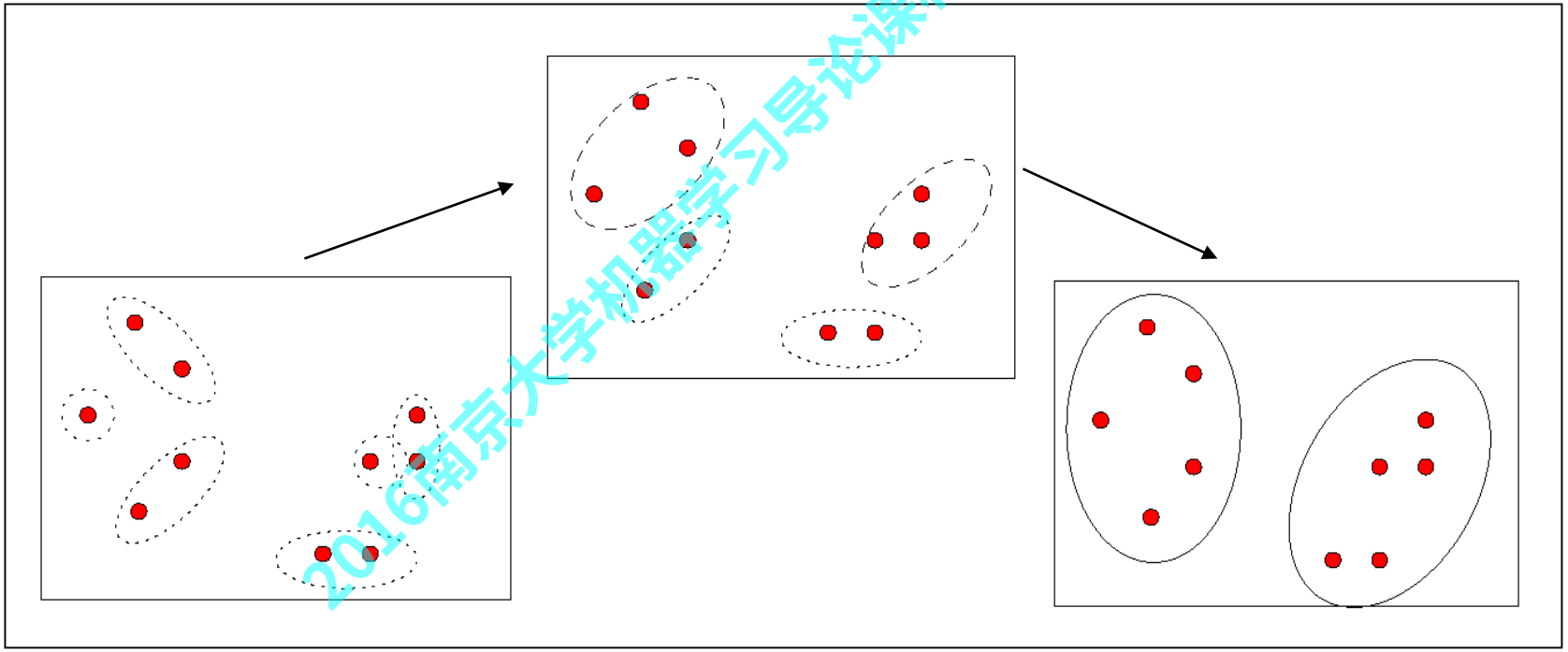


AGNES (AGglomerative NESting)

Step1: 将每个样本点作为一个簇

Step2: 合并最近的两个簇

Step3: 若所有样本点都存在与一个簇中，则停止；否则转到 Step2



AGNES

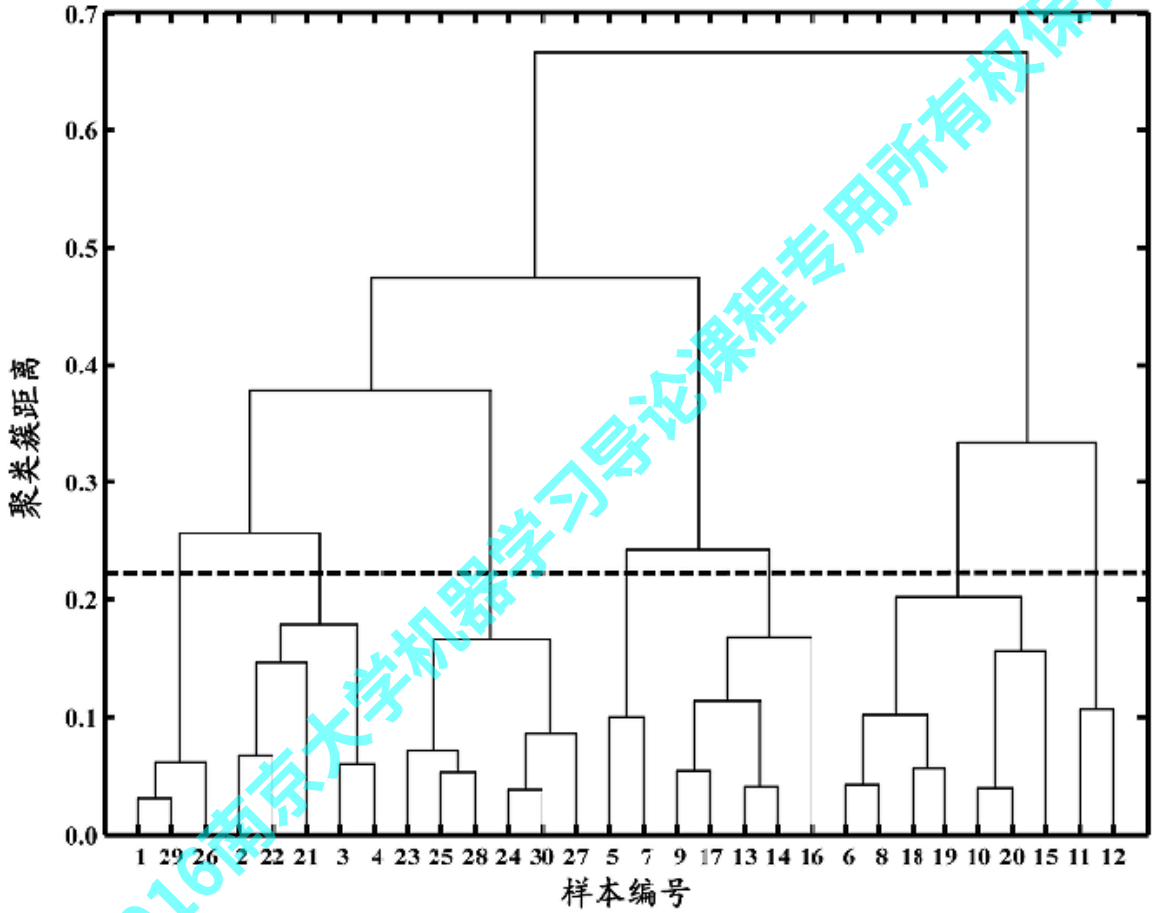


图 9.12 西瓜数据集 4.0 上 AGNES 算法生成的树状图(采用 $d_{\max}$). 横轴对应于样本编号, 纵轴对应于聚类簇距离.

前往第十站……