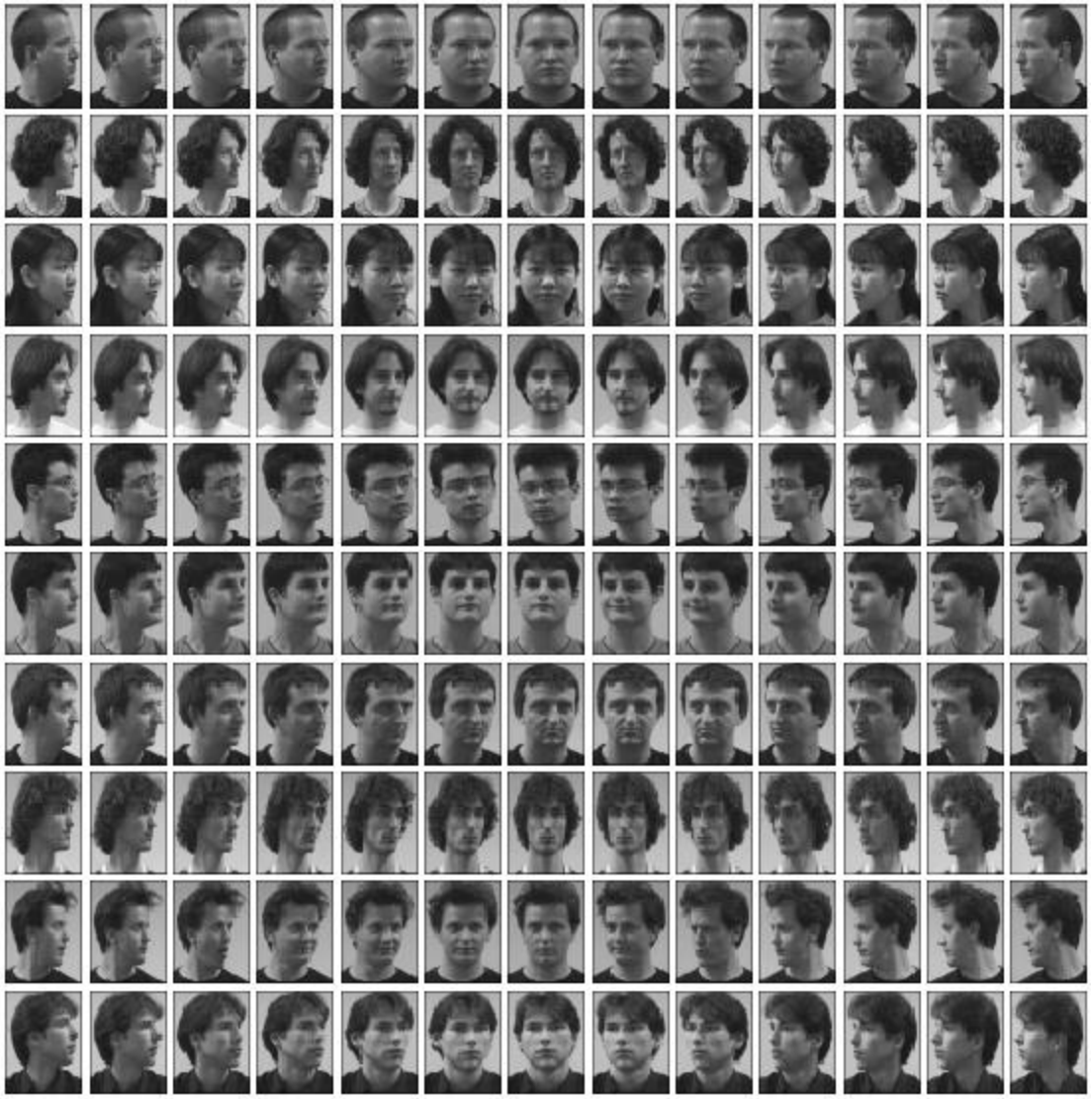
第8章第1讲
数据聚类
Data Clustering

向 世 明
smxiang@nlpr.ia.ac.cn

助教：杨学行(xhyang@nlpr.ia.ac.cn); 吴一超(yichao.wu@nlpr.ia.ac.cn)

8.1 引言

- 聚类
  - 物以类聚，人以群分。
  - 将数据分成多个类别，在同一个类内，对象（实体）之间具有较高的相似性，不同类对象之间的差异性较大。
  - 对一批没有类别标签的样本集，按照样本之间的相似程度分类，相似的归为一类，不相似的归为其它类。这种分类称为**聚类分析**，也称为无监督分类。
  - 聚类的质量(或结果)取决于对度量标准的选择。
  - 聚类结果因不同任务而不同。



身份识别 vs 姿态估计

8.1 引言

- 聚类任务
  - 给定一个样本集合 X，给定一种度量样本间相似度或者相异度（距离）的标准。聚类系统的输出是关于样本集 X 的一个划分，即 $D = \{D_1 \cup D_2 \cup \ldots \cup D_k\}$。其中，$D_i$ (i=1,2,…,k)是 X 的一个子集，且满足：
    - $D_1 \cup D_2 \cup \ldots \cup D_k = X$
    - $D_i \cap D_j = \varnothing, \quad i \neq j$
  - D 中成员 $D_1, D_2, \ldots, D_k$ 叫做类或者簇(cluster)，每个类都是通过一些特征来描述的：
    - 通过类中心或者类的边界点来表示；
    - 使用**聚类树**采用图形化方式来表示。

8.1 引言

- **聚类方法分类**
  - **按照聚类标准**
    - 统计聚类方法：基于全局数据的聚类，即从全体样本中通过距离比较，获得聚类中心。主要采用欧氏距离度量、马氏距离度量等。
    - 概念聚类方法：聚类时不采用几何距离，主要根据对概念的描述来确定。
  - **按聚类所处理的数据类型**
    - **数值型**数据聚类、**离散型**数据聚类、**混合型**数据聚类。

8.1 引言

- 聚类方法分类
  - 按照度量准则
    - 基于距离的聚类方法：基于各种不同的距离或者相似性来度量点对之间的关系，如K-means等。
    - 基于密度的聚类方法：基于合适的密度函数来对样本进行聚类。
    - 基于连通性的聚类方法：主要包含**基于图**的方法。高度连通的数据通常被聚为一簇，如谱聚类。

8.1 引言

- 聚类方法分类
  - 按照不同的技术路线
    - 划分法：采用一定的规则对数据进行划分，如K-means等。
    - 层次法：对给定样本进行层次划分，如层级聚类。
    - 密度法：对数据的密度进行评价，如高斯混合模型。
    - 网格法：将数据空间划分为有限个单元网络结构，然后基于网络结构进行聚类
    - 模型法：**为每一个簇引入一个模型，然后对数据进行划分，使其满足各自分派的模型。**

8.2 距离与相似性度量

- 距离
  - 设有 d 维空间的三个样本**x**，**y** 和 **z**，记 $d(.,.)$为一个 $R^d \times R^d \rightarrow R$的映射，如满足如下几个条件则称$d(.,.)$为一个距离:
    - $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \geq 0$ 非负性
    - $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 0$ 自相似性
    - $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = d(\mathbf{y}, \mathbf{x})$ 对称性
    - $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq d(\mathbf{x}, \mathbf{z}) + d(\mathbf{z}, \mathbf{y})$ 三角不等式
  - 距离可以描述一对点之间的相异程度，距离越大，两个点越不相似；距离越小，两个点越相似。

8.2 距离与相似性度量

- 距离
  - 设$\mathbf{x}, \mathbf{y} \in R^d$，Minkowski 距离度量定义如下：

$$d(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \left(\sum_{i=1}^{d} |x_i - y_i|^q \right)^{\frac{1}{q}}$$

$$d(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{d} |x_i - y_i|$$

城区距离

曼哈顿距离

$$d(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{d} |x_i - y_i|^2}$$

欧氏距离

$$d(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \max_{1 \le i \le d} |x_i - y_i|$$

切比雪夫距离

8.2 距离与相似性度量

- 距离
  - 设$\mathbf{x}, \mathbf{y} \in R^d$， 马氏 (Mahalanobis) 距离定义如下：

$$d(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sqrt{(\mathbf{x}-\mathbf{y})^T \mathbf{M}(\mathbf{x}-\mathbf{y})}$$

其中，$\mathbf{M}$是半正定矩阵。

  - $\mathbf{M}$为单位矩阵时，退化为欧氏距离度量。
  - $\mathbf{M}$为对角矩阵时，退化为特征加权欧氏距离

8.2 距离与相似性度量

- 相似性
  - 设$\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathrm{R}^d$， 余弦相似度定义如下：

$$s(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\sum_{i=1}^{d} x_i y_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^{d} x_i^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{d} y_i^2}}$$

(两个模为1的向量之内积)

8.2 距离与相似性度量

- 相似性
  - 设$\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathrm{R}^d$，其每维特征只取{0,1}中的一个值。为了定义数据点之间的距离，通常先计算出如下几个值：
    - f_{00}：样本 **x** 和 **y** 中满足 $x_i=y_i=0$ 的属性的个数
    - f_{10}：样本 **x** 和 **y** 中满足 $x_i=1\&y_i=0$ 的属性的个数
    - f_{01}：样本 **x** 和 **y** 中满足 $x_i=0\&y_i=1$ 的属性的个数
    - f_{11}：样本 **x** 和 **y** 中满足 $x_i=y_i=1$ 的属性的个数
  - 进一步，可以定义如下几种类型的相似性度量：

8.2 距离与相似性度量

- 相似性
  - 简单匹配系数(simple matching coefficient, SMC):

$$s_{SMC}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{f_{00}+f_{11}}{f_{00}+f_{10}+f_{01}+f_{11}}$$

  - **Jaccard 相似系数:**

$$s_J(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{f_{11}}{f_{10}+f_{01}+f_{11}}$$

  - **Tanimoto系数:**

$$s_T(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\mathbf{x}^T\mathbf{y}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}+\mathbf{y}^T\mathbf{y}-\mathbf{x}^T\mathbf{y}} = \frac{f_{11}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}+\mathbf{y}^T\mathbf{y}-f_{11}}$$

x取1的个数　　**y**取1的个数

8.2 距离与相似性度量

- **举例：**计算如下两位顾客的相似度：

商品	面包	啤酒	牛奶	咖啡	茶叶	鸡蛋	猪肉	牛肉	洋葱	土豆	大米	白糖
x	1	1	1	1	0	0	0	1	1	1	0	1
y	1	0	1	0	0	1	0	0	0	1	1	1

商品	莲藕	花生	可乐	豆腐	菠菜	黄瓜	面粉	酱油	辣椒	白酒	黄鱼	茄子
x	0	0	1	0	1	1	1	0	1	1	1	0
y	0	0	1	1	1	1	1	1	0	0	1	0

8.2 距离与相似性度量

- **类间距离：**
  - **最短距离法：**定义两个类中最近的两个样本的距离为类间距离。

$$d(D_a, D_b) = \min\{d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mid \mathbf{x} \in D_a, \mathbf{y} \in D_b\}$$

  - **最长距离法：**定义两个类中最远的两个样本的距离为类间距离。

$$d(D_a, D_b) = \max\{d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mid \mathbf{x} \in D_a, \mathbf{y} \in D_b\}$$

- **类直径：**类直径反映类中样本之间的差异，可定义为类中各样本至类中心点的欧氏距离平方和：

$$r(D_a) = \sum_{\mathbf{x} \in D_a} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})^T (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}))$$

8.3 混合密度函数及参数可辨识性

- **目标－利用样本估计密度中的一些参数**
  - 混合密度估计可为数据聚类提供方法论上的指导。
- **假定：**
  - 样本来自于 c 个不同类别， c 是已知的。
  - 每一个类出现的先验概率 $P(\omega_j)$ 是已知的, $j = 1, 2, \ldots, c$。
  - 类条件概率密度函数 $p(\mathbf{x}|\omega_j, \theta_j)$ 的形式是已知的。
  - c 个参数向量 $\boldsymbol{\theta}_j$, $j = 1, 2, \ldots, c$, 是未知的。
  - 样本的类别标签也是未知的。
- **样本的生成过程：** 首先通过类先验概率 $P(\omega_j)$ 随机选择一个类别，然后通过类条件概率密度函数 $p(\mathbf{x}|\omega_j, \boldsymbol{\theta}_j)$ 随机选择一个样本。

8.3 混合密度函数及参数可辨识性

- 设总体样本的概率密度函数为：

混合比例

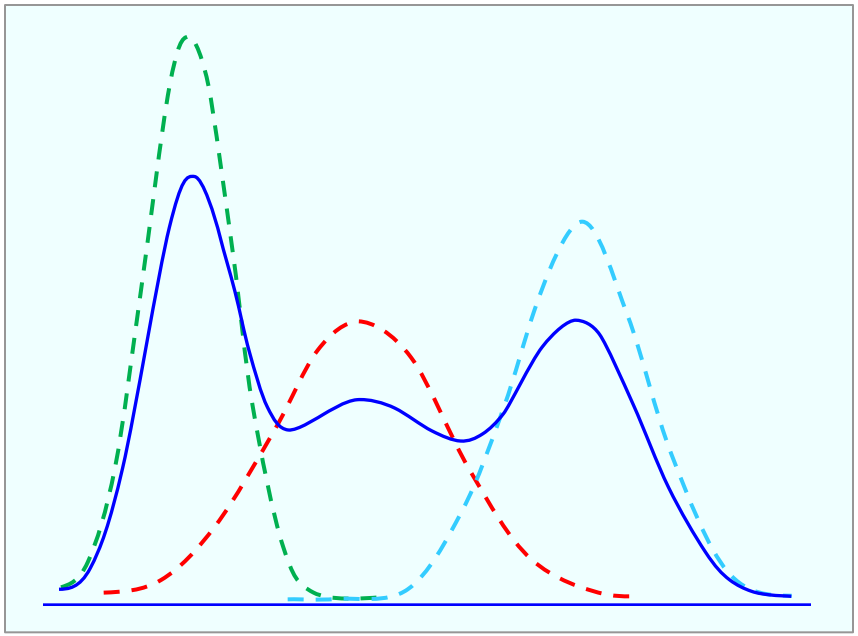
$$p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}|\omega_j, \boldsymbol{\theta}_j) \boxed{P(\omega_j)}$$

其中，$\boldsymbol{\theta}=\{\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \ldots, \boldsymbol{\theta}_c\}$。称上述密度函数为**混合密度**；称条件概率密度函数 $p(\mathbf{x}|\omega_j, \boldsymbol{\theta}_j)$ 为**成分密度**；称先验概率为**混合参数**。此处主要考察参数 $\boldsymbol{\theta}$。

基本任务：估计 $\boldsymbol{\theta}$。一旦 $\boldsymbol{\theta}$ 得到估计，可以将上述混合密度分解为多个已知的密度成分，并且可以采用最大化后验概率来确定样本的类别。

8.3 混合密度函数及参数可辨识性

- 举例：一维高斯混合模型：



三个高斯分布的混合

8.3 混合密度函数及参数可辨识性

- **θ参数的可辨识性**
  - 一个密度函数 $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})$ 对参数 $\boldsymbol{\theta}$ 是可辨识的，如果 $\boldsymbol{\theta} \neq \boldsymbol{\theta}'$ 意味着一定存在一个样本使 $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}) \neq p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}')$。
  - 一个密度函数 $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})$ 对参数 $\boldsymbol{\theta}$ 是不可辨识的，如果我们不能估计一个唯一的 $\boldsymbol{\theta}$，即使我们采用无穷多样本。
  - 密度函数中任何一个参数都不可辨识，则称其为完全不可辨识。
  - 参数 $\boldsymbol{\theta}$ 的可辨识性是与模型相关的，是模型的一个属性。
  - **采用混合密度函数来对数据的分布进行描述具有一定的普遍性。但是，这条道路通常并不是完全可行的。**原因就在于一些混合密度函数中的参数是完全不可辨识的。

8.3 混合密度函数及参数可辨识性

- 参数不可辨识-例子
  - 设样本只取{0, 1}中的一个值，且具有如下密度函数：

$$p(x|\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}\theta_1^x(1-\theta_1)^{1-x} + \frac{1}{2}\theta_2^x(1-\theta_2)^{1-x}$$

$$= \begin{cases} \frac{1}{2}(\theta_1+\theta_2), & \text{if } x=1 \\ 1-\frac{1}{2}(\theta_1+\theta_2), & \text{if } x=0 \end{cases}$$

比如，已知 $p(x=1|\boldsymbol{\theta}) = 0.6$，则$p(x=0|\boldsymbol{\theta})=0.4$。根据上述密度函数，至多 可得 $\theta_1+\theta_2=1.2$，得不到 θ_1 和 θ_2的具体值。

8.3 混合密度函数及参数可辨识性

- 参数可辨识-例子
  - 如果每一个成分都为正态分布，则混合密度参数通常是可辨识的。但当 $P(\omega_1)=P(\omega_2)$ 时，交换 $\boldsymbol{\theta}_1$和 $\boldsymbol{\theta}_2$ 时，概率不受影响 (但通常也能知道簇所属的成分)：

$$p(x|\boldsymbol{\theta})=\frac{P(\omega_1)}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}(x-\theta_1)^2\right)+\frac{P(\omega_2)}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}(x-\theta_2)^2\right)$$

因此，我们总是假定在混合模型参数可辨识的条件下研究参数估计方法。

8.4 最大似然估计

- 任务：
  - 给定一个包含 n 个无类别标签的数据集 $D=\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n\}$，假定这些样本独立地从如下**混合型概率密度函数**中选样得到：

$$p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}|\omega_j, \boldsymbol{\theta}_j) P(\omega_j)$$

  - 根据这些样本，采用最大似然估计方法对 $\boldsymbol{\theta}$ 进行估计。
  - D 中数据的联合密度 (假定独立采样)：

$$p(D|\boldsymbol{\theta}) = \prod_{k=1}^{n} p(\mathbf{x}_k|\boldsymbol{\theta})$$

8.4 最大似然估计

- **目标：**估计一个 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 使 $p(D|\,\theta)$最大。
- 考虑对数似然：

$$f_{lh}(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{k=1}^{n} \ln\left(p(\mathbf{x}_k \,|\, \boldsymbol{\theta})\right) = \sum_{k=1}^{n} \ln\left(\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}_k \,|\, \omega_j, \boldsymbol{\theta}_j) P(\omega_j)\right)$$

  - $f_{lh}(\theta)$ 对参数的梯度，并假定参数独立。

$f_{lh}(\boldsymbol{\theta})$对参数的梯度：

$$p(\mathbf{x}\mid\boldsymbol{\theta})=\sum_{j=1}^{c}p(\mathbf{x}\mid\omega_j,\boldsymbol{\theta}_j)P(\omega_j)$$

仅考虑 $\boldsymbol{\theta}_i$ 这一项

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}_i} f_{lh}(\boldsymbol{\theta})=\sum_{k=1}^{n}\frac{1}{p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})}\nabla_{\boldsymbol{\theta}_i}p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})$$

$$=\sum_{k=1}^{n}\frac{1}{p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})}\nabla_{\boldsymbol{\theta}_i}\left(p(\mathbf{x}_k\mid\omega_i,\boldsymbol{\theta}_i)P(\omega_i)\right)$$

$$=\sum_{k=1}^{n}\frac{P(\omega_i)}{p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})}\nabla_{\boldsymbol{\theta}_i}\left(p(\mathbf{x}_k\mid\omega_i,\boldsymbol{\theta}_i)\right)$$

$\Vdash$

$$=\sum_{k=1}^{n}\frac{P(\omega_i)}{p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})}p(\mathbf{x}_k\mid\omega_i,\boldsymbol{\theta}_i)\ \nabla_{\boldsymbol{\theta}_i}\ln\left(p(\mathbf{x}_k\mid\omega_i,\boldsymbol{\theta}_i)\right)$$

$$=\sum_{k=1}^{n}\frac{P(\omega_i,\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta}_i)}{p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})}\nabla_{\boldsymbol{\theta}_i}\ln\left(p(\mathbf{x}_k\mid\omega_i,\boldsymbol{\theta}_i)\right)$$

$$=\sum_{k=1}^{n}P(\omega_i\mid\mathbf{x}_k,\boldsymbol{\theta})\ \nabla_{\boldsymbol{\theta}_i}\ln\left(p(\mathbf{x}_k\mid\omega_i,\boldsymbol{\theta}_i)\right)$$

$f_{lh}(\boldsymbol{\theta})$对参数的梯度：

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}_i} f_{lh}(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \boldsymbol{\theta}) \ \nabla_{\boldsymbol{\theta}_i} \ln\left(p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \boldsymbol{\theta}_i) \right)$$

单个样本对梯度的贡献：

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}_i} f_{lh}(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{x}_k) = P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \boldsymbol{\theta}) \ \nabla_{\boldsymbol{\theta}_i} \ln\left(p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \boldsymbol{\theta}_i) \right)$$

单个样本 $\mathbf{x}_k$ 对“似然函数关于 $\boldsymbol{\theta}_i$ 的梯度”之贡献 等于 “$\mathbf{x}_k$ 属于第 i 个成分的后验概率” 乘以 “$\mathbf{x}_k$ 对第 i 个成分所对应的似然函数关于 $\boldsymbol{\theta}_i$ 的梯度”。

8.4 最大似然估计

- 令梯度等于零，可得如下 c 个方程：

$$\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\theta}}) \nabla_{\boldsymbol{\theta}_i} \ln\left(p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \hat{\boldsymbol{\theta}}_i) \right) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, c$$

- 求解上述方程可得待估计的 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 。

- **进一步：当未知量中包含先验概率 $P(\omega_i)$（即混合比例）时，**对 $p(D|\boldsymbol{\theta})$ 的最大似然 值的搜索应限制如下两个条件：

$$P(\omega_i) \geq 0, \quad i = 1, 2, \cdots, c, \quad \text{且} \quad \sum_{i=1}^{c} P(\omega_i) = 1.$$

8.4 最大似然估计

- 实际上，如果似然函数可微，且 $P(\omega_i) \neq 0$， 那么 $P(\omega_i)$ 和 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_i$ 必然同时满足以下条件：

条件1：

$$\hat{P}(\omega_i) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\theta}})$$

条件2：

$$\sum_{k=1}^{n} \hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\theta}}) \nabla_{\boldsymbol{\theta}_i} \ln\left(p(\mathbf{x}_k \mid w_i, \hat{\boldsymbol{\theta}}_i)\right) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, c$$

其中，

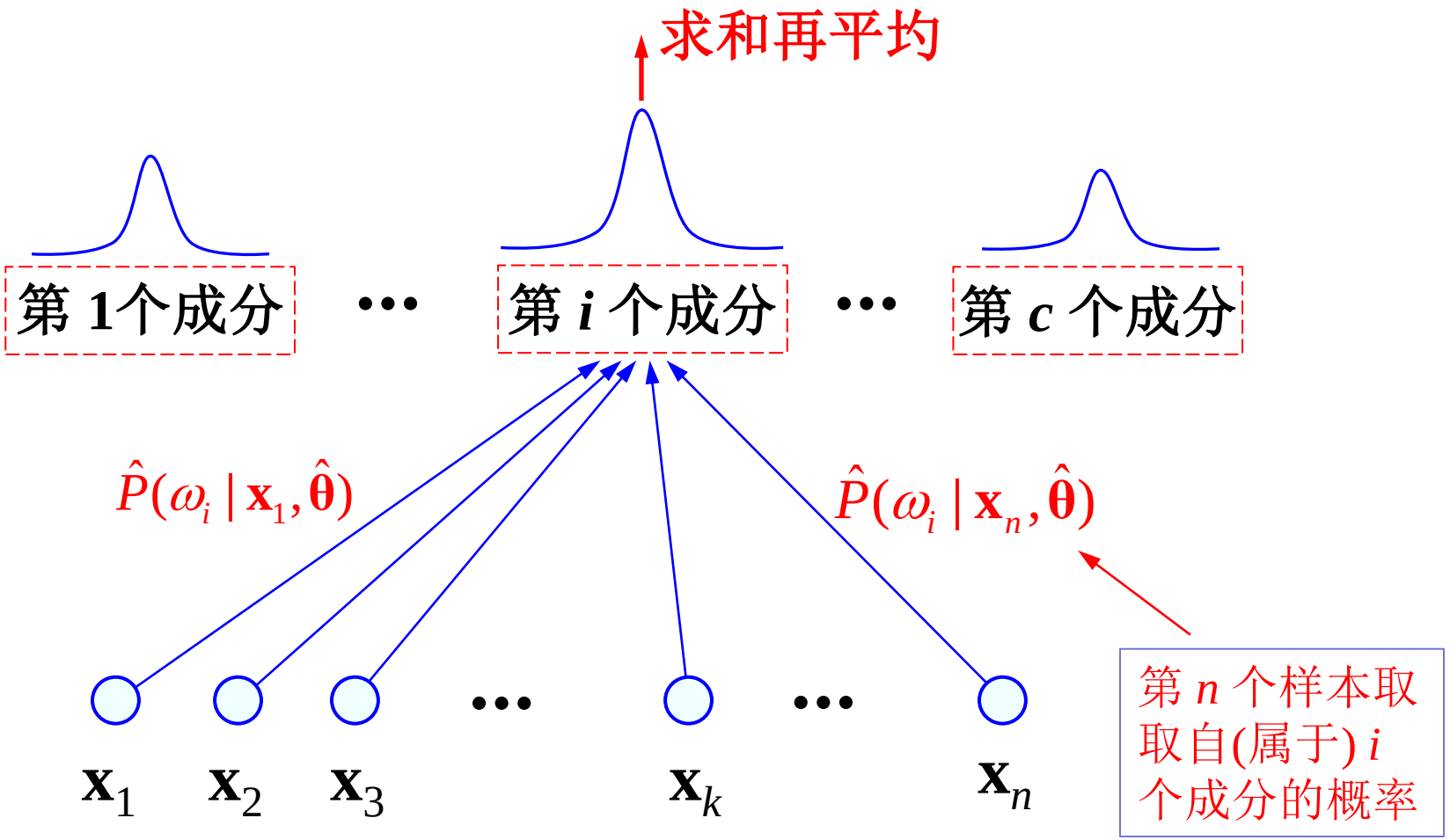
$$\hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\theta}}) = \frac{p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \hat{\boldsymbol{\theta}}_i)\hat{P}(\omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}_k \mid \omega_j, \hat{\boldsymbol{\theta}}_j)\hat{P}(\omega_j)} = \frac{p(\mathbf{x}_k, \omega_i \mid \hat{\boldsymbol{\theta}}_i)}{p(\mathbf{x}_k \mid \boldsymbol{\theta})}$$

全概率公式

- 对类先验的估计

(条件1的直观解释)

$$\hat{P}(\omega_i) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\theta}}), \quad i = 1, 2, \ldots, c$$



- **关于条件1的证明**
  - 首先，考虑所有变量时对数似然函数可以写成：

$$f_{lh}(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\alpha})=\sum_{k=1}^{n}\ln\left(p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})\right)=\sum_{k=1}^{n}\ln\left(\sum_{j=1}^{c}p(\mathbf{x}_k\mid\omega_j,\boldsymbol{\theta}_j)P(\omega_j)\right)$$

$$=\sum_{k=1}^{n}\ln\left(\sum_{j=1}^{c}p(\mathbf{x}_k\mid\omega_j,\boldsymbol{\theta}_j)\alpha_j\right)$$

其中引入新记号：$\boldsymbol{\alpha}=[\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_c]^T=[P(\omega_1),P(\omega_2),\cdots,P(\omega_c)]^T$

  - 然后，拉格朗日函数可以写成：

$$L(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\alpha})=f_{lh}(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\alpha})+\lambda\left(\sum_{j=1}^{c}\alpha_j-1\right)\qquad\because\ \sum_{j=1}^{c}\alpha_j=1$$

拉格朗日乘子

- **关于条件1的证明(续)**
  - 求目标函数关于变量的偏导数，并令其等于0：

$$\frac{\partial L(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_i}=\sum_{k=1}^{n}\frac{p(\mathbf{x}_k\mid\omega_i,\boldsymbol{\theta}_i)}{p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})}+\lambda=0,\quad i=1,2,...,c$$

  - 在方程的两边乘以 α_i，并将 c 个方程相加，可得

$$\sum_{i=1}^{c}\sum_{k=1}^{n}\frac{p(\mathbf{x}_k\mid\omega_i,\boldsymbol{\theta}_i)\alpha_i}{p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})}+\lambda\sum_{i=1}^{c}\alpha_i=0$$

$$\Rightarrow\quad \lambda=-\sum_{i=1}^{c}\sum_{k=1}^{n}\frac{p(\mathbf{x}_k\mid\omega_i,\boldsymbol{\theta}_i)\alpha_i}{p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})}=-\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=1}^{c}\frac{p(\mathbf{x}_k\mid\omega_i,\boldsymbol{\theta}_i)\alpha_i}{p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})}$$

$$=-\sum_{k=1}^{n}\frac{p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})}{p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})}=-n$$

- **关于条件1的证明(续)**
  - 最后由如下公式

$$\frac{\partial L(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\alpha})}{\partial \alpha_i}=\sum_{k=1}^{n}\frac{p(\mathbf{x}_k\mid\omega_i,\boldsymbol{\theta}_i)}{p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})}+\lambda=0,\quad i=1,2,...,c$$

  - 可得

$$\sum_{k=1}^{n}\frac{p(\mathbf{x}_k\mid\omega_i,\boldsymbol{\theta}_i)\alpha_i}{p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})}=n\alpha_i,\quad i=1,2,...,c$$

$$\Rightarrow \alpha_i=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\frac{p(\mathbf{x}_k\mid\omega_i,\boldsymbol{\theta}_i)\alpha_i}{p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})}=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\frac{p(\mathbf{x}_k\mid\omega_i,\boldsymbol{\theta}_i)p(\omega_i)}{p(\mathbf{x}_k\mid\boldsymbol{\theta})}$$

$$=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}P(\omega_i\mid\mathbf{x}_k,\boldsymbol{\theta})$$

因此，条件1得证。

8.5 正态分布情形下的非监督参数估计

- 本节讨论混合密度的各分量成分均为多维正态分布的情形：
  $p(\mathbf{x}|\omega_i, \boldsymbol{\theta}_i) \sim N(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)$

$$N(\mathbf{x}\,|\,\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}\,|\,\boldsymbol{\Sigma}_i\,|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)\right)$$

- 考虑如下两种情形：

Case	$\boldsymbol{\mu}_i$,	$\boldsymbol{\Sigma}_i$	$P(\omega_i)$	c
1	?	√	√	√
2	?	?	?	√

8.5 正态分布情形下的非监督参数估计

- 情形一：均值 $\boldsymbol{\mu}_i$ 未知
  - 似然函数如下：

$$\ln p(\mathbf{x}\,|\,\omega_i,\boldsymbol{\mu}_i)=-\ln\left((2\pi)^{d/2}\,|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}\right)-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)$$

  - 梯度：

$$\nabla_{\boldsymbol{\mu}_i}\ln p(\mathbf{x}\,|\,\omega_i,\boldsymbol{\mu}_i)=\boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)$$

  - 均值 $\boldsymbol{\mu}_i$ 需要满足的方程 (由前述条件2)：

$$\sum_{k=1}^{n}P(\omega_i\,|\,\mathbf{x}_k,\hat{\boldsymbol{\mu}})\,\boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x}-\hat{\boldsymbol{\mu}}_i)=0,\quad i=1,2,\cdots,c$$

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}=[\hat{\boldsymbol{\mu}}_1,\hat{\boldsymbol{\mu}}_2,\ldots,\hat{\boldsymbol{\mu}}_c]^T$$

- **情形一：均值 $\boldsymbol{\mu}_i$ 未知**
  - 通过两边乘以$\boldsymbol{\Sigma}_i$，于是有：

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_i = \frac{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})\,\mathbf{x}_k}{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})}$$

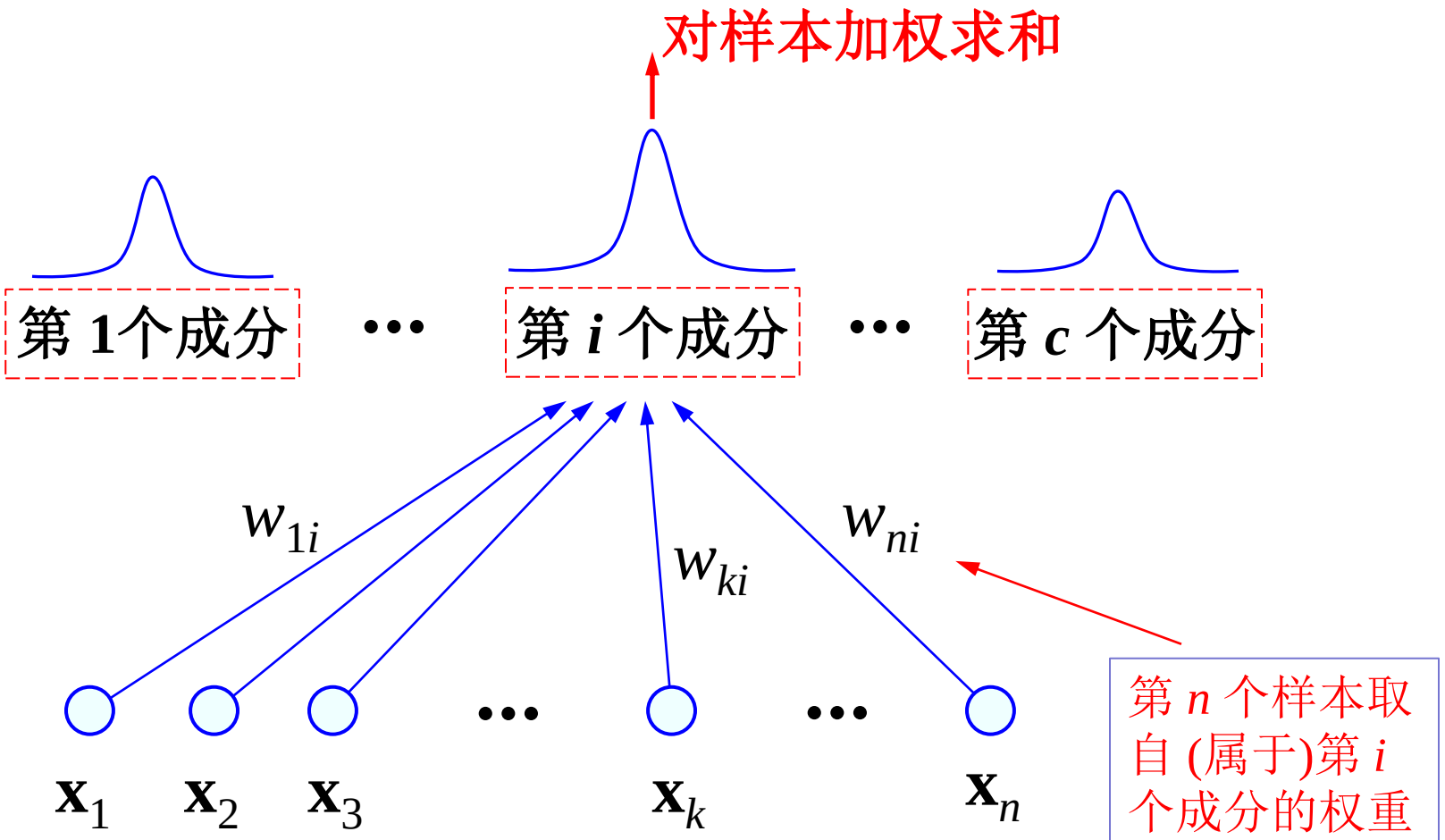
  - 进一步，令：

$$w_{ki} = \frac{P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})}{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})}, \quad k = 1,\ldots,n;\ \ i = 1,\ldots,c$$

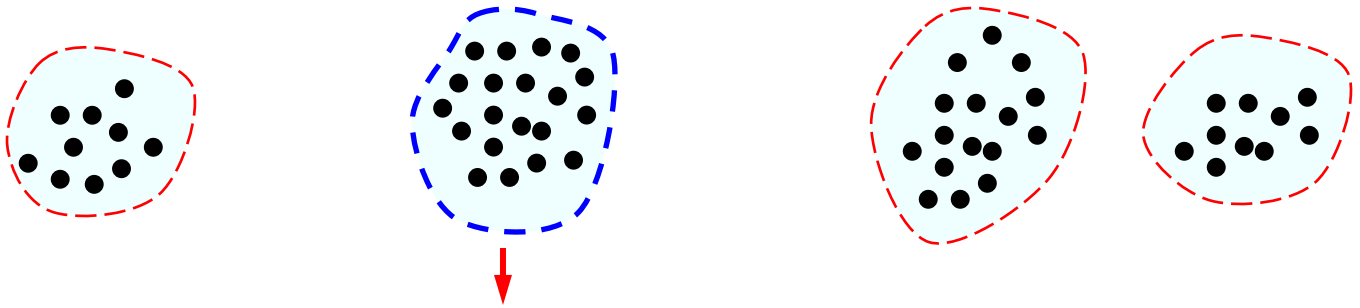
$$\Rightarrow \quad \hat{\boldsymbol{\mu}}_i = \sum_{i=1}^{n} w_{ki}\ \mathbf{x}_k$$

上式表明，类均值的最大似然估计为样本的加权平均。权值表明样本 $\mathbf{x}_k$ 属于第 i 类的可能性。

- 对 $\boldsymbol{\mu}_i$ 的估计(解释)：$\hat{\boldsymbol{\mu}}_i = \sum_{i=1}^{n} w_{ki}\ \mathbf{x}_k$，$w_{ki} = \dfrac{P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})}{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})}$



- **情形一：均值 $\boldsymbol{\mu}_i$ 未知**
  - 如果正好有一些样本 满足：$p(\omega_i, | \boldsymbol{\mu}_i, \mathbf{x}_k)=1$，其它均为 0，$\hat{\boldsymbol{\mu}}_i$ 将为属于第 *i* 的样本的均值。



只属于第 *i* 类：

$$P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x}_k \in \omega_i \\ 0, & \mathbf{x}_k \notin \omega_i \end{cases}$$

$$w_{ki} = \frac{P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})}{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})} = \frac{1}{n_i}$$

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{x}_k \in D_i} \mathbf{x}_k$$

8.5 正态分布情形下的非监督参数估计

- **情形一：均值 $\boldsymbol{\mu}_i$ 未知**
  - 如果 $\hat{\boldsymbol{\mu}}_i$ 充分接近其真值，则 $P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})$ 将成为 $\mathbf{x}_k$ 属于第 i 类的后验概率。
  - 但它的计算要通过类条件概率和类先验概率来计算：

$$P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}}) = \frac{p(\mathbf{x}_k, \omega_i \mid \hat{\boldsymbol{\mu}})}{p(\mathbf{x}_k \mid \hat{\boldsymbol{\mu}})} = \frac{p(\mathbf{x}_k, \omega_i \mid \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)}{p(\mathbf{x}_k \mid \hat{\boldsymbol{\mu}})}$$

$$= \frac{p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)P(\omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}_k \mid \omega_j, \hat{\boldsymbol{\mu}}_j)P(\omega_j)} = \frac{N(\mathbf{x}_k \mid \hat{\boldsymbol{\mu}}_i, \Sigma_i)P(\omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} N(\mathbf{x}_k \mid \hat{\boldsymbol{\mu}}_j, \Sigma_j)P(\omega_j)}$$

第二个等式：表示“先选择类ω_i再选择样本”这一事件只与第i个成分相关。

- **情形一：均值 $\boldsymbol{\mu}_i$ 未知**
  - 但是，**上述表示并不是关于 $\hat{\boldsymbol{\mu}}_i$ 的一个显示表达式，**它与 $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ 有关，**因为后验概率包含待估参数(根据前一页，我们有)**：

$$P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}}) = \frac{N(\mathbf{x}_k \mid \hat{\boldsymbol{\mu}}_i, \Sigma_i) P(\omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} N(\mathbf{x}_k \mid \hat{\boldsymbol{\mu}}_j, \Sigma_j) P(\omega_j)}$$

  - 通常采用迭代求解 (给定各值初值)：

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_i(t+1) = \frac{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}}(t)) \mathbf{x}_k}{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}}(t))}$$

算法本质：梯度下降法，也称爬山法 (最大似然)

- 一个例子：假定以下25个样本随机取自于如下分布：

$$p(x\,|\,\mu_1,\mu_2)=\frac{1}{3}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu_1)^2\right)+\frac{2}{3}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu_2)^2\right)$$

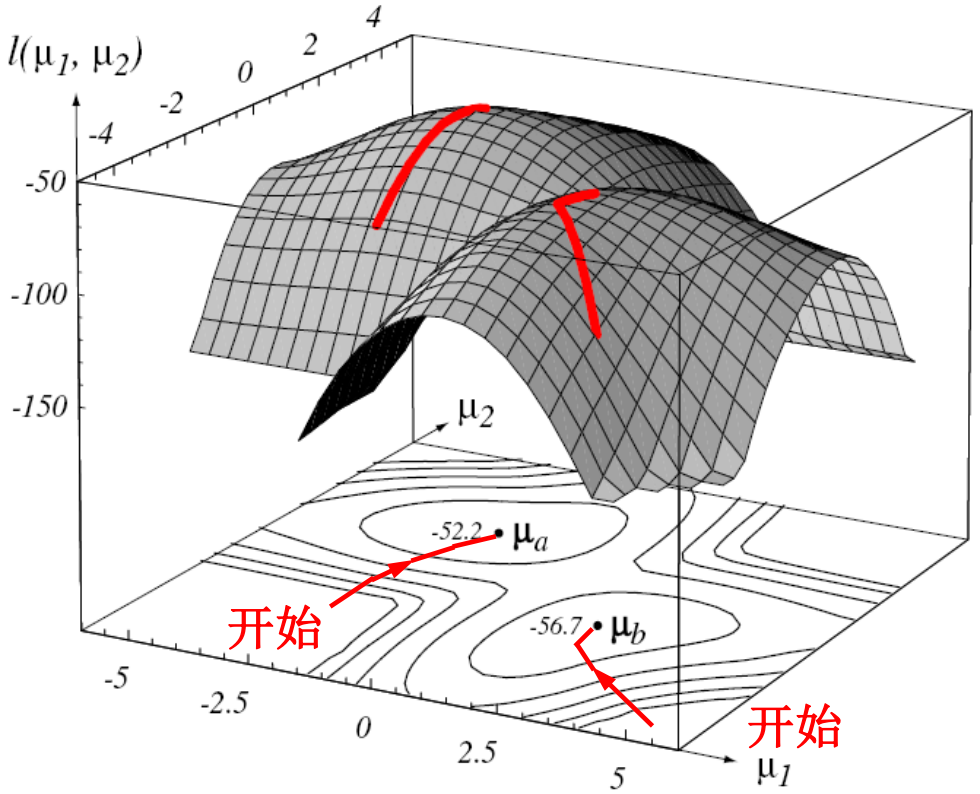
其中，μ_1=-2, μ_2 = 2.

k	x_k	ω_1	ω_2
1	0.608		×
2	-1.590	×	
3	0.235		×
4	3.949		×
5	-2.249	×	
6	2.704		×
7	-2.473	×	
8	0.672		×

k	x_k	ω_1	ω_2
9	0.262		×
10	1.072		×
11	-1.773	×	
12	0.537		×
13	3.240		×
14	2.400		×
15	-2.499	×	
16	2.608		×

k	x_k	ω_1	ω_2
17	-3.458	×	
18	0.257		×
19	2.569		×
20	1.415		×
21	1.410		×
22	-2.653	×	
23	1.396		×
24	3.286		×
25	-0.712	×	

- 由25个样本生成的似然函数曲面 (25个对数似然相加得到)：



目标函数有两个局部最大点在 $(\mu_1, \mu_2) = (-2, 2)$ 和 $(2, -2)$附近。每个最大点都是一个近似正确的解。**因为类中心交换一下顺序也是可以的。**

图中，两个不同的初始迭代点分别趋近于不同的局部最优点。

- 情形二：所有参数均未知 (但总类数已知)
  - 对 $\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i$，样本 $\mathbf{x}_k$ 的似然值有：

$$\ln p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i) = -\ln\left((2\pi)^{d/2} \mid \boldsymbol{\Sigma}_i \mid^{1/2}\right) - \frac{1}{2}(\mathbf{x}_k - \boldsymbol{\mu}_i)^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x}_k - \boldsymbol{\mu}_i)$$

$$= \ln\left(\mid \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \mid^{1/2} / (2\pi)^{d/2}\right) - \frac{1}{2}(\mathbf{x}_k - \boldsymbol{\mu}_i)^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x}_k - \boldsymbol{\mu}_i)$$

因为：

$$N(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} \mid \boldsymbol{\Sigma}_i \mid^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)\right)$$

- **情形二：所有参数均未知 (但总类数已知)**
  - 对 $\ln p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)$ 其求梯度，**并考虑所有样本**，通过矩阵代数运算，我们有：

类先验(混合比例)：

$$\hat{P}(\omega_i) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\theta}})$$

类均值：

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_i = \frac{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})\mathbf{x}_k}{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})}$$

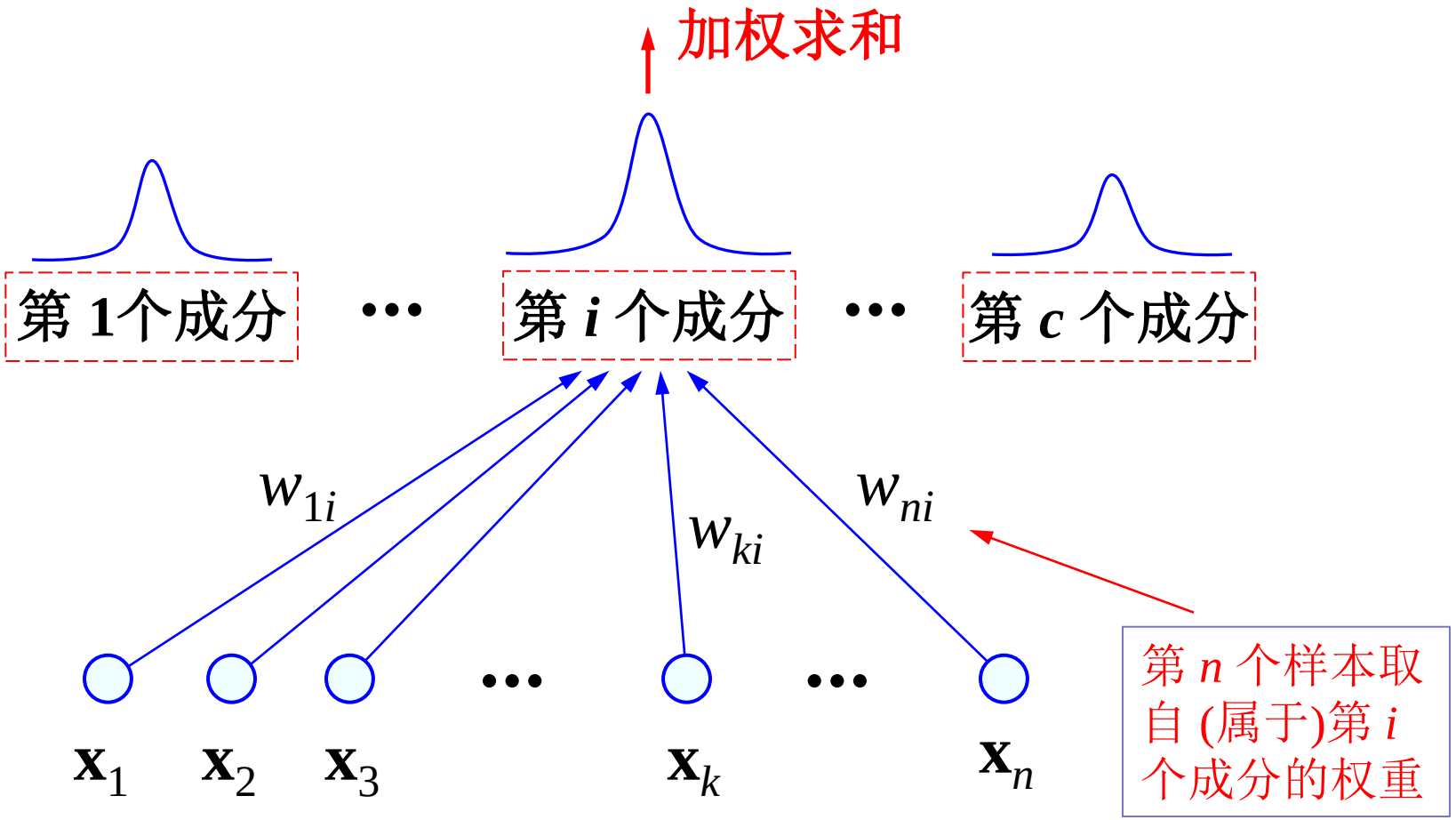
类协方差矩阵：

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_i = \frac{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\theta}})(\mathbf{x}_k - \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)(\mathbf{x}_k - \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)^T}{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\theta}})}$$

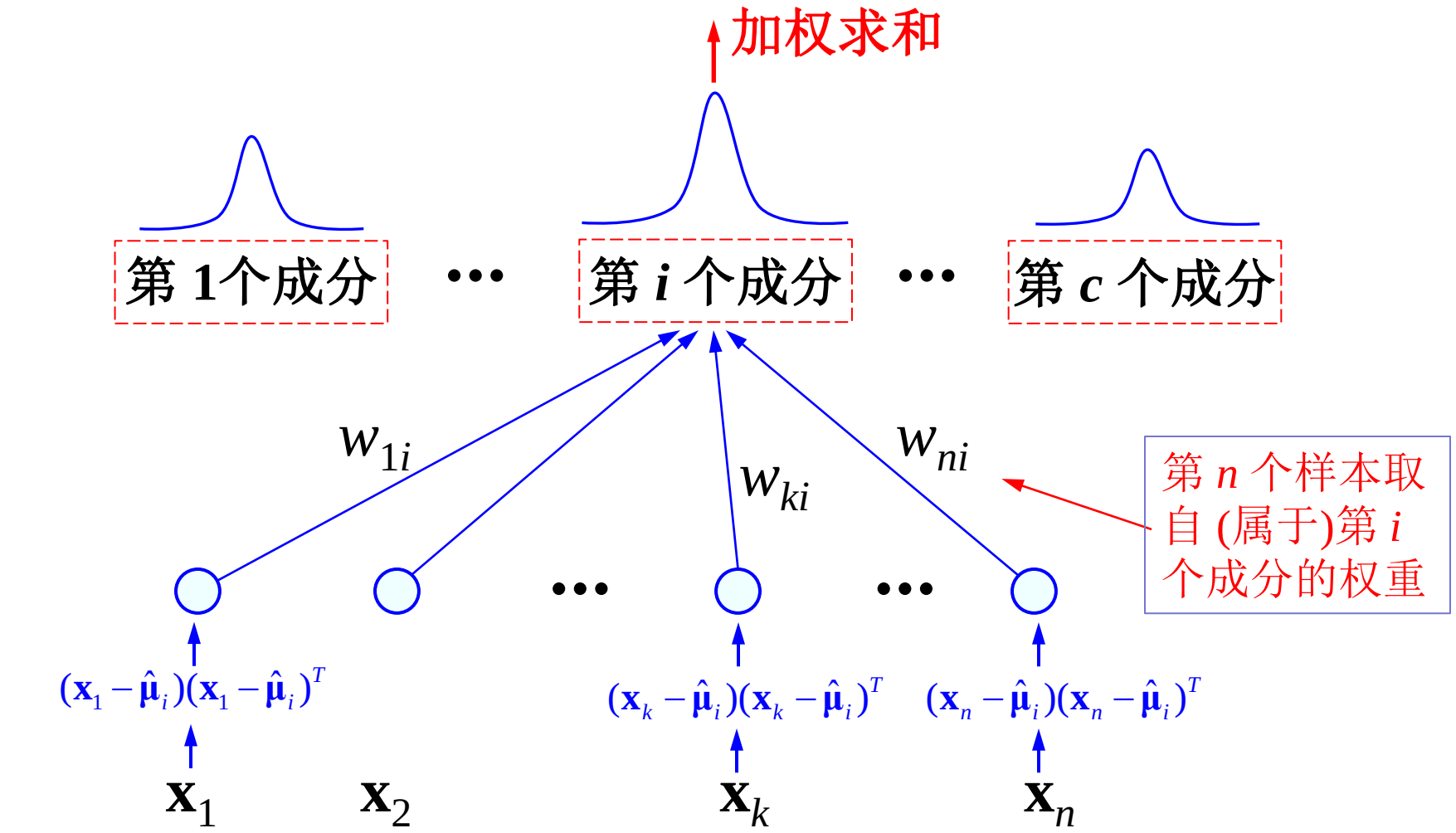
（$\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 记录所有的未知参数）

对 $\boldsymbol{\mu}_i$ 的估计(解释)：

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_i = \sum_{i=1}^{n} w_{ki}\ \mathbf{x}_k\,, \qquad w_{ki} = \frac{P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})}{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})}$$



对 Σ_i 的估计(解释)：$\hat{\Sigma}_i = \sum_{i=1}^{n} w_{ki}\,(\mathbf{x}_k - \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)(\mathbf{x}_k - \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)^T$，$w_{ki} = \dfrac{P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})}{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})}$



- 其中，样本属于第 i 个成分的后验概率(此时也可以计算)：

$$\hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\theta}}) = \frac{p(\mathbf{x}_k, \omega_i \mid \hat{\boldsymbol{\theta}}_i)}{p(\mathbf{x}_k \mid \hat{\boldsymbol{\theta}})}$$

$$= \frac{p(\mathbf{x}_k \mid \omega_i, \hat{\boldsymbol{\theta}}_i)\hat{P}(\omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} p(\mathbf{x}_k \mid \omega_j, \hat{\boldsymbol{\theta}}_j)\hat{P}(\omega_j)}$$

$$= \frac{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_i|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_k - \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_i^{-1}(\mathbf{x}_k - \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)\right)\hat{P}(\omega_i)}{\sum_{j=1}^{c} |\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_j|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_k - \hat{\boldsymbol{\mu}}_j)^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_j^{-1}(\mathbf{x}_k - \hat{\boldsymbol{\mu}}_j)\right)\hat{P}(\omega_j)}$$

注意，分子只与 i 有关。

（$\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 记录所有的未知参数）

- 前面关于均值、类方差和混合比例的公式看起来很很复杂。但实际上，**它们的含义确十分明显**。在极端情况下，即当样本 $\mathbf{x}_k$ 来自于 ω_i 类时，其后验概率 $\hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\theta}})$ 为 1，否则就为零，此时有：

只属于第 *i* 类：

$$P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x}_k \in \omega_i \\ 0, & \mathbf{x}_k \notin \omega_i \end{cases}$$

$$\hat{P}(\omega_i) = \frac{n_i}{n},$$

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{k=1}^{n_i} \mathbf{x}_k^{(i)},$$

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{k=1}^{n_i} (\mathbf{x}_k^{(i)} - \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)(\mathbf{x}_k^{(i)} - \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)^T$$

上标 (i) 表示属于 ω_i 类的样本， n_i 表示属于 ω_i 类样本的个数。

8.6 K-均值聚类 (K-means clustering)

- 前一节在最大似然框架下有关参数估计的相关结论可以从多个方面进行简化，得到一些经典的算法。
- 其中之一是著名的 K-均值聚类算法。
  - 引入假设：只计算数据点到类中心的欧氏距离的平方，即仅计算 $\|\mathbf{x}_k - \hat{\boldsymbol{\mu}}_i\|^2$ ，**寻找与样本 $\mathbf{x}_k$ 最近的中心点**，并对**后验概率做如下0-1近似**：

$$\hat{P}(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\theta}}) \approx \begin{cases} 1, & \text{if } \mathbf{x}_k \text{ is nearest to the center } \hat{\boldsymbol{\mu}}_i \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

8.6 K-均值聚类

- 进一步，如果只估计 c 个高斯成分的均值，**同时考虑关于后验概率的0-1近似，**利用前一节的结论有：

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_i = \frac{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})\mathbf{x}_k}{\sum_{k=1}^{n} P(\omega_i \mid \mathbf{x}_k, \hat{\boldsymbol{\mu}})} = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{x}_k \in \omega_i} \mathbf{x}_k$$

- 对上述公式进行迭代求解。**在迭代过程中，同时考虑关于后验概率的0-1近似。** 由此可以得到著名的 K-均值聚类算法（这里 $K = c$)。
- 通过迭代最终得到 c 个高斯成分的均值之后，**以这些均值作为 c 个类（簇）的类中心，计算每个样本点到类中心的欧氏距离，将该样本点归入到最短距离所在的类**。从而完成 K-均值聚类的计算工作。

8.6 K-均值聚类

- 算法基本思想

K-Means Clustering—Algorithm 1

1 begin initialization n, c, μ_1, μ_2,…, μ_c.
2 do classify n samples according to nearest μ_i
3 re-compute μ_i
4 until no change in μ_i
5 return μ_1, μ_2,…, μ_c

- 一个例子：假定以下25个样本随机取自于如下分布：

$$p(x\,|\,\mu_1,\mu_2)=\frac{1}{3\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu_1)^2\right)+\frac{2}{3\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu_2)^2\right)$$

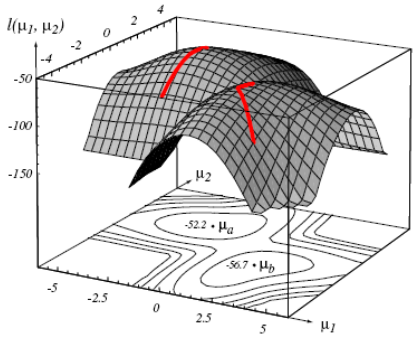
其中，μ1=-2, μ2 = 2.

k	x_k	ω_1	ω_2
1	0.608		×
2	-1.590	×	
3	0.235		×
4	3.949		×
5	-2.249	×	
6	2.704		×
7	-2.473	×	
8	0.672		×

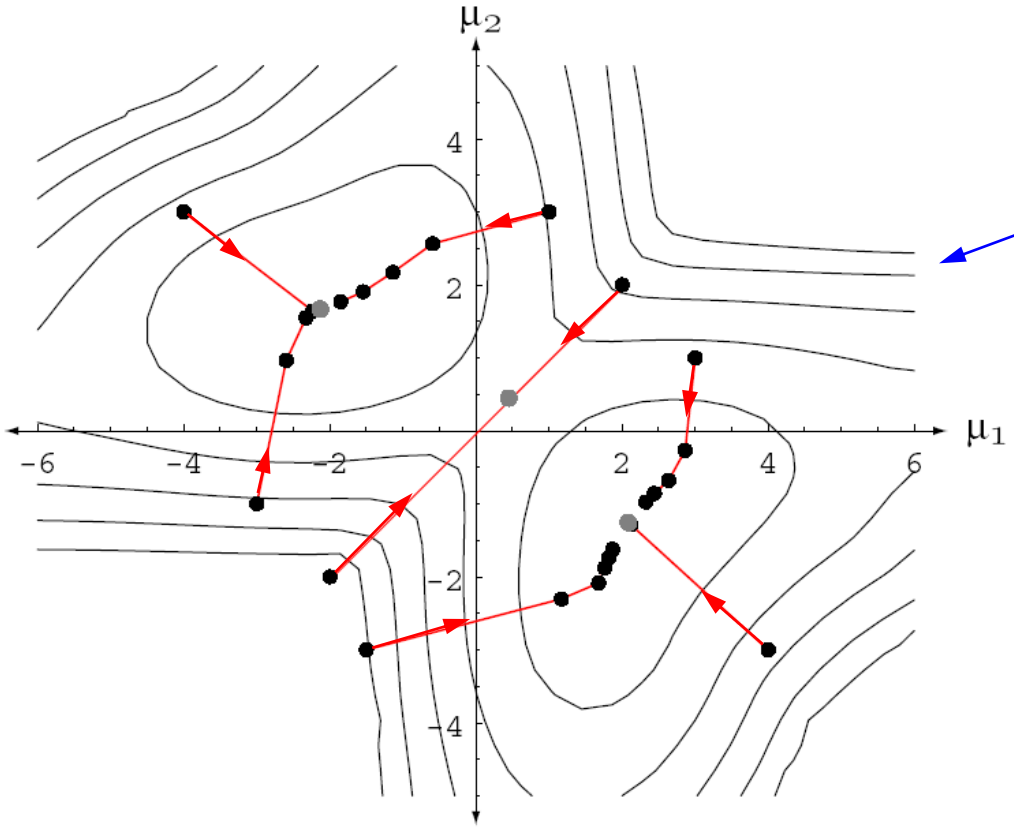
k	x_k	ω_1	ω_2
9	0.262		×
10	1.072		×
11	-1.773	×	
12	0.537		×
13	3.240		×
14	2.400		×
15	-2.499	×	
16	2.608		×

k	x_k	ω_1	ω_2
17	-3.458	×	
18	0.257		×
19	2.569		×
20	1.415		×
21	1.410		×
22	-2.653	×	
23	1.396		×
24	3.286		×
25	-0.712	×	

- **K-均值迭代过程：**



对数似然
函数等值线



8个初始点（二维向量）：3个迭代获得(-2,2)附近的点，3个迭代获得(2,-2)附近的点，两个得到(0,0)附件的点（错误）。

8.6 K-均值聚类

- 前面我们对K-均值算法从混合密度估计的角度(“正态分布情形下的非监督参数估计”)做了一个解释。其中，假定数据是服从一个含有 c 个高斯成分的混合密度。
- 在估计混合密度均值时，我们考虑**样本点至类中心的欧氏距离，**以此为迭代准则来逐步地得到个类中心（即均值），从而得到K-均值聚类算法。
- 所以该算法的基础也可以解释为“最小误差平方和”准则。
- 下面从这个角度来进一步解释，并给出一个“最小误差平方和”准则下的K-均值聚类方法。

8.6 K-均值聚类

- 设 n_i 表示属于 ω_i 类样本的个数，$\mathbf{m}_i$ 是这些样本的均值（注：这里将 $\boldsymbol{\mu}_i$ 换成 $\mathbf{m}_i$）：

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{x} \in D_i} \mathbf{x}$$

- 考虑对所有样本的一个划分，计算划分后的样本与均值的误差平方和，得到如下“误差平方和”聚类准则：

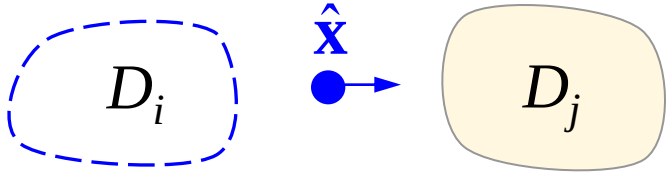
$$J_e = \sum_{i=1}^{c} J_i, \quad \text{其中，} \quad J_i = \sum_{\mathbf{x} \in D_i} \|\mathbf{x} - \mathbf{m}_i\|^2$$

- 注意，对于不同的划分（聚类），会得到不同的 $\mathbf{m}_i$。因此 J_e 的值也是不同的。使 J_e 最小的聚类就是误差平方和准则下的最优结果。因此，称这类聚类方法为**最小方差划分法**。

8.6 K-均值聚类

- 尽管我们的目标是对样本进行最优划分，但上述准则的关键之处仍然在于对各均值 的估计。
- 从“正态分布情形下的非监督参数估计”的相关分析可知，难以得到有关它们的解析解。实际上，从 J_e 准则所具有的形式上看，也很难得到解析解。因此，需要采用迭代求解技术。
- **每一次迭代就是对样本的一个划分，通过划分的结果才能计算类中心。因此，要不断地调整属于各个类的样本，有进有出。**
- 因此，下面的重点将介绍**在迭代的过程中如何对样本进行调整**。

8.6 K-均值聚类



- 迭代过程中的样本调整：
  - 假设样本 $\hat{\mathbf{x}}$ 从类 D_i 移动到 D_j，此时，两个类中心将同时进行变化：

$$\mathbf{m}_j^* = \mathbf{m}_j + \frac{\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_j}{n_j + 1}, \qquad \mathbf{m}_i^* = \mathbf{m}_i - \frac{\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_i}{n_i - 1}$$

  - 属于第 j 类的样本点引起的误差平方和将增加为：

$$J_j^* = \sum_{\mathbf{x} \in D_j} \left\| \mathbf{x} - \mathbf{m}_j^* \right\|^2 + \left\| \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_j \right\|^2 = J_j + \frac{n_j \left\| \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_j \right\|^2}{n_j + 1}$$

属于第 j 类的样本点引起的误差平方和将增加，推导如左。

$$J_j^* = \sum_{\mathbf{x}\in D_j} \left\|\mathbf{x}-\mathbf{m}_j^*\right\|^2 + \left\|\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{m}_j\right\|^2$$

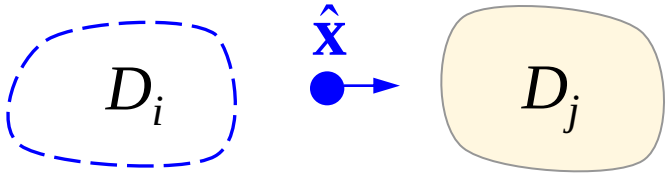
$$= \sum_{\mathbf{x}\in D_j} \left\|\mathbf{x}-\mathbf{m}_j - \frac{\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{m}_j}{n_j+1}\right\|^2 + \left\|\frac{n_j}{n_j+1}(\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{m}_j)\right\|^2$$

$$= \sum_{\mathbf{x}\in D_j} \left(\left\|\mathbf{x}-\mathbf{m}_j\right\|^2 - \frac{2}{n_j+1}(\mathbf{x}-\mathbf{m}_j)^T(\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{m}_j) + \frac{\left\|\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{m}_j\right\|^2}{(n_j+1)^2} \right) + \left\|\frac{n_j}{n_j+1}(\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{m}_j)\right\|^2$$

$$= J_j - \frac{2}{n_j+1}(\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{m}_j)^T \left(\sum_{\mathbf{x}\in D_j}\mathbf{x} - \sum_{\mathbf{x}\in D_j}\mathbf{m}_j \right) + \frac{n_j\left\|\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{m}_j\right\|^2}{(n_j+1)^2} + \left\|\frac{n_j}{n_j+1}(\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{m}_j)\right\|^2$$

$$= J_j - \frac{2}{n_j+1}(\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{m}_j)^T \left(n_j\mathbf{m}_j - n_j\mathbf{m}_j \right) + \frac{n_j\left\|\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{m}_j\right\|^2}{n_j+1)}$$

$$= J_j + \frac{n_j\left\|\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{m}_j\right\|^2}{n_j+1}$$



- **迭代过程中的样本调整：**
  - **属于第 *i* 类的样本点引起的误差平方和将减少为：**

$$J_i^* = J_i - \frac{n_i \left\| \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_i \right\|^2}{n_i - 1}$$

  - 如果以下条件成立，则将样本 $\hat{\mathbf{x}}$ 从类 D_i 移动到 D_j 会减少总体误差，**因此这种移动是可以鼓励的：**

$$\frac{n_j \left\| \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_j \right\|^2}{n_j + 1} < \frac{n_i \left\| \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_i \right\|^2}{n_i - 1}$$

如果减少量
大于增加量

  - 即是说，从一个类引出一个样本会减少该类均方误差；但移入一个样本至一个类会增加该类均方误差。如果**减少量大于增加量**，对这样的样本进行移动是有利于总体误差减少的。

K-Means Clustering—Algorithm2 (minimum squared error clustering)

1 begin initialization n, c, $\mathbf{m}_1$, $\mathbf{m}_2$,…, $\mathbf{m}_c$.

2 do randomly select a sample $\hat{\mathbf{x}}$

3 $i \leftarrow \arg\min_{i'} \| \mathbf{m}_{i'} - \hat{\mathbf{x}} \|$ // classify $\hat{\mathbf{x}}$

4 if $n_i \neq 0$, then compute

$$\rho_j = \begin{cases} \frac{n_j}{n_j+1} \| \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_j \|, & j \neq i \\ \frac{n_j}{n_j-1} \| \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{m}_j \|, & j = i \end{cases}$$

5 find the minimum ρ_k among all ρ_j, j=1,2,…,c

6 if $\rho_k \leq \rho_j$ for all j, then transfer $\hat{\mathbf{x}}$ to D_k

7 re-compute J_e, $\mathbf{m}_i$, $\mathbf{m}_k$

8 until no change in J_e for all n samples

9 return $\mathbf{m}_1$, $\mathbf{m}_2$,…, $\mathbf{m}_c$

8.6 K-均值聚类

- K-均值聚类算法是一种典型的**动态聚类方法**，具有如下三个要点：
  - (1) 选择欧氏距离度量作为样本间的相似性度量。
  - (2) 采用最大似然估计或最小均方误差作为评价聚类的准则函数。
  - (3) 给定某个初始分类，然后采用迭代算法寻找准则函数的极值。
- **优点：**
  - 是解决聚类问题的一种经典算法，简单、快速。
  - 对处理大数据集，该算法仍可保持其高效率。
  - 对于密集簇，聚类效果很好。
- **缺点：**
  - 必须事先给定簇的个数，且对初始值敏感。
  - 不适合于发现非凸曲面的簇以及大小相差很大的簇。
  - 对噪声、孤立数据点、野点很敏感。

8.6 K-均值聚类

- 关于初始点的选择建议：
  - **凭经验选择初始代表点**，根据问题相关性。
  - **将数据随机地分成 *c* 类**，计算每类中心，以此作为初始点。
  - **用密度法选择初始点**，以每个样本为中心，在一个球形区域内估计样本密度，类似parzen窗方法，逐步地将数据划分至不同的密度区域。
  - **中心分解方法**：先将所有数据看成一个聚类，计算聚类中心，然后寻找与该中心最远的点，划入一部分数据点至该最远点所在的区域；对剩下的数据，以此类推。

8.7 模糊K-均值聚类

- **模糊集的基本知识**
  - 从集合论的角度，一个类可以看作是一个集合。聚类就是将一个集合划分为若干个子集的过程。
  - 1965年，Zadeh 提出了著名的模糊集理论，由此形成了一门新的学科：模糊数学和模糊技术。
  - 模糊集理论是对传统集合理论的一种推广。在传统集合理论中，一个元素或者属于一个集合，或者不属于一个集合。对于模糊集而言，一个元素是以一定的程度属于某个集合，也可以以不同的程度属于几个集合。**这一描述引伸出一个重要的概念——模糊集中元素的“隶属度”。**
  - 隶属度函数是表示一个对象 **x** 属于集合 A 的程度，其自变量的取值范围为所有可能属于集合 A 的对象。

8.7 模糊K-均值聚类

- **模糊K-均值聚类准则**
  - 基本出发点：假定样本 $\mathbf{x}_j$ 以一定的模糊程度属于某一类，比如第 i 类，记为：$\mu_i(\mathbf{x}_j)$。**直观地讲，这种假定也可以理解为 $\mathbf{x}_j$ 属于第 i 类的概率，**即令：$\mu_i(\mathbf{x}_j) = P(\omega_i | \mathbf{x}_j, \theta)$。
  - 聚类准则修正如下：

$$J_{fuz} = \sum_{i=1}^{c}\sum_{j=1}^{n}[\mu_i(\mathbf{x}_j)]^b \left\|\mathbf{x}_j - \mathbf{m}_i\right\|^2$$

其中，上标 b 是一个自由参数，如果等于0，则退化为经典的 K-均值聚类算法。

  - 定义不同的隶属度函数将得到不同的模糊聚类算法。

8.7 模糊K-均值聚类

- 一个经典的方法是假定 $\mathbf{x}_j$ 属于各度的隶属度之和为1：

$$\sum_{i=1}^{c} \mu_i(\mathbf{x}_j) = 1, \quad j = 1, 2, ..., n$$

- 在上述约束条件下，对 J_{fuz} 目标函数求极值，分别对 $\mathbf{m}_i$ 和 $\mu_i(\mathbf{x}_j)$ 求偏导数，并令其等于 0，则有：

$$\mathbf{m}_i = \frac{\sum_{j=1}^{n} [\mu_i(\mathbf{x}_j)]^b \mathbf{x}_j}{\sum_{j=1}^{n} [\mu_i(\mathbf{x}_j)]^b},$$

$$\mu_i(\mathbf{x}_j) = \frac{\left(1/\|\mathbf{x}_j - \mathbf{m}_i\|^2\right)^{1/(b-1)}}{\sum_{k=1}^{c} \left(1/\|\mathbf{x}_j - \mathbf{m}_k\|^2\right)^{1/(b-1)}}, \quad i = 1, ...c, \; j = 1, ..., n$$

8.7 模糊K-均值聚类

- 算法步骤

Fuzzy K-Means Clustering

1 begin initialization n, c, $\mathbf{m}_1$, $\mathbf{m}_2$,…, $\mathbf{m}_c$,

2 given $\mu_i(\mathbf{x}_j)$, $i = 1, 2, \ldots, c,\ \ j = 1, 2, \ldots, n,$

3 let $\Sigma_i\, \mu_i(\mathbf{x}_j) = 1, \quad j = 1, 2, \ldots, n$

4 do the following computations:

5 update $\mathbf{m}_j$

6 update $\mu_i(\mathbf{x}_j)$

7 until small change in $\mathbf{m}_j$ and $\mu_i(\mathbf{x}_j)$

8 return $\mathbf{m}_1$, $\mathbf{m}_2$,…, $\mathbf{m}_c$

8.7 模糊K-均值聚类

- **优点：**
  - 算法的鲁棒性会更好。
- **缺点：**
  - 仍处理不好野点 (outlier)
  - 仍对初始值敏感
  - 仍需知道类别数

8.8 常用的聚类准则

- 针对符合混合高斯密度分布的数据，我们从**最大似然估计**和**最小均方误差**的角度介绍了一类经典的聚类方法：K-均值聚类和模糊K-均值聚类。现对聚类规则作进一步扩展。
- 均方误差准则

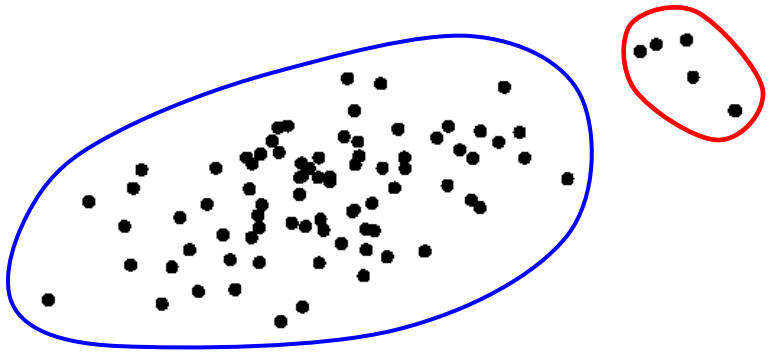
$$J_e = \sum_{i=1}^{c} \sum_{\mathbf{x} \in D_i} \left\| \mathbf{x} - \mathbf{m}_i \right\|^2, \quad \text{其中，} \mathbf{m}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{x} \in D_i} \mathbf{x}$$

该准则的直观解释是：**对于一个给定的簇 D_i，用其均值将作为该簇所有样本的代表点，称为聚类中心。J_e 度量了总体平方误差。**

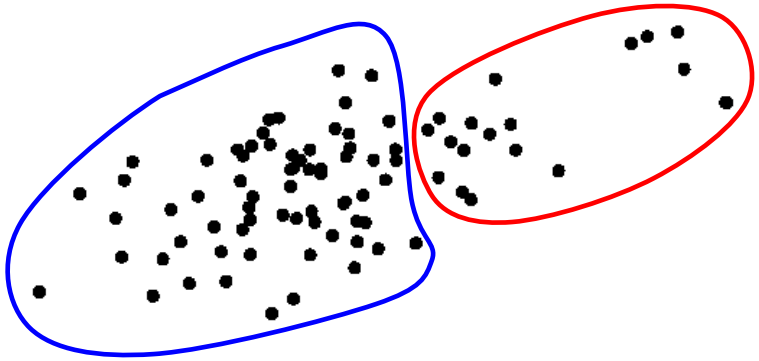
J_e 的值取决于样本如何被分成不同簇，同时 J_e 的值也取决于簇的多少。

8.8 常用的聚类准则

- 均方误差准则的适用范围
  - J_e 适合于度量簇内数据形成一个紧凑的“云团”的情形。也就是说， J_e 不太适用于分散的数据点。
  - J_e 不太适用于各簇数据不平衡的情形。



J_e 更大



J_e 更小

8.8 常用的聚类准则

- **均方误差准则扩展**
  - 将簇内数据点的均值带入 J_e，可得：

$$J_e = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{c} n_i \bar{s}_i, \quad \text{其中，} \bar{s}_i = \frac{1}{n_i^2}\sum_{\mathbf{x}\in D_i}\sum_{\mathbf{x}'\in D_i}\left\|\mathbf{x}-\mathbf{x}'\right\|^2$$

可见，$\bar{s}_i$ 即为属于同一簇 D_i 的点对之间的平均距离。该表达式同时也表明，欧氏距离将作为相似性的度量方式。

上述形式更容易扩展。也就是说，可以引入其它度量方式来代替点对之间的欧氏距离：

$$\bar{s}_i = \frac{1}{n_i^2}\sum_{\mathbf{x}\in D_i}\sum_{\mathbf{x}'\in D_i} s(\mathbf{x},\mathbf{x}')$$

8.8 常用的聚类准则

- 散度准则
  - 散度准则：**类内散度最小，类间散度最大**。
  - 散度度量数据点之间的分散程度，采用矩阵表示：

类均值	$\mathbf{m}_i = \frac{1}{n_i}\sum_{\mathbf{x}\in D_i}\mathbf{x}$	$\mathbf{m} = \frac{1}{n}\sum_{\mathbf{x}\in D}\mathbf{x} = \frac{1}{n_i}\sum_{i=1}^{c} n_i\mathbf{m}_i$	总均值
类散度	$\mathbf{S}_i = \sum_{\mathbf{x}\in D_i}(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)^T$	$\mathbf{S}_W = \sum_{i=1}^{c}\mathbf{S}_i$	总类内散度
类间散度	$\mathbf{S}_B = \sum_{i=1}^{c} n_i(\mathbf{m}_i-\mathbf{m})(\mathbf{m}_i-\mathbf{m})^T$	$\mathbf{S}_T = \sum_{\mathbf{x}\in D}(\mathbf{x}-\mathbf{m})(\mathbf{x}-\mathbf{m})^T$	总散度

$$\mathbf{S}_T = \mathbf{S}_W + \mathbf{S}_B$$

8.8 常用的聚类准则

- 为什么叫散度？
  - **类散度矩阵**实际上为协方差矩阵（相差一个系数）其主对角线元素代表方差，因此具有数据分布“分散程度”的含义。从宏观上刻画样本之间的离散程度。
  - **总类内散度矩阵**为类内散度矩阵之和，它所刻画的是：“从总体来看类内各个样本与其所在类之间的离散度”。
  - **类间散度矩阵**则描述类与类之间的总体离散程度。

8.8 常用的聚类准则

- 散度与距离之间的关系：
  - 设一个簇的中心点为 **m**。对于该簇的一个样本 **x**，它**对类散度矩阵的贡献**为 $(\mathbf{x}-\mathbf{m})(\mathbf{x}-\mathbf{m})^T \in \mathrm{R}^{d\times d}$。根据矩阵运算，该**矩阵的迹**等于 $(\mathbf{x}-\mathbf{m})^T(\mathbf{x}-\mathbf{m})$，即样本 **x** 到类中心点 **m** 的距离的平方。
  - 因此，类散度矩阵的迹等于类内所有点到类中心点的距离平方和：

$$\sum_{\mathbf{x}\in D_i}\|\mathbf{x}-\mathbf{m}_i\|^2 = \mathrm{tr}(\mathbf{S}_i), \quad i=1,2,...,c$$

  - 该和反应了样本分布的聚集程度。该和越小，数据分布越紧凑。

8.8 常用的聚类准则

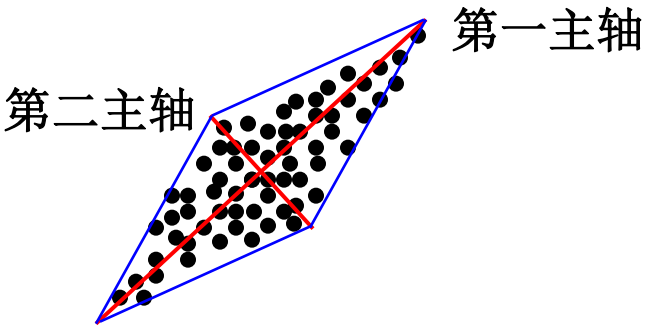
- 总类内散度迹最小准则
  - 根据散度矩阵的迹与距离的关系，有如下关于总类内散度的迹的关系式：

$$J_e = \sum_{i=1}^{c} \sum_{\mathbf{x} \in D_i} \left\| \mathbf{x} - \mathbf{m}_i \right\|^2 = \sum_{i=1}^{c} \mathrm{tr}(\mathbf{S}_i) = \mathrm{tr}\left(\sum_{i=1}^{c} \mathbf{S}_i \right) = \mathrm{tr}(\mathbf{S}_W)$$

  - 可见，**总类内散度迹最小准则与类均方误差最小准则是等价的**。
- 类间散度最大准则

$$\max \quad \mathrm{tr}(\mathbf{S}_B) = \sum_{i=1}^{c} n_i \left\| \mathbf{m} - \mathbf{m}_i \right\|^2$$

- **行列式准则**
  - 一个矩阵的行列式等于该矩阵的所有特征值之乘积。
  - 对于数据的协方差矩阵而言，其第一个特征值反映数据沿第一主轴的分布。**该值越大，数据沿此轴分布越长。**



两个主轴大小之积可描述面积大小。

  - **协方差矩阵的行列式正比于数据的分布所占的空间体积（平方）。**
  - 最小化总类内行列式准则：$\min \quad J_d = |\mathbf{S}_W|$
  - 通常不采用这一准则的原因：$\mathbf{S}_W$ 可能非奇异!

- 不变性准则
  - 在 $\mathbf{S}_W$ 为非奇异矩阵时，可以证明 $\mathrm{tr}((\mathbf{S}_W)^{-1}\mathbf{S}_B)$ 不会因为对数据施加一个任意的非奇线性变换而改变。
  - 由于实对称矩阵的迹等于其所有特征值之和，于是有：

$$\mathrm{tr}\left(\mathbf{S}_W^{-1}\mathbf{S}_B\right)=\sum_{i=1}^{d}\lambda_i, \qquad \left|\mathbf{S}_W^{-1}\mathbf{S}_B\right|=\prod_{i=1}^{d}\lambda_i \qquad \text{（最大化）}$$

$$\mathrm{tr}\left(\mathbf{S}_T^{-1}\mathbf{S}_W\right)=\sum_{i=1}^{d}\frac{1}{1+\lambda_i}, \qquad \frac{|\mathbf{S}_W|}{|\mathbf{S}_T|}=\prod_{i=1}^{d}\frac{1}{1+\lambda_i} \qquad \text{（最小化）}$$

其中，λ_i 为矩阵 $(\mathbf{S}_W)^{-1}\mathbf{S}_B$ 的特征值。

由于 S_T 并不依赖于数据如何划分，所以最小化 $|\mathbf{S}_W|$ 与最小化 $|\mathbf{S}_W|/|\mathbf{S}_T|$ 是等价的。

Thank All of You!