面向高维数据的PCA-Hubness聚类方法

葛亮，郎江涛，唐黄，唐允恒

（重庆大学计算机学院，重庆，400044）

**摘要：**维数灾难在各个领域给各种机器学习方法带来了诸多挑战。在高维空间中，由于数据的稀疏性以及距离的集中，从而导致高维数据的聚类变得异常困难。因此，提出了PCA-Hubness 聚类方法用于解决高维数据的聚类问题。PCA-Hubness聚类方法利用 hubness和本征维度的相互关系，以偏度的变化率为降维依据，保证了在对高维数据降维时不会损失过多的有价值信息，有利于提高聚类效果。此算法在UCI数据集上进行实验，相比基于hub的算法平均提高了60% 的轮廓系数。

**关键字：**聚类；高维数据；本征维度；Hubness；PCA

Clustering High-Dimensional Data using PCA-Hubness

Ge Liang，Lang Jiangtao，Tang Huang，Tang Yunheng

(School of Computer Science, Chongqing University, Chongqing, 400044)

**Abstract:** Curse of dimensionality presents a number of challenges in various fields for machine learning methods. In high-dimensional space, the difficulty of data sparseness and concentration of distance, which makes it difficult to cluster. Therefore, the PCA-Hubness clustering method is proposed to solve the clustering problem of high-dimensional data. PCA-Hubness clustering method uses the relationship between hubness and intrinsic dimension, and bases on the degree of skewness, which ensures that the valuable information is not lost when the dimensions of high dimensional data is reduced, which is helpful to improve clustering effect. This algorithm performs experiments on the UCI dataset, which increases the silhouette index by 60% on average compared to the hub-based algorithm.

**Keywords:** Clustering; High-dimensional data; Intrinsic Dimension; Hubness; PCA

# 1 问题的提出

通常在无监督学习过程中，聚类是将元素分成不同的组别或者更多的子集，使得分配到相同簇中的元素彼此之间比其它的数据点更为相似，也就是说，聚类算法的目的是要增加类内的相似性并减小类间的相似性。多年来，已提出多种聚类算法，可以大致分为以下五类：划分方法、层次方法、基于密度的方法、基于网格的方法和基于模型的方法[1]。然而，上述聚类算法在高维数据中却变得不再适用。这主要是由以下两个因素引起的：空的空间现象（Empty Space Phenomenon）和距离的集中（Concentration of Distances）。前者指的是当维数提高时，空间的体积提高太快，因而可用数据变得很稀疏[2]。后者是说高维数据空间表示出现了某种程度上的反直觉的特性。随着维度增加，数据间的距离趋于相同，这可能会导致基于距离的算法性能变差。这便是机器学习中令人头疼的维数灾难问题。然而，由于本征维数的存在，许多高维空间中的数据集可削减至低维空间数据，而不必丢失重要信息。在高维数据中，某些点易频繁地出现在其它点的k近邻列表中，这称为 hubness 现象，这些点称之为 hubs[6]。高维数据中存在着的冗余和噪声特征维度对聚类造成了严重的影响，然而无目标的降维又会损失重要的有价值信息。本文利用 hubness和本征维度的相互关系，以偏度的变化率为降维依据，保证了在对高维数据降维时不会损失过多的有价值信息，有利于提高聚类效果，实验结果表明此方法是可行的。

# 2相关工作

近年来在涉及声音和图像数据的若干应用领域中观察到 hubness 现象（Aucouturier and Pachet，2007；Doddington et al.，1998；Hicklin et al.，2005）， 此外，Jebara 等人简要地描述了在半监督学习的邻域图构造过程中出现的hubness 现象（Tony Jebara et al 2009）[3]。Amina M 等人通过将 hub 引入到 k-means 算法中从而形成了基于 hub 的算法（Amina M et al 2015）[4]。尽管在数据聚类中 hubness 这一现象并没有给予过多关注，然而 k近邻列表却广泛使用在诸多聚类中。k近邻列表通过观察 k 个最近邻所确定的空间体积来计算密度估计。基于密度的聚类算法的主要目标是寻找被低密度区域分离的高密度区域[5]。在高维空间中，这常常难以估计，因为数据非常稀疏。因此，为了解决上述问题，本文引入了 hubness 新的概念。

## 2.1 Hubness 现象

令 表示一组数据点，其中 为数据集 的元素。令 表示在 空间中的一个距离函数 ，其中 如下定义：

在此基础之上，定义 ， 表示为在 空间中， 出现在其它 k 近邻列表中的次数，也记为 K-occurrence。 数据点的 bad k-occurrences 表示为 ，是指数据点 x 作为数据集 D 中其它的点的 k近邻次数，并且 x 点的标签和那些点的标签不匹配。数据点的 good k-occurrences 表示为 ， 是指点 x 的标签与那些点的标签相匹配[6]。为了表征 的非对称性，我们使用 k-occurrences 分布的标准第三矩，

其中 和 分别是 的均值和标准差。

## 2.2 基于hub的聚类

具有高 hubness分数的点更易接近簇中心 [6]。将 hubness 视为一种局部中心度量方式，则可以以各种方式使用它进行聚类。基于hub的聚类算法主要有以下4种： deterministic，probabilistic，hybrid 和 kernel。这4种方法均为 k-means 算法的扩展。在 deterministic 方法中，首先确定簇的数量，然后使用 k-means 算法进行聚类，在每次聚类的过程中将当前簇中具有高 hubness 分数的点作为簇中心。Probabilistic 方法使用模拟退火算法以一定概率 选择高 hubness 分数的点作为当前簇的中心。Deterministic 和 probabilistic 方法只依赖于距离矩阵而不必关心数据的表现形式。为了尽可能地获取数据的中心位置则需要使用 hybrid 方法。在 hybrid 方法中，使用数据点的 hubness 分数来指导搜索，但最终会形成基于质心的簇结构。kernel 方法在前三者基础上可以对非超球面簇集进行处理。基于 hub 的聚类算法用于高维数据，由此可见随着维度的增加聚类时间和迭代次数也随之增加。虽然基于 hub 的聚类算法可以处理高维数据，然而高维数据中存在的冗余和噪声特征却并未得到解决，这不利于聚类分析。

# 3 PCA-Hubness聚类算法

主成分分析（Principal Components Analysis，PCA）经常用于减少数据集的维数，同时保持数据集中的对方差贡献最大的特征。这是通过保留低阶主成分，忽略高阶主成分做到的。这样低阶成分往往能够保留住数据的最重要方面[7]。主成分分析主要是通过对协方差矩阵进行特征分解，以得出数据的主成分（即特征向量）与它们的权值（即特征值）。这可以理解为对原数据中的方差做出解释：哪一个方向上的数据值对方差的影响最大？换而言之，PCA 提供了一种降低数据维度的有效办法；如果分析者在原数据中除掉最小的特征值所对应的成分，那么所得的低维度数据必定是最优化的（也即，这样降低维度必定是失去讯息最少的方法）。

通过使用降维来保存大部分数据信息的主成分分析的观点是不正确的。确实如此，当没有任何假设信息的信号模型时，主成分分析在降维的同时并不能保证信息的不丢失，其中信息是由香农熵来衡量的。 因此，下文中将会探讨在使用降维技术 PCA 的情况下 的偏度和本征维数的相互作用。此研究的主要目的在于探讨降维是否能够缓解 的偏度这一问题。“因为观察到的 的偏度与与本征维数强烈相关，本征维数对 到数据集的均值或到最接近簇的均值有着积极影响，这意味着在较高（本征）维度中，hubs 变得越来越接近数据集或最接近簇的中心”[6]。

实验过程中采用的距离度量方法是闵可夫斯基距离（Minkowski distance），它是衡量数值点之间距离的一种非常常见的方法，假设数值点 P 和 Q 坐标如下：

，

那么，闵可夫斯基距离定义为：

该距离最常用的 p 值是 2 和 1, 前者是欧几里得距离（Euclidean distance），后者是曼哈顿距离（Manhattan distance）。可夫斯基距离比较直观，但是它与数据的分布无关，具有一定的局限性，如果 x 方向的幅值远远大于 y 方向的值，这个距离公式就会过度放大 x 维度的作用。所以，在计算距离之前，我们可能还需要对数据进行 z-transform 处理，即减去均值，除以标准差：

其中 是该维度上的均值， 是该维度上的标准差。可以看到，上述处理开始体现数据的统计特性了。这种方法在假设数据各个维度不相关的情况下利用数据分布的特性计算出不同的距离。

图1 实验流程图

图 1 为整个实验的流程图。首先，构建KNN 邻域矩阵，计算每个点的逆近邻数。然后，用 PCA 进行降维，在降维的过程中通过偏度的变化率来控制降维的程度，以防损失过多重要的有价值信息。最后，在获取降维数据后利用基于hub 的算法进行聚类分析。

为了探究在使用降维技术的情况下 的偏度和本征维数的相互作用，使用了来自加州大学尔湾分校(UCI) 机器学习库的数据集进行观测 的分布。在表1中包含了以下信息：数据集的大小（，第2列）；维数（，第3列）；类别数（，第4列）。

表1 真实数据集

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 数据集 | n | d | cls | 数据集 | n | d | cls |
| arraythmia | 452 | 279 | 10 | mfeat-fou | 2000 | 76 | 10 |
| Ionosphere | 351 | 34 | 2 | spectrometer | 208 | 60 | 10 |
| musk | 476 | 166 | 2 | sonar | 208 | 60 | 2 |
| mfeat\_factors | 2000 | 216 | 10 |  |  |  |  |

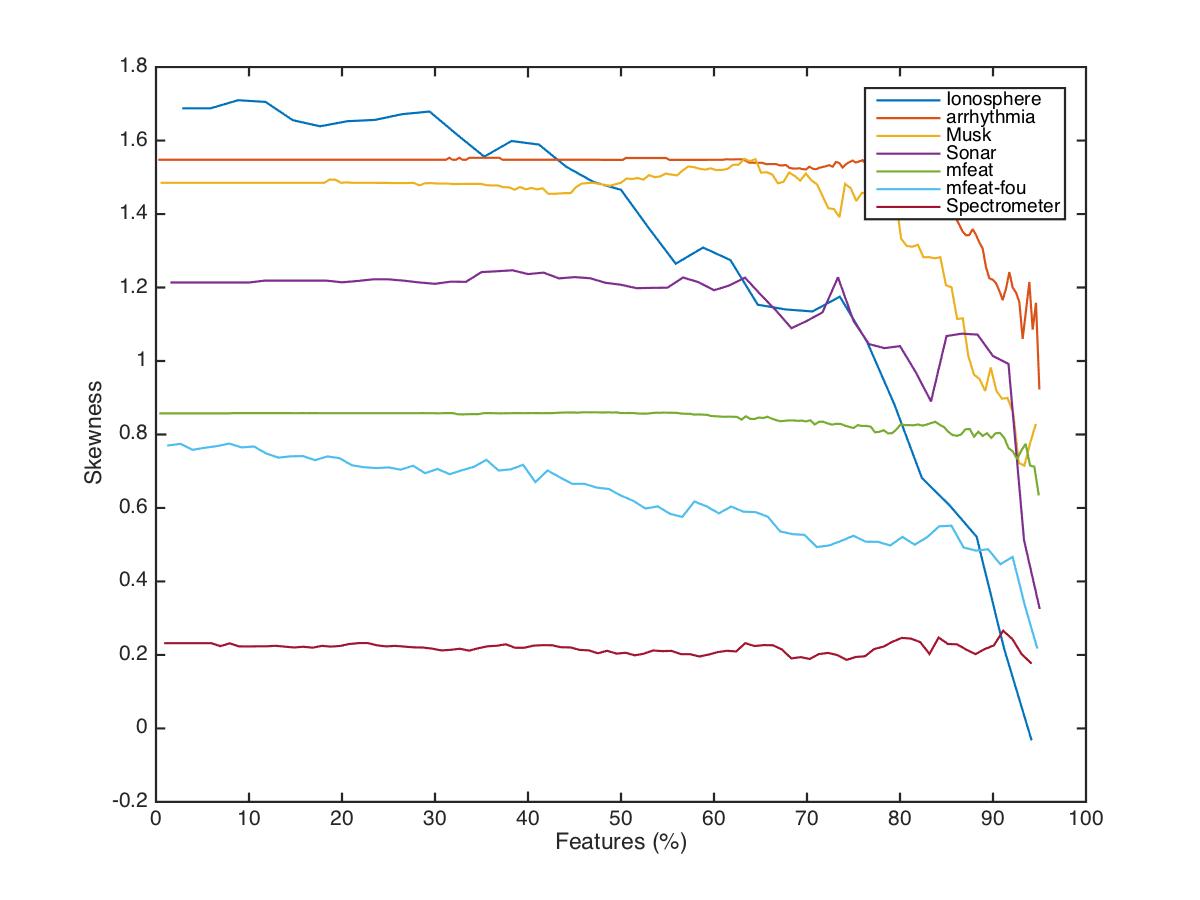


图 2 特征维度与偏度的关系

图 2 描述了针对若干个真实数据集（musk，sonar，mfeat-fou等）通过降维方法获得的维数占原有数据集维数的百分比与 之间的相互关系。数据之间距离的度量方法为Minkowski 距离，其中 的取值分别为：2（Euclidean distance）。 从左往右观察，对于大部分数据集而言利用PCA 降维算法， 保持相对恒定直到降维后留下特征的百分比较小时才会陡然下降。因此，当达到数据集的本征维数时若继续减小维数则会导致有价值的信息丢失。针对 PCA 方法对数据进行降维时，若降维后本征维数未发生明显变化，那么降维并不会对 hubness 这一现象有显著影响。

# 4 实验结果

实验数据来源于加州大学尔湾分校(UCI) 机器学习库。表2对应的第5列为真实数据集的偏度值 ，表明对于大多数数据集的 的分布向右倾斜。虽然 的值是固定的，但是使用其它的 值也可得到类似的结果。在实验之前，数据集中的所有单个特征均作了归一化处理。轮廓系数（Silhouette Index）为聚类结果的评测指标[7]，其计算公式如下所示：

其中， 表示 向量到同一簇内其他点不相似程度的平均值， 表示 向量到其他簇的平均不相似程度的最小值。可见轮廓系数的值总是介于 [-1,1] ，越趋近于1代表内聚度和分离度都相对较优。将所有点的轮廓系数求平均，就是该聚类结果总的轮廓系数。实验的结果如表 2 所示。其中，KMEANS为标准的kmeans聚类方法，GHPKM是在每次聚类的过程中将当前簇中最高 hubness 分数的点作为其簇中心。 Ker-KM是在GHPKM的基础上引入kernel方法从而可以对非超球面簇集进行聚类。PH-KM为本文的聚类方法。下表中加粗的数据表示的是当前数据集的最优值。

表2 轮廓系数

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| data set | size | d | cls |  | dist | KMEANS | GHPKM[8] | Ker-KM[4] | PH-KM |
| Ionosphere | 351 | 34 | 2 | 1.72 |  | 0.28 | 0.27 | 0.34 | **0.41** |
| mfeat\_factors | 2000 | 216 | 10 | 0.83 |  | 0.17 | 0.18 | 0.15 | **0.24** |
| mfeat-fou | 2000 | 76 | 10 | 1.28 |  | 0.07 | 0.07 | -0.03 | **0.24** |
| musk | 476 | 166 | 2 | 1.33 |  | 0.28 | 0.27 | 0.28 | **0.31** |
| parkinsons | 195 | 22 | 2 | 0.73 |  | 0.37 | 0.37 | 0.45 | **0.88** |
| sonar | 208 | 60 | 2 | 1.35 |  | 0.19 | 0.15 | 0.13 | **0.22** |
| wpbc | 198 | 33 | 2 | 0.86 |  | 0.16 | 0.16 | 0.17 | **0.32** |

实验结果表明，在缺乏 hubness 特性的情况下，如wpbc、mfeat\_factors，基于 hubness 的方法表现不佳，其性能接近于 KMEANS；一些有较高 hubness的数据集，如Ionosphere、mfeat-fou，因在降维的过程中其本征维数几乎保持稳定顾聚类结果较佳。

# 5 结论

据本文作者了解，这是首次使用 hubness 结合 PCA 对数据进行聚类分析的相关工作。本文通过探讨在使用降维技术 PCA 的情况下 的偏度和本征维数的相互作用从而说明：对于大部分数据集而言利用PCA 降维算法， 保持相对稳定直到降维后留下的特征的百分比较小时才会陡然下降。基于 hub 的算法是专为高维数据设计的。因为大多数标准聚类算法的性能随着维数的增加而降低。 另一方面，hubness 是高维数据的本征属性，通过利用降维技术 PCA 而又基本保持本征维数不变的情况下对数据进行实验从而提高聚类结果。

参考文献：

[1] Jiawei Han．数据挖掘概念与技术[C] 机械工业出版社，2012

[2] Houle, M. E.，Kriegel, H. P.，Kröger, P.，Schubert, E.，Zimek. A. Scientific and Statistical Database Management[J]，Lecture Notes in Computer Science 6187: 482. 2010.

[3] Tony Jebara，Jun Wang，Shih-Fu Chang. Graph construction and b-matching for semi-supervised learning[J]. In Proceedings of the 26th International Conference on Machine Learning(ICML)， pages 441–448，2009.

[4] Amina M，Syed Farook K. A Novel Approach for Clustering High-Dimensional Data using Kernel Hubness[J]. International Confenrence on Advances in Computing and Communication. 2015.

[5] Ester Martin，Kriegel Hans-Peter， Sander,Jörg，Xu, Xiaowei，Simoudis Evangelos，Han, Jiawei，Fayyad Usama M., eds. A density-based algorithm for discovering clusters in large spatial databases with noise[J]. Proceedings of the Second International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD-96). AAAI Press. pp. 226–231.

[6] Milosˇ Radovanovic ́，Alexandros Nanopoulos，Mirjana Ivanovic ́. Hubs in Space: Popular Nearest Neighbors in High-Dimensional Data[J]， Journal of Machine Learning Research 11 (2010) 2487-2531. 2010

[7] Abdi. H，Williams L.J. Principal component analysis[J]. Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics. 2 (4): 433–459. 2010

[8] Peter J. Rousseeuw. Silhouettes: a Graphical Aid to the Interpretation and Validation of Cluster Analysis[J]. Computational and Applied Mathematics. 20: 53–65. 1987.

[9] Nenad Toma sev，Milo s Radovanovi c，Dunja Mladeni c，and Mirjana Ivanovi c. The Role of Hubness in Clustering High-Dimensional Data[J]，IEEE TRANSACTIONS ON KNOWLEDGE AND DATA ENGINEERING, VOL. 26, NO. 3，2014

**作者简介**：郎江涛（1990-），男，山西人，硕士生，本科学士学位，研究方向计算机应用技术

**联系地址**：重庆市重庆大学计算机学院

**邮编**：400044

**电子邮箱：shuiyibu.ja@gmail.com**

**联系电话：**18883701550

**QQ：**296017297