哈尔滨工业大学计算机科学与技术学院

实验报告

课程名称：机器学习

课程类型：必修

实验题目：实现k-means聚类和混合高斯模型

学号：1160300314

姓名：朱明彦

一、实验目的

实现一个k-means算法和混合高斯模型，并用EM算法估计模型中的参数。

二、实验要求及实验环境

实验要求

测试

用高斯分布产生k个高斯分布的数据(不同均值和方差)(其中参数自己设定)

1. 用k-means聚类测试效果，
2. 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，考察EM算法是否可以获得正确结果(与你的设定结果比较)。

应用

可以在UCI上找一个简单问题数据，用你实现的GMM进行聚类。

实验环境

- **OS**: Ubuntu 16.04.5 LTS
- python 3.7.0

三、设计思想(本程序中用到的主要算法及数据结构)

1.算法原理

1.1 K-Means算法原理

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

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

式(1)中，$\mu_\mathbf{i}=\dfrac{1}{|\mathbf{C_i}|}\sum_{\mathbf{x}\in\mathbf{C_i}}\mathbf{x}$是簇$\mathbf{C_i}$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。

> K-Means的优化目标需要考察到样本集D的全部可能的划分，这是一个NP难的问题。因此K-Means采用贪心策略，通过迭代优化来近似求解。

迭代优化的策略如下：

1. 首先初始化一组均值向量
2. 根据初始化的均值向量给出样本集D的一个划分，**样本距离那个簇的均值向量距离最近，则将该样本划归到哪个簇**
3. 再根据这个划分来计算每个簇内真实的均值向量，如果真实的均值向量与假设的均值向量相同，假设正确；否则，将真实的均值向量作为新的假设均值向量，回到1.继续迭代求解。

1.2 GMM算法原理

首先给出n维样本空间中的随机变量$\mathbf{x}$服从高斯分布的密度函数：

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

其中$\mu=\{\mu_1,\mu_2,\dots,\mu_n\}$为n维的均值向量，$\Sigma$是$n\times n$的协方差阵。

再给出混合高斯分布的定义：

$$p_{\mathcal{M}}=\sum_{i=1}^{k}\alpha_i p(\mathbf{x}|\mu_{\mathbf{i}},\Sigma_i) \tag{3}$$

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。其中$\mu_{\mathbf{i}},\Sigma_i$是第$i$个高斯分布的均值和协方差矩阵，$\alpha_i>0$为相应的混合系数，满足$\sum_{i=1}^{k}\alpha_i=1$。

我们假设对于样本集D由高斯混合分布给出：首先根据$\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_k$定义的先验分布选择高斯分布混合成分，即$p(z_j=i)=\alpha_i$，其中$z_j\in\{1,2,\dots,k\}$；然后，根据被选择的高斯混合成分的概率密度函数进行采样，从而生成相应的样本。那么根据贝叶斯定理，z_j的后验分布对应于：

$$p_{\mathcal{M}}(z_j=i|\mathbf{x_j})=\frac{p(z_j=i)\cdot p_{\mathcal{M}}(\mathbf{x_j}|z_j=i)}{p_{\mathcal{M}}(\mathbf{x_j})}=\frac{\alpha_i\cdot p(\mathbf{x_j}|\mu_{\mathbf{i}},\Sigma_i)}{\sum\limits_{l=1}^{k}\alpha_l p(\mathbf{x_j}|\mu_{\mathbf{l}},\Sigma_l)} \tag{4}$$

$p_{\mathcal{M}}(z_j=i|\mathbf{x_j})$给出了样本$\mathbf{x_j}$由第$i$个高斯混合分布生成的后验概率。

当式(3)已知时，混合高斯模型将样本集D划分成了k个簇$C=\{\mathbf{C_1},\mathbf{C_2},\dots,\mathbf{C_k}\}$，对于每一个样本$\mathbf{x_j}$，其簇标记为$\lambda_j$：

$$\lambda_j=\mathbf{arg\ max}_i p_{\mathcal{M}}(z_j=i|\mathbf{x_j}) \tag{5}$$

关键在与参数$\{\alpha_i,\mu_i,\Sigma_i|i\in\{1,2,\dots,k\}\}$的求解，如果给定样本集$D$可以采用极大似然估计(最大化对数似然)：

$$LL(D)=\ln\left(\prod_{j=1}^{m}p_{\mathcal{M}}(\mathbf{x_j})\right)=\sum_{j=1}^{m}\ln\left(\sum_{i=1}^{k}\alpha_i\cdot p(\mathbf{x_j}|\mu_i,\Sigma_i)\right) \tag{6}$$

使式(6)最大化，对μ_i求导令导数为0有：

$$\sum_{j=1}^{m}\frac{\alpha_i\cdot p(\mathbf{x_j}|\mu_i,\Sigma_i)}{\sum\limits_{l=1}^{k}\alpha_l\cdot p(\mathbf{x_j}|\mu_l,\Sigma_l)}\Sigma_i^{-1}(\mathbf{x_j}-\mu_{\mathbf{i}})=0 \tag{7}$$

两边同乘Σ_i进行化简有：

$$\mu_i = \frac{\sum_{j=1}^{m} p_{\mathcal{M}}(z_j = i|\mathbf{x_j}) \cdot \mathbf{x_j}}{\sum_{j=1}^{m} p_{\mathcal{M}}(z_j = i|\mathbf{x_j})} \tag{8}$$

即各个混合成分的均值可以通过样本加权平均来估计，权重样本式每个样本属于该成分的后验概率。

同理式(6)对Σ_i求导令导数为0有：

$$\Sigma_i = \frac{\sum_{j=1}^{m} p_{\mathcal{M}}(z_j = i|\mathbf{x_j}) \cdot (\mathbf{x_j} - \mu_\mathbf{i})(\mathbf{x_j} - \mu_\mathbf{i})^T}{\sum_{j=1}^{m} p_{\mathcal{M}}(z_j = i|\mathbf{x_j})} \tag{9}$$

对于混合系数α_i，由于其还需要满足$\alpha_i \geq 0, \sum_i^k \alpha_i = 1$，所以在式$(6)$的基础上增加拉格朗日项：

$$LL(D) + \lambda \left(\sum_{i=1}^{k} \alpha_i - 1 \right) \tag{10}$$

其中λ为拉格朗日乘子，由式(10)对α_i求导并令导数为0有：

$$\sum_{j=1}^{m} \frac{p(\mathbf{x_j}|\mu_i, \Sigma_i)}{\sum_{l=1}^{k} \alpha_l \cdot p(\mathbf{x_j}|\mu_l, \Sigma_l)} + \lambda = 0 \tag{11}$$

式(11)两边同乘α_i并将$i \in \{1, 2, \ldots, k\}$代入相加得：

$$\sum_{i=1}^{k} \left(\alpha_i \cdot \sum_{j=1}^{m} \frac{p(\mathbf{x_j}|\mu_i, \Sigma_i)}{\sum\limits_{l=1}^{k} \alpha_l \cdot p(\mathbf{x_j}|\mu_i, \Sigma_i)} \right) + \lambda \sum_{i=1}^{k} \alpha_i = 0 \tag{12}$$

整理一下，由于$\sum_{i=1}^{k} \alpha_i = 1$:

$$\sum_{j=1}^{m} \left(\frac{\sum\limits_{i=1}^{k} \alpha_i \cdot p(\mathbf{x_j}|\mu_i, \Sigma_i)}{\sum\limits_{l=1}^{k} \alpha_l \cdot p(\mathbf{x_j}|\mu_i, \Sigma_i)} \right) + \lambda = m + \lambda = 0 \tag{13}$$

从而有$\lambda = -m$，结合式(11)有：

$$\alpha_i = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^{m} \frac{p(\mathbf{x_j}|\mu_i, \Sigma_i)}{\sum_{l=1}^{k} \alpha_l \cdot p(\mathbf{x_j}|\mu_l, \Sigma_l)} \tag{14}$$

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。

2.算法的实现

2.1 K-Means算法实现

2.1.1 随机选择样本作为初始均值向量

1. 从样本集D中随机选择k个样本作为初始化的假设均值向量$\{\mu_\mathbf{1}, \mu_\mathbf{2}, \ldots, \mu_\mathbf{k}\}$
2. 重复迭代直到算法收敛：
    1. 初始化$\mathbf{C_i} = \emptyset, i = 1, 2, \ldots, k$

2. 对$\mathbf{x_j}, j = 1, 2, \ldots, m$标记为$\lambda_j$，使得$\lambda_j = \mathbf{arg\ min}_i ||\mathbf{x_j} - \mu_\mathbf{i}||$，即使得每个$\mathbf{x_j}$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$\hat{\mu_\mathbf{i}} = \frac{1}{|\mathbf{C_i}|} \sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{C_i}} \mathbf{x}$
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

2.1.2 利用最大化初始均值向量之间距离方式进行选择

在下面的实验结果分析中，我们可以看到2.1.1 K-Means算法的聚类结果严重依赖于初始化的簇中心，所以当初始化的簇中心"不好"的时候，会导致整个的聚类结果不好，所以下面采用了一种最大化簇中心距离的方法，选择均值向量。

仅对于2.1.1节中2.1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$\{\mu_\mathbf{1}, \mu_\mathbf{2}, \ldots, \mu_\mathbf{i}\}$，则在$D$ $\{\mu_\mathbf{1}, \mu_\mathbf{2}, \ldots, \mu_\mathbf{i}\}$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$\{\mu_\mathbf{1}, \mu_\mathbf{2}, \ldots, \mu_\mathbf{i}, \mu_{\mathbf{i+1}}\}$ 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。

2.2 GMM算法实现

GMM常采用EM算法进行迭代优化求解，其中每次迭代中，先根据当前参数来计算每个样本属于每个高斯成分的后验概率，所谓"E步"；再根据式$(8)(9)(14)$更新参数，所谓"M步"。

给定样本集D和高斯混合成分数目k。

1. 随机初始化参数$\{\alpha_i, \mu_i, \Sigma_i | i \in \{1, 2, \ldots, k\}\}$以及$\mathbf{C_i} = \emptyset$
2. 开始迭代至带到迭代次数或者是参数值不再发生变化：
   1. E步，根据式(4)计算每个样本由各个混合高斯成分生成的后验概率
   2. M步，根据式$(8)(9)(14)$更新参数$\{\alpha_i, \mu_i, \Sigma_i | i \in \{1, 2, \ldots, k\}\}$
3. 根据式(5)确定每个样本的簇标记λ_j，并将其加入相应的簇$\mathbf{C}_{\lambda\mathbf{j}} = \mathbf{C}_{\lambda\mathbf{j}} \cup \{\mathbf{x_j}\}$
4. 输出簇划分$C = \{\mathbf{C_1}, \mathbf{C_2}, \ldots, \mathbf{C_k}\}$

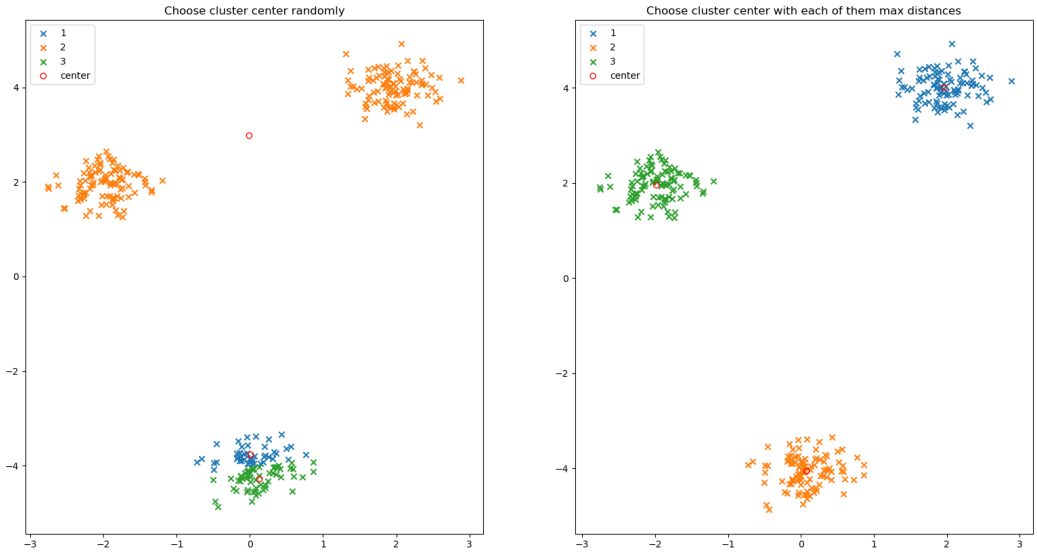
四、实验结果分析

1. 生成数据的测试

在生成数据时，使用的是二维空间上的数据，便于数据可视化；利用二维高斯分布，按照给定的均值和样本数量要求生成数据。

1.1 K-Means两种不同初始值方法结果对比

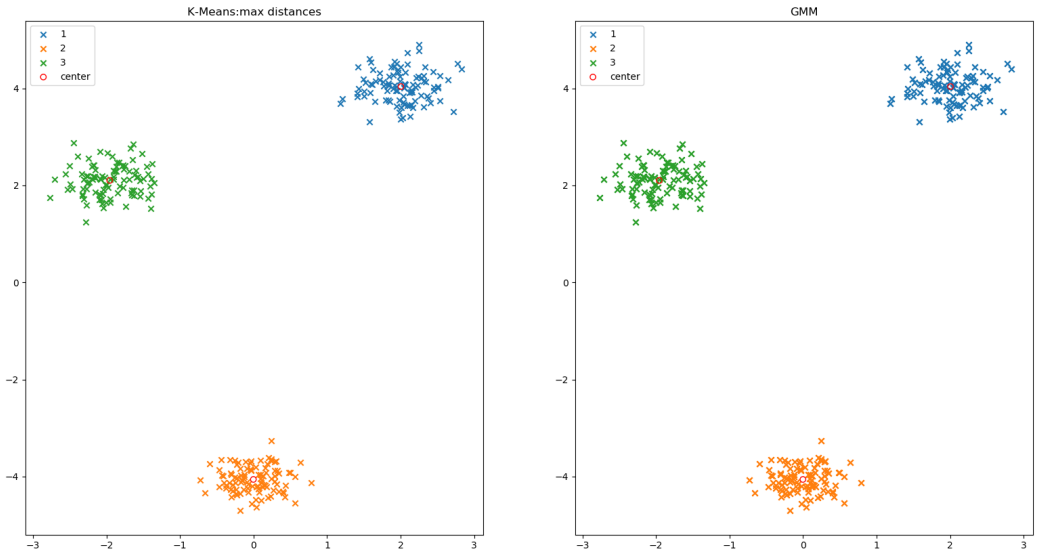
在三.2.1中提到了两种初始化的方式，在这里我们对比一下他们聚类的结果。



可以看到，在左侧，使用的随机选择初始簇中心的方式，在这次的运行中，就由于初始簇中心的问题，导致陷入局部最优解，没能有效地将样本分为三类；而在右侧则是使用选择距离最远的k个初始簇中心，将彼此之间的距离增大有效地划分了三类。

1.2 K-Means与GMM对比

同样使用生成数据，对比K-Means和GMM的结果如下：



可以看到，两种方法在生成数据上的表现类似，都可以实现聚类。

2. UCI数据测试

使用的UCI的数据是Iris(鸢尾花)数据集，根据其4个属性：

- 花萼长度
- 花萼宽度

- 花瓣长度
- 花瓣宽度 来预测鸢尾花属于(Setosa, Versicolour, Virginica)三类中的哪一类。

由于k-means和GMM输出的结果中，类别的编号可能是不同的，所以将所有可能的序号排列均进行测试，**与测试样本中给出的label进行对比**，得到的最优的结果作为最终的结果。此外还需要标注每个样本属于哪个类别。 最终的测试结果如下,上面为GMM结果，下面为K-means的准确度：

```
0.7133333333333334
0.8866666666666667
```

3. 关于GMM算法迭代中变化

在实际执行中，将GMM初始参数的初始化方式与K-Means类似，均是选择k个距离最远的均值μ_i，协方差阵初始化为$n \times n$的对角阵，对角元素均为0.1，混合系数取$\frac{1}{k}$。 在执行过程中，查看似然值的变化，如下：

```
GMM
0
-inf
1
-274.58376891176636
2
-255.01870933124792
3
-238.1119235634578
4
-225.23891479668256
5
-219.22643139995486
6
-216.5986611795422
7
-215.25848291145974
8
-214.4466394600144
9
-213.81931561860236
10
-213.25697700180416
```

可以看到，**似然值始终在增大**，与预期相符。

五、结论

- K-Means实际上假设数据式呈球状分布，与之相比GMM使用更加一般的数据表示即高斯分布
- K-Means假设使用的欧式距离来衡量样本与各个簇中心的相似度(假设数据的各个维度对于相似度计算的作用是相同的)

- K-Means的簇中心初始化对于最终的结果有很大的影响，如果选择不好初始的簇中心值容易使之陷入局部最优解
- GMM使用EM算法进行迭代优化，因为其涉及到隐变量的问题，没有之前的完全数据，而是在不完全数据上进行。

六、参考文献

- Christopher Bishop. Pattern Recognition and Machine Learning.
- 周志华 著. 机器学习, 北京: 清华大学出版社, 2016.1
- UCI Iris
- AI Note

七、附录:源代码(带注释)

- 主程序见`lab3.py`
- K-means聚类算法见`k_means.py`
- 混合高斯模型见`gaussian_mixture_model.py`
- 从Iris数据集中读取数据见`iris_read.py`