

第4讲:聚类分析

康雁飞

数量经济与商务统计系

Outline

- 1 为什么聚类?
- 2 如何度量相似性?
- 3 如何聚类?
- 4 作业

Outline

- 1 为什么聚类?
- 2 如何度量相似性?
- 3 如何聚类?
- 4 作业

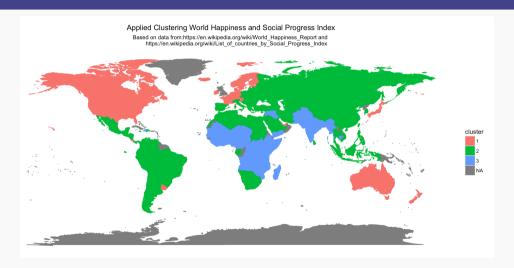
为什么聚类?

- 1 海量数据
- 2 指标多而杂
- 3 数据内在特征不直观

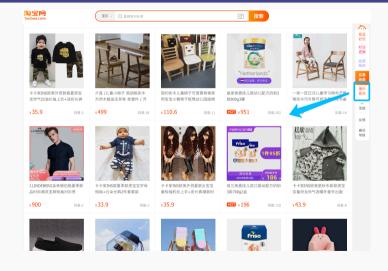


- 1 聚类分析(对数据)
- 2 主成分分析(对指标)

举例: 幸福指数



举例: 顾客行为



举例: 文本聚类

今日头条 发微头条 写文章 提问题 发视频 有什么新鲜事想告诉大家 西瓜视频 0/2000字 执点 № 图片 ② 表情 直播 时政微纪录 | 决战决胜——习近平指挥脱贫攻坚进行时 图片 视频 # 央视网新闻・65评论・剛剛 科技 习近平走秦晋, 关注脱贫攻坚三问题 娱乐 | 时政 | 四 新华网客户端 · 40评论 · 7分钟前 游戏 离奇! 时隔28年, 突然想起买过一套房! 上门发现竟住 体育 着陌生人 房产 → 中国青年网・427评论・15分钟前 備车帝 财经 事情闹大了, 上百名各国政要发联名公开信谴责 搞笑 国际 - 环球网·229评论·22分钟前 面名 鲁阳市政协副士度 九二学社鲁阳市委士委田荣士



Outline

- 1 为什么聚类?
- 2 如何度量相似性?
- 3 如何聚类?
- 4 作业

相似性度量 - 距离

- 在聚类分析中,如果样本点为有限维定量指标,常用明考夫斯基距离 (Minkowski distance)。
- 余弦距离(衡量文本之间的相似度通常用)。

明考夫斯基距离(Minkowski distance)

明考夫斯基距离:

$$d_q(x,y) = \left[\sum_{j=1}^p |x_j - y_j|^q\right]^{1/q}.$$

- 1 q = 1 时,即绝对值距离: $d_1(x,y) = \sum_{j=1}^p |x_j y_j|$.
- q=2时,即欧式距离: $d_2(x,y)=\sqrt{\sum\limits_{j=1}^p(x_j-y_j)^2}$.
- 図 $q=\infty$ 时,即切比雪夫距离: $d_{\infty}(x,y)=\max_{1\leq i\leq p}|x_{j}-y_{j}|$.

明考夫斯基距离

- **1** 最常用的是欧氏距离。它的优点是:坐标经旋转变换后,点和点之间 距离保持不变。
- 采用明氏距离时,应采用相同量纲的变量。
- 尽可能避免数据的多重相关性。

余弦距离

余弦距离:

$$\cos(x,y) = \frac{x \cdot y}{|x| \cdot |y|}.$$

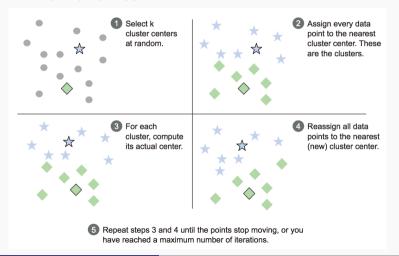
余弦距离可以衡量不同量纲的变量之间的距离(距离:文本)。

Outline

- 1 为什么聚类?
- 2 如何度量相似性?
- 3 如何聚类?
- 4 作业

k-均值聚类(k-means clustering)

k-均值聚类是一个迭代聚类算法。



k-均值聚类(k-means clustering)

k-均值聚类

- 1 确定类的个数 k。
- 随机抽取 k 个样本点作为 k 个类中心。
- 務每个样本点分配到距离其最近的类中。
- 4 重新计算类中心。

重复第3、4步直到样本点的类别不再变化或者达到了最大迭代次数。

如何选择 k?

- 如何衡量聚类质量 (goodness of clustering)?
- 组内距越小越好,组间距越大越好。
- 组内平方和:

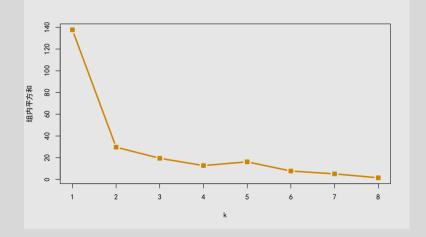
tot.within =
$$\sum_{k=1}^{k} \sum_{x_i \in C_k} (x_i - \mu_k)^2$$
,

其中 μ_k 为第 k 个类 C_k 的中心。

■ 问题: 组内平方和如何随 k 变化?

如何选择 k?

碎石图(Scree plot)



R 中进行 k-均值聚类

例:某企业生产新式大衣,将新产品的样品寄给九个城市的进货员,并附寄调查意见表征求对新产品的评价,评价分质量、款式、颜色三个方面,以十分评分。

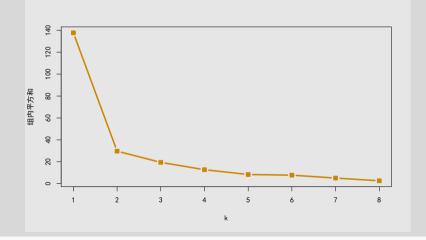
```
coat.scores <- read.csv('./data/coatscores.csv')
str(coat.scores)

## 'data frame': 9 obs. of 3 variables:</pre>
```

\$ Quality: int 3 4 10 8 7 3 8 6 9 # \$ Style : num 5 2 7.5 9.5 8 4 6.5 3 8.5 # \$ Color : num 4 5 8.5 7 9 3.5 7 5.5 6

选择k

碎石图(Scree plot)

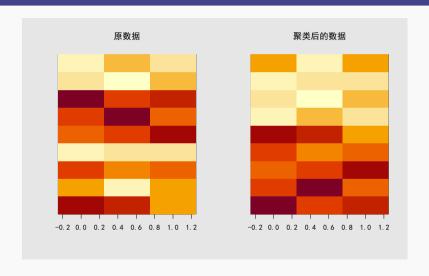


R 中进行 k-均值聚类

##

```
coat.scores.kmeans <- kmeans(coat.scores, 2)</pre>
coat.scores.kmeans
## K-means clustering with 2 clusters of sizes 5, 4
##
## Cluster means:
    Quality Style Color
## 1 8.4 8.0 7.5
## 2 4.0 3.5 4.5
##
## Clustering vector:
## [1] 2 2 1 1 1 2 1 2 1
##
## Within cluster sum of squares by cluster:
## [1] 16.2 13.5
   (between_SS / total_SS = 78.4 %)
##
## Available components:
```

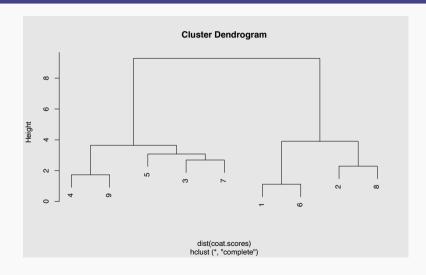
可视化



分层聚类(Hierachical clustering)

- 分层聚类算法也是一种迭代算法。
- 它不需要我们提前指定分类个数。
- 它可以输出一个树状结构。

分层聚类



分层聚类

分层聚类

- 每个样本点自成一类。
- 选择最近的两个类聚成一类。
- 计算新的类与类之间的距离。

重复第2、3步直至所有的样本点聚为一类。

如何计算类 C_1 与类 C_2 之间的距离?聚合指数

- 最短距离法: $D(C_1, C_2) = \min_{\substack{x_i \in C_1 \\ y_i \in C_2}} \{d(x_i, y_j)\}$.
- 显 最长距离法: $D(C_1, C_2) = \max_{\substack{x_i \in C_1 \\ y_j \in C_2}} \{d(x_i, y_j)\}.$
- **雪** 重心法: $D(C_1, C_2) = d(\bar{x}, \bar{y}).$
- 类平均法: $D(C_1, C_2) = \frac{1}{l \times m} \sum_{x_i \in C_1} \sum_{y_i \in C_2} d(x_i, y_j).$

例: 大衣评分

首先需要明确:

- 如何测度距离 $d(x_i, y_j)$? (欧式距离)
- \square 如何测度聚合指数 $D(C_1, C_2)$?(最长距离法)

例:大衣评分

```
dist(coat.scores)
```

首先 1 和 6 合并为一类。

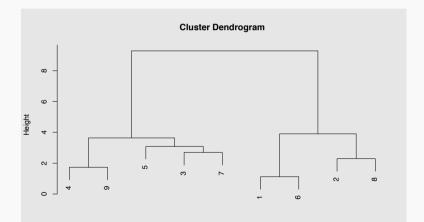
例: 大衣评分

coat.scores.hc\$merge

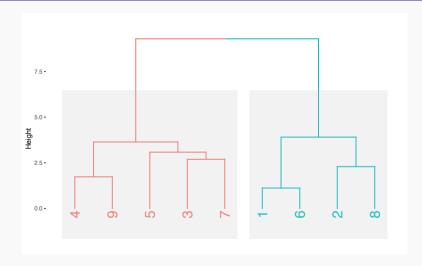
```
## [,1] [,2]
## [1,] -1 -6
## [2,] -4 -9
## [3,] -2 -8
## [4,] -3 -7
## [5,] -5 4
## [6,] 2 5
## [7,] 1 3
## [8,] 6 7
```

R中的层次聚类

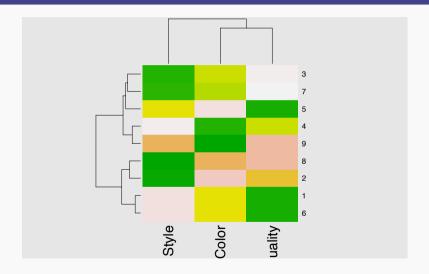
```
coat.scores.hc <- hclust(dist(coat.scores))
plot(coat.scores.hc)</pre>
```



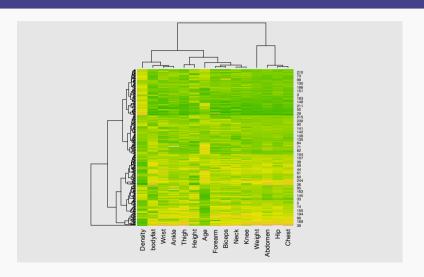
R中的层次聚类



热力图



热力图



变量聚类

- 注意:至今为止我们理解了样本的聚类。
- 有时候变量聚类非常有用(用户画像)。
- 变量之间的相似性度量: 相关系数。
- 变量类之间的聚合指数:最大系数法、最小系数法。

其他常用的聚类算法

机器学习中的无监督分类方法

- 1 单指标分裂聚类法
- 2 基于密度的聚类算法
- 自组织图聚类(Self-Organized Maps)
- 4 混合模型聚类
- 5 ..

Outline

- 1 为什么聚类?
- 2 如何度量相似性?
- 3 如何聚类?
- 4 作业

下表给出六种精神治疗药物的三种临床测量指标数据,请利用分层聚类做聚类分析(分别采用最短距离法和最长距离法)。

药物	吸入量	疗效	依赖性
速可眠	5	9	20
LSD	6	11	2
安定	4	5	20
吗啡	6	9	46
仙人球毒碱	5	7	1
酒精	3	1	12

请采用聚类分析的方法,对污染数据.xlsx进行聚类分析。并解释各类的意义。