数据科学导论

Introduction to Data Science

第四章 数据挖掘基础

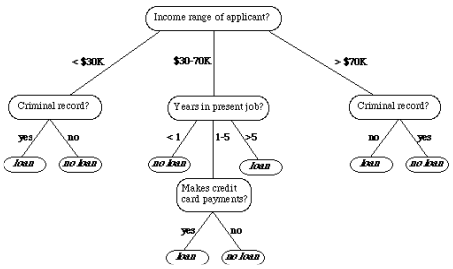
陈恩红，黄振亚
Email: huangzhy@ustc.edu.cn, cheneh@ustc.edu.cn

课程主页：
http://staff.ustc.edu.cn/~huangzhy/Course/DS2024.html

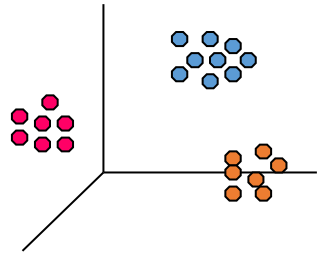
数据挖掘基础

- 数据挖掘——四个任务有哪些常用方法?

分类与预测



聚类



数据

	T		H		P	
	L	H	L	H	L	H
J	-6.0	8.8	60	100	986	1044
F	-2.8	10.9	48	100	973	1025
M	-5.6	17.7	34	100	976	1037
A	-1.2	22.2	27	100	996	1036
M	-0.8	27.8	25	100	1003	1034
J	5.2	29.1	26	100	998	1030
J	9.8	30.6	23	99	997	1027
A	5.6	26.1	31	100	992	1029
S	5.2	24.8	35	100	998	1028
O	-0.4	21.3	42	100	990	1031
N	-7.6	17.3	55	100	963	1023
D	-10.4	9.2	53	100	987	1039

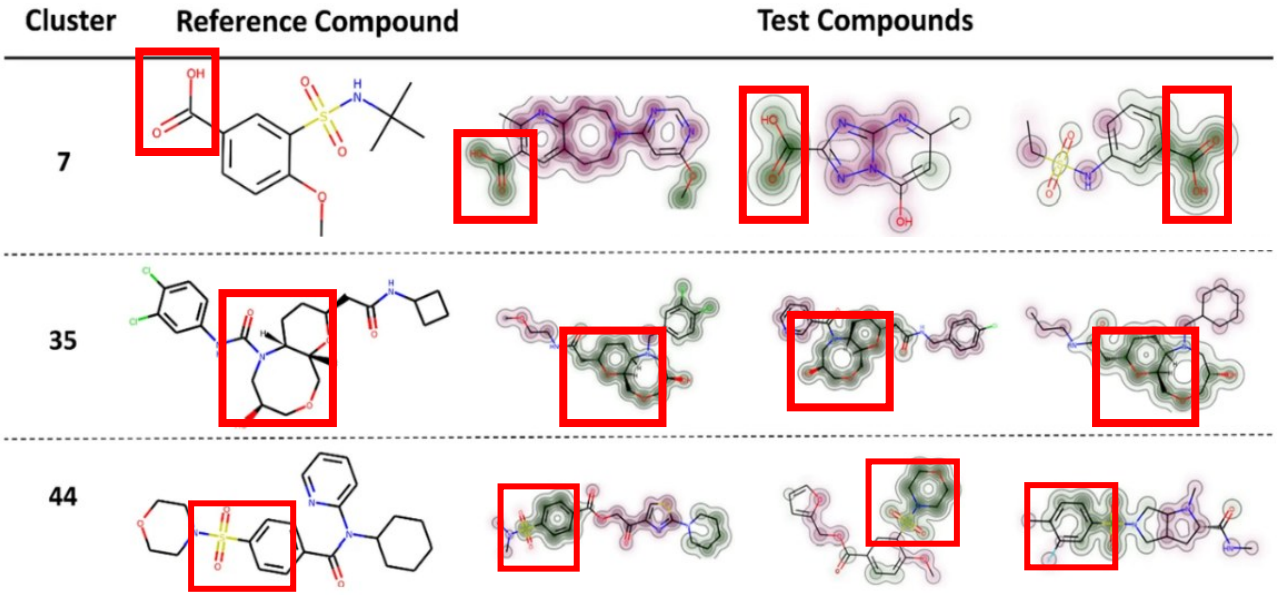
table 17a

2010 monthly weather variation, Cambridge (UK)

关联分析

聚类分析: 应用实例

- 案例一：分子与药物分析
  - 输入：生物医药分子
  - **结构相似度更高**的分子被分配到一个聚簇



- 第7 簇中含有芳香族羧酸酯
- 第35簇中含有芳基卤化物
- 第44簇中含有磺胺

➢ Hadipour, H., Liu, C., Davis, R., Cardona, S.T., & Hu, P. (2022). Deep clustering of small molecules at large-scale via variational autoencoder embedding and K-means. BMC Bioinformatics, 23.

聚类分析: 应用实例

- 案例二：疫情溯源
  - 输入：纽约市病例人群的信息：地理位置等
  - 对纽约市的冠状病毒病(COVID-19)**爆发场所**聚类， 定位的感染源

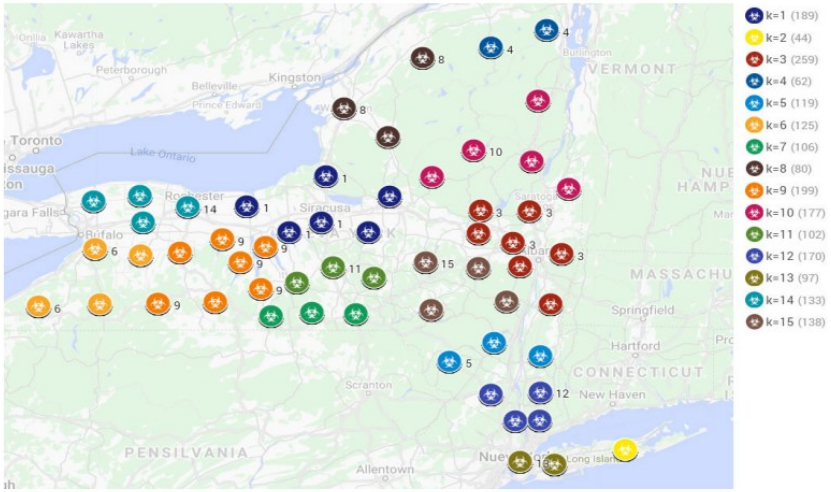


FIGURE 5. K-means clustering ($k = 15$) in New York state.

按病例的位置聚类，得到K个聚簇区域

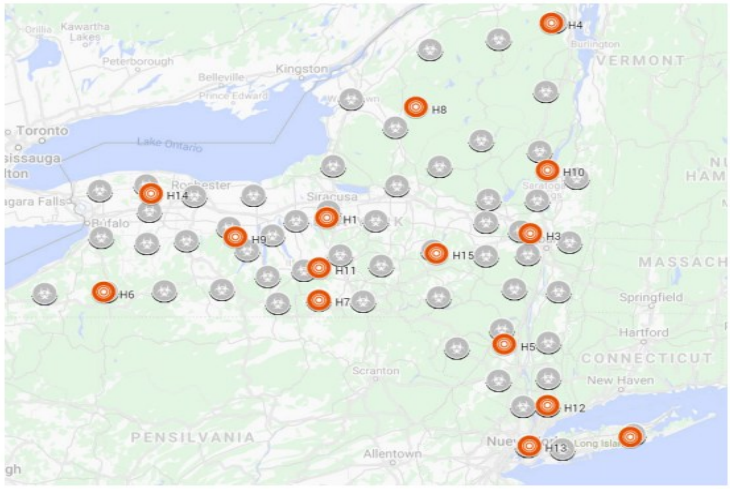


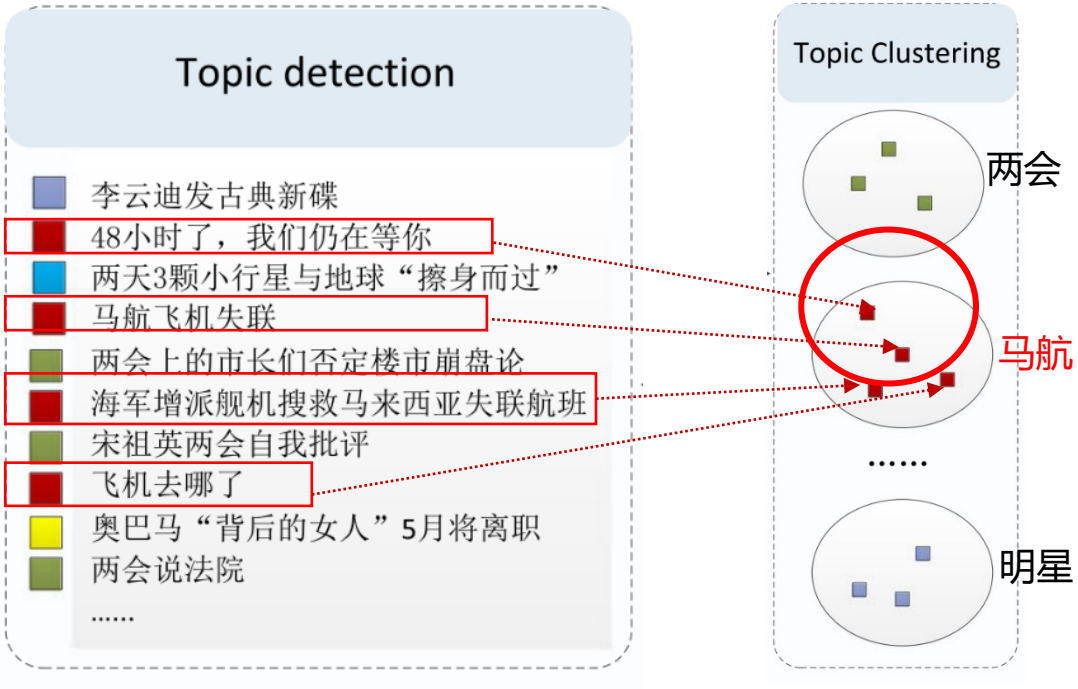
FIGURE 7. Hot spots H_k for each cluster in New York state (orange circles).

聚簇区域中心被视为感染源

➢ Guevara C, Peñas M S. Surveillance Routing of COVID-19 Infection Spread Using an Intelligent Infectious Diseases Algorithm[J]. Ieee Access, 2020, 8: 201925-201936.

聚类分析: 应用实例

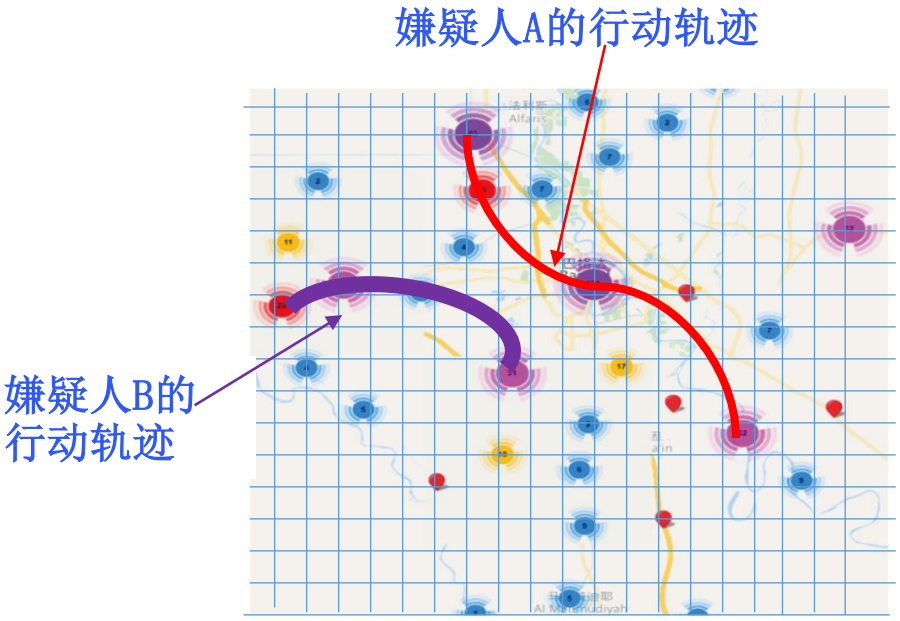
- 案例三：网络舆情分析-话题挖掘
  - 输入：社交媒体中的评论与话题
  - 话题聚类，同一话题簇中出现的**关键词相似**



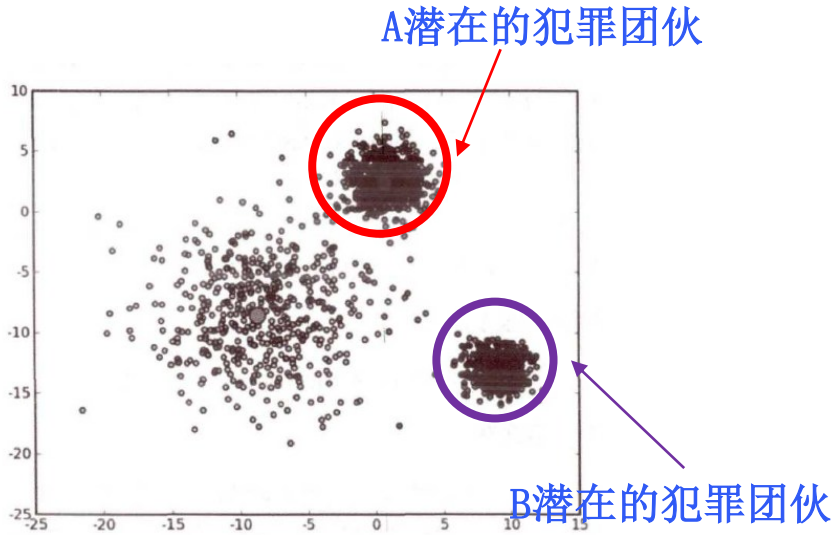
➢ Cai Y, Wu X, Xie X, et al. A topic mining method for multi-source network public opinion based on improved hierarchical clustering[C]//2019 IEEE DSC. IEEE, 2019: 439-444.

聚类分析: 应用实例

- 案例四：安防与维稳-犯罪团伙识别
  - 输入：人员轨迹时空数据：如网吧、酒店、车站等,
  - 对**嫌疑人的轨迹信息**进行聚类，找出犯罪团伙。



地理空间网格化



轨迹信息聚类结果

聚类分析: 应用实例

- 案例五：教育问题的聚类
  - 输入：数学应用题
  - 题目聚类，同类题目的解答模板一样

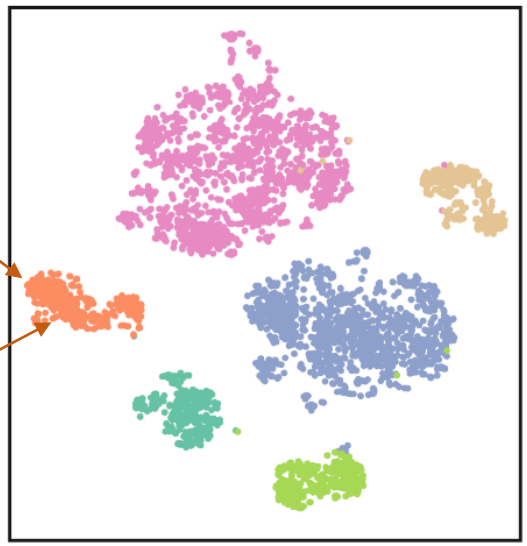
数学应用题

Prob. A: Norma has 88 cards. She loses 70. How many cards will Norma have ?

Eq: 88 - 70

Prob. B: Joyce starts with 75 apples. She gives 52 to Larry. How many apples does Joyce end with?

Eq: 75 - 52



基础运算的模式不同

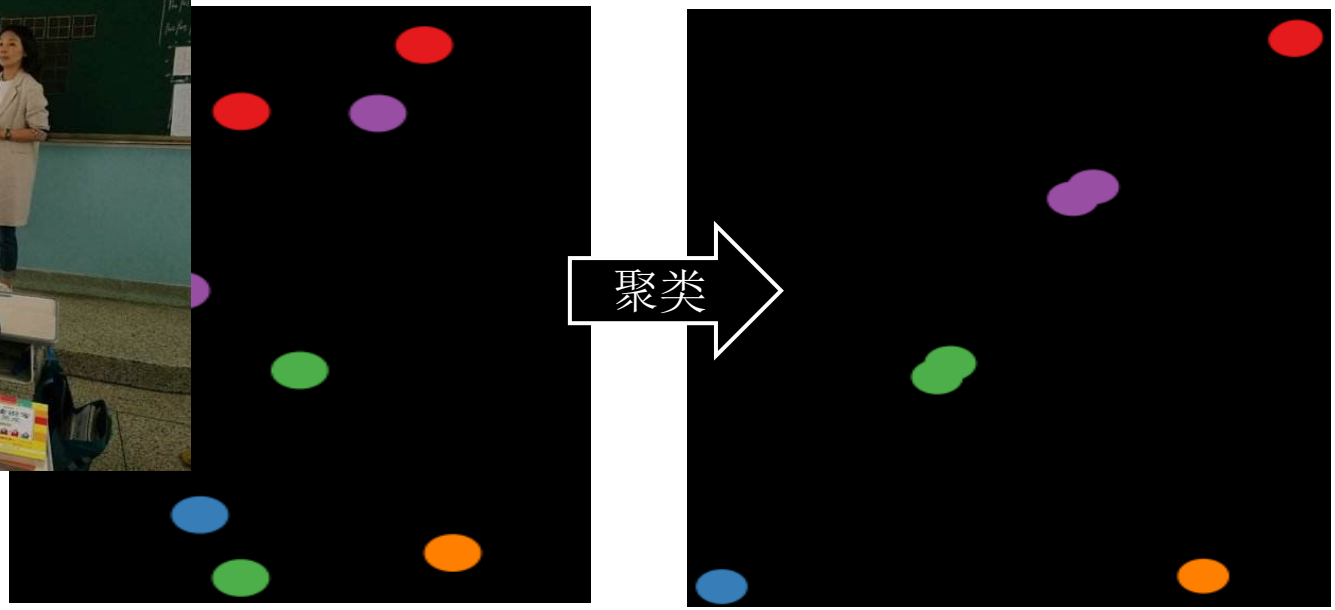
- $n_1 + n_2$
- n_1 / n_2
- $n_1 - n_2$
- $(n_1 + n_2) * n_3$
- $n_1 * n_2$
- $(n_1 + n_2) / n_3$

- Li, Z., Zhang, W., Yan, C., Zhou, Q., Li, C., Liu, H., & Cao, Y. (2022). Seeking Patterns, Not just Memorizing Procedures: Contrastive Learning for Solving Math Word Problems. ArXiv, abs/2110.08464.
- Huang, Z., Lin, X., Wang, H., Liu, Q., Chen, E., Ma, J., Su, Y., & Tong, W. (2021). DisenQNet: Disentangled Representation Learning for Educational Questions. Proceedings of the 27th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery & Data Mining.

聚类分析: 应用实例

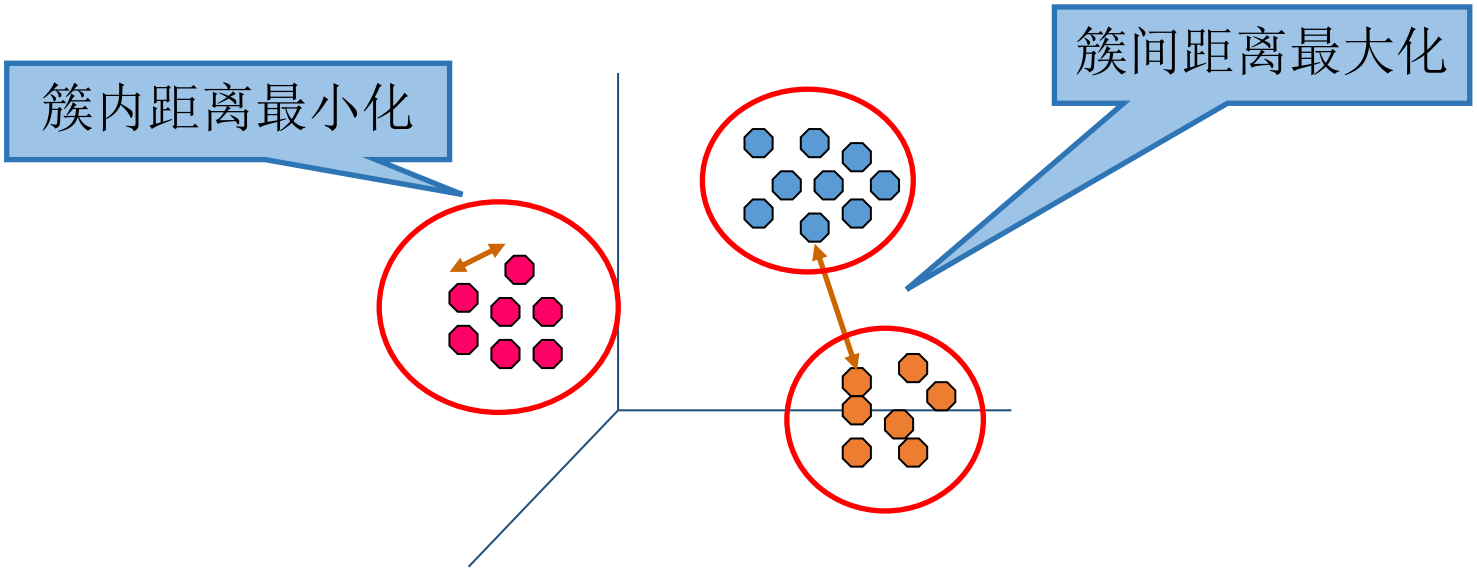
- 案例六：学业数据分析——优化教师教学
  - 输入：试验学校的学生考试数据
  - 聚类发现教师教学模式的规律

根据考试数据对班级进行简单聚类，根据聚类结果，发现70%的类里，两个班级是同位授课教师



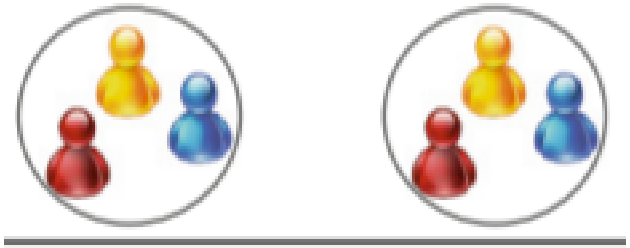
聚类分析

- 数据挖掘任务 —— 聚类(Clustering)
  - 目标：对数据进行**“群体性”分析**，将样本分为若干个**簇**（Clusters）
    - 其中，每个簇都由相似的样本所组成
  - 簇的特点：簇内相似（距离近），簇间相异（距离远）



聚类分析

- 聚类分析要解决三个问题
  - **1. 如何定义簇？：即，思考我们的目标（但具有主观性）**
    - “群体性”的依据：不同的“群体性”立场，可以得到不同的簇
    - 例如，学生分组应该考虑 **技能互补？** 还是 **能力相近**？
  - **2. 如何定义相关性？** 即，度量数据之间的相似性
    - 相似性度量往往存在一定局限性，未必反映聚类的真实意图
    - 例如，常用向量表征数据(人的爱好)， 但是否绝对相似？

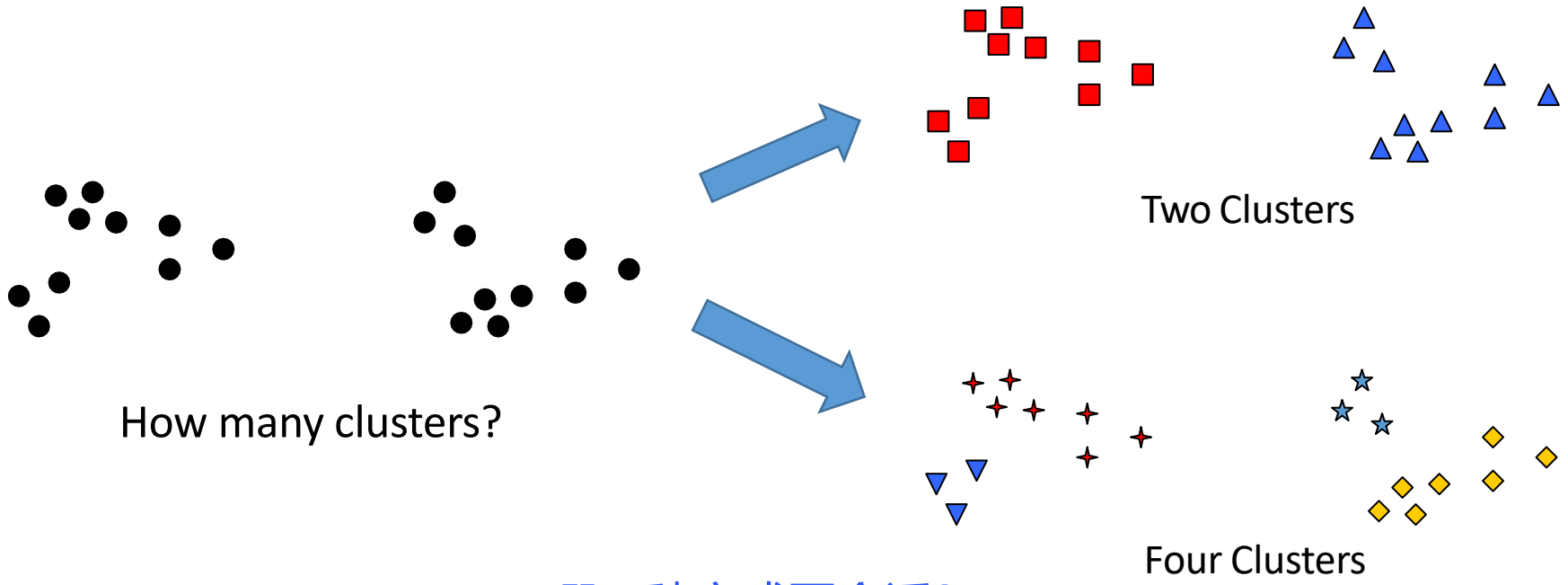


技能互补？ 能力相近？

图片本身相似，但代表的类别完全不同？

聚类分析

- 聚类分析要解决三个问题
  - **3. 如何决定簇的数量？** 即，选择合适数量的簇
    - 数据没有天然标签，簇的数量往往是个开放性问题
    - 避免过大或过小的簇，会导致失去代表性，但这未必可通过簇数调节



哪一种方式更合适？

聚类分析

- 聚类方法：最常见的无监督学习算法
- 常用方法
  - K均值聚类(K-means)
  - 密度聚类(Density-based Clustering)
  - 聚类效果验证
  - 前沿聚类方法

聚类分析：K-means

- K-means的基本概念
  - 数据：视作高维空间中的一个点，表示为向量
  - 中心点：簇的中心，反应簇的共有属性
  - 簇的数量：人为设定
  - 数据的关系度量：用“平均”的方式簇中心与簇中数据

聚类分析：K-means

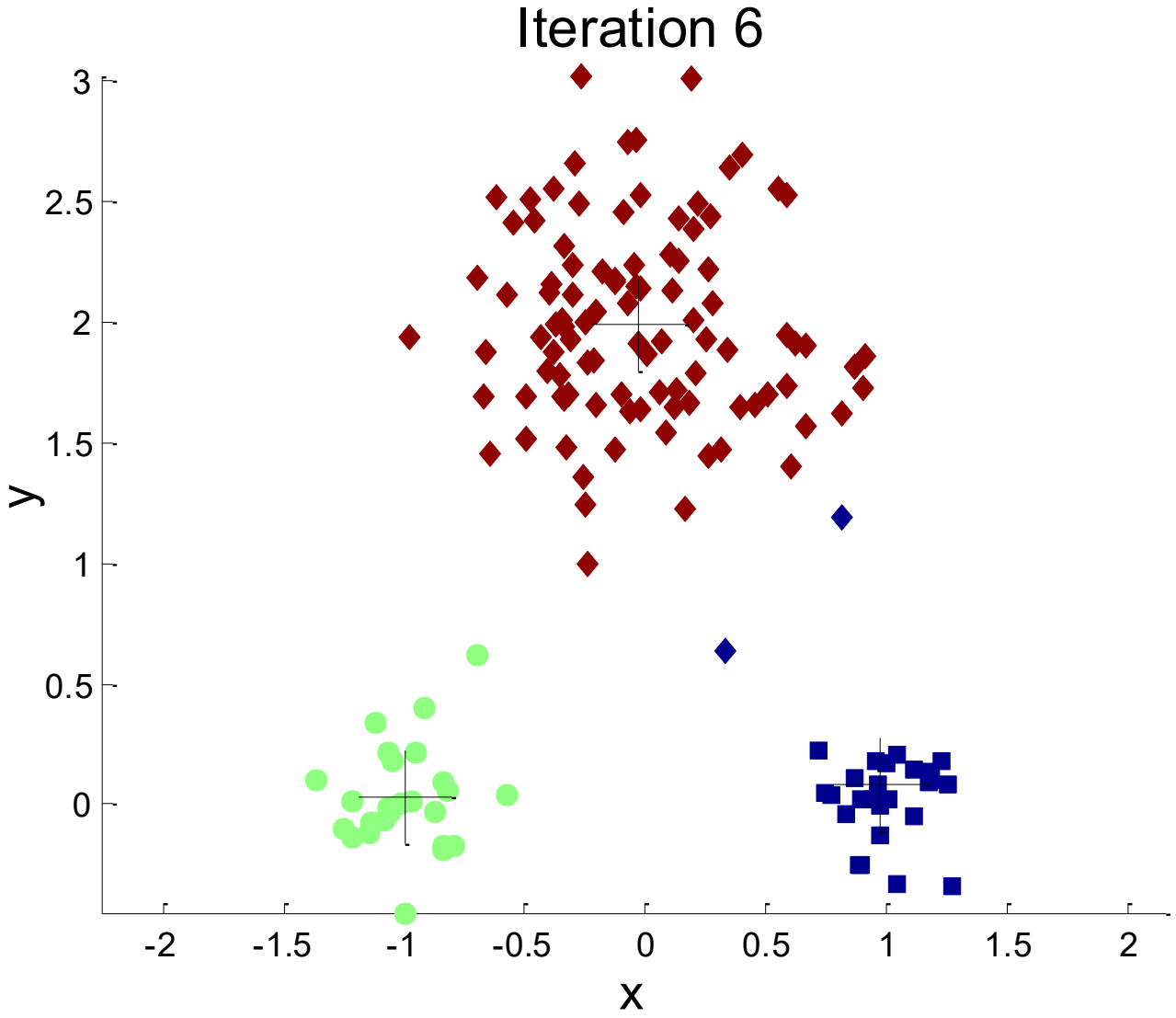
- K-means算法：设定K个中心，形成K个数据簇
  - 根据问题目标，预先指定簇的个数K
  - 每一个簇存在一个中心点
  - 每一个数据属于最近中心点对应的簇
  - 簇中心的更新：依赖簇中数据的算术平均
  - 簇中心更新后：根据度量，数据将重新分配至不同的簇
  - 算法是迭代过程：簇中心与簇数据迭代更新，直至稳定

1: Select K points as the initial centroids.
2: **repeat**
3: Form K clusters by assigning all points to the closest centroid.
4: Recompute the centroid of each cluster.
5: **until** The centroids don't change

聚类分析：K-means

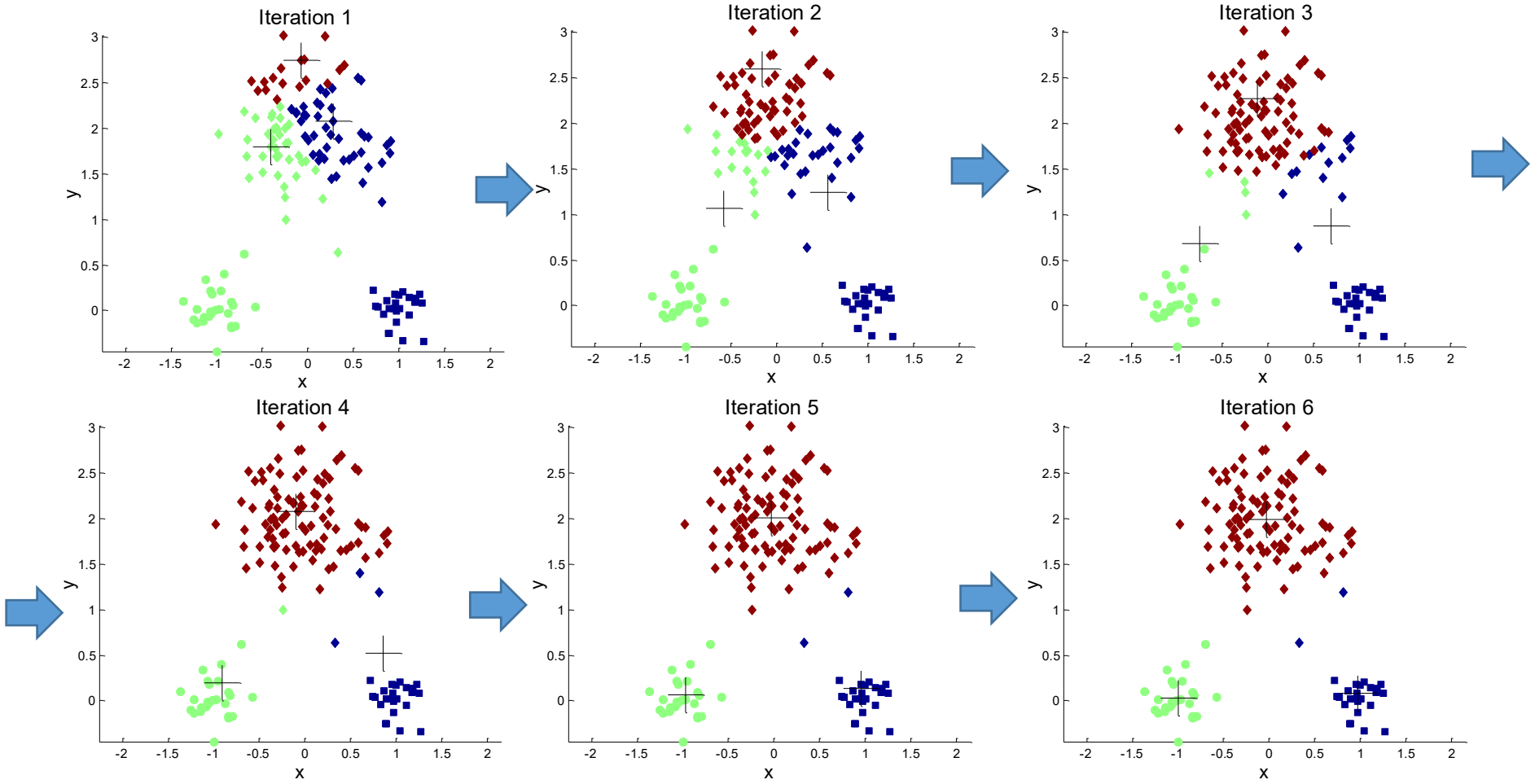
- 一个例子展示：K-means过程
- 3个簇中心
- 数据：二维空间的点
- “+”：表示簇中心
- 颜色：不同的簇

聚类分析：K-means



聚类分析：K-means

- K-means示例



聚类分析：K-means

- 如何评估K-means的效果
  - 指标：平方误差和（Sum of Squared Error， SSE）
  - 算法目标：优化数据与簇中心的距离
    - 定义每个数据的聚类误差：样本数据与最近簇的距离
  - SSE定义为

$$SSE = \sum_{i=1}^{K} \sum_{x \in c_i} dist^2(m_i, x)$$

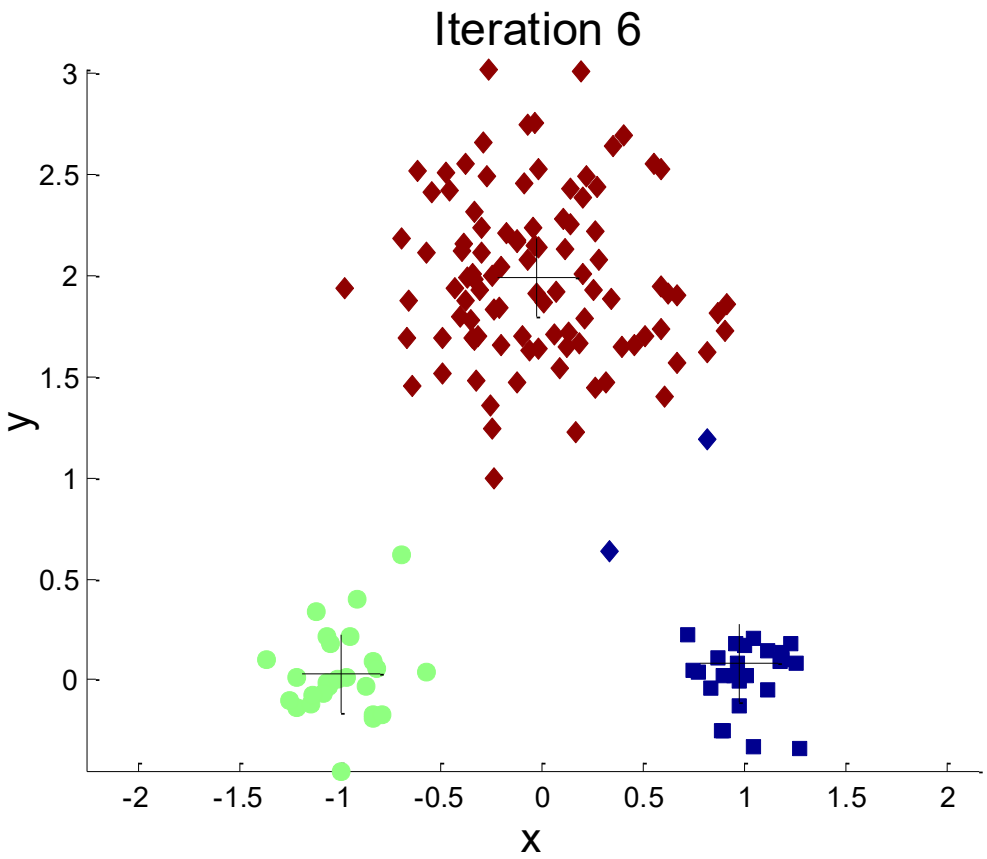
  - x 是簇C_i的样本，m_i是簇C_i的质心，可证明m_i是簇C_i平均 (mean)
  - 注：面对多个聚类结果时, 倾向于SSE更小的方式
    - 当簇数量K增加时，SSE一般趋于下降，因此尽量在相同K下比较SSE
    - K和SSE较小的聚类，优于 K和SSE交大的聚类

聚类分析：K-means

- K-means的特点
  - 关于中心点
    - 中心点一般采用随机初始化，因此重复K-means得到的结果可能不同
    - 中心点一般设置为簇内数据的平均向量（算术平均）
  - 关于相关性度量
    - 可用欧几里得距离、余弦相似度、相关系数等度量
  - 关于算法运行
    - K均值算法常常几轮就收敛
    - 算法停止条件为：Until relatively few points change clusters
      - 低于一定数量的数据 更新簇的归属，即，每个簇中 只有 很少的数据 发生变化
    - 算法复杂度$O(n \times K \times I \times d)$
      - n = 样本总数, K = 簇的个数数, I = 迭代轮数, d = 特征维度

聚类分析：K-means

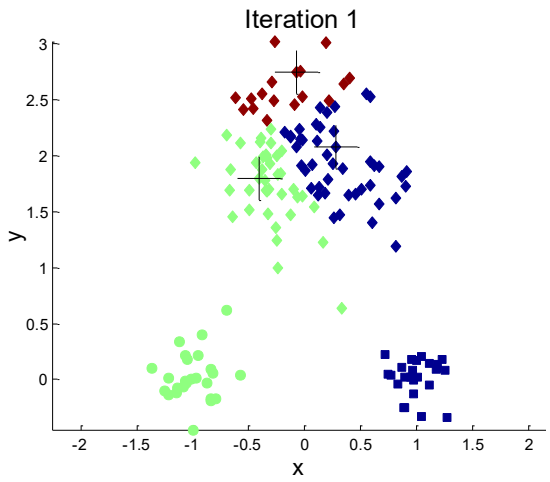
- K-means的特点: 初始中心如何选择?
  - 中心点初始化较好时（回顾19页的例子）

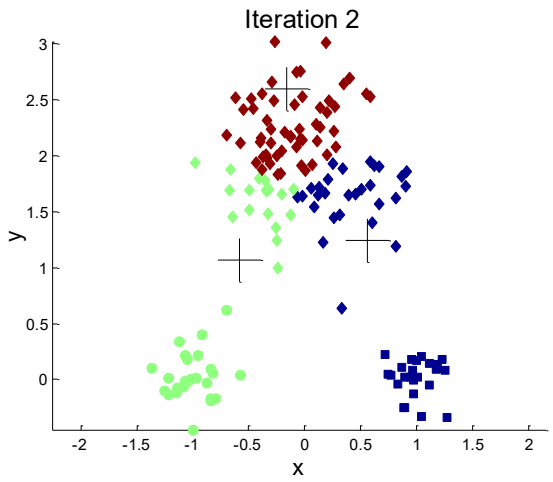


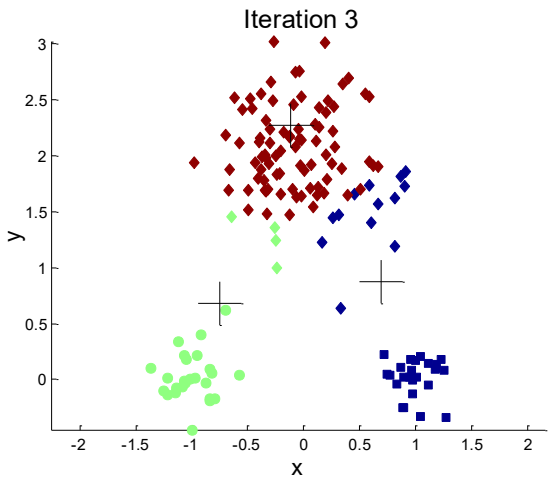
聚类结果好

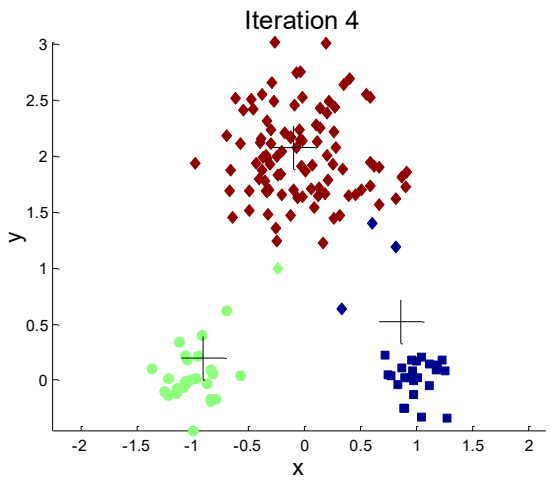
数据挖掘基础

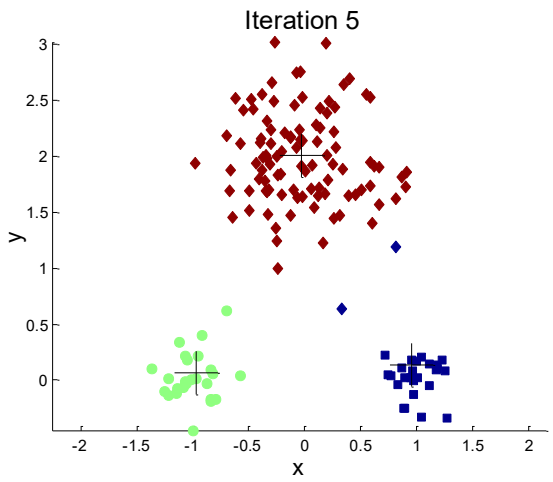
- K-means的特点: 初始中心如何选择?

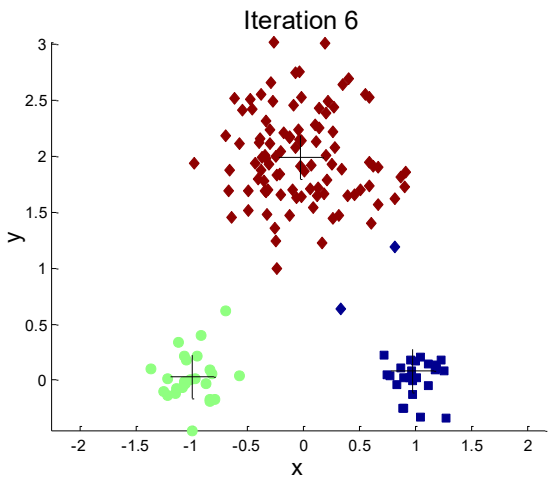








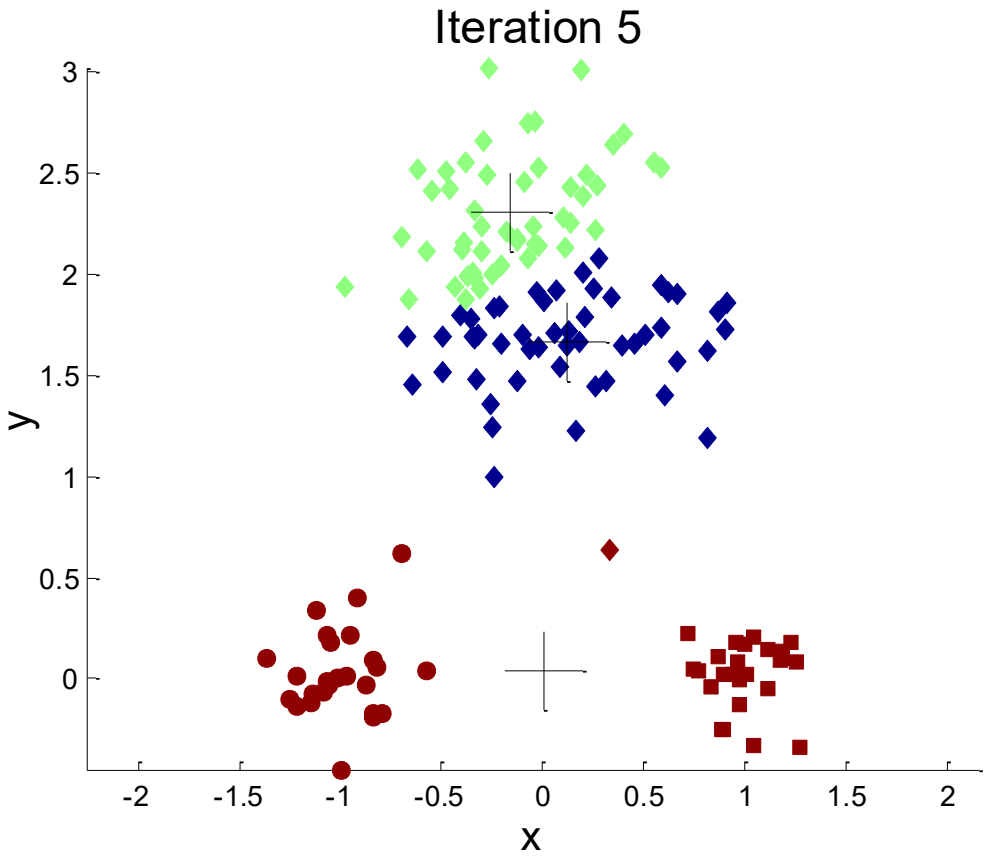




聚类结果好

聚类分析：K-means

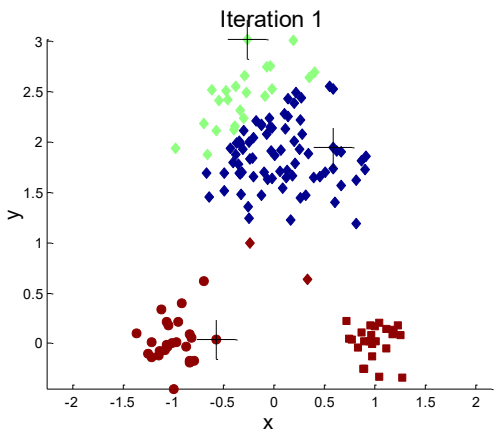
- K-means的特点: 初始中心如何选择?
  - 中心点初始化较差时

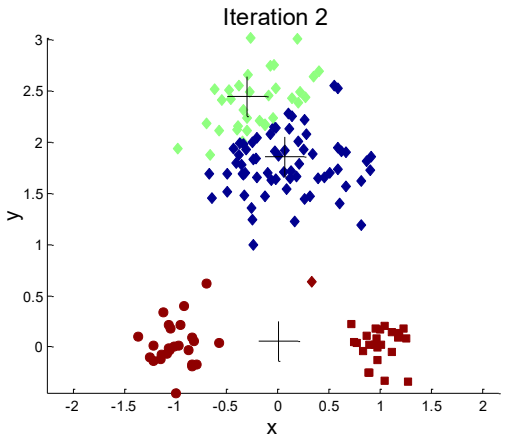


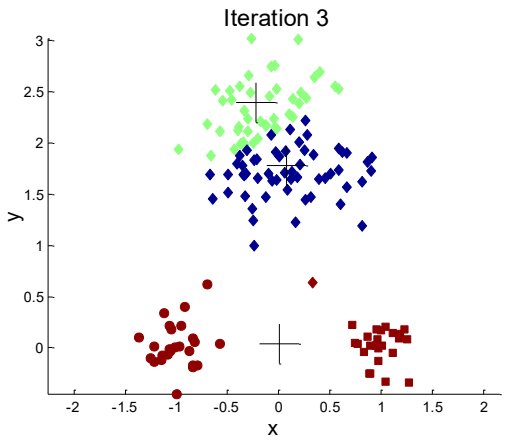
聚类结果差

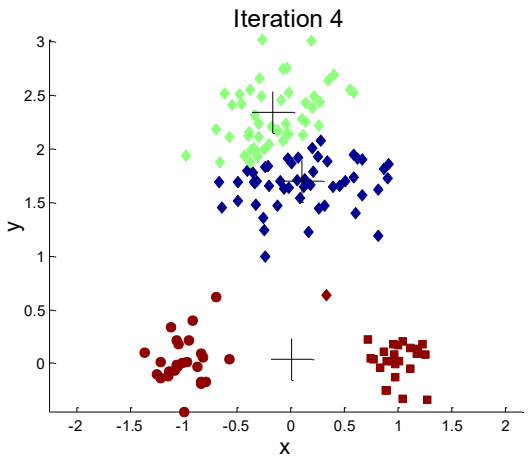
聚类分析：K-means

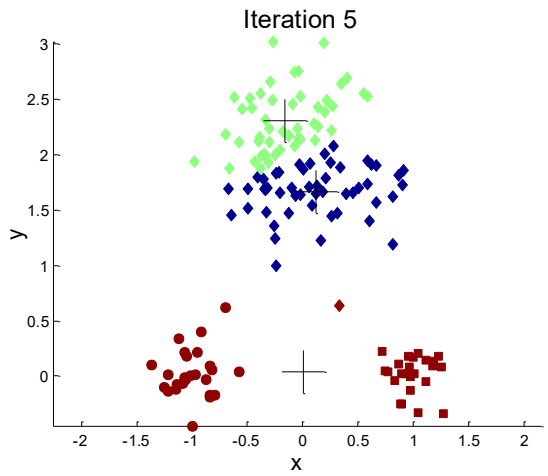
- K-means的特点: 初始中心如何选择?











聚类结果差

聚类分析：K-means

- K-means的特点: 如何解决初始中心选择的问题?
  - 最简单的方法：多次运行
    - 但效率较低 （能否得到好的结果 看你的运气 ）
  - 采少数样本，借助其他聚类（如层次聚类）先确定出初始中心
    - 然而层次聚类开支较大，同时此方法仅适用于K较小的情况
  - 初始选择大于K的数量，然后从中挑选聚类分隔较为明显的中心
  - 后处理 “修补” 聚类的结果
  - 二分K均值方案（Bisecting K-means）

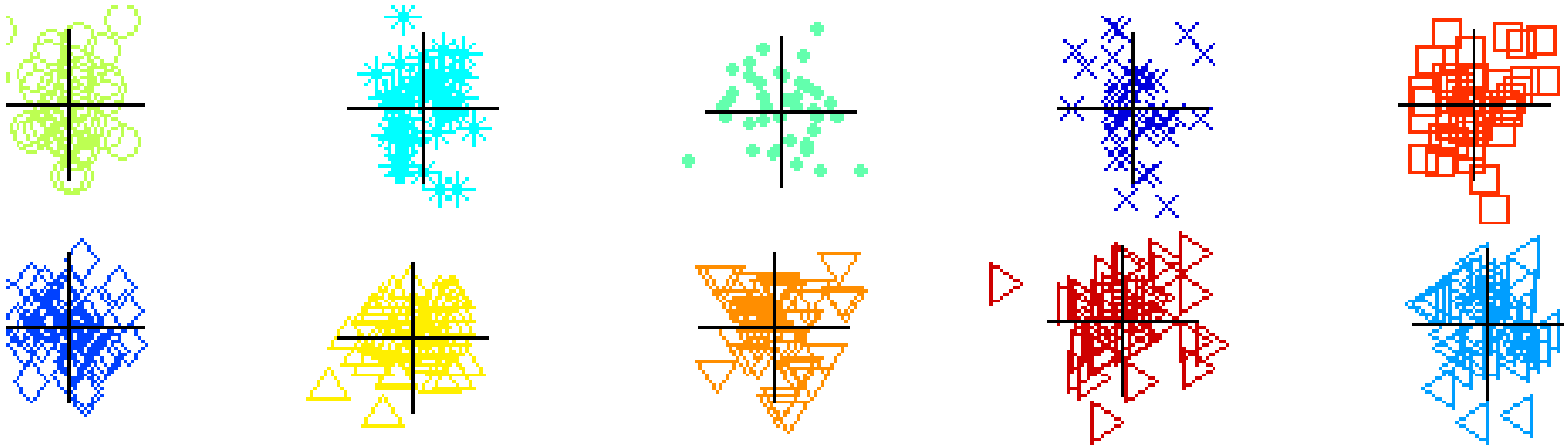
聚类分析：K-means

- K-means的特点: 如何解决初始中心选择的问题?
  - 二分K均值方案（Bisecting K-means）
    - 不容易受到初始化问题的影响
    - K-means的变体，类似于一种层次聚类的思想
    - 基本思想：为了得到K个簇，先分为 2 个簇，然后不断选择其中一个分裂

1: Initialize the list of clusters to contain the cluster containing all points.
2: **repeat**
3: Select a cluster from the list of clusters
4: **for** $i = 1$ to $number\_of\_iterations$ **do**
5: Bisect the selected cluster using basic K-means
6: **end for**
7: Add the two clusters from the bisection with the lowest SSE to the list of clusters.
8: **until** Until the list of clusters contains K clusters

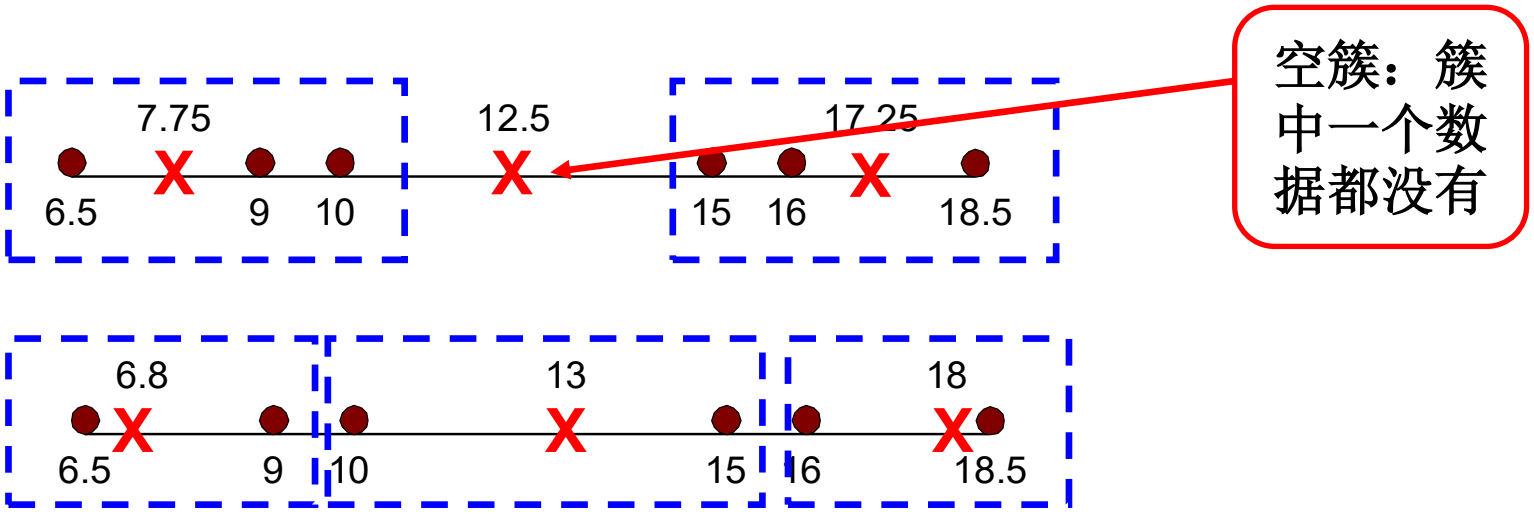
聚类分析：K-means

- K-means的特点: 如何解决初始中心选择的问题?
  - 实例：二分K均值方案（Bisecting K-means）
  - 从这个实例可以看出，二分K均值受初始中心的影响不大
  - 究其原因，二分K均值 可视作一个“逐步求精” 的过程



数据挖掘基础

- K-means的特点: 可能返回空簇
  - 例如，所有的点在分配时都未被分配到某个簇
    - 解决方法：以样本作为初始中心，则不会出现，即簇内至少一个点
  - 处理空簇：一般而言，新生成一个簇来替代空簇(思路类似后处理)
    - 解决方法1：选择一个最远样本点新生成一个簇
    - 解决方法2：将最大SSE的簇进行拆分

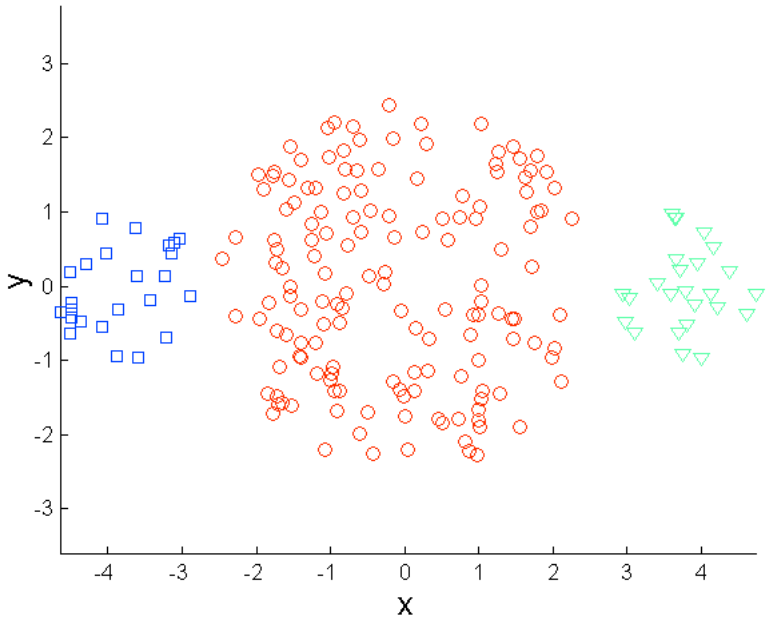


聚类分析：K-means

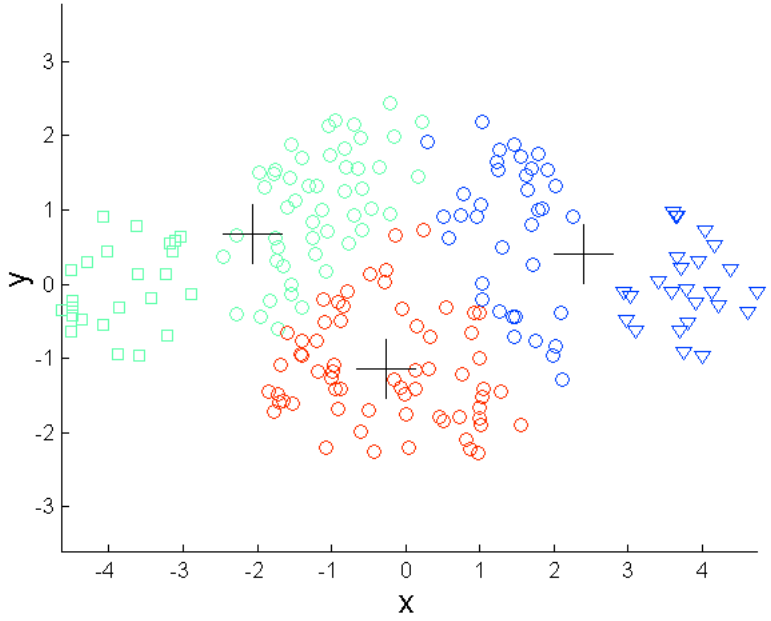
- K-means的局限性
  - 簇的特点会影响K-means聚类的结果
    - 1. 簇的规模
    - 2. 簇的（数据）密度
    - 3. 簇的（不规则）形状

聚类分析：K-means

- K-means的局限性
  - 1. 簇的规模：当出现规模不同的簇时，往往结果会受到一定干扰



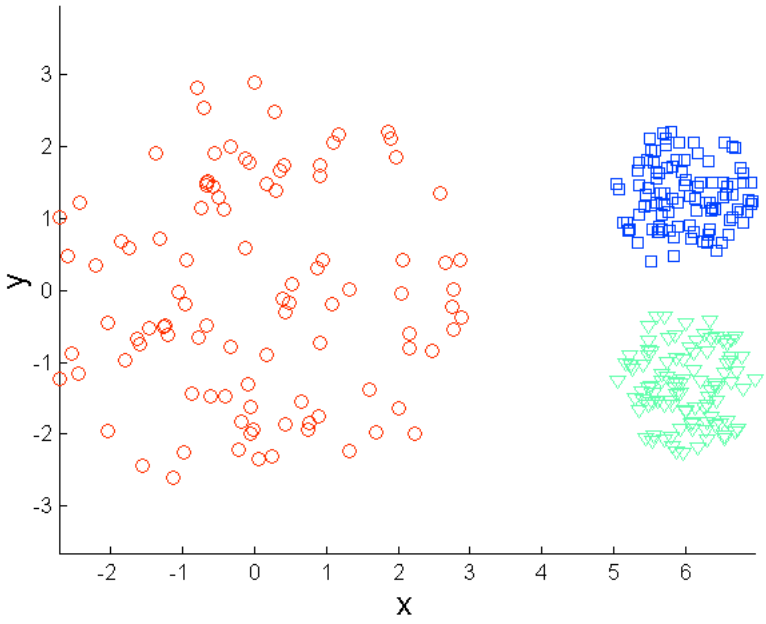
Original Points



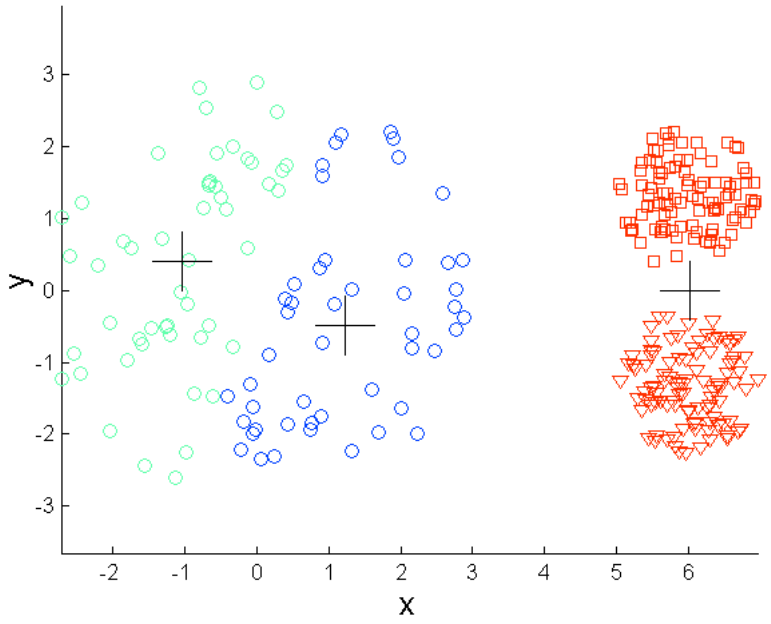
K-means (3 Clusters)

聚类分析：K-means

- K-means的局限性
  - 2. 簇的(数据)密度：当出现密度不同的簇时，往往结果会受到一定干扰



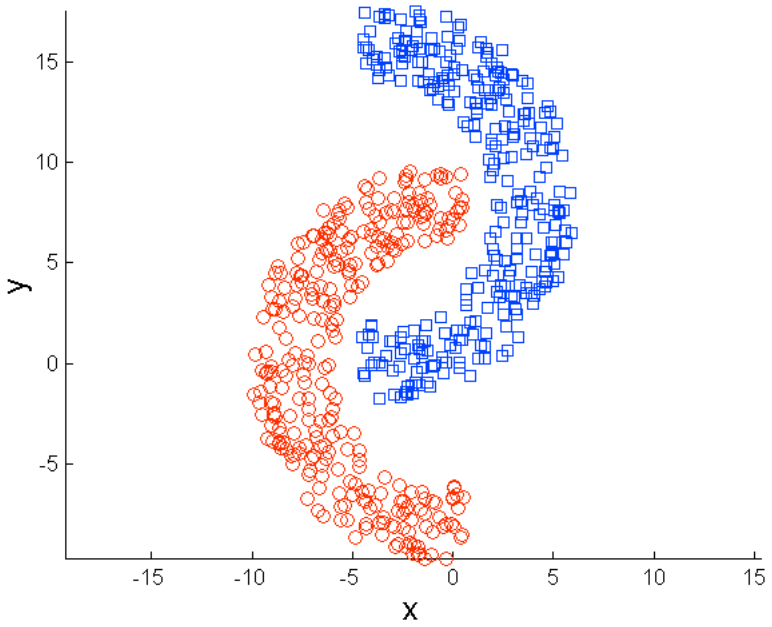
Original Points



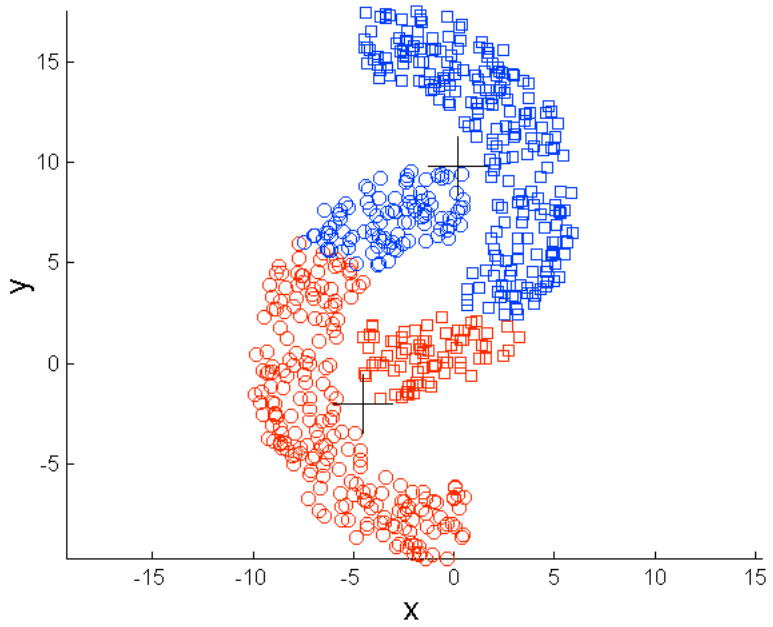
K-means (3 Clusters)

聚类分析：K-means

- K-means的局限性
  - 3. 簇的形状：当出现不规则形状的簇时（非球状），往往很难有效聚类



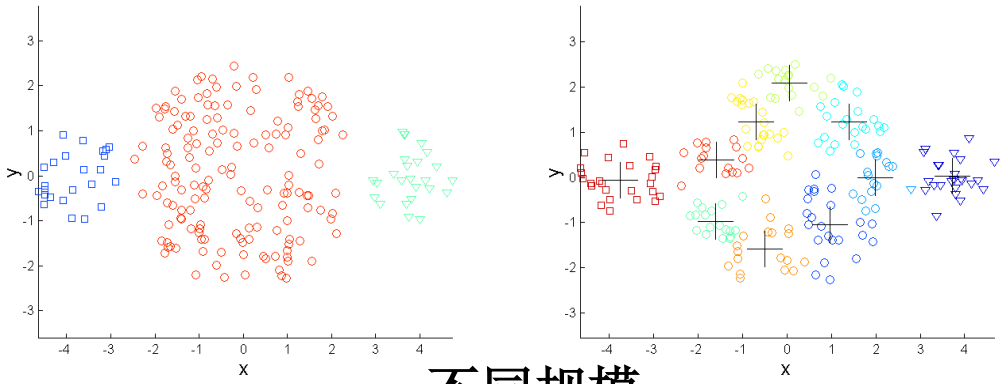
Original Points



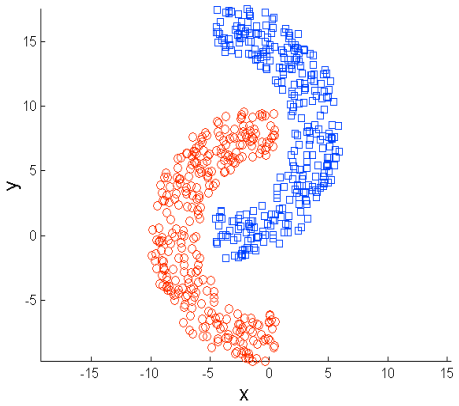
K-means (2 Clusters)

聚类分析：K-means

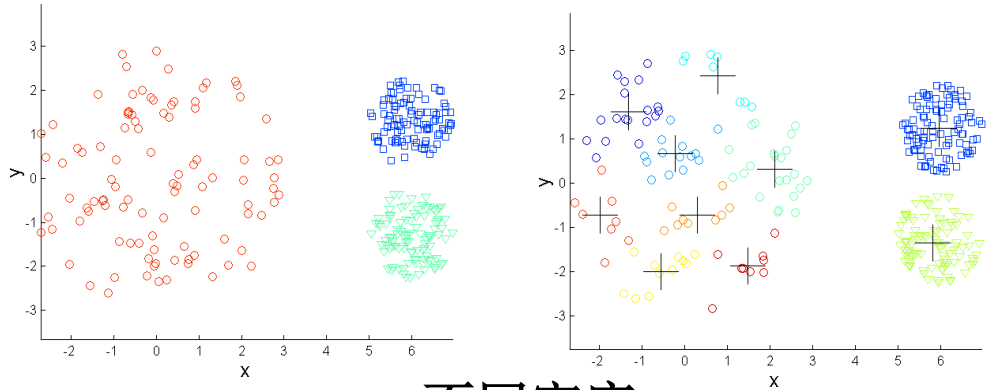
- 如何解决K-means的局限性
  - 一种解决方法：初始时增加簇的个数，然后将多个小簇合并为大簇



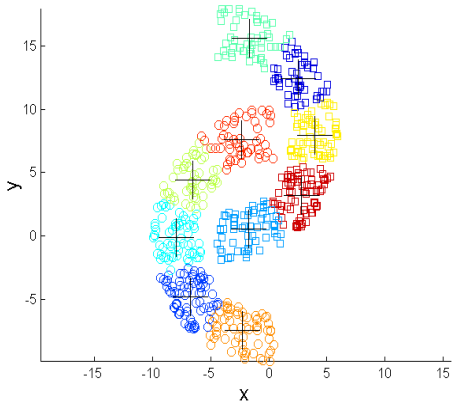
不同规模



不同形状



不同密度



聚类分析

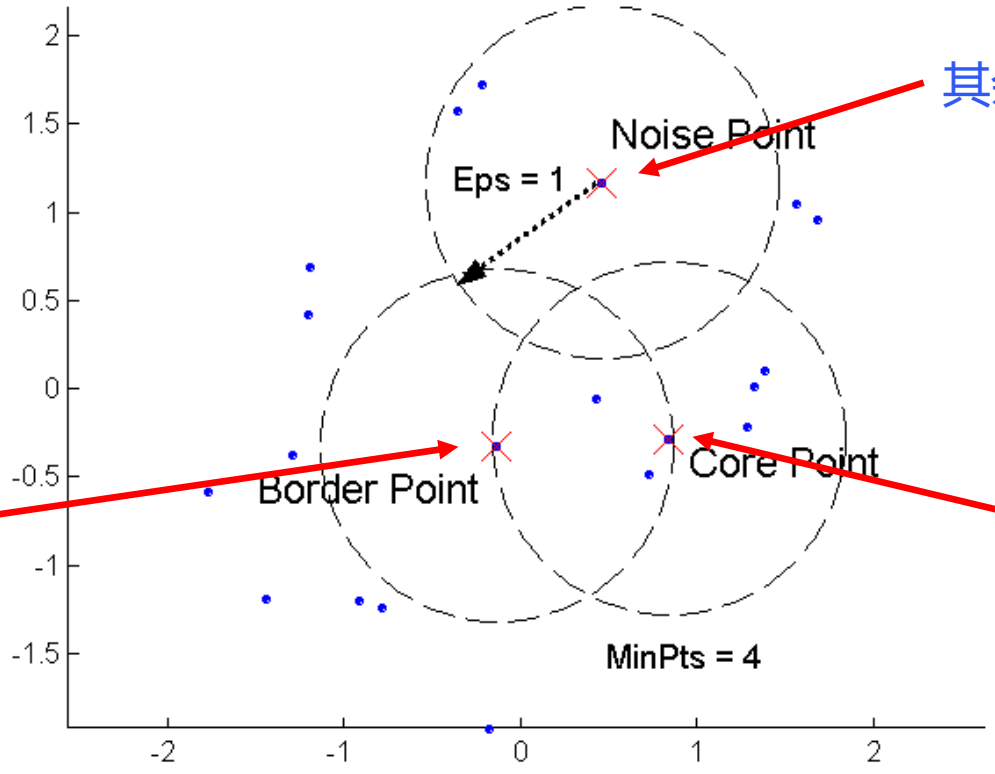
- 聚类方法：最常见的无监督学习算法
- 常用方法
  - K均值聚类(K-means)
  - 密度聚类(Density-based Clustering)
  - 聚类效果验证
  - 前沿聚类方法

聚类分析：密度聚类

- 密度聚类
  - 基本假设：只有达到一定密度，才足以成为一个簇
  - 密度：指定样本一定半径的样本数量
    - 半径，记为Eps
    - 半径内样本数阈值，记为MinPts
- 典型算法：DBSCAN
  - 核心要素：三类不同的数据点
  - 1. 核心点(Core point)：稠密部分内部的点
    - 其Eps的范围内的样本个数不少于MinPts，这些核心点位于簇的中心
  - 2. 边界点(Border point)：非核心点，但是处于稠密区域边界内/上的点
    - 其Eps的范围内的样本个数少于MinPts，但它是某个核心点的邻居
  - 3. 噪音点(Noise point)：处于稀疏区域的点
    - 除核心点和边界点之外的样本

聚类分析：密度聚类

- DBSCAN
  - 三类点：核心点、边界点和噪音点 示意图



其余点

半径内3个点，
小于阈值4
是某个核心点
的邻居

半径内6个点，
大于阈值4

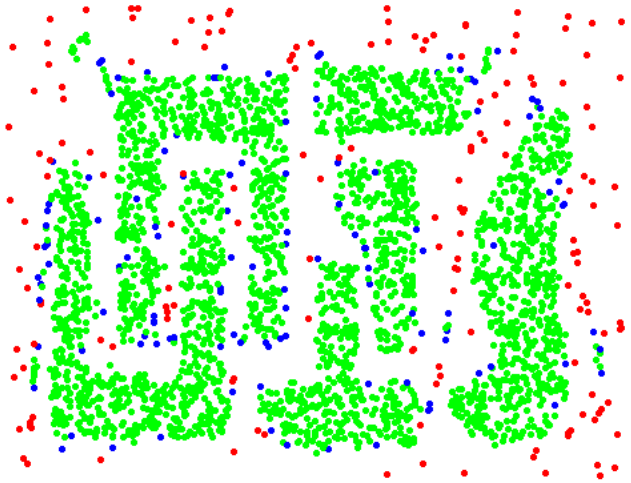
聚类分析：密度聚类

- DBSCAN的基本流程可归纳如下
  - 1. 将所有节点区分为核心点、边界点或噪声点
  - 2. 删除噪声点
  - 3. 将所有距离在预定半径内的核心点之间连一条边
  - 4. 连通的核心点形成一个簇
  - 5. 将所有的边界点指派到一个与之关联的核心点所在的簇中

聚类分析：密度聚类

- DBSCAN实例
  - 半径Eps = 10, 阈值MinPts = 4

Original Points



Point types:

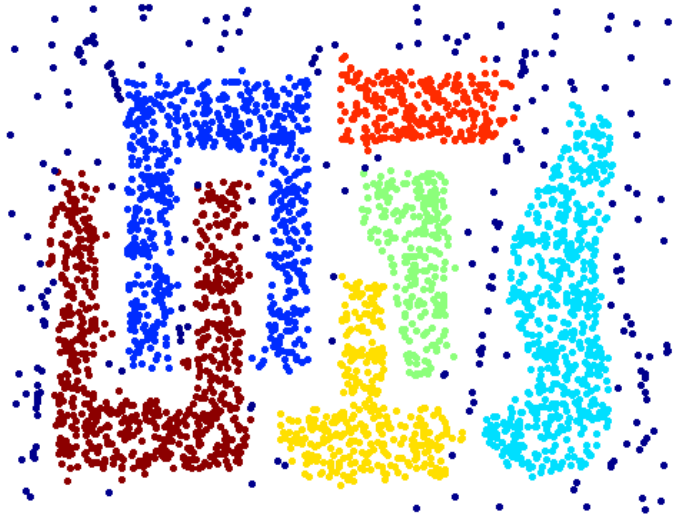
绿色core, 蓝色border, 红色noise

聚类分析：密度聚类

- DBSCAN的优势
  - 对噪声鲁棒
  - 能够处理不同形状和大小的簇

周边的噪声除去，内部的数据很好的聚类

Original Points

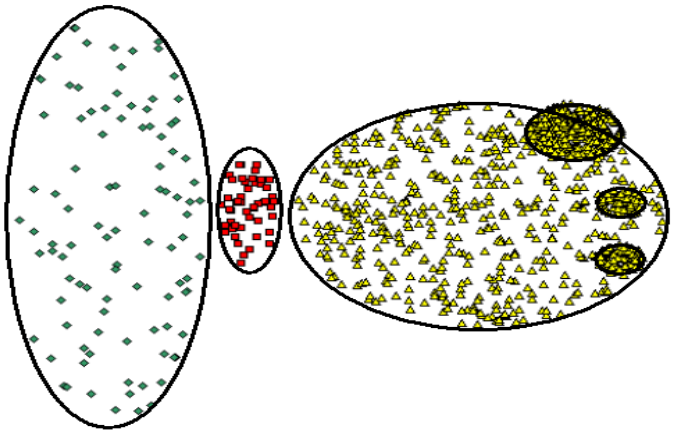


Clusters

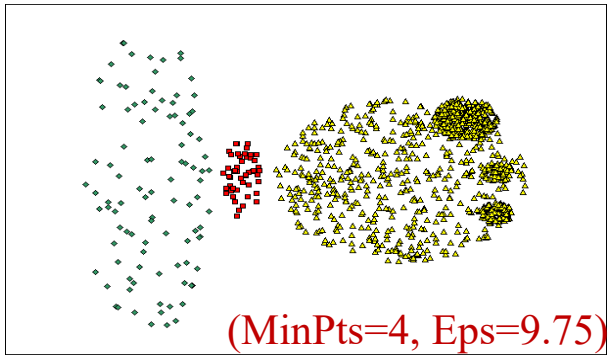
聚类分析：密度聚类

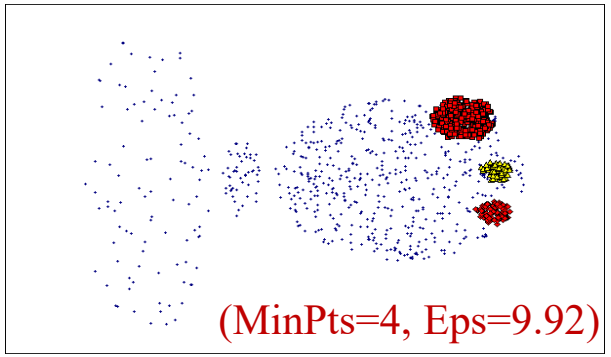
- DBSCAN的局限性
  - 簇的密度变化使得DBSCAN的效果可能会受到影响
  - 参数难以设置：半径Eps、阈值MinPts的选取需与数据维度匹配

例子：两种方式参数相近，但簇的密度完全不同，**DBSCAN**的结果差距很大



Original Points





聚类分析：密度聚类

- DBSCAN算法作者获得ICDM2013 Research Contributions Award

TITEL	ZITIERT VON	JAHR
A density-based algorithm for discovering clusters in large spatial databases with noise. M Ester, HP Kriegel, J Sander, X Xu kdd 96 (34), 226-231	22965	1996

聚类分析

- 聚类方法：最常见的无监督学习算法
- 常用方法
  - K均值聚类(K-means)
  - 层次聚类(Hierarchical Clustering)
  - 密度聚类(Density-based Clustering)
  - 聚类效果验证
  - 前沿聚类方法

聚类分析

- 聚类效果验证
  - 作为无监督学习，聚类问题并没有天然标签，如何评估聚类结果？
  - 首先，我们需要了解，为什么需要评估聚类结果的“好”与“坏”
    - 确定数据集的聚类趋势，确定是否真的有群体性
    - 确定合理的簇的个数
    - 比较两个簇，或者比较两种方法的聚类，看哪种结果更合适
    - 将聚类的簇与已知的客观信息进行比较
      - 例如，外部提供的标签、Query等

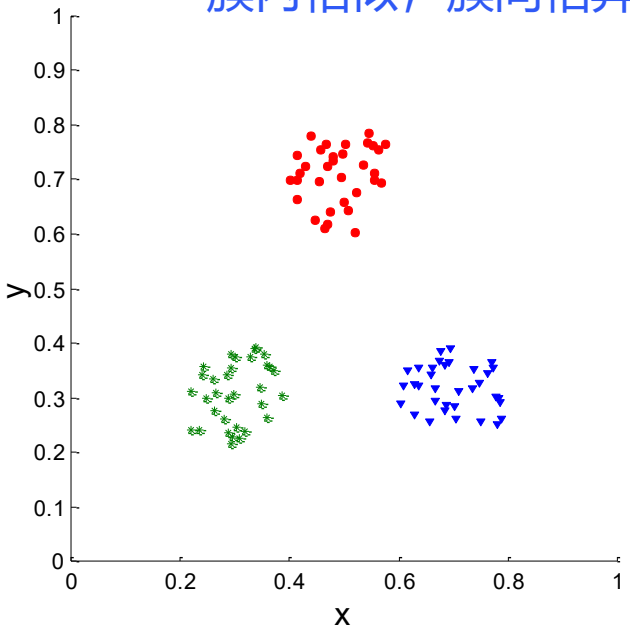
聚类分析

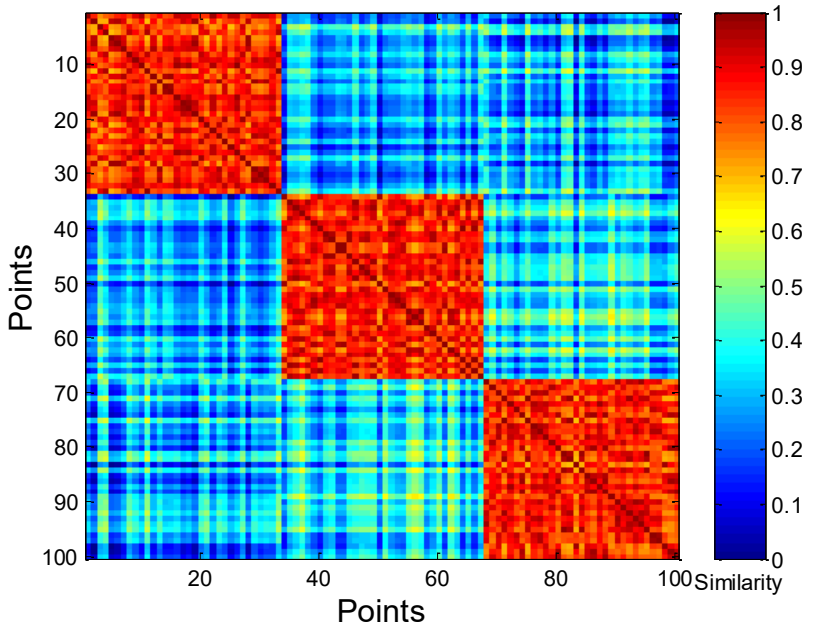
- 聚类效果验证
  - 一般而言，聚类问题的评估标准可以分为以下三类
    - 非监督评估（或内部评估）:仅使用数据本身的特性，而不考虑任何外部标签信息
      - 例如：距离矩阵，SSB(分离度：簇质心m_i到数据点均值m的距离平方和
        $SSB = \sum_{i=1}^{K} |C_i|(m - m_i)^2$，$|C_i|$是簇$i$的大小, m是所有数据点的总均值
    - 有监督评估（或外部评估）:引入外部信息，衡量聚类结构与外部结果的匹配程度
      - 例如：Entropy，Jaccard系数，准确（Precision）、召回（Recall）、F值等
    - 相对评估：主要用于比较两个簇或者两个聚类结果
      - 常常需要外部或内部指标结合, e.g., SSE or entropy

聚类分析

- 方式1：非监督评估:—基于邻近度矩阵
  - 理想的聚类结果是：簇内的点邻近度全为1，簇之间的邻近度全为0
  - 通过邻近度矩阵，可以可视化地评估聚类结果的好坏
    - 通过观察相似度矩阵是否体现出对角模式，可以大致判断结果好坏

簇内相似，簇间相异





聚类分析

- 方式2：有监督评估—基于Jaccard系数
  - 理想的聚类结果是：在邻近度矩阵中
    - 同一个类中的样本，对应的矩阵元素为1
    - 不同类中的样本，对应的矩阵元素为0
  - 通过比较两个“理想”矩阵之间的相关性，可以近似估计聚类结果

f_{00} =具有不同的类和不同的簇的对象对的个数

f_{01} =具有不同的类和相同的簇的对象对的个数

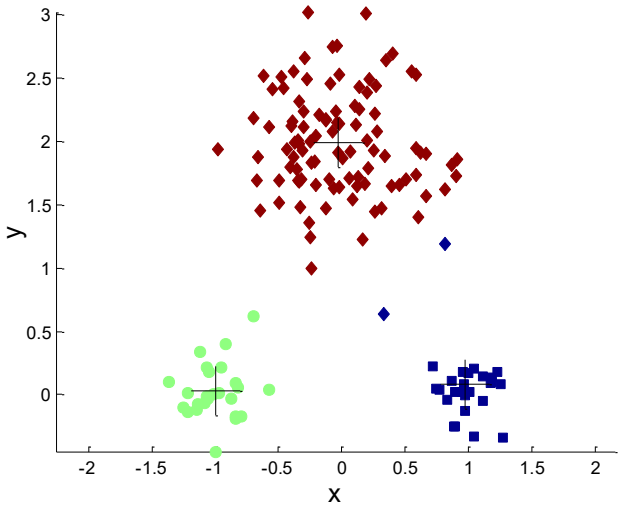
f_{10} =具有相同的类和不同的簇的对象对的个数

f_{11} =具有相同的类和相同的簇的对象对的个数

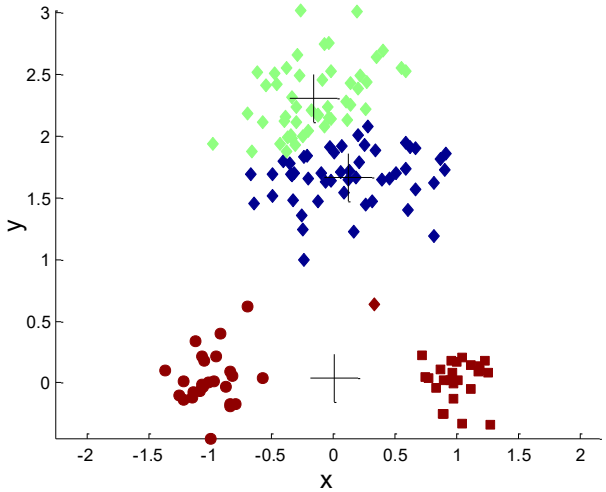
(回顾第2章：数据集成) $$\text{Jaccard 系数} = \frac{f_{11}}{f_{01} + f_{10} + f_{11}}$$

聚类分析

- 方式3：相对评估—基于SSE
  - 对同一样本集合，SSE较小的聚类结果更好



优于



SSE小

SSE大

簇数K小

聚类分析

- Y Liu, Z Li, H Xiong, X Gao, J Wu, "**Understanding of internal clustering validation measures**". **ICDM 2010.**
- Yanchi Liu, Zhongmou Li, Hui Xiong, Xuedong Gao, Junjie Wu, Sen Wu, " **Understanding and Enhancement of Internal Clustering Validation Measures**", **IEEE Transactions on Cybernetics (TC)**, Vol. 43, No. 3, pp. 982-994, 2013.
- J Wu, H Xiong, J Chen, "**Adapting the right measures for k-means clustering**". **KDD 2009.**

"The validation of clustering structures is the most difficult and frustrating part of cluster analysis. Without a strong effort in this direction, cluster analysis will remain a black art accessible only to those true believers who have experience and great courage."

----------*Algorithms for Clustering Data*, Jain and Dubes

聚类分析

- 聚类方法：最常见的无监督学习算法
- 常用方法
  - K均值聚类(K-means)
  - 层次聚类(Hierarchical Clustering)
  - 密度聚类(Density-based Clustering)
  - 聚类效果验证
  - 前沿聚类方法

聚类分析

- **前沿聚类方法 — 课外学习**
  - Prototype-based(基于原型的聚类)
    - Fuzzy K-means
    - Mixture Model Clustering
    - Self-Organizing Maps
  - Density-based(基于密度的聚类)
    - Grid-based clustering
    - Subspace clustering
  - Graph-based (基于图的聚类)
    - Chameleon
    - Jarvis-Patrick
    - Shared Nearest Neighbor (SNN)

总结：聚类分析

- 聚类方法：最常见的无监督学习算法
- 常用方法
  - K均值聚类(K-means)
  - 层次聚类(Hierarchical Clustering)
  - 密度聚类(Density-based Clustering)
  - 聚类效果验证
  - 前沿聚类方法