谱聚类

聚类问题可以分为两种思路：

1. Compactness，这类有 K-means，GMM 等，但是这类算法只能处理凸集，为了处理非凸的样本集，必须引入核技巧。
2. Connectivity，这类以谱聚类为代表。

谱聚类是一种基于无向带权图的聚类方法。这个图用 $G=(V,E)$ 表示，其中 $V=\{1,2,\cdots,N\}$，$E=\{w_{ij}\}$，这里 w_{ij} 就是边的权重，这里权重取为相似度，$W=(w_{ij})$ 是相似度矩阵，定义相似度（径向核）：

$$
\begin{aligned}
w_{ij}=k(x_i,x_j)=\exp(-\frac{||x_i-x_j||_2^2}{2\sigma^2}),(i,j)\in E \\
w_{ij}=0,(i,j)\notin E
\end{aligned}
\tag{1}
$$

下面定义图的分割，这种分割就相当于聚类的结果。定义 $w(A,B)$：

$$
A\subset V,B\subset V,A\cap B=\emptyset,w(A,B)=\sum\limits_{i\in A,j\in B}w_{ij}
\tag{2}
$$

假设一共有 K 个类别，对这个图的分割 $CUT(V)=CUT(A_1,A_2,\cdots,A_K)=\sum\limits_{k=1}^Kw(A_k,\overline{A_k})=\sum\limits_{k=1}^K[w(A_k,V)-w(A_k,A_k)]$

于是，我们的目标就是 $\mathop{\min}\limits_{A_k}CUT(V)$。

为了平衡每一类内部的权重不同，我们做归一化的操作，定义每一个集合的度，首先，对单个节点的度定义：

$$
d_i=\sum\limits_{j=1}^Nw_{ij}
\tag{3}
$$

其次，每个集合：

$$
\Delta_k=degree(A_k)=\sum\limits_{i\in A_k}d_i
\tag{4}
$$

于是：

$$
N(CUT)=\sum\limits_{k=1}^K\frac{w(A_k,\overline{A_k})}{\sum\limits_{i\in A_k}d_i}
\tag{5}
$$

所以目标函数就是最小化这个式子。

谱聚类的模型就是：

$$
\{\hat{A}_k\}_{k=1}^K=\mathop{argmin}\limits_{A_k}N(CUT)
\tag{6}
$$

引入指示向量：

$$
\left\{
\begin{array}{ll}
y_i \in \{0,1\}^K & (7) \\
\sum_{j=1}^{K} y_{ij} = 1 & (8)
\end{array}
\right.
$$

其中，y_{ij} 表示第 i 个样本属于 j 个类别，记：$Y = (y_1, y_2, \cdots, y_N)^T$。所以：

$$
\hat{Y} = \underset{Y}{argmin}\, N(CUT) \tag{9}
$$

将 $N(CUT)$ 写成对角矩阵的形式，于是：

$$
\begin{aligned}
N(CUT) &= Trace[diag(\frac{w(A_1, \overline{A_1})}{\sum\limits_{i\in A_1} d_i}, \frac{w(A_2, \overline{A_2})}{\sum\limits_{i\in A_2} d_i}, \cdots, \frac{w(A_K, \overline{A_K})}{\sum\limits_{i\in A_K} d_i})] \\
&= Trace[diag(w(A_1, \overline{A_1}), w(A_2, \overline{A_2}), \cdots, w(A_K, \overline{A_K})) \cdot diag(\sum_{i\in A_1} d_i, \cdots, \sum_{i\in A_K} d_i)^{-1}] \\
&= Trace[O \cdot P^{-1}]
\end{aligned} \tag{10}
$$

我们已经知道 Y, w 这两个矩阵，我们希望求得 O, P。

由于：

$$
Y^TY = \sum_{i=1}^{N} y_i y_i^T \tag{11}
$$

对于 $y_i y_i^T$，只在对角线上的 $k \times k$ 处为 1，所以：

$$
Y^TY = diag(N_1, N_2, \cdots, N_K) \tag{12}
$$

其中，N_i 表示有 N_i 个样本属于 i，即 $N_k = \sum\limits_{k\in A_k} 1$。

引入对角矩阵，根据 d_i 的定义，$D = diag(d_1, d_2, \cdots, d_N) = diag(w_{NN}\mathbb{I}_{N1})$，于是：

$$
P = Y^TDY \tag{13}
$$

对另一项 $O = diag(w(A_1, \overline{A_1}), w(A_2, \overline{A_2}), \cdots, w(A_K, \overline{A_K})$：

$$
O = diag(w(A_i, V)) - diag(w(A_i, A_i)) = diag(\sum_{j\in A_i} d_j) - diag(w(A_i, A_i)) \tag{14}
$$

其中，第一项已知，第二项可以写成 Y^TwY，这是由于：

$$
Y^TwY = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} y_i y_j^T w_{ij} \tag{15}
$$

于是这个矩阵的第 lm 项可以写为：

$$
\sum_{i\in A_l, j\in A_m} w_{ij} \tag{16}
$$

这个矩阵的对角线上的项和 $w(A_i, A_i)$ 相同，所以取迹后的取值不会变化。

所以：

$$N(CUT) = Trace[(Y^T(D-w))Y) \cdot (Y^TDY)^{-1}] \tag{17}$$

其中，$L = D - w$ 叫做拉普拉斯矩阵。