Clustering by fast search and find of density peaks

> 刘华坤
>
> 2017.12.03

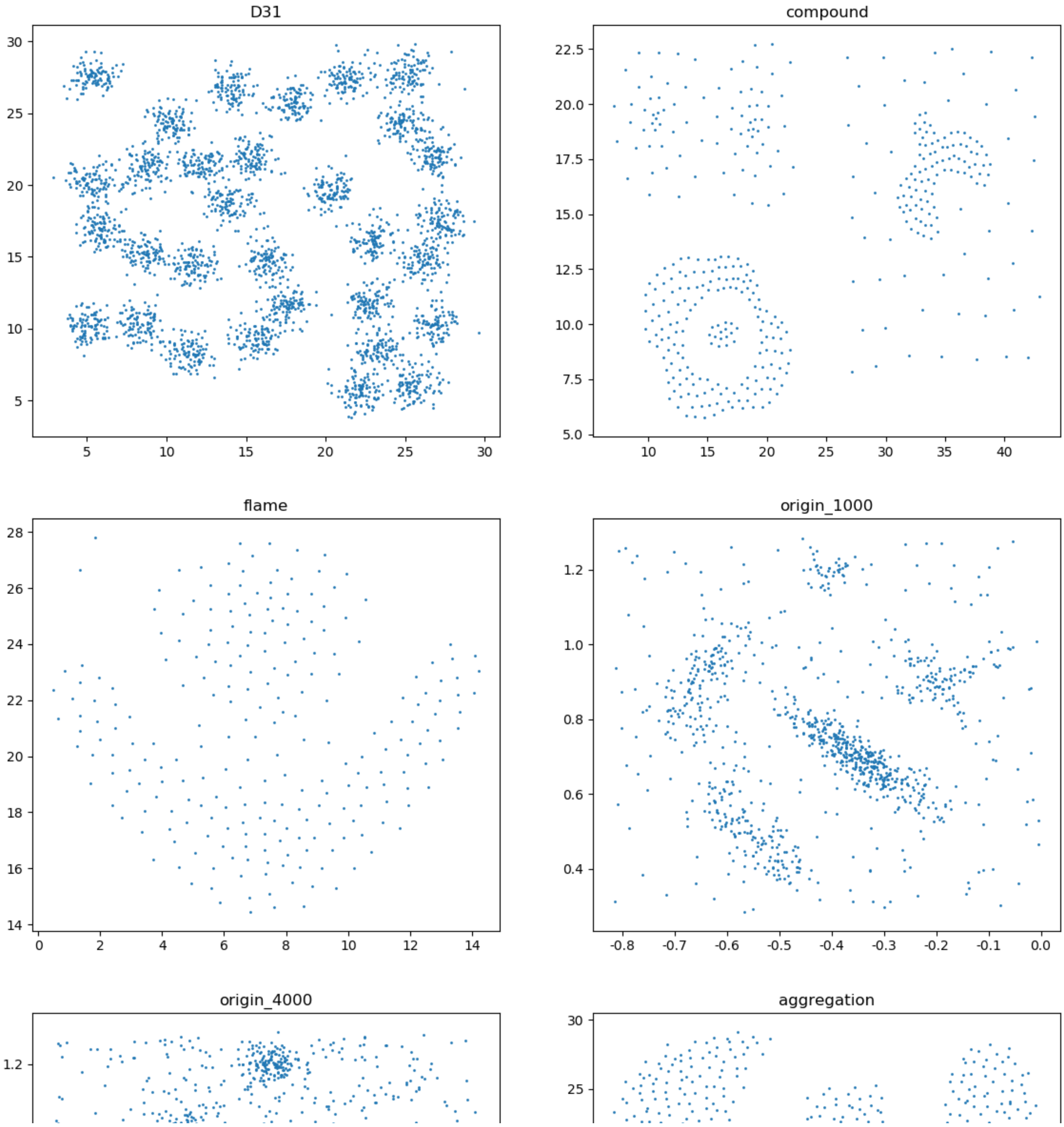
核心思想

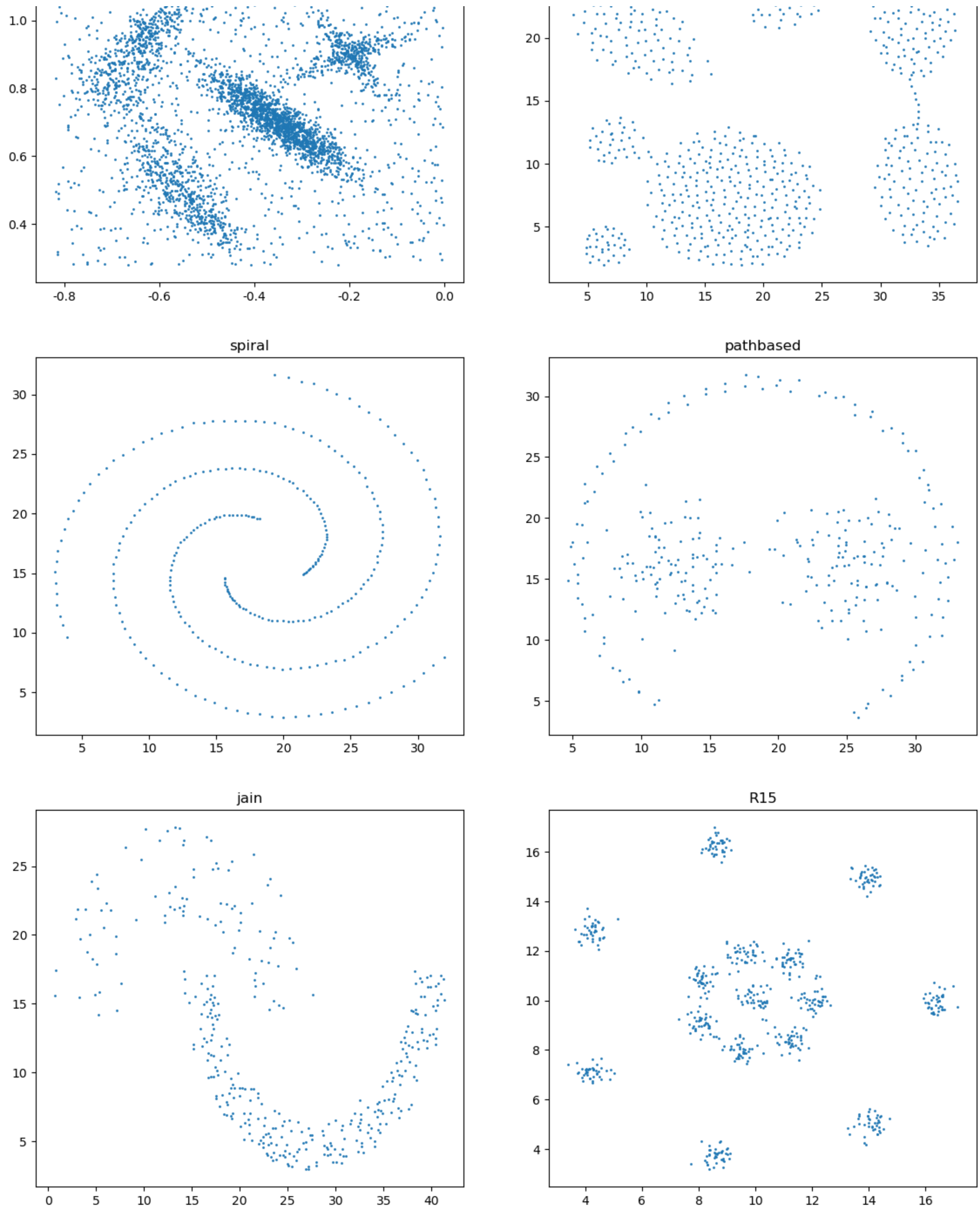
> 通过局部密度和距离找出聚类中心点
>
> 启发式聚类中心点的搜索。

步骤

1. 读取点

> 这里选取了 10 个 2维 数据集
>
> 如下图





---

2. 计算点与点之间的距离

这里采用了 欧几里德距离公式 计算两点间的距离。

> 暂时不对其他距离公式进行讨论。

---

3. 计算截断距离 d_c

> 介绍求解 d_c 的方式

论文中提到，d_c 理论的取值应使

$$avg(neighbors) = (1\%\text{~}2\%) * N$$
$$N : \text{数据集点的总数}$$

所以我们的方法应尽量满足此条件。

二分法计算 d_c

1. 初始化 d_c 和条件 $lower, upper$

$$d_c = (min\_dis + max\_dis)/2$$
$$\text{min\_dis: 最小距离}$$
$$\text{max\_dis: 最大距离}$$
$$lower = 1\%$$
$$upper = 2\%$$

这里，我们设置百分比的计算方法为距离矩阵（上三角矩阵）小于 d_c 的数目与距离矩阵（上三角矩阵）总大小之比

$$percent = \frac{\sum_{dis_{ij} < d_c} 1}{(N-1)^2/2}$$

2. 二分法计算 d_c，当在所给百分比范围内时即选为满足条件的 d_c

$$d_c = \begin{cases} \frac{(min\_dis + d_c)}{2} & \text{if } percent > upper \\ \frac{(d_c + max\_dis)}{2} & \text{if } percent < lower \\ correct\ d_c & \text{others} \end{cases}$$

> 此方法较精确了计算了 d_c，求出来的结果满足论文中的条件。

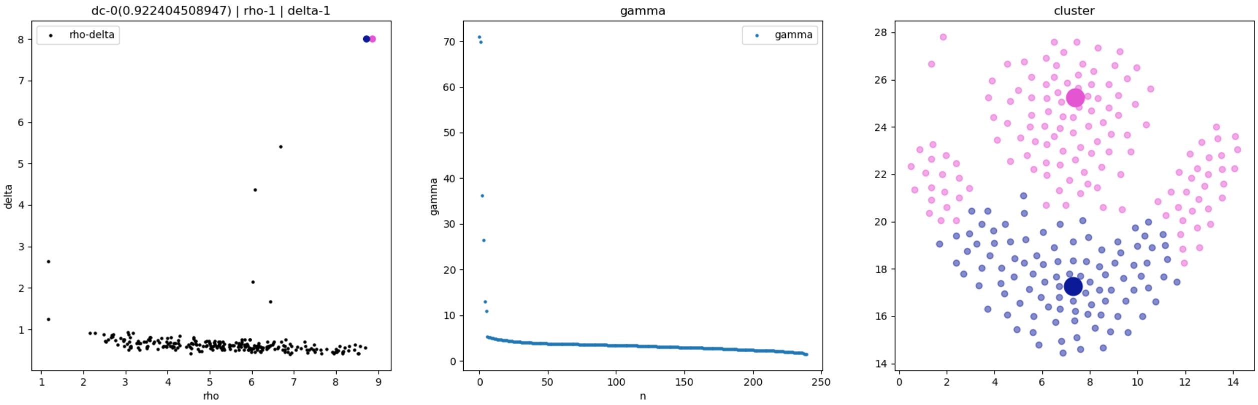
对于不同的数据集，d_c 的最佳取值范围都有所不同，具体问题需要具体测试。

测试

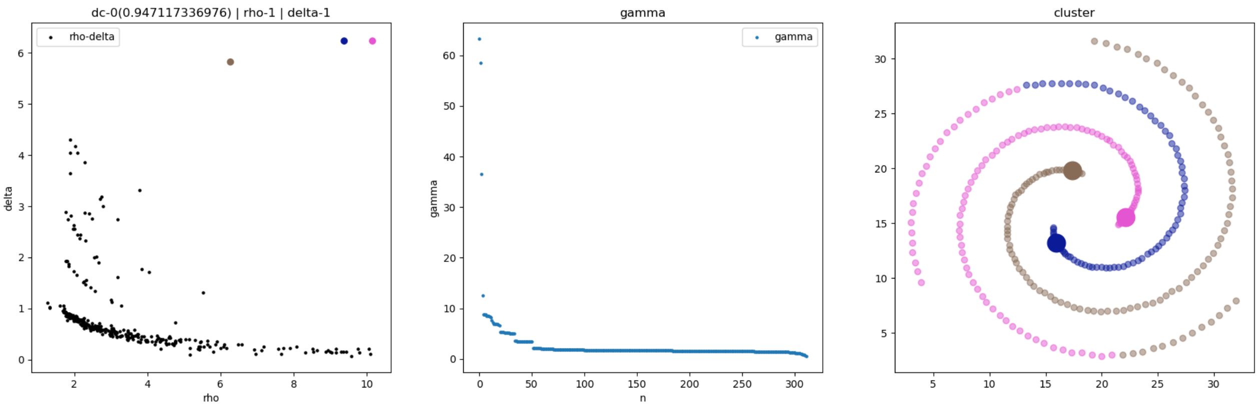
> 用 spiral 和 flame 两个数据集测试不同 d_c 值的影响。
>
> ρ 的计算采用高斯核（见步骤4），δ 的计算采用方法二（见步骤5）

- $lower = 1\%\ \ upper = 2\%$

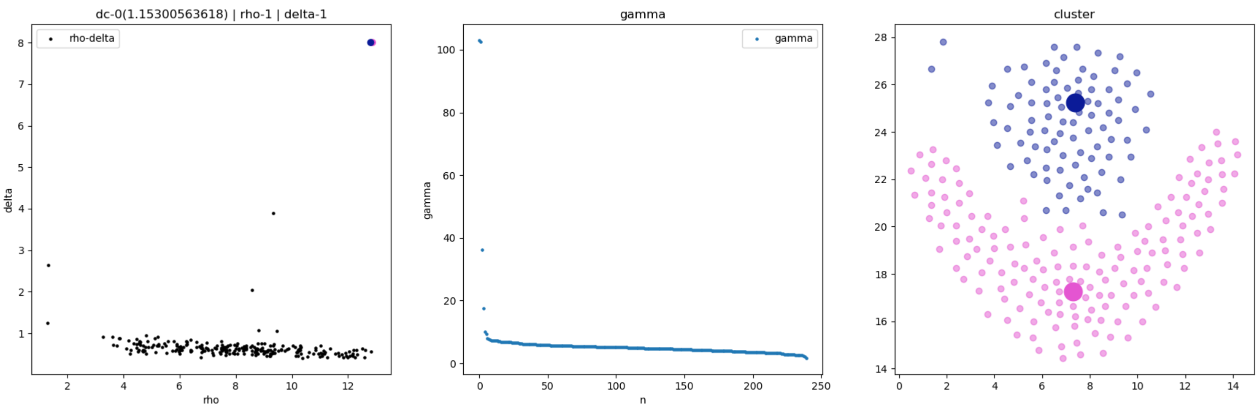
- flame 数据集



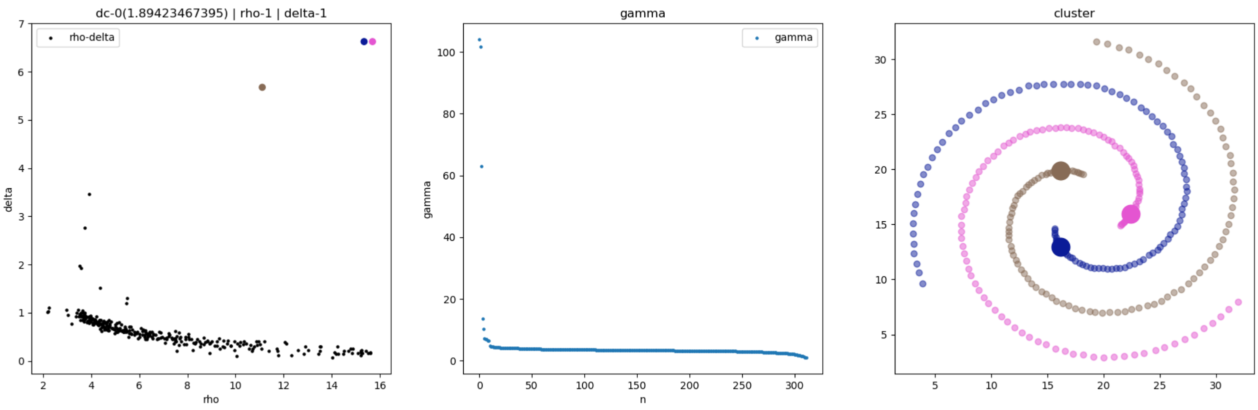
- spiral 数据集



- $lower = 3\%\ \ upper = 4\%$
- flame 数据集



- spiral 数据集



> 根据测试可知，d_c 暂时无法通过自动计算得到一个合理的值，而对于每个数据集都需要调试以达到一个较佳的值。
>
> 而根据原文可知， d_c 只要在一个合理的范围内（过大或过小均不行），其对中心点的选取影响不大（中心点不变），但是对于聚类的性能有不小的影响（因为改变了d_c 即改变了 ρ ，对δ 和 $assign$ 等各种数据有所影响）。
>
> 这里提出该算法的四个相互影响且起决定性作用的因素，即
>
> - d_c ：截断距离
> - ρ：局部密度
> - δ：距高密度点的最小距离
> - 分配方式：聚类方式
>
> 下面会对其他因素一一进行讨论。

---

4. 计算局部密度 ρ_i

> ρ：局部密度值
>
> 论文中提出了两种计算 ρ 的方法

方法一：截断核函数

> 计算和 i 的距离小于 d_c 的点的数量。

$$\rho_i = \sum_j \chi(d_{ij} - d_c)$$

$$\chi(x) = \begin{cases} 1 & \text{x} < 0 \\ 0 & otherwise \end{cases}$$

方法二：高斯核函数

$$\rho_i = \sum_j \exp(-(\frac{d_{ij}}{d_c})^2)$$

> 当 j 远离 i 时函数取值很小（接近0），靠近 i 时取值很大（接近1）

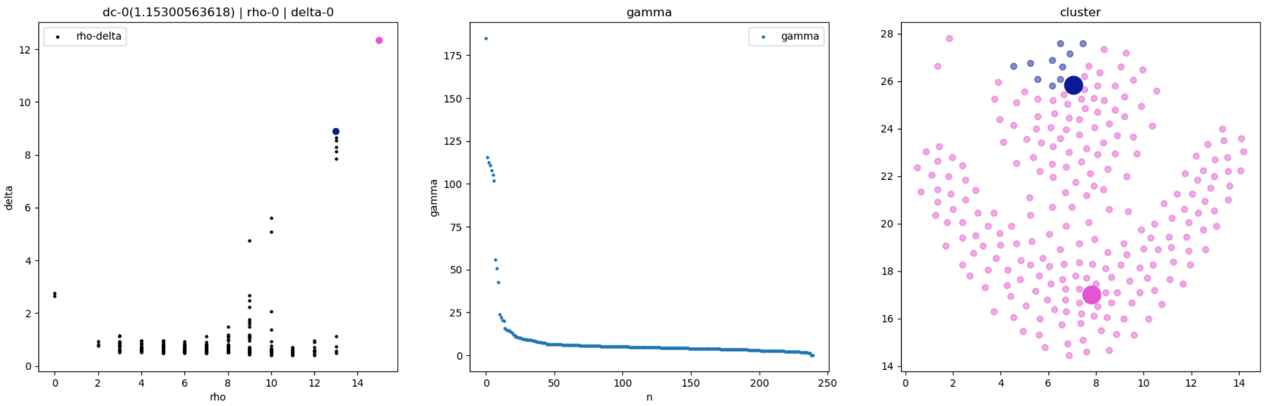
分析上述两种方法

- 第一种方法较为直接，其结果是离散的，实际使用时会发现较容易出现相同局部密度的点。因为没有考虑到邻居点（$d_{ij} < d_c$，j 即为 i 的邻居点）和自身距离的因素。
- 第二种方法采用了高斯核函数，连续递减的函数可以将邻居点和自身的距离因素考虑进去，从而可以降低出现相同局部密度的点的概率。

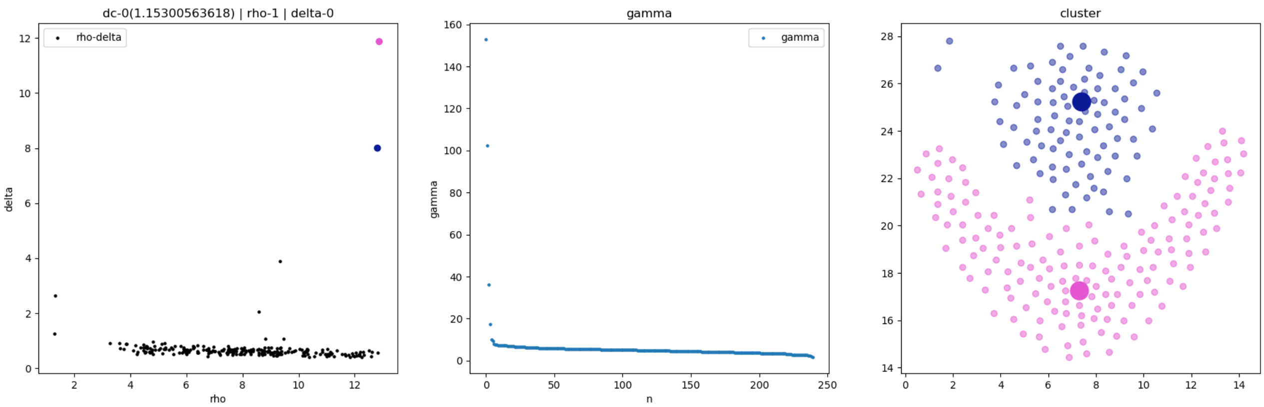
测试

> 这里用 flame 数据集(分布较均匀,aggregation 也可以）进行测试

- 方法一



- 方法二



> 可以观察到在 $\rho \sim \delta$ 表中，方法一的点较聚集，很难分辨出集群中心。方法二很分散，效果较好。

综上，实现算法时我统一选择使用高斯核函数计算 ρ

---

5. 计算 δ_i

> δ_i 用来衡量 i 和其他高密度的点的最小距离。
>
> 这里探讨两种 δ 的计算方法

方法一：原论文方法。

$$\delta_i = \begin{cases} \min_{j:\rho_j>\rho_i}(d_{ij}) & \text{if } \rho_i \neq max(\rho) \\ \max_j(d_{ij}) & \text{if } \rho_i = max(\rho) \end{cases}$$

这里会出现一个问题，如果 $\rho_i = \rho_j$，且 ρ_i and ρ_j 离得距离很近，则本应在一个聚类中的两个点，有可能会被分到两个聚类中，或成为两个聚类中心。针对这个问题，原文作者在讨论中提出了这么一种方法（方法二）。

方法二：改进后的方法

$$\begin{gathered} order\_rho\_index = \rho(desc)_{index} \\ i,j \text{ 为 } order\_rho\_index \text{ 的索引} \\ m = order\_rho\_index[i] \\ n = order\_rho\_index[j] \\ \delta_i = \begin{cases} \min_{j:j<i}(d_{mn}) & i \geq 1 \\ \max(\delta) & i = 0 \end{cases} \end{gathered}$$

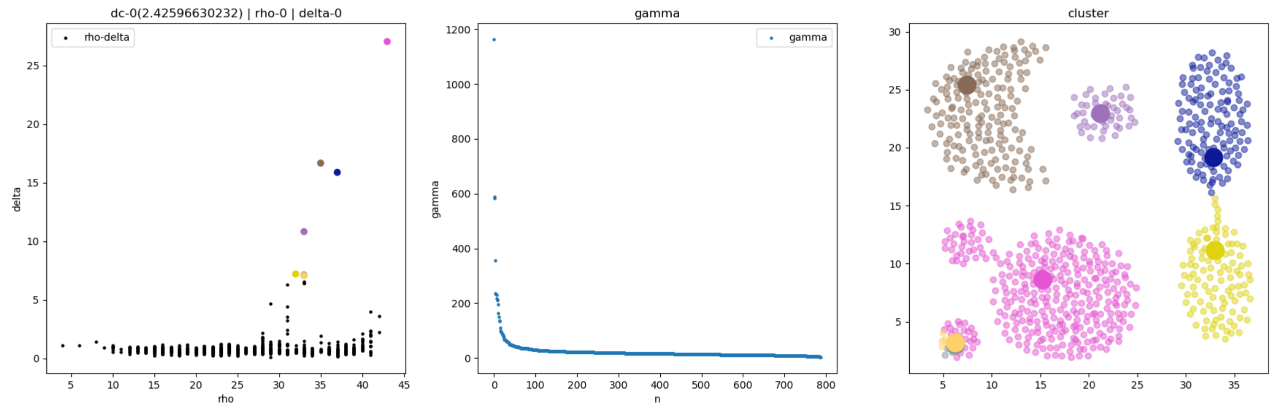
这里，我们会发现当 $\rho_i = \rho_j$ 时，他们的索引会排在 $order\_rho\_index$ 中相邻的两位，而由对 δ 的定义可得，此时，排在前面的首先会获取一个较大的 δ_i 值，而后者即使有较大的 ρ_j 值，其 δ_j 很可能能为 $\min(d_{ji})$，而并不会获取一个较大的 δ 值。由此，可以有效的处理方法一中的问题，使的 i,j 中只会选择 i 为聚类中心（ρ_j 较小）。

测试

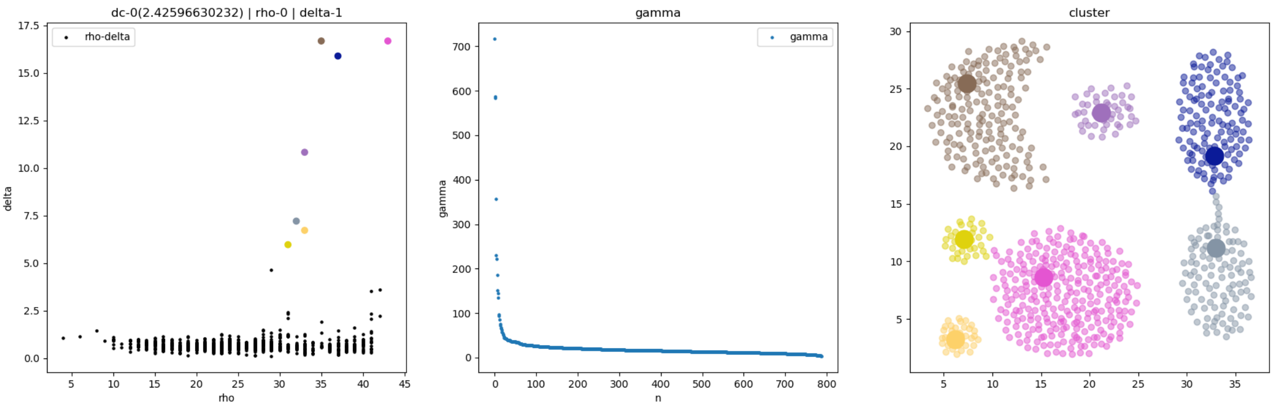
> 我选用 aggregation 数据集进行测试
>
> ρ 采用方法一（直接计算数量，不采用高斯核）

结果如下

- 方法一



- 方法二



> 因为我对中心点的选择使用的方法是：给定点的数量N ，取γ 值前 N 个，并且未对距离很小的两点进行筛选，所以方法一的结果导致左下角聚类中心点高度密集。
>
> 但由此也很好的表现出了方法二的效果。

综上，实现算法时我统一选择使用方法二。

---

6. 绘制 $\rho-\delta$ 或 $\gamma_i=\rho_i*\delta_i$ 图像

在论文中，作者在结尾提出了一种确定中心点数量的思路，即绘制γ图像

$$\gamma_i=\rho_i*\delta_i$$

但作者在讨论中也明确表达即使绘制出了图像，其距离中心点的数量，或γ 图的聚类中心与非聚类中心的分隔线也很难自动确定，只能通过人们的观察和主观判断才能确定。

7. 确定聚类中心 （难点二）

> 通过 $\rho-\delta$ 决策图或 γ 图确定聚类中心。

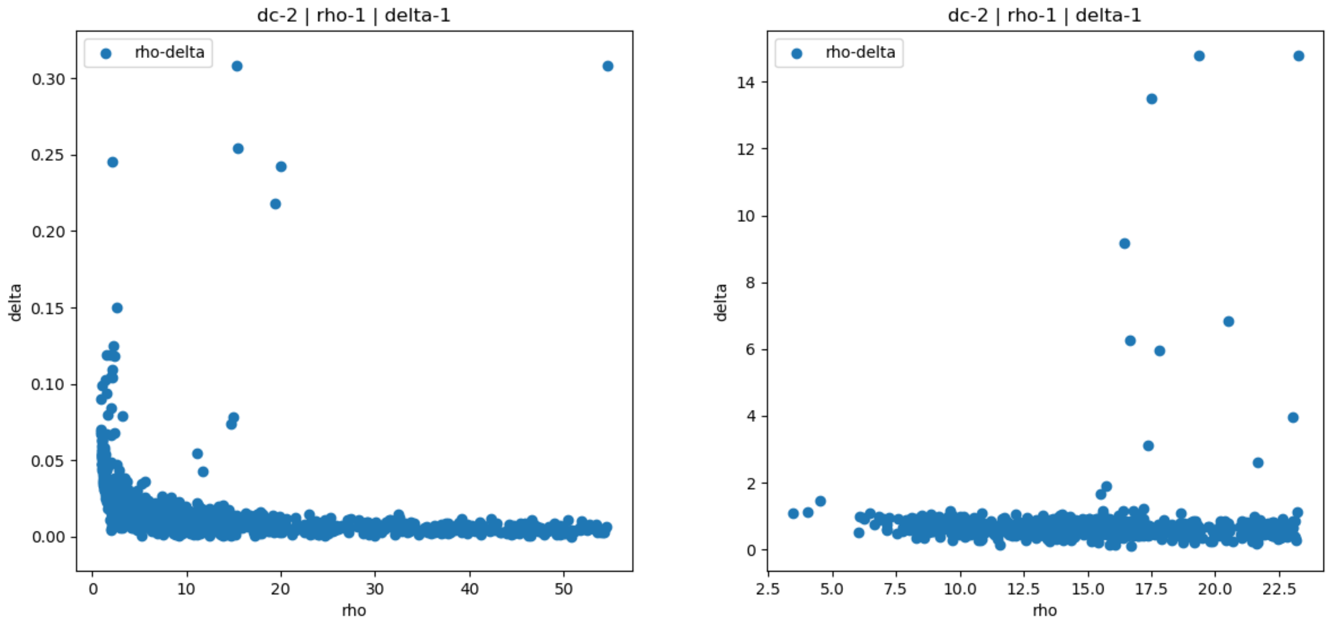
这里是原论文中争议较大的部分，因为按照原文的意思，聚类中心可以自动的寻找到，尽管论文作者在讨论中表达出他所指的“自动”是指自动整理数据并生成 ρ~δ 的图，然后人们可以通过视觉人工地来确定中心点，但是此处仍有诸多问题，如取点的标准，这里我们探讨了如下的问题。

- $\rho-\delta$ 决策图中，如何确定聚类中心点？

> 我们这里不再讨论其他因素产生的影响，如：相近且相似点的取舍。而只关注分散的中心点的选取。
>
> 所以我们 d_c 取为经调试后的较佳值，ρ 的计算采用方法二（高斯核函数），δ 的计算采用方法二（改进后的方法）
>
> 数据集选取两种数据集进行讨论。（origin-1000，aggregation）

测试

- 下左图为 origin-1000 数据集的决策图，根据原文中提供的思想，发现在 $\rho > 10, \delta > 0.2$ 有5个点，其 δ 和 ρ 都较大，故可选取为聚类中心点。



- 但是观察到上右图（aggregation数据集），每个人对其取点的范围定义可能会有所不同，从而导致聚类中心的点不确定。

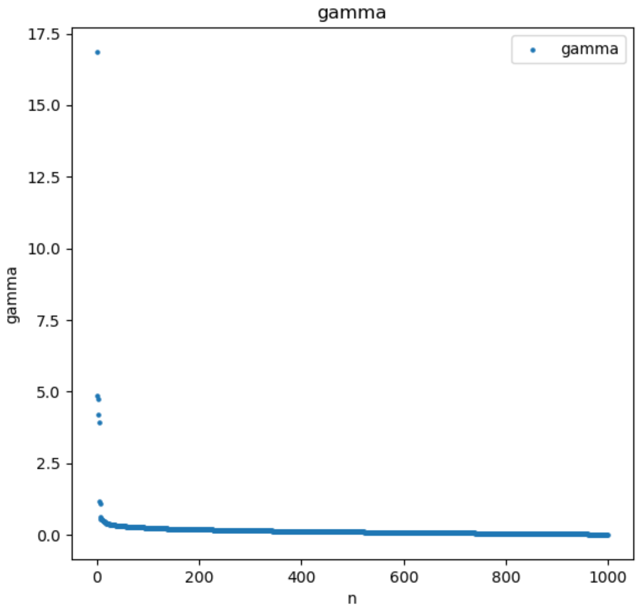
> 所以很容易发现，生成决策图后，对聚类中心的选取需要明显的人工干预（即给定$\rho_{threshold}$和 $\delta_{threshold}$)。

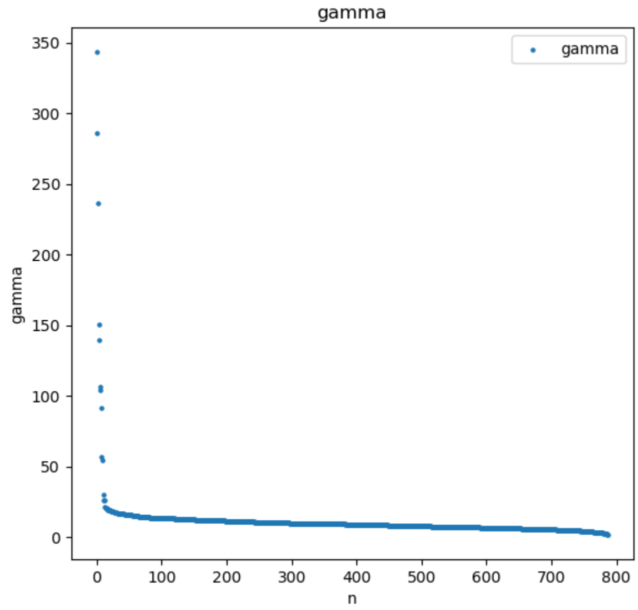
- 原文中的最后，作者给出了一种获取中心点数量的方法。

$$\gamma_i = \rho_i * \delta_i$$

首先通过 (12) 获得 γ ，然后对 γ 进行降序排序，画出 $\gamma - n$(索引) 图。如下：

（左：origin-1000，右：aggregation）





- 这里引申出来第二个问题，即使给出了 γ 图，对于人工判断的依赖依然很大，即很难找到一个标准，指定前N 个为聚类中心点。

所以确定中心点这里有两种方法

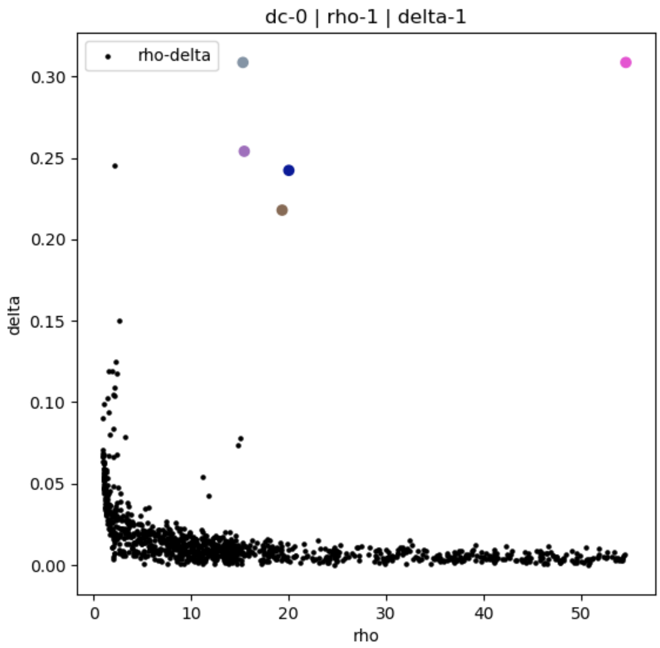
1. 给定：$\rho_{threshold}$和 $\delta_{threshold}$

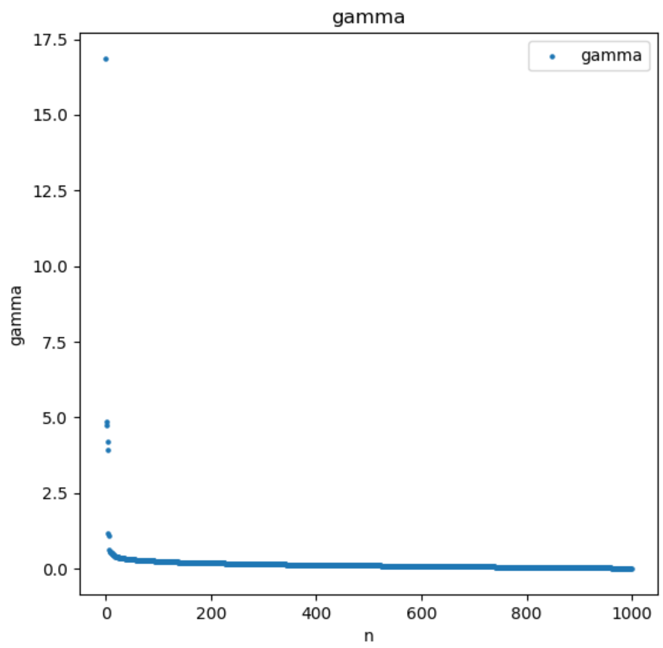
$$i : \rho_i > \rho_{threshold} \text{ and } \delta_i > \delta_{threshold}$$

2. 给定N，取 γ_{desc_order} 前 N 个点（或给定$\gamma_{threshold}$ ）

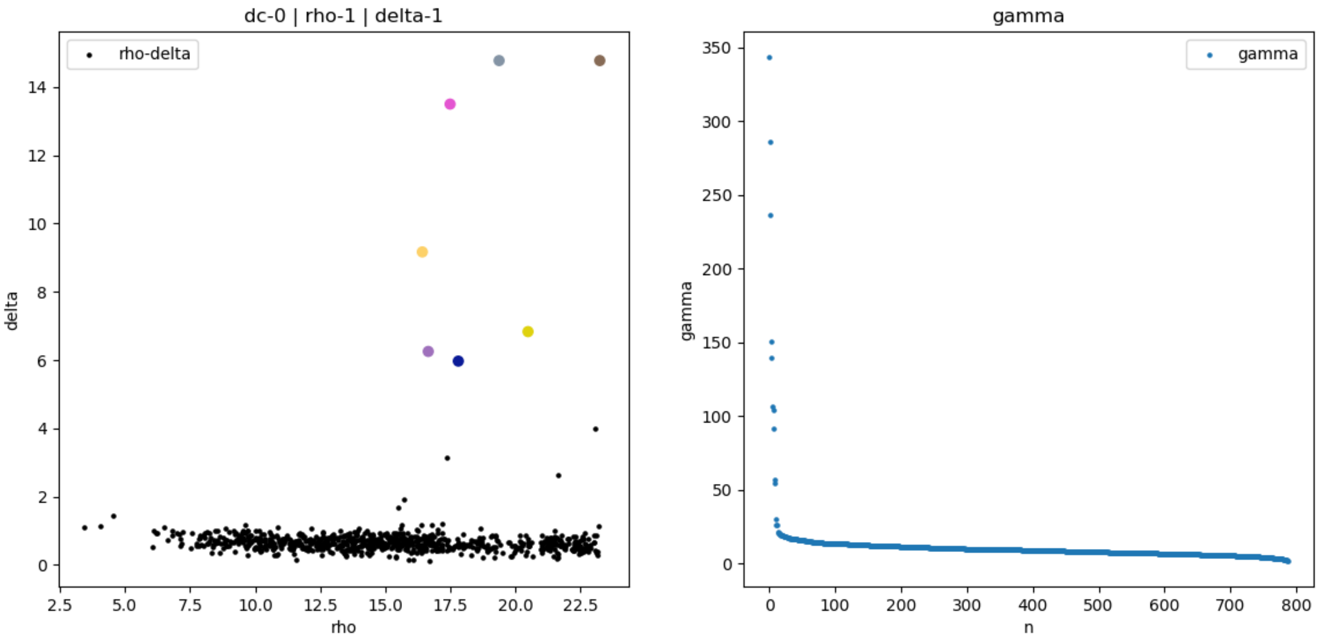
测试结果

- origin-1000 数据集





- aggregation 数据集



> 两种方法并无太大差异，
>
> 我的实现中采用了给定 N 值的方法。

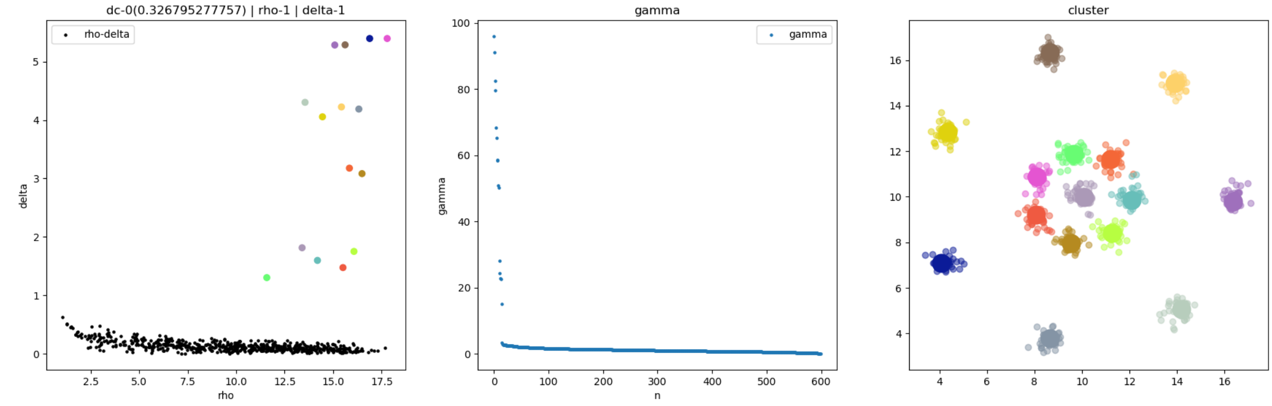
---

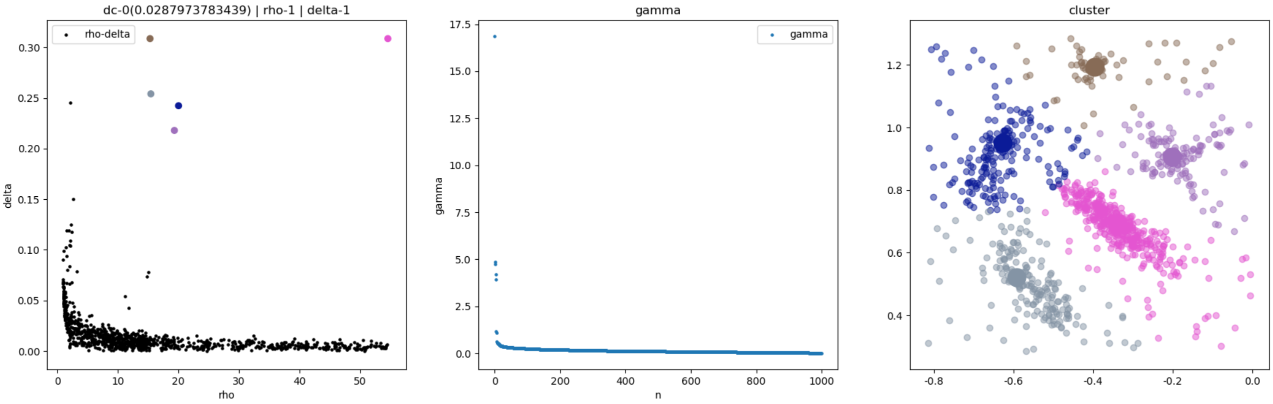
8. 分配点（聚类）

> 这里探讨两种分配点的方法。

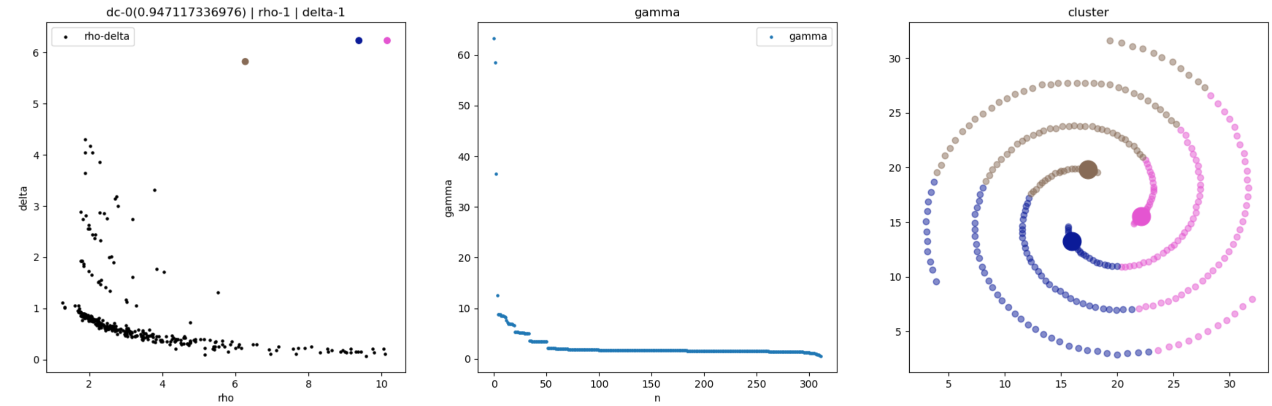
方法一：直接将数据点与他距离最近的聚类中心点分配到一类中

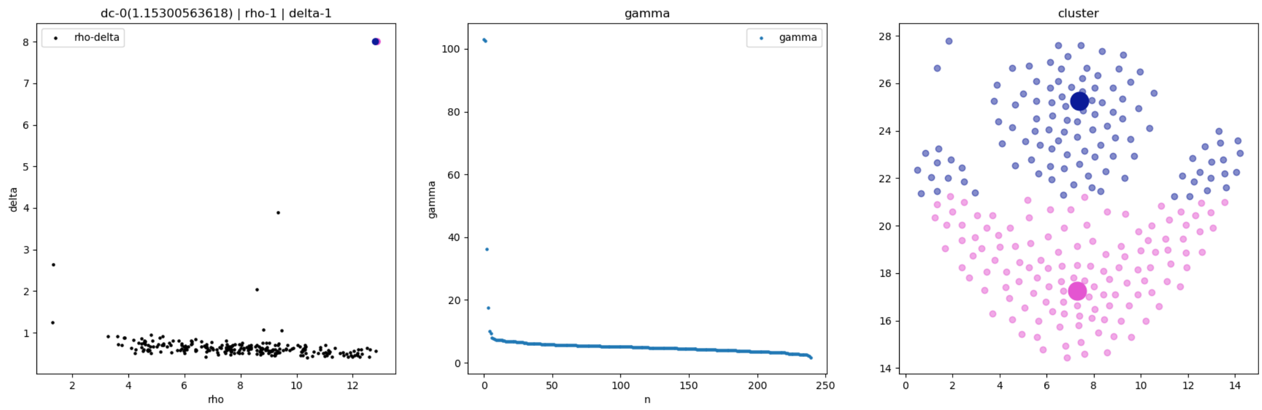
> 该方法简单直接
>
> 效果对于整体分布分散，局部分布集中的数据集效果较好。
>
> 如下（origin-1000数据集，R15数据集，d_c 取 3%-4%，ρ 的计算采取高斯核，δ 的计算采取改进后的方法）





> 但是其弊端也十分明显，如下图（上：spiral数据集，下：flame数据集）





方法二：通过链式寻找最近高密度中心点

> 该方法中心思想为通过链式将每个点与中心点链接到。

1. 将 ρ 按降序排序，得到 $order\_rho\_index$：记录 ρ 降序的点编号，如 $order\_rho\_index[0]$ 为ρ 最大的点编号。
2. 按照 $order\_rho\_index$ 设置 $link$。

$$i = order\_rho\_index[n] \text{ , } j = order\_rho\_index[m]$$

$$link[i] = \begin{cases} i & \text{i is center} \\ j : min(d_{j:m<n}(ij)) & \text{i is not center} \end{cases}$$

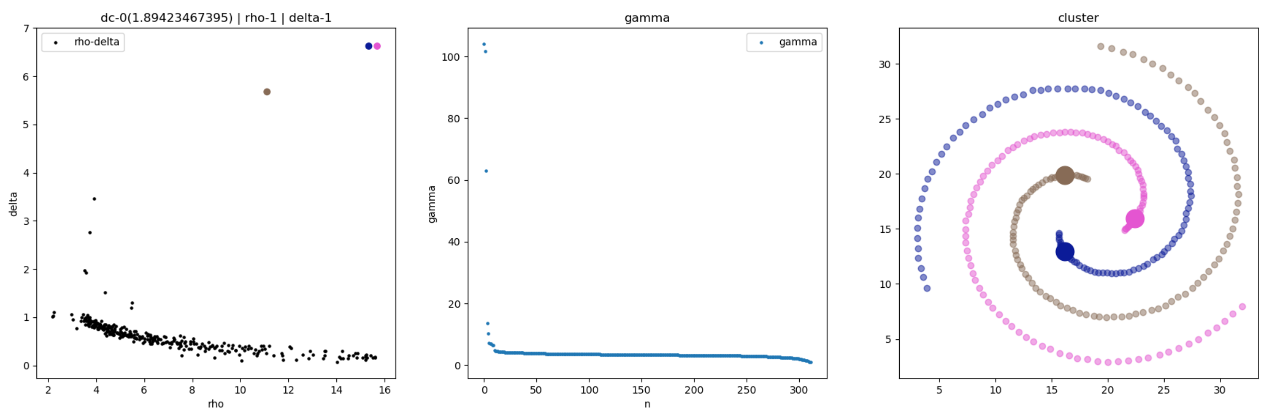
3. 分配点

```
for i, v in link.items():  # i: 待分配点; v: 待分配点的链接点
    c = v  # c: 链接点
    while c not in center:  # 遍历直到中心点
        c = link[c]
    cluster[c].append(i)  # 分配点
```

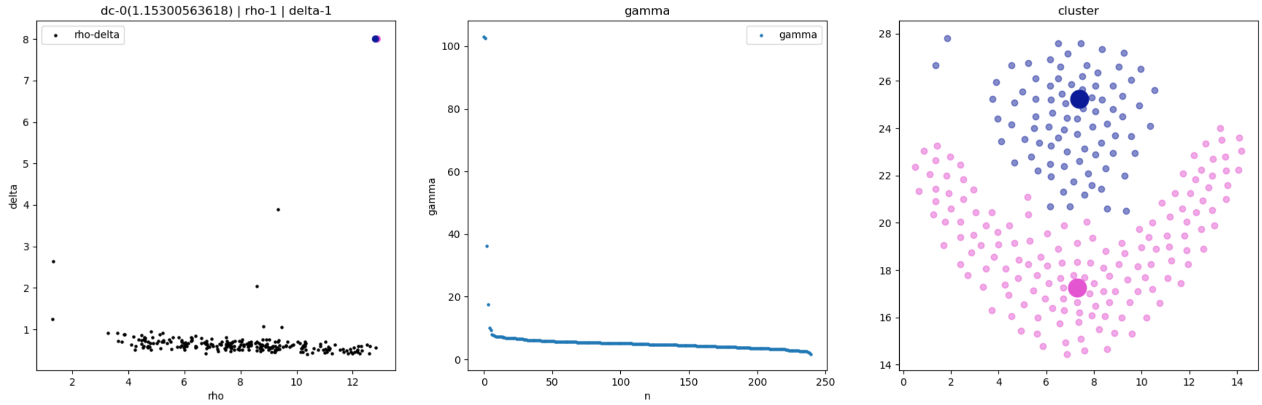
测试

> 方法二采用和方法一相同的数据集和方法进行测试。

- spiral

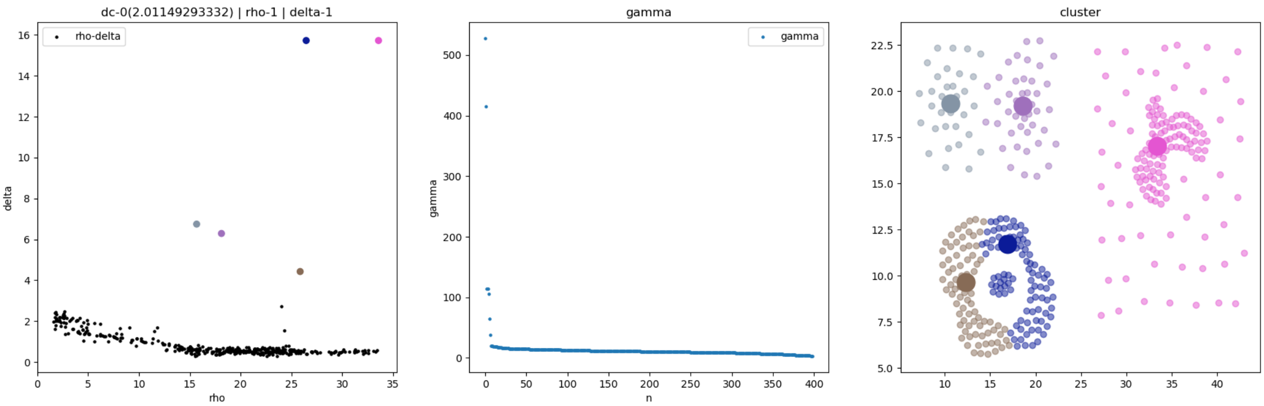


- flame

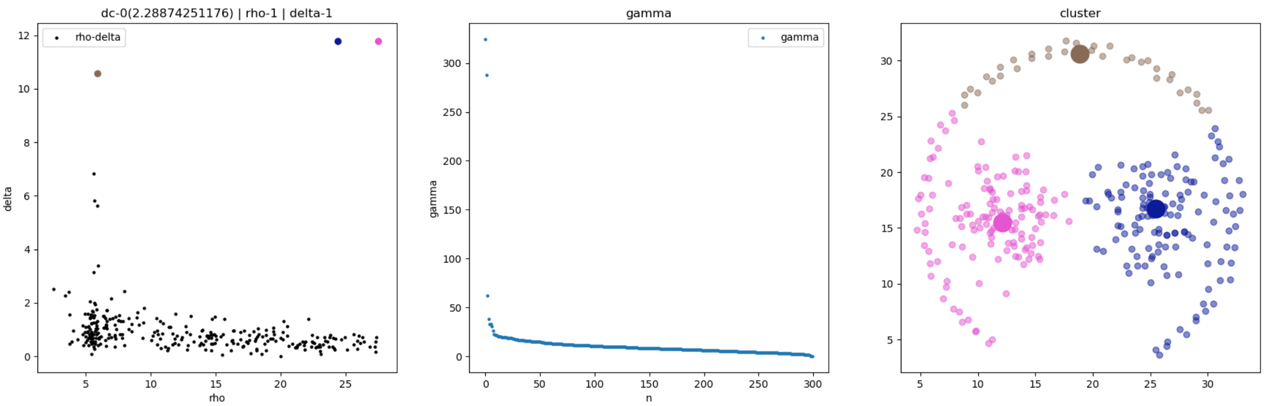


> 通过实验，可以明显感受到方法二较方法一更适合处理不规则数据集，但在测试所选的十个的数据集中，仍有两个数据集无法得到最佳聚类。

- compound



- path-based



> 综上，我在实现算法时采用了方法二（尽管仍有一些未处理的问题）。

---

9. 计算 halo

> 评测点的可靠性。
>
> 将聚类点分为 $core, halo$ 。

$$i \in cluster[c]\ ,\ \ j \notin cluster[c]\ , \text{c: 聚类中心}$$

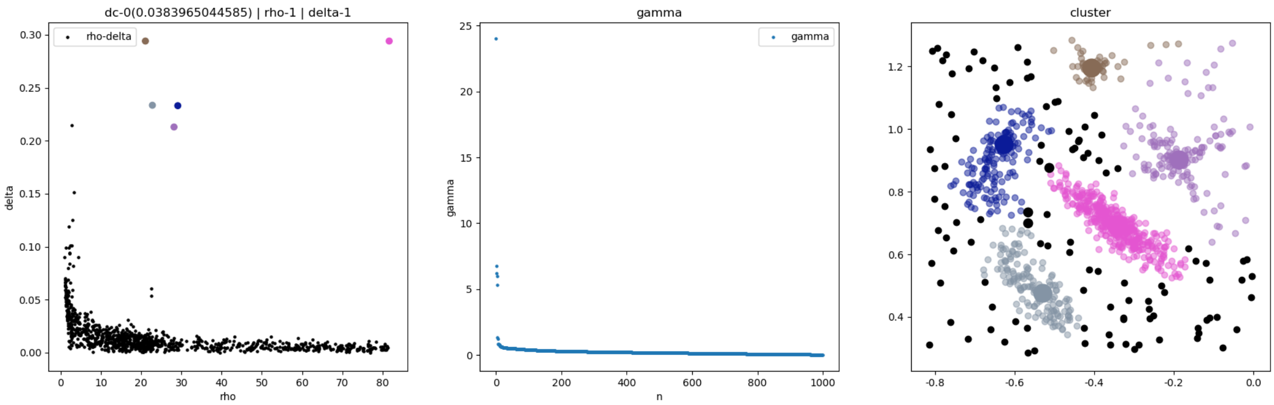
$$border[c] = i : d(ij) < d_c$$

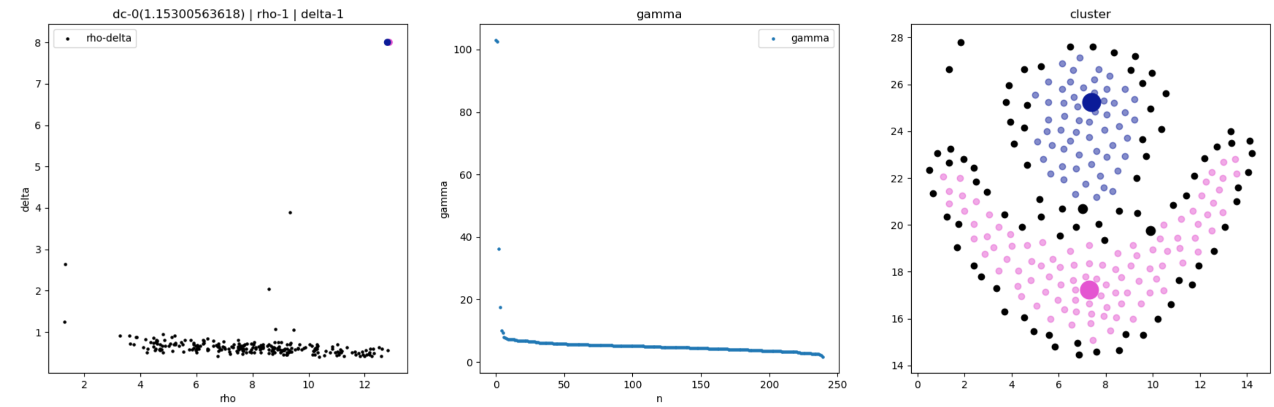
$$\rho_b = \max(\rho_{k:k \in border[c]})$$

$$core[c] = m : \rho_m \geq \rho_b$$

$$halo[c] = n : \rho_n < \rho_b$$

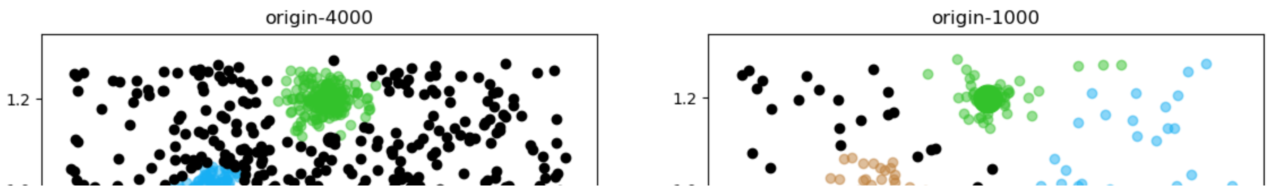
> 这里选取 origin-1000 数据集 和 flame 数据集

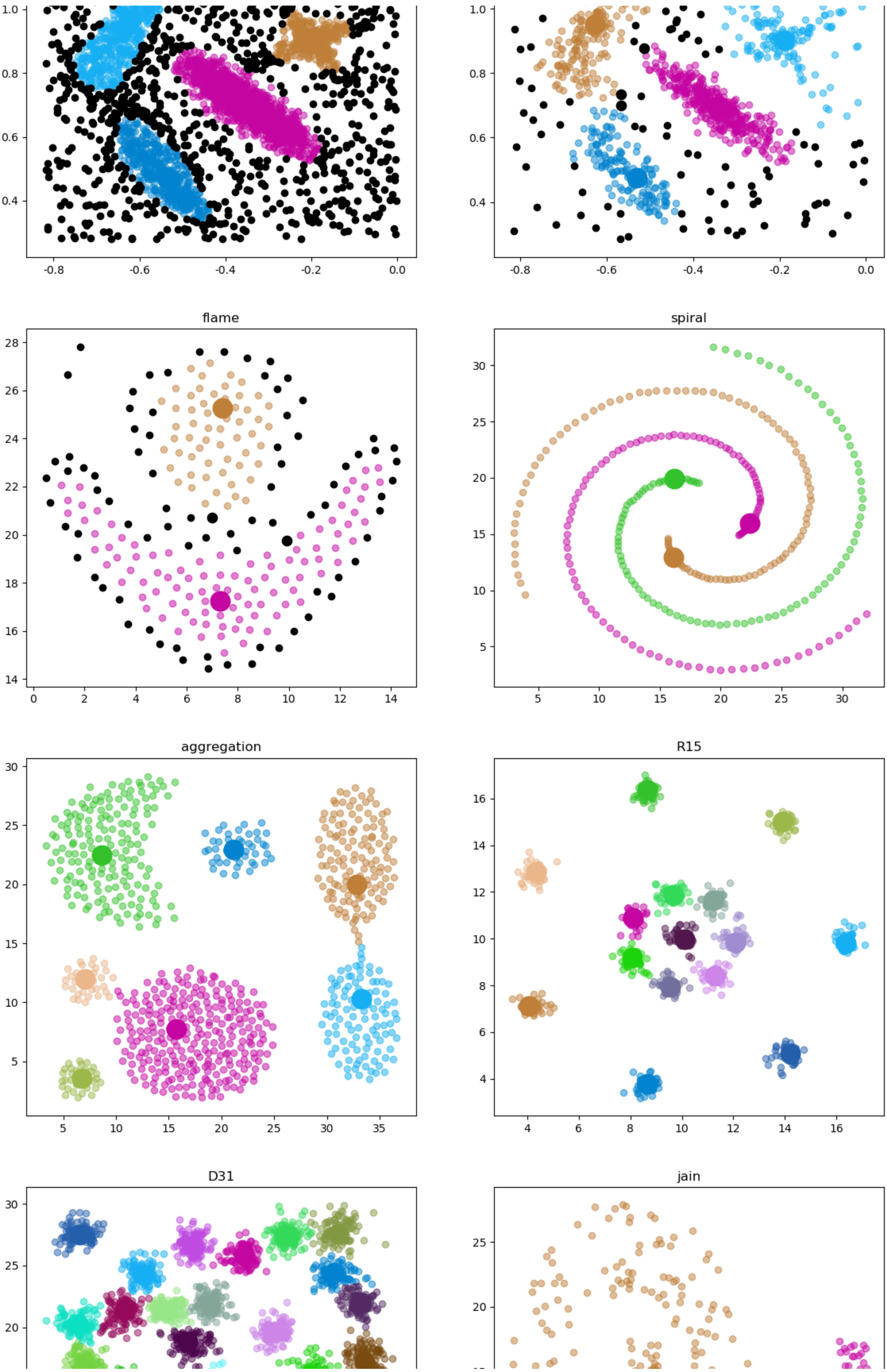


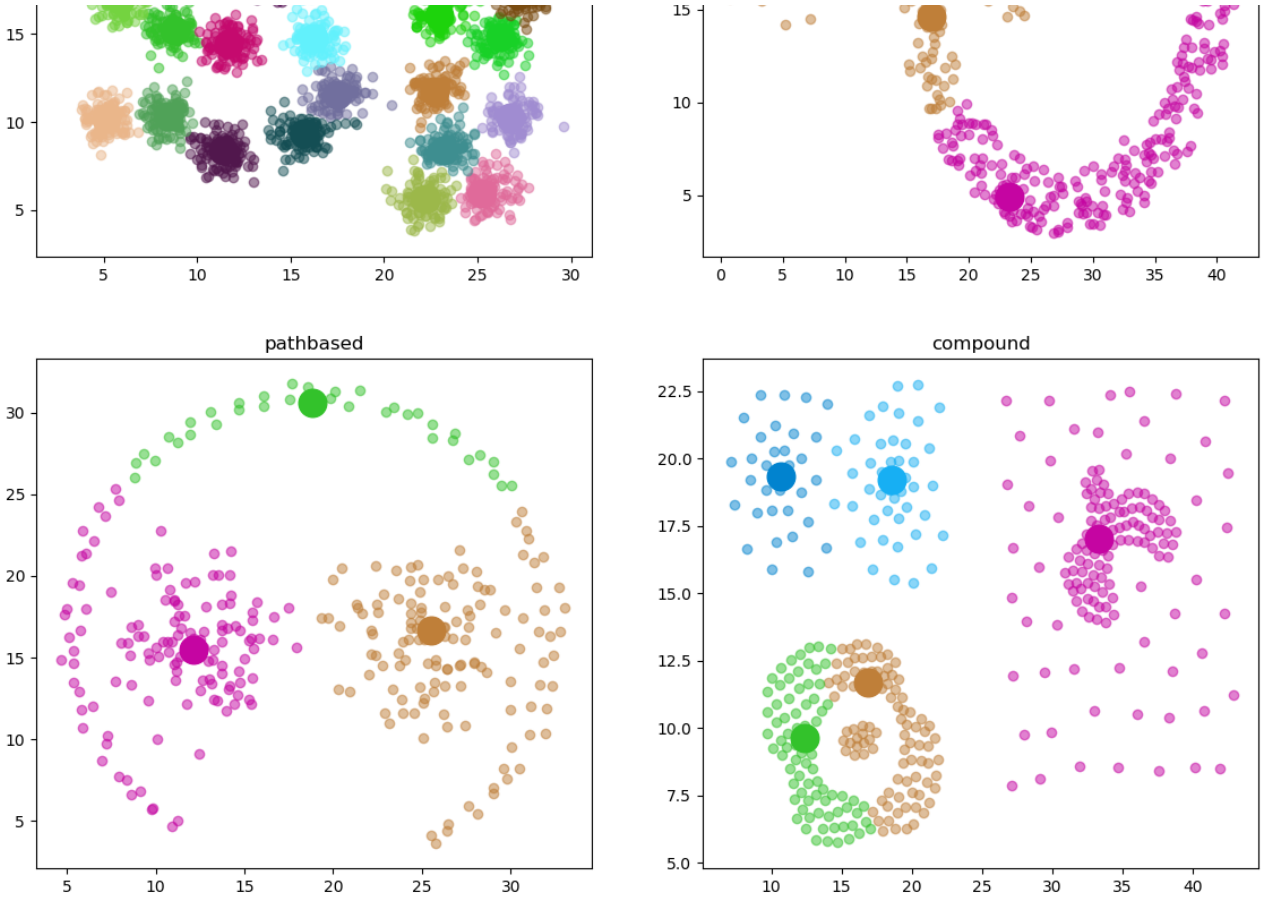


---

10. 绘制结果




flame
spiral
aggregation
R15
D31
jain



总结

- DPC算法将ρ 与 δ 结合并给予人们寻找聚类中心启发性的决策图。在当时聚类算法存在诸多问题时是很不错的思想。
- 尽管饱受人们的争议，例如作者的措辞有种被夸大的感觉，或者作者代码实现与论文原文所描述有所出入，又或者因为测试的不够全面而被批判，但是其算法的精炼程度及其核心思想仍受到大多数人们的称赞。
- 在未接触过其他著名的聚类算法的情况下阅读这篇论文并实现，收获颇丰。在质疑很多问题的同时也收获了很多知识。

附录

- code
- dataset