# 聚类

1. 在无监督学习`(unsupervised learning)`中，训练样本的标记信息是未知的。
2. 无监督学习的目标：通过对无标记训练样本的学习来揭露数据的内在性质以及规律。
3. 一个经典的无监督学习任务：寻找数据的最佳表达`(representation)`。常见的有：
   - 低维表达：试图将数据（位于高维空间）中的信息尽可能压缩在一个较低维空间中。
   - 稀疏表达：将数据嵌入到大多数项为零的一个表达中。该策略通常需要进行维度扩张。
   - 独立表达：使数据的各个特征相互独立。
4. 无监督学习应用最广的是聚类`(clustering)`。
   - 给定数据集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\vec{\mathbf{x}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$，聚类试图将数据集中的样本划分为 $K$ 个不相交的子集 $\{\mathbb{C}_1,\mathbb{C}_2,\cdots,\mathbb{C}_K\}$，每个子集称为一个簇`cluster`。其中：$\mathbb{C}_k\bigcap_{k\neq l}\mathbb{C}_l=\phi,\quad \mathbb{D}=\bigcup_{k=1}^K\mathbb{C}_k$。
   - 通过这样的划分，每个簇可能对应于一个潜在的概念。这些概念对于聚类算法而言，事先可能是未知的。
   - 聚类过程仅仅能自动形成簇结构，簇所对应的概念语义需要由使用者来提供。
5. 通常用 $\lambda_i\in\{1,2,\cdots,K\}$ 表示样本 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 的簇标记`cluster label`，即 $\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{C}_{\lambda_i}$。于是数据集 $\mathbb{D}$ 的聚类结果可以用包含 $N$ 个元素的簇标记向量 $\vec{\lambda}=(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_N)^T$ 来表示。
6. 聚类的作用：
   - 可以作为一个单独的过程，用于寻找数据内在的分布结构。
   - 也可以作为其他学习任务的前驱过程。如对数据先进行聚类，然后对每个簇单独训练模型。
7. 聚类问题本身是病态的。即：没有某个标准来衡量聚类的效果。
   - 可以简单的度量聚类的性质，如每个聚类的元素到该类中心点的平均距离。

     但是实际上不知道这个平均距离对应于真实世界的物理意义。
   - 可能很多不同的聚类都很好地对应了现实世界的某些属性，它们都是合理的。

     如：在图片识别中包含的图片有：红色卡车、红色汽车、灰色卡车、灰色汽车。可以聚类成：红色一类、灰色一类；也可以聚类成：卡车一类、汽车一类。

     > 解决该问题的一个做法是：利用深度学习来进行分布式表达，可以对每个车辆赋予两个属性：一个表示颜色、一个表示型号。

# 一、性能度量

1. 聚类的性能度量也称作聚类的有效性指标`validity index`。
2. 直观上看，希望同一簇的样本尽可能彼此相似，不同簇的样本之间尽可能不同。即：簇内相似度`intra-cluster similarity`高，且簇间相似度`inter-cluster similarity`低。
3. 聚类的性能度量分两类：
   - 聚类结果与某个参考模型`reference model`进行比较，称作外部指标`external index`。
   - 直接考察聚类结果而不利用任何参考模型，称作内部指标`internal index`。

## 1.1 外部指标

1. 对于数据集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\vec{\mathbf{x}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$，假定通过聚类给出的簇划分为 $\mathcal{C}=\{\mathbb{C}_1,\mathbb{C}_2,\cdots,\mathbb{C}_K\}$。参考模型给出的簇划分为 $\mathcal{C}^*=\{\mathbb{C}_1^*,\mathbb{C}_2^*,\cdots,\mathbb{C}_{K'}^*\}$，其中 $K$ 和 $K'$ 不一定相等 。

   令 $\vec{\lambda},\vec{\lambda}^*$ 分别表示 $\mathcal{C},\mathcal{C}^*$ 的簇标记向量。定义：

$$a=|SS|,SS=\{(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)\mid\lambda_i=\lambda_j,\lambda_i^*=\lambda_j^*,i<j\}$$
$$b=|SD|,SD=\{(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)\mid\lambda_i=\lambda_j,\lambda_i^*\neq\lambda_j^*,i<j\}$$
$$c=|DS|,DS=\{(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)\mid\lambda_i\neq\lambda_j,\lambda_i^*=\lambda_j^*,i<j\}$$
$$d=|DD|,DD=\{(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)\mid\lambda_i\neq\lambda_j,\lambda_i^*\neq\lambda_j^*,i<j\}$$

   其中 $|\cdot|$ 表示集合的元素的个数。各集合的意义为：

   - $SS$：包含了同时隶属于 $\mathcal{C},\mathcal{C}^*$ 的样本对。
   - $SD$：包含了隶属于 $\mathcal{C}$，但是不隶属于 $\mathcal{C}^*$ 的样本对。
   - $DS$：包含了不隶属于 $\mathcal{C}$，但是隶属于 $\mathcal{C}^*$ 的样本对。
   - $DD$：包含了既不隶属于 $\mathcal{C}$，又不隶属于 $\mathcal{C}^*$ 的样本对。

   由于每个样本对 $(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j),i<j$ 仅能出现在一个集合中，因此有 $a+b+c+d=\frac{N(N-1)}{2}$。

2. 下述性能度量的结果都在 `[0,1]` 之间。这些值越大，说明聚类的性能越好。

### 1.1.1 Jaccard系数

1. `Jaccard` 系数 `Jaccard Coefficient:JC`：

$$JC=\frac{a}{a+b+c}$$

   它刻画了：所有的同类的样本对（要么在 $\mathcal{C}$ 中属于同类，要么在 $\mathcal{C}^*$ 中属于同类）中，同时隶属于 $\mathcal{C},\mathcal{C}^*$ 的样本对的比例。

### 1.1.2 FM指数

1. `FM` 指数 `Fowlkes and Mallows Index:FMI`：

$$FMI=\sqrt{\frac{a}{a+b}\cdot\frac{a}{a+c}}$$

   它刻画的是：

   - 在 $\mathcal{C}$ 中同类的样本对中，同时隶属于 $\mathcal{C}^*$ 的样本对的比例为 $p1=\frac{a}{a+b}$ 。
   - 在 $\mathcal{C}^*$ 中同类的样本对中，同时隶属于 $\mathcal{C}$ 的样本对的比例为 $p2=\frac{a}{a+c}$ 。
   - `FMI` 就是 $p1$ 和 $p2$ 的几何平均。

### 1.1.3 Rand指数

1. `Rand` 指数 `Rand Index:RI`：

$$RI=\frac{a+d}{N(N-1)/2}$$

   它刻画的是：

   - 同时隶属于 $\mathcal{C},\mathcal{C}^*$ 的同类样本对（这种样本对属于同一个簇的概率最大）与既不隶属于 $\mathcal{C}$、又不隶属于 $\mathcal{C}^*$ 的非同类样本对（这种样本对不是同一个簇的概率最大）之和，占所有样本对的比例。
   - 这个比例其实就是聚类的可靠程度的度量。

### 1.1.4 ARI指数

1. 使用`RI`有个问题：对于随机聚类，`RI`指数不保证接近0（可能还很大）。

   `ARI`指数就通过利用随机聚类来解决这个问题。

2. 定义一致性矩阵为：

| | $\mathbb{C}_1^*$ | $\mathbb{C}_2^*$ | $\cdots$ | $\mathbb{C}_{K'}^*$ | sums |
|---|---|---|---|---|---|
| $\mathbb{C}_1$ | $n_{1,1}$ | $n_{1,2}$ | $\cdots$ | $n_{1,K'}$ | $s_1$ |
| $\mathbb{C}_2$ | $n_{2,1}$ | $n_{2,2}$ | $\cdots$ | $n_{2,K'}$ | $s_2$ |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\ddots$ | $\vdots$ | $\vdots$ |
| $\mathbb{C}_K$ | $n_{K,1}$ | $n_{K,2}$ | $\cdots$ | $n_{K,K'}$ | $s_K$ |
| sums | $t_1$ | $t_2$ | $\cdots$ | $t_K$ | $N$ |

   其中：

   - $s_i$ 为属于簇 $\mathbb{C}_i$ 的样本的数量，$t_i$ 为属于簇 $\mathbb{C}_i^*$ 的样本的数量。
   - $n_{i,j}$ 为同时属于簇 $\mathbb{C}_i$ 和簇 $\mathbb{C}_i^*$ 的样本的数量。

   则根据定义有：$a=\sum_i\sum_j C_{n_{i,j}}^2$，其中 $C_n^2=\frac{n(n-1)}{2}$ 表示组合数。数字`2`是因为需要提取两个样本组成样本对。

3. 定义`ARI`指数`Adjusted Rand Index`：

$$ARI=\frac{\sum_i\sum_j C_{n_{i,j}}^2-\left[\sum_i C_{s_i}^2\times\sum_j C_{t_j}^2\right]/C_N^2}{\frac{1}{2}\left[\sum_i C_{s_i}^2+\sum_j C_{t_j}^2\right]-\left[\sum_i C_{s_i}^2\times\sum_j C_{t_j}^2\right]/C_N^2}$$

   其中：

   - $\sum_i\sum_j C_{n_{i,j}}^2$ ：表示同时隶属于 $\mathcal{C},\mathcal{C}^*$ 的样本对。
   - $\frac{1}{2}\left[\sum_i C_{s_i}^2+\sum_j C_{t_j}^2\right]$ ：表示最大的样本对。

     即：无论如何聚类，同时隶属于 $\mathcal{C},\mathcal{C}^*$ 的样本对不会超过该数值。
   - $\left[\sum_i C_{s_i}^2\times\sum_j C_{t_j}^2\right]/C_N^2$ ：表示在随机划分的情况下，同时隶属于 $\mathcal{C},\mathcal{C}^*$ 的样本对的期望。
     - 随机挑选一对样本，一共有 $C_N^2$ 种情形。
     - 这对样本隶属于 $\mathcal{C}$ 中的同一个簇，一共有 $\sum_i C_{s_i}^2$ 种可能。
     - 这对样本隶属于 $\mathcal{C}^*$ 中的同一个簇，一共有 $\sum_j C_{t_i}^2$ 种可能。
     - 这对样本隶属于 $\mathcal{C}$ 中的同一个簇、且属于 $\mathcal{C}^*$ 中的同一个簇，一共有 $\sum_i C_{s_i}^2\times\sum_j C_{t_j}^2$ 种可能。
     - 则在随机划分的情况下，同时隶属于 $\mathcal{C},\mathcal{C}^*$ 的样本对的期望（平均样本对）为：$\left[\sum_i C_{s_i}^2\times\sum_j C_{t_j}^2\right]/C_N^2$ 。

## 1.2 内部指标

1. 对于数据集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\vec{\mathbf{x}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$，假定通过聚类给出的簇划分为 $\mathcal{C}=\{\mathbb{C}_1,\mathbb{C}_2,\cdots,\mathbb{C}_K\}$。

   定义：

$$\text{avg}(\mathbb{C}_k)=\frac{2}{|\mathbb{C}_k|(|\mathbb{C}_k|-1)}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j\in\mathbb{C}_k,i\neq j}\text{distance}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j),\quad k=1,2,\cdots,K$$

$$\text{diam}(\mathbb{C}_k)=\max_{\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j\in\mathbb{C}_k,i\neq j}\text{distance}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j),\quad k=1,2,\cdots,K$$

$$d_{min}(\mathbb{C}_k,\mathbb{C}_l)=\min_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{C}_k,\vec{\mathbf{x}}_j\in\mathbb{C}_l}\text{distance}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j),\quad k,l=1,2,\cdots,K;k\neq l$$

$$d_{cen}(\mathbb{C}_k,\mathbb{C}_l)=\text{distance}(\vec{\mu}_k,\vec{\mu}_l),\quad k,l=1,2,\cdots,K;k\neq l$$

其中：$\text{distance}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)$ 表示两点 $\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j$ 之间的距离；$\vec{\mu}_k$ 表示簇 $\mathbb{C}_k$ 的中心点，$\vec{\mu}_l$ 表示簇 $\mathbb{C}_l$ 的中心点，$\text{distance}(\vec{\mu}_k,\vec{\mu}_l)$ 表示簇 $\mathbb{C}_k,\mathbb{C}_l$ 的中心点之间的距离。

上述定义的意义为：

- $\text{avg}(\mathbb{C}_k)$：簇 $\mathbb{C}_k$ 中每对样本之间的平均距离。
- $\text{diam}(\mathbb{C}_k)$：簇 $\mathbb{C}_k$ 中距离最远的两个点的距离。
- $d_{min}(\mathbb{C}_k,\mathbb{C}_l)$：簇 $\mathbb{C}_k,\mathbb{C}_l$ 之间最近的距离。
- $d_{cen}(\mathbb{C}_k,\mathbb{C}_l)$：簇 $\mathbb{C}_k,\mathbb{C}_l$ 中心点之间的距离。

### 1.2.1 DB指数

1. `DB` 指数 `Davies-Bouldin Index:DBI`：

$$DBI=\frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K}\max_{k\neq l}\left(\frac{\text{avg}(\mathbb{C}_k)+\text{avg}(\mathbb{C}_l)}{d_{cen}(\mathbb{C}_k,\mathbb{C}_l)}\right)$$

其物理意义为：

- 给定两个簇，每个簇样本距离均值之和比上两个簇的中心点之间的距离作为度量。

  该度量越小越好。
- 给定一个簇 $k$，遍历其它的簇，寻找该度量的最大值。
- 对所有的簇，取其最大度量的均值。

2. 显然 $DBI$ 越小越好。
   - 如果每个簇样本距离均值越小（即簇内样本距离都很近），则 $DBI$ 越小。
   - 如果簇间中心点的距离越大（即簇间样本距离相互都很远），则 $DBI$ 越小。

### 1.2.2 Dunn指数

1. `Dunn` 指数 `Dunn Index:DI`：

$$DI=\frac{\min_{k\neq l}d_{min}(\mathbb{C}_k,\mathbb{C}_l)}{\max_i\text{diam}(\mathbb{C}_i)}$$

其物理意义为：任意两个簇之间最近的距离的最小值，除以任意一个簇内距离最远的两个点的距离的最大值。

2. 显然 $DI$ 越大越好。
   - 如果任意两个簇之间最近的距离的最小值越大（即簇间样本距离相互都很远），则 $DI$ 越大。
   - 如果任意一个簇内距离最远的两个点的距离的最大值越小（即簇内样本距离都很近），则 $DI$ 越大。

## 1.3 距离度量

1. 距离函数 $\text{distance}(\cdot,\cdot)$ 常用的有以下距离：

- 闵可夫斯基距离`Minkowski distance`：

  给定样本 $\vec{\mathbf{x}}_i=(x_{i,1},x_{i,2},\cdots,x_{i,n})^T,\vec{\mathbf{x}}_j=(x_{j,1},x_{j,2},\cdots,x_{j,n})^T$，则闵可夫斯基距离定义为：

  $$\text{distance}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)=\left(\sum_{d=1}^{n}|x_{i,d}-x_{j,d}|^p\right)^{1/p}$$

  - 当 $p=2$ 时，闵可夫斯基距离就是欧式距离`Euclidean distance`：

    $$\text{distance}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)=||\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{x}}_j||_2=\sqrt{\sum_{d=1}^{n}|x_{i,d}-x_{j,d}|^2}$$

  - 当 $p=1$ 时，闵可夫斯基距离就是曼哈顿距离`Manhattan distance`：

    $$\text{distance}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)=||\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{x}}_j||_1=\sum_{d=1}^{n}|x_{i,d}-x_{j,d}|$$

- `VDM`距离`Value Difference Metric`：

  考虑非数值类属性（如属性取值为：`中国，印度，美国，英国`），令 $m_{d,a}$ 表示 $x_d=a$ 的样本数；$m_{d,a,k}$ 表示 $x_d=a$ 且位于簇 $\mathbb{C}_k$ 中的样本的数量。则在属性 $d$ 上的两个取值 $a,b$ 之间的`VDM`距离为：

  $$VDM_p(a,b)=\left(\sum_{k=1}^{K}\left|\frac{m_{d,a,k}}{m_{d,a}}-\frac{m_{d,b,k}}{m_{d,b}}\right|^p\right)^{1/p}$$

  该距离刻画的是：属性取值在各簇上的频率分布之间的差异。

2. 当样本的属性为数值属性与非数值属性混合时，可以将闵可夫斯基距离与`VDM`距离混合使用。

   假设属性 $x_1,x_2,\cdots,x_{n_c}$ 为数值属性， 属性 $x_{n_c+1},x_{n_c+2},\cdots,x_n$ 为非数值属性。则：

   $$\text{distance}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)=\left(\sum_{d=1}^{n_c}|x_{i,d}-x_{j,d}|^p+\sum_{d=n_c+1}^{n}VDM_p(x_{i,d},x_{j,d})^p\right)^{1/p}$$

3. 当样本空间中不同属性的重要性不同时，可以采用加权距离。

   以加权闵可夫斯基距离为例：

   $$\text{distance}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)=\left(\sum_{d=1}^{n}w_d\times|x_{i,d}-x_{j,d}|^p\right)^{1/p}$$

   $$w_d\geq 0,d=1,2,\cdots,n;\quad\sum_{d=1}^{n}w_d=1$$

4. 这里的距离函数都是事先定义好的。在有些实际任务中，有必要基于数据样本来确定合适的距离函数。这可以通过距离度量学习`distance metric learning`来实现。

5. 这里的距离度量满足三角不等式：$\text{distance}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)\leq\text{distance}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_k)+\text{distance}(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_j)$。

   在某些任务中，根据数据的特点可能需要放松这一性质。如：`美人鱼`和`人`距离很近，`美人鱼`和`鱼`距离很近，但是`人`和`鱼`的距离很远。这样的距离称作非度量距离`non-metric distance`。

# 二、原型聚类

1. 原型聚类`prototype-based clustering`假设聚类结构能通过一组原型刻画。

常用的原型聚类有：

- `k`均值算法`k-means`。
- 学习向量量化算法`Learning Vector Quantization:LVQ`。
- 高斯混合聚类`Mixture-of-Gaussian`。

# 2.1 k-means 算法

## 2.1.1 k-means

1. 给定样本集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\vec{\mathbf{x}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$， 假设一个划分为 $\mathcal{C}=\{\mathbb{C}_1,\mathbb{C}_2,\cdots,\mathbb{C}_K\}$。

   定义该划分的平方误差为：

   $$err=\sum_{k=1}^{K}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{C}_k}||\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mu}_k||_2^2$$

   其中 $\vec{\mu}_k=\frac{1}{|\mathbb{C}_k|}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{C}_k}\vec{\mathbf{x}}_i$ 是簇 $\mathbb{C}_k$ 的均值向量。

   - $err$ 刻画了簇类样本围绕簇均值向量的紧密程度，其值越小，则簇内样本相似度越高。
   - `k-means` 算法的优化目标为：最小化 $err$。即：$\min_{\mathcal{C}}\sum_{k=1}^{K}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in C_k}||\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mu}_k||_2^2$。
2. `k-means` 的优化目标需要考察 $\mathbb{D}$ 的所有可能的划分，这是一个`NP`难的问题。实际上`k-means`采用贪心策略，通过迭代优化来近似求解。
   - 首先假设一组均值向量。
   - 然后根据假设的均值向量给出了 $\mathbb{D}$ 的一个划分。
   - 再根据这个划分来计算真实的均值向量：
     - 如果真实的均值向量等于假设的均值向量，则说明假设正确。根据假设均值向量给出的 $\mathbb{D}$ 的一个划分确实是原问题的解。
     - 如果真实的均值向量不等于假设的均值向量，则可以将真实的均值向量作为新的假设均值向量，继续迭代求解。
3. 这里的一个关键就是：给定一组假设的均值向量，如何计算出 $\mathbb{D}$ 的一个簇划分？

   `k`均值算法的策略是：样本离哪个簇的均值向量最近，则该样本就划归到那个簇。
4. `k-means` 算法：
   - 输入：
     - 样本集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\vec{\mathbf{x}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$。
     - 聚类簇数 $K$。
   - 输出：簇划分 $\mathcal{C}=\{\mathbb{C}_1,\mathbb{C}_2,\cdots,\mathbb{C}_K\}$。
   - 算法步骤：
     - 从 $\mathbb{D}$ 中随机选择 $K$ 个样本作为初始均值向量 $\{\vec{\mu}_1,\vec{\mu}_2,\cdots,\vec{\mu}_K\}$。
     - 重复迭代直到算法收敛，迭代过程：
       - 初始化阶段：取 $\mathbb{C}_k=\phi,k=1,2,\cdots,K$
       - 划分阶段：令 $i=1,2,\cdots,N$：
         - 计算 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 的簇标记：$\lambda_i=\arg\min_k||\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mu}_k||_2,k\in\{1,2,\cdots,K\}$。

           即：将 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 离哪个簇的均值向量最近，则该样本就标记为那个簇。
         - 然后将样本 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 划入相应的簇：$\mathbb{C}_{\lambda_i}=\mathbb{C}_{\lambda_i}\bigcup\{\vec{\mathbf{x}}_i\}$。

- 重计算阶段：计算 $\hat{\vec{\mu}}_k$ ： $\hat{\vec{\mu}}_k=\frac{1}{|\mathbb{C}_k|}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{C}_k}\vec{\mathbf{x}}_i$ 。
- 终止条件判断：
  - 如果对所有的 $k\in\{1,2,\cdots,K\}$，都有 $\hat{\vec{\mu}}_k=\vec{\mu}_k$，则算法收敛，终止迭代。
  - 否则重赋值 $\vec{\mu}_k=\hat{\vec{\mu}}_k$ 。

5. `k-means` 优点：
   - 计算复杂度低，为 $O(N\times K\times q)$ ，其中 $q$ 为迭代次数。

     通常 $K$ 和 $q$ 要远远小于 $N$，此时复杂度相当于 $O(N)$。
   - 思想简单，容易实现。
6. `k-means` 缺点：
   - 需要首先确定聚类的数量 $K$ 。
   - 分类结果严重依赖于分类中心的初始化。

     通常进行多次`k-means`，然后选择最优的那次作为最终聚类结果。
   - 结果不一定是全局最优的，只能保证局部最优。
   - 对噪声敏感。因为簇的中心是取平均，因此聚类簇很远地方的噪音会导致簇的中心点偏移。
   - 无法解决不规则形状的聚类。
   - 无法处理离散特征，如：`国籍、性别` 等。
7. `k-means` 性质：
   - `k-means` 实际上假设数据是呈现球形分布，实际任务中很少有这种情况。

     与之相比，`GMM` 使用更加一般的数据表示，即高斯分布。
   - `k-means` 假设各个簇的先验概率相同，但是各个簇的数据量可能不均匀。
   - `k-means` 使用欧式距离来衡量样本与各个簇的相似度。这种距离实际上假设数据的各个维度对于相似度的作用是相同的。
   - `k-means` 中，各个样本点只属于与其相似度最高的那个簇，这实际上是`硬` 分簇。
   - `k-means` 算法的迭代过程实际上等价于`EM` 算法。具体参考`EM` 算法章节。

### 2.1.2 k-means++

1. `k-means++` 属于 `k-means` 的变种，它主要解决`k-means` 严重依赖于分类中心初始化的问题。
2. `k-means++` 选择初始均值向量时，尽量安排这些初始均值向量之间的距离尽可能的远。
3. `k-means++` 算法：
   - 输入：
     - 样本集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\vec{\mathbf{x}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$。
     - 聚类簇数 $K$。
   - 输出：簇划分 $\mathcal{C}=\{\mathbb{C}_1,\mathbb{C}_2,\cdots,\mathbb{C}_K\}$。
   - 算法步骤：
     - 从 $\mathbb{D}$ 中随机选择1个样本作为初始均值向量组 $\{\vec{\mu}_1,\}$ 。
     - 迭代，直到初始均值向量组有 $K$ 个向量。

       假设初始均值向量组为 $\{\vec{\mu}_1,\cdots,\vec{\mu}_m\}$。迭代过程如下：

- 对每个样本 $\vec{\mathbf{x}}_i$ ，分别计算其距 $\vec{\mu}_1,\cdots,\vec{\mu}_m$ 的距离。这些距离的最小值记做 $d_i=\min_{\vec{\mu}_j}||\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mu}_j||$ 。
- 对样本 $\vec{\mathbf{x}}_i$，其设置为初始均值向量的概率正比于 $d_i$ 。即：离所有的初始均值向量越远，则越可能被选中为下一个初始均值向量。
- 以概率分布 $P=\{d_1,d_2,\cdots,d_N\}$ （未归一化的）随机挑选一个样本作为下一个初始均值向量 $\vec{\mu}_{m+1}$ 。

- 一旦挑选出初始均值向量组 $\{\vec{\mu}_1,\cdots,\vec{\mu}_K\}$，剩下的迭代步骤与 `k-means` 相同。

### 2.1.3 k-modes

1. `k-modes` 属于 `k-means` 的变种，它主要解决 `k-means` 无法处理离散特征的问题。
2. `k-modes` 与 `k-means` 有两个不同点（假设所有特征都是离散特征）：
   - 距离函数不同。在 `k-modes` 算法中，距离函数为：

     $$\text{distance}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)=\sum_{d=1}^{n}I(x_{i,d}=x_{j,d})$$

     其中 $I(\cdot)$ 为示性函数。

     上式的意义为：样本之间的距离等于它们之间不同属性值的个数。
   - 簇中心的更新规则不同。在 `k-modes` 算法中，簇中心每个属性的取值为：簇内该属性出现频率最大的那个值。

     $$\hat{\mu}_{k,d}=\arg\max_{v}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{C}_k}I(x_{i,d}=v)$$

     其中 $v$ 的取值空间为所有样本在第 $d$ 个属性上的取值。

### 2.1.4 k-medoids

1. `k-medoids` 属于 `k-means` 的变种，它主要解决 `k-means` 对噪声敏感的问题。
2. `k-medoids` 算法：
   - 输入：
     - 样本集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\vec{\mathbf{x}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$。
     - 聚类簇数 $K$。
   - 输出：簇划分 $\mathcal{C}=\{\mathbb{C}_1,\mathbb{C}_2,\cdots,\mathbb{C}_K\}$。
   - 算法步骤：
     - 从 $\mathbb{D}$ 中随机选择 $K$ 个样本作为初始均值向量 $\{\vec{\mu}_1,\vec{\mu}_2,\cdots,\vec{\mu}_K\}$ 。
     - 重复迭代直到算法收敛，迭代过程：
       - 初始化阶段：取 $\mathbb{C}_k=\phi,k=1,2,\cdots,K$ 。

         遍历每个样本 $\vec{\mathbf{x}}_i,i=1,2,\cdots,N$ ，计算它的簇标记：$\lambda_i=\arg\min_k||\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mu}_k||_2,k\in\{1,2,\cdots,K\}$ 。即：将 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 离哪个簇的均值向量最近，则该样本就标记为那个簇。

         然后将样本 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 划入相应的簇：$\mathbb{C}_{\lambda_i}=\mathbb{C}_{\lambda_i}\bigcup\{\vec{\mathbf{x}}_i\}$ 。
       - 重计算阶段：

         遍历每个簇 $\mathbb{C}_k,k=1,2,\cdots,K$ ：

        - 计算簇心 $\vec{\mu}_k$ 距离簇内其它点的距离 $d_{\mu}^{(k)}=\sum_{\vec{\mathbf{x}}_j^{(k)}\in\mathbb{C}_k}||\vec{\mu}_k-\vec{\mathbf{x}}_j^{(k)}||$。
        - 计算簇 $\mathbb{C}_k$ 内每个点 $\vec{\mathbf{x}}_i^{(k)}$ 距离簇内其它点的距离 $d_i^{(k)}=\sum_{\vec{\mathbf{x}}_j^{(k)}\in\mathbb{C}_k}||\vec{\mathbf{x}}_i^{(k)}-\vec{\mathbf{x}}_j^{(k)}||$。

          如果 $d_i^{(k)}<d_{\mu}^{(k)}$，则重新设置簇中心：$\vec{\mu}_k=\vec{\mathbf{x}}_i^{(k)},\quad d_{\mu}^{(k)}=d_i^{(k)}$ 。
      - 终止条件判断：遍历一轮簇 $\mathbb{C}_1,\cdots,\mathbb{C}_K$ 之后，簇心保持不变。
3. `k-medoids` 算法在计算新的簇心时，不再通过簇内样本的均值来实现，而是挑选簇内距离其它所有点都最近的样本来实现。这就减少了孤立噪声带来的影响。
4. `k-medoids` 算法复杂度较高，为 $O(N^2)$ 。其中计算代价最高的是计算每个簇内每对样本之间的距离。

   通常会在算法开始时计算一次，然后将结果缓存起来，以便后续重复使用。

### 2.1.5 mini-batch k-means

1. `mini-batch k-means` 属于 `k-means` 的变种，它主要用于减少 `k-means` 的计算时间。
2. `mini-batch k-means` 算法每次训练时随机抽取小批量的数据，然后用这个小批量数据训练。这种做法减少了 `k-means` 的收敛时间，其效果略差于标准算法。
3. `mini-batch k-means` 算法：
   - 输入：
     - 样本集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\vec{\mathbf{x}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$。
     - 聚类簇数 $K$。
   - 输出：簇划分 $\mathcal{C}=\{\mathbb{C}_1,\mathbb{C}_2,\cdots,\mathbb{C}_K\}$。
   - 算法步骤：
     - 从 $\mathbb{D}$ 中随机选择 $K$ 个样本作为初始均值向量 $\{\vec{\mu}_1,\vec{\mu}_2,\cdots,\vec{\mu}_K\}$ 。
     - 重复迭代直到算法收敛，迭代过程：
       - 初始化阶段：取 $\mathbb{C}_k=\phi,k=1,2,\cdots,K$
       - 划分阶段：随机挑选一个 `Batch` 的样本集合 $\mathbb{B}=\vec{\mathbf{x}}_{b_1},\cdots,\vec{\mathbf{x}}_{b_M}$ ，其中 $M$ 为批大小。
         - 计算 $\vec{\mathbf{x}}_i,i=b_1,\cdots,b_M$ 的簇标记：$\lambda_i=\arg\min_k||\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mu}_k||_2,k\in\{1,2,\cdots,K\}$ 。

           即：将 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 离哪个簇的均值向量最近，则该样本就标记为那个簇。
         - 然后将样本 $\vec{\mathbf{x}}_i,i=b_1,\cdots,b_M$ 划入相应的簇：$\mathbb{C}_{\lambda_i}=\mathbb{C}_{\lambda_i}\bigcup\{\vec{\mathbf{x}}_i\}$ 。
       - 重计算阶段：计算 $\hat{\vec{\mu}}_k$ ：$\hat{\vec{\mu}}_k=\frac{1}{|\mathbb{C}_k|}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{C}_k}\vec{\mathbf{x}}_i$ 。
       - 终止条件判断：
         - 如果对所有的 $k\in\{1,2,\cdots,K\}$，都有 $\hat{\vec{\mu}}_k=\vec{\mu}_k$，则算法收敛，终止迭代。
         - 否则重赋值 $\vec{\mu}_k=\hat{\vec{\mu}}_k$ 。

## 2.2 学习向量量化

1. 与一般聚类算法不同，学习向量量化 `Learning Vector Quantization:LVQ` 假设数据样本带有类别标记，学习过程需要利用样本的这些监督信息来辅助聚类。
2. 给定样本集 $\mathbb{D}=\{(\vec{\mathbf{x}}_1,y_1),(\vec{\mathbf{x}}_2,y_2),\cdots,(\vec{\mathbf{x}}_N,y_N)\},\vec{\mathbf{x}}\in\mathcal{X},y\in\mathcal{Y}$， `LVQ` 的目标是从特征空间中挑选一组样本作为原型向量 $\{\vec{\mathbf{p}}_1,\vec{\mathbf{p}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{p}}_Q\}$ 。
   - 每个原型向量代表一个聚类簇，簇标记 $y_{p_q}\in\mathcal{Y},q=1,2,\cdots,Q$。即：簇标记从类别标记中选取。

- 原型向量从特征空间中取得，它们不一定就是 $\mathbb{D}$ 中的某个样本。

3. `LVQ` 的想法是：通过从样本中挑选一组样本作为原型向量 $\{\vec{\mathbf{p}}_1,\vec{\mathbf{p}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{p}}_Q\}$，可以实现对样本空间 $\mathcal{X}$ 的簇划分。
   - 对任意样本 $\vec{\mathbf{x}}$，它被划入与距离最近的原型向量所代表的簇中。
   - 对于每个原型向量 $\vec{\mathbf{p}}_q$，它定义了一个与之相关的一个区域 $\mathbf{R}_q$，该区域中每个样本与 $\vec{\mathbf{p}}_q$ 的距离都不大于它与其他原型向量 $\vec{\mathbf{p}}_{q'}$ 的距离。

$$\mathbf{R}_q=\{\vec{\mathbf{x}}\in\mathcal{X}\mid||\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{p}}_q||_2\leq\min_{q'\neq q}||\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{p}}_{q'}||_2\}$$

   - 区域 $\{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\cdots,\mathbf{R}_Q\}$ 对样本空间 $\mathcal{X}$ 形成了一个簇划分，该划分通常称作 `Voronoi` 剖分。

4. 问题是如何从样本中挑选一组样本作为原型向量？ `LVQ` 的思想是：
   - 首先挑选一组样本作为假设的原型向量。
   - 然后对于训练集中的每一个样本 $\vec{\mathbf{x}}_i$， 找出假设的原型向量中，距离该样本最近的原型向量 $\vec{\mathbf{p}}_{q_i}$：
     - 如果 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 的标记与 $\vec{\mathbf{p}}_{q_i}$ 的标记相同，则更新 $\vec{\mathbf{p}}_{q_i}$，将该原型向量更靠近 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 。
     - 如果 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 的标记与 $\vec{\mathbf{p}}_{q_i}$ 的标记不相同，则更新 $\vec{\mathbf{p}}_{q_i}$，将该原型向量更远离 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 。
   - 不停进行这种更新，直到迭代停止条件（如以到达最大迭代次数，或者原型向量的更新幅度很小）。

5. `LVQ` 算法：
   - 输入：
     - 样本集 $\mathbb{D}=\{(\vec{\mathbf{x}}_1,y_1),(\vec{\mathbf{x}}_2,y_2),\cdots,(\vec{\mathbf{x}}_N,y_N)\}$
     - 原型向量个数 $Q$
     - 各原型向量预设的类别标记 $\{y_{p_1},y_{p_2},\cdots,y_{p_Q}\}$
     - 学习率 $\eta\in(0,1)$
   - 输出：原型向量 $\{\vec{\mathbf{p}}_1,\vec{\mathbf{p}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{p}}_Q\}$
   - 算法步骤：
     - 依次随机从类别 $\{y_{p_1},y_{p_2},\cdots,y_{p_Q}\}$ 中挑选一个样本，初始化一组原型向量 $\{\vec{\mathbf{p}}_1,\vec{\mathbf{p}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{p}}_Q\}$。
     - 重复迭代，直到算法收敛。迭代过程如下：
       - 从样本集 $\mathbb{D}$ 中随机选取样本 $(\vec{\mathbf{x}}_i,y_i)$，挑选出距离 $(\vec{\mathbf{x}}_i,y_i)$ 最近的原型向量 $\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}$：$q_i=\arg\min_q||\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{p}}_q||$ 。
       - 如果 $\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}$ 的类别等于 $y_i$，则：$\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}\leftarrow\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}+\eta(\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}})$ 。
       - 如果 $\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}$ 的类别不等于 $y_i$，则：$\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}\leftarrow\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}-\eta(\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}})$ 。

6. 在原型向量的更新过程中：
   - 如果 $\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}$ 的类别等于 $y_i$，则更新后， $\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}$ 与 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 距离为：

$$||\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}-\vec{\mathbf{x}}_i||_2=||\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}+\eta(\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}})-\vec{\mathbf{x}}_i||_2=(1-\eta)||\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}-\vec{\mathbf{x}}_i||_2$$

     则更新后的原型向量 $\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}$ 距离 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 更近。
   - 如果 $\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}$ 的类别不等于 $y_i$，则更新后， $\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}$ 与 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 距离为：

$$||\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}-\vec{\mathbf{x}}_i||_2=||\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}-\eta(\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}})-\vec{\mathbf{x}}_i||_2=(1+\eta)||\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}-\vec{\mathbf{x}}_i||_2$$

     则更新后的原型向量 $\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}$ 距离 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 更远。

7. 这里有一个隐含假设：即计算得到的样本 $\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}\pm\eta(\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}})$（该样本可能不在样本集中） 的标记就是更新之前 $\vec{\mathbf{p}}_{\mathbf{q_i}}$ 的标记。

即：更新操作只改变原型向量的样本值，但是不改变该原型向量的标记。

## 2.3 高斯混合聚类

1. 高斯混合聚类采用概率模型来表达聚类原型。
2. 对于 $n$ 维样本空间 $\mathcal{X}$ 中的随机向量 $\vec{\mathbf{x}}$，若 $\vec{\mathbf{x}}$ 服从高斯分布，则其概率密度函数为：

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

其中 $\vec{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_n)^T$ 为 $n$ 维均值向量，$\Sigma$ 是 $n \times n$ 的协方差矩阵。$\vec{\mathbf{x}}$ 的概率密度函数由参数 $\vec{\mu}, \Sigma$ 决定。

3. 定义高斯混合分布：$p_{\mathcal{M}} = \sum_{k=1}^{K} \alpha_k p(\vec{\mathbf{x}} \mid \vec{\mu}_k, \Sigma_k)$。该分布由 $K$ 个混合成分组成，每个混合成分对应一个高斯分布。其中:
   - $\vec{\mu}_k, \Sigma_k$ 是第 $k$ 个高斯混合成分的参数。
   - $\alpha_k > 0$ 是相应的混合系数，满足 $\sum_{k=1}^{K} \alpha_k = 1$。
4. 假设训练集 $\mathbb{D} = \{\vec{\mathbf{x}}_1, \vec{\mathbf{x}}_2, \cdots, \vec{\mathbf{x}}_N\}$ 的生成过程是由高斯混合分布给出。

   令随机变量 $Z \in \{1, 2, \cdots, K\}$ 表示生成样本 $\vec{\mathbf{x}}$ 的高斯混合成分序号，$Z$ 的先验概率 $P(Z = k) = \alpha_k$。

   生成样本的过程分为两步：
   - 首先根据概率分布 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_K$ 生成随机变量 $Z$。
   - 再根据 $Z$ 的结果，比如 $Z = k$，根据概率 $p(\vec{\mathbf{x}} \mid \vec{\mu}_k, \Sigma_k)$ 生成样本。
5. 根据贝叶斯定理，若已知输出为 $\vec{\mathbf{x}}_i$，则 $Z$ 的后验分布为：

$$p_{\mathcal{M}}(Z = k \mid \vec{\mathbf{x}}_i) = \frac{P(Z = k) p_{\mathcal{M}}(\vec{\mathbf{x}}_i \mid Z = k)}{p_{\mathcal{M}}(\vec{\mathbf{x}}_i)} = \frac{\alpha_k p(\vec{\mathbf{x}}_i \mid \vec{\mu}_k, \Sigma_k)}{\sum_{l=1}^{K} \alpha_l p(\vec{\mathbf{x}}_i \mid \vec{\mu}_l, \Sigma_l)}$$

   其物理意义为：所有导致输出为 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 的情况中，$Z = k$ 发生的概率。
6. 当高斯混合分布已知时，高斯混合聚类将样本集 $\mathbb{D}$ 划分成 $K$ 个簇 $\mathcal{C} = \{\mathbb{C}_1, \mathbb{C}_2, \cdots, \mathbb{C}_K\}$。

   对于每个样本 $\vec{\mathbf{x}}_i$，给出它的簇标记 $\lambda_i$ 为：

$$\lambda_i = \arg\max_k p_{\mathcal{M}}(Z = k \mid \vec{\mathbf{x}}_i)$$

   即：如果 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 最有可能是 $Z = k$ 产生的，则将该样本划归到簇 $\mathbb{C}_k$。

   这就是通过最大后验概率确定样本所属的聚类。
7. 现在的问题是，如何学习高斯混合分布的参数。由于涉及到隐变量 $Z$，可以采用 `EM` 算法求解。

   具体求解参考 `EM` 算法的章节部分。

# 三、密度聚类

1. 密度聚类 `density-based clustering` 假设聚类结构能够通过样本分布的紧密程度确定。
2. 密度聚类算法从样本的密度的角度来考察样本之间的可连接性，并基于可连接样本的不断扩张聚类簇，从而获得最终的聚类结果。

## 3.1 DBSCAN 算法

1. `DBSCAN` 是一种著名的密度聚类算法，它基于一组邻域参数 $(\epsilon, MinPts)$ 来刻画样本分布的紧密程度。

2. 给定数据集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\vec{\mathbf{x}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$， 定义：
   - $\epsilon$ -邻域： $N_\epsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)=\{\vec{\mathbf{x}}_j\in\mathbb{D}\mid distance(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)\leq\epsilon\}$ 。

     即：$N_\epsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)$ 包含了样本集 $\mathbb{D}$ 中与 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 距离不大于 $\epsilon$ 的所有的样本。
   - 核心对象`core object`：若 $|N_\epsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)|\geq MinPts$ ，则称 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 是一个核心对象。

     即：若 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 的 $\epsilon$ -邻域中至少包含 $MinPts$ 个样本，则 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 是一个核心对象。
   - 密度直达`directyl density-reachable`：若 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 是一个核心对象，且 $\vec{\mathbf{x}}_j\in N_\epsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)$， 则称 $\vec{\mathbf{x}}_j$ 由 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 密度直达，记作 $\vec{\mathbf{x}}_i\mapsto\vec{\mathbf{x}}_j$ 。
   - 密度可达`density-reachable`：对于 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 和 $\vec{\mathbf{x}}_j$， 若存在样本序列 $(\vec{\mathbf{p}}_0,\vec{\mathbf{p}}_1,\vec{\mathbf{p}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{p}}_m,\vec{\mathbf{p}}_{m+1})$， 其中 $\vec{\mathbf{p}}_0=\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{p}}_{m+1}=\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{p}}_s\in\mathbb{D}$，如果 $\vec{\mathbf{p}}_{s+1}$ 由 $\vec{\mathbf{p}}_s$ 密度直达，则称 $\vec{\mathbf{x}}_j$ 由 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 密度可达，记作 $\vec{\mathbf{x}}_i\rightsquigarrow\vec{\mathbf{x}}_j$ 。
   - 密度相连`density-connected`：对于 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 和 $\vec{\mathbf{x}}_j$，若存在 $\vec{\mathbf{x}}_k$ ，使得 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 与 $\vec{\mathbf{x}}_j$ 均由 $\vec{\mathbf{x}}_k$ 密度可达，则称 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 与 $\vec{\mathbf{x}}_j$ 密度相连 ，记作 $\vec{\mathbf{x}}_i\sim\vec{\mathbf{x}}_j$ 。
3. `DBSCAN`算法的簇定义：给定邻域参数 $(\epsilon,MinPts)$ ， 一个簇 $\mathbb{C}\subseteq\mathbb{D}$ 是满足下列性质的非空样本子集：
   - 连接性 `connectivity`： 若 $\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{C},\vec{\mathbf{x}}_j\in\mathbb{C}$ ，则 $\vec{\mathbf{x}}_i\sim\vec{\mathbf{x}}_j$ 。
   - 最大性`maximality`：若 $\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{C}$，且 $\vec{\mathbf{x}}_i\rightsquigarrow\vec{\mathbf{x}}_j$， 则 $\vec{\mathbf{x}}_j\in\mathbb{C}$ 。

   即一个簇是由密度可达关系导出的最大的密度相连样本集合。
4. `DBSCAN`算法的思想：若 $\vec{\mathbf{x}}$ 为核心对象，则 $\vec{\mathbf{x}}$ 密度可达的所有样本组成的集合记作 $\mathbb{X}=\{\vec{\mathbf{x}}'\in\mathbb{D}\mid\vec{\mathbf{x}}\rightsquigarrow\vec{\mathbf{x}}'\}$ 。可以证明： $\mathbb{X}$ 就是满足连接性与最大性的簇。

   于是`DBSCAN`算法首先任选数据集中的一个核心对象作为种子`seed`，再由此出发确定相应的聚类簇。
5. `DBSCAN`算法：
   - 输入：
     - 数据集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\vec{\mathbf{x}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$
     - 邻域参数 $(\epsilon,MinPts)$
   - 输出： 簇划分 $\mathcal{C}=\{\mathbb{C}_1,\mathbb{C}_2,\cdots,\mathbb{C}_K\}$
   - 算法步骤：
     - 初始化核心对象集合为空集： $\Omega=\phi$
     - 寻找核心对象：
       - 遍历所有的样本点 $\vec{\mathbf{x}}_i,i=1,2,\cdots,N$， 计算 $N_\epsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)$
       - 如果 $|N_\epsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)|\geq MinPts$ ，则 $\Omega=\Omega\bigcup\{\vec{\mathbf{x}}_i\}$
     - 迭代：以任一未访问过的核心对象为出发点，找出有其密度可达的样本生成的聚类簇，直到所有核心对象都被访问为止。
6. 注意：
   - 若在核心对象 $\vec{\mathbf{o}}_1$ 的寻找密度可达的样本的过程中，发现核心对象 $\vec{\mathbf{o}}_2$ 是由 $\vec{\mathbf{o}}_1$ 密度可达的，且 $\vec{\mathbf{o}}_2$ 尚未被访问，则将 $\vec{\mathbf{o}}_2$ 加入 $\vec{\mathbf{o}}_1$ 所属的簇，并且标记 $\vec{\mathbf{o}}_2$ 为已访问。
   - 对于 $\mathbb{D}$ 中的样本点，它只可能属于某一个聚类簇。因此在核心对象 $\vec{\mathbf{o}}_i$ 的寻找密度可达的样本的过程中，它只能在标记为未访问的样本中寻找 （标记为已访问的样本已经属于某个聚类簇了）。
7. `DBSCAN` 算法的优点：
   - 簇的数量由算法自动确定，无需人工指定。
   - 基于密度定义，能够对抗噪音。
   - 可以处理任意形状和大小的簇。

8. `DBSCAN` 算法的缺点：
   - 若样本集的密度不均匀，聚类间距差相差很大时，聚类质量较差。因为此时参数 $\epsilon$ 和 $MinPts$ 的选择比较困难。
   - 无法应用于密度不断变化的数据集中。

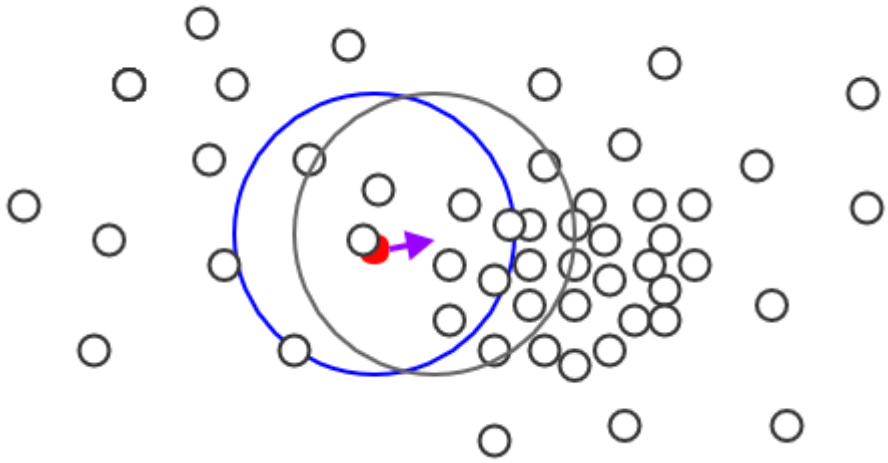
## 3.2 Mean-Shift 算法

1. `Mean-Shift` 是基于核密度估计的爬山算法，可以用于聚类、图像分割、跟踪等领域。
2. 给定 $n$ 维空间的 $N$ 个样本组成的数据集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$，给定一个中心为 $\vec{\mathbf{x}}$、半径为 $h$ 的球形区域 $\mathbb{S}$（称作 `兴趣域`），定义其 `mean shift` 向量为：$\vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{x}})=\frac{1}{|\mathbb{S}|}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{S}}(\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{x}})$。
3. `Mean-Shift` 算法的基本思路是：
   - 首先任选一个点作为聚类的中心来构造 `兴趣域`。
   - 然后计算当前的 `mean shift` 向量，`兴趣域` 的中心移动为：$\vec{\mathbf{x}}\leftarrow\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{x}})$。

     移动过程中，`兴趣域` 范围内的所有样本都标记为同一个簇。
   - 如果 `mean shift` 向量为 0，则停止移动，说明 `兴趣域` 已到达数据点最密集的区域。

   因此 `Mean-Shift` 会向着密度最大的区域移动。

   下图中：蓝色为当前的 `兴趣域`，红色为当前的中心点 $\vec{\mathbf{x}}$；紫色向量为 `mean shift` 向量 $\vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{x}})$，灰色为移动之后的 `兴趣域`。



4. 在计算 `mean shift` 向量的过程中假设每个样本的作用都是相等的。实际上随着样本与中心点的距离不同，样本对于 `mean shift` 向量的贡献不同。

   定义高斯核函数为：$g(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(-\frac{x}{2})$，则重新 `mean shift` 向量定义为：

$$\vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{x}})=\vec{\mathbf{m}}(\vec{\mathbf{x}})-\vec{\mathbf{x}},\quad \vec{\mathbf{m}}(\vec{\mathbf{x}})=\frac{\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{S}}\vec{\mathbf{x}}_i g(||\frac{\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{x}}}{h}||^2)}{\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{S}}g(||\frac{\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{x}}}{h}||^2)}$$

   其中 $h$ 称做带宽。$||\frac{\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{x}}}{h}||$ 刻画了样本 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 距离中心点 $\vec{\mathbf{x}}$ 相对于半径 $h$ 的相对距离。
5. `Mean_Shift` 算法：
   - 输入：

- 数据集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\vec{\mathbf{x}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$
- 带宽参数 $h$
- 迭代阈值 $\epsilon_1$ ， 簇阈值 $\epsilon_2$

- 输出： 簇划分 $\mathcal{C}=\{\mathbb{C}_1,\mathbb{C}_2,\cdots\}$
- 算法步骤：

  迭代，直到所有的样本都被访问过。迭代过程为（设已有的簇为 $1,2,\cdots,L-1$ ）：

  - 在未访问过的样本中随机选择一个点作为中心点 $\vec{\mathbf{x}}$ ， 找出距它半径为 $h$ 的`兴趣域`，记做 $\mathbb{S}$ 。

    将$\mathbb{S}$ 中的样本的簇标记设置为 $L$ （一个新的簇）。
  - 计算当前的`mean shift` 向量，兴趣域中心的移动为：

    $$\vec{\mathbf{x}}\leftarrow\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{x}})=\vec{\mathbf{m}}(\vec{\mathbf{x}})=\frac{\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{S}}\vec{\mathbf{x}}_i g(||\frac{\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{x}}}{h}||^2)}{\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{S}}g(||\frac{\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{x}}}{h}||^2)}$$

    在移动过程中，兴趣域内的所有点标记为`访问过`，并且将它们的簇标记设置为 $L$ 。
  - 如果 $||\vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{x}})||\leq\epsilon_1$ ， 则本次结束本次迭代。
  - 设已有簇中，簇 $l$ 的中心点 $\vec{\mathbf{x}}^{(l)}$ 与 $\vec{\mathbf{x}}$ 距离最近，如果 $||\vec{\mathbf{x}}^{(l)}-\vec{\mathbf{x}}||\leq\epsilon_2$，则将当前簇和簇 $l$ 合并。

    合并时，当前簇中的样本的簇标记重新修改为 $l$ 。

  当所有的样本都被访问过时，重新分配样本的簇标记（因为可能有的样本被多个簇标记过）：若样本被多个簇标记过，则选择最大的那个簇作为该样本的簇标记。即：尽可能保留大的簇。

6. 可以证明：`Mean_Shift` 算法每次移动都是向着概率密度函数增加的方向移动。

   在 $n$ 维欧式空间中，对空间中的点 $\vec{\mathbf{x}}$ 的概率密度估计为：

   $$\hat{f}(\vec{\mathbf{x}})=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}K_H(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i),\quad K_H(\vec{\mathbf{x}})=|\mathbf{H}|^{-\frac{1}{2}}K(\mathbf{H}^{-\frac{1}{2}}\vec{\mathbf{x}})$$

   其中：

   - $K(\vec{\mathbf{x}})$ 表示空间中的核函数，$\mathbf{H}$ 为带宽矩阵。
   - 通常 $K(\cdot)$ 采用放射状对称核函数 $K(\vec{\mathbf{x}})=c_k\times k(||\vec{\mathbf{x}}||^2)$ ， $k(\cdot)$ 为 $K(\cdot)$ 的轮廓函数， $c_k$ （一个正数）为标准化常数从而保证 $K(\vec{\mathbf{x}})$ 的积分为 1 。
   - 通常带宽矩阵采用 $\mathbf{H}=h^2\mathbf{I}$ ， $h$ 为带宽参数。

   因此有：$\hat{f}(\vec{\mathbf{x}})=\frac{c_k}{Nh^n}\sum_{k=1}^{N}k(||\frac{\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i}{h}||^2)$ 。则有梯度：

   $$\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}\hat{f}(\vec{\mathbf{x}})=\frac{2c_k}{Nh^{n+2}}\sum_{k=1}^{N}(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i)k'(||\frac{\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i}{h}||^2)$$

   记$k(\cdot)$ 的导数为 $g(\cdot)=k'(\cdot)$ 。取 $g(\cdot)$ 为新的轮廓函数，$c_g$ （一个正数）为新的标准化常数，$G(\vec{\mathbf{x}})=c_g\times g(||\vec{\mathbf{x}}||^2)$ 。

   则有：

   $$\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}\hat{f}(\vec{\mathbf{x}})=\frac{2c_k}{Nh^{n+2}}\sum_{i=1}^{N}(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i)g(||\frac{\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i}{h}||^2)$$

   $$=\frac{2c_k}{h^2c_g}\left[\frac{c_g}{Nh^n}\sum_{i=1}^{N}g\left(||\frac{\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i}{h}||^2\right)\right]\left[\frac{\sum_{i=1}^{N}\vec{\mathbf{x}}_i g\left(||\frac{\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i}{h}||^2\right)}{\sum_{i=1}^{N}g\left(||\frac{\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i}{h}||^2\right)}-\vec{\mathbf{x}}\right]$$

定义 $\hat{f}_g(\vec{\mathbf{x}})=\frac{c_g}{Nh^n}\sum_{i=1}^N g\left(||\frac{\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i}{h}||^2\right)$，则它表示基于核函数 $G(\cdot)$ 的概率密度估计，始终为非负数。

根据前面定义：$\vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{x}})=\frac{\sum_{i=1}^N \vec{\mathbf{x}}_i g\left(||\frac{\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i}{h}||^2\right)}{\sum_{i=1}^N g\left(||\frac{\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i}{h}||^2\right)}-\vec{\mathbf{x}}$，则有：$\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}\hat{f}(\vec{\mathbf{x}})=\frac{2c_k}{h^2c_g}\times\hat{f}_g(\vec{\mathbf{x}})\times\vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{x}})$。

因此 $\vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{x}})$ 正比于 $\nabla_{\vec{\mathbf{x}}}\hat{f}(\vec{\mathbf{x}})$，因此`mean shift`向量的方向始终指向概率密度增加最大的方向。

> 上式计算 $\sum_{i=1}^N$ 时需要考虑所有的样本，计算复杂度太大。作为一个替代，可以考虑使用 $\vec{\mathbf{x}}$ 距离 $h$ 内的样本，即`兴趣域`内的样本。即可得到：$\vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{x}})=\frac{\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{S}}\vec{\mathbf{x}}_i g(||\frac{\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{x}}}{h}||^2)}{\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{S}}g(||\frac{\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{x}}}{h}||^2)}-\vec{\mathbf{x}}$。

7. `Mean-Shift`算法优点：
   - 簇的数量由算法自动确定，无需人工指定。
   - 基于密度定义，能够对抗噪音。
   - 可以处理任意形状和大小的簇。
   - 没有局部极小值点，因此当给定带宽参数 $h$ 时，其聚类结果就是唯一的。
8. `Mean_Shift`算法缺点：
   - 无法控制簇的数量。
   - 无法区分有意义的簇和无意义的簇。如：在`Mean_Shift`算法中，异常点也会形成它们自己的簇。

# 四、层次聚类

1. 层次聚类`hierarchical clustering`试图在不同层次上对数据集进行划分，从而形成树形的聚类结构。

## 4.1 AGNES 算法

1. `AGglomerative NESting：AGNES`是一种常用的采用自底向上聚合策略的层次聚类算法。
2. `AGNES`首先将数据集中的每个样本看作一个初始的聚类簇，然后在算法运行的每一步中，找出距离最近的两个聚类簇进行合并。

   合并过程不断重复，直到达到预设的聚类簇的个数。
3. 这里的关键在于：如何计算聚类簇之间的距离？

   由于每个簇就是一个集合，因此只需要采用关于集合的某个距离即可。给定聚类簇 $\mathbb{C}_i,\mathbb{C}_j$， 有三种距离：
   - 最小距离： $d_{min}(\mathbb{C}_i,\mathbb{C}_j)=\min_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{C}_i,\vec{\mathbf{x}}_j\in\mathbb{C}_j}distance(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)$。

     最小距离由两个簇的最近样本决定。
   - 最大距离： $d_{max}(\mathbb{C}_i,\mathbb{C}_j)=\max_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{C}_i,\vec{\mathbf{x}}_j\in\mathbb{C}_j}distance(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)$。

     最大距离由两个簇的最远样本决定。
   - 平均距离：$d_{avg}(\mathbb{C}_i,\mathbb{C}_j)=\frac{1}{|\mathbb{C}_i||\mathbb{C}_j|}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{C}_i}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_j\in\mathbb{C}_j}distance(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)$。

     平均距离由两个簇的所有样本决定。
4. `AGNES`算法可以采取上述任意一种距离：
   - 当`AGNES`算法的聚类簇距离采用 $d_{min}$ 时，称作单链接`single-linkage`算法。
   - 当`AGNES`算法的聚类簇距离采用 $d_{max}$ 时，称作全链接`complete-linkage`算法。
   - 当`AGNES`算法的聚类簇距离采用 $d_{avg}$ 时，称作均链接`average-linkage`算法。
5. `AGNES`算法：

- 输入：
  - 数据集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\vec{\mathbf{x}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$
  - 聚类簇距离度量函数 $d(\cdot,\cdot)$
  - 聚类簇数量 $K$
- 输出：簇划分 $\mathcal{C}=\{\mathbb{C}_1,\mathbb{C}_2,\cdots,\mathbb{C}_K\}$
- 算法步骤：
  - 初始化：将每个样本都作为一个簇

    $$\mathbb{C}_i=\{\vec{\mathbf{x}}_i\},i=1,2,\cdots,N$$

  - 迭代，终止条件为聚类簇的数量为 $K$。迭代过程为：

    计算聚类簇之间的距离，找出距离最近的两个簇，将这两个簇合并。

    > 每进行一次迭代，聚类簇的数量就减少一些。

6. `AGNES` 算法的优点：
   - 距离容易定义，使用限制较少。
   - 可以发现聚类的层次关系。
7. `AGNES` 算法的缺点：
   - 计算复杂度较高。
   - 算法容易聚成链状。

# 4.2 BIRCH 算法

1. `BIRCH:Balanced Iterative Reducing and Clustering Using Hierarchies` 算法通过聚类特征树 `CF Tree:Clustering Feature True` 来执行层次聚类，适合于样本量较大、聚类类别数较大的场景。

## 4.2.1 聚类特征

1. 聚类特征 `CF`：每个 `CF` 都是刻画一个簇的特征的三元组：$CF=(\text{num},\vec{\Sigma}_l,\Sigma_s)$。其中：
   - $\text{num}$：表示簇内样本数量的数量。
   - $\vec{\Sigma}_l$：表示簇内样本的线性求和：$\vec{\Sigma}_l=\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{S}}\vec{\mathbf{x}}_i$，其中 $\mathbb{S}$ 为该 `CF` 对应的簇。
   - $\Sigma_s$：表示簇内样本的长度的平方和。$\Sigma_s=\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{S}}||\vec{\mathbf{x}}_i||^2=\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{S}}\vec{\mathbf{x}}_i^T\vec{\mathbf{x}}_i$，其中 $\mathbb{S}$ 为该 `CF` 对应的簇。
2. 根据 `CF` 的定义可知：如果 `CF1` 和 `CF2` 分别表示两个不相交的簇的特征，如果将这两个簇合并成一个大簇，则大簇的特征为：$CF_{merge}=CF_1+CF_2$。

   即：`CF` 满足可加性。
3. 给定聚类特征 `CF`，则可以统计出簇的一些统计量：
   - 簇心：$\bar{\vec{\mathbf{x}}}=\frac{\vec{\Sigma}_l}{\text{num}}$。
   - 簇内数据点到簇心的平均距离（也称作簇的半径）：$\rho=\sqrt{\frac{\text{num}\times\Sigma_s-||\vec{\Sigma}_l||^2}{\text{num}}}$。
   - 簇内两两数据点之间的平均距离（也称作簇的直径）：$\delta=\sqrt{\frac{2\times\text{num}\times\Sigma_s-2||\vec{\Sigma}_l||^2}{\text{num}\times\text{num-1}}}$。
4. 给定两个不相交的簇，其特征分别为 $CF_1=(\text{num}_1,\vec{\Sigma}_{l,1},\Sigma_{s,1})$ 和 $CF_2=(\text{num}_2,\vec{\Sigma}_{l,2},\Sigma_{s,2})$。

   假设合并之后的簇为 $CF_3=(\text{num}_3,\vec{\Sigma}_{l,3},\Sigma_{s,3})$，其中 $\text{num}_3=\text{num}_1+\text{num}_2$，$\vec{\Sigma}_{l,3}=\vec{\Sigma}_{l,1}+\vec{\Sigma}_{l,2}$，$\Sigma_{s,3}=\Sigma_{s,1}+\Sigma_{s,2}$。

   可以通过下列的距离来度量 `CF1` 和 `CF2` 的相异性：

- 簇心欧氏距离 `centroid Euclidian distance`：$d_0=\sqrt{||\bar{\vec{\mathbf{x}}}_1-||\bar{\vec{\mathbf{x}}}_2||_2^2}$，其中 $\bar{\vec{\mathbf{x}}}_1,\bar{\vec{\mathbf{x}}}_2$ 分别为各自的簇心。
- 簇心曼哈顿距离 `centroid Manhattan distance`：$d_1=||\bar{\vec{\mathbf{x}}}_1-||\bar{\vec{\mathbf{x}}}_2||_1$ 。
- 簇连通平均距离 `average inter-cluster distance`：

$$d_2=\sqrt{\frac{\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{S}_1}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_j\in\mathbb{S}_2}||\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{x}}_j||_2^2}{\text{num}_1\times\text{num}_2}}=\sqrt{\frac{\Sigma_{s,1}}{\text{num}_1}+\frac{\Sigma_{s,2}}{\text{num}_2}-2\frac{\vec{\Sigma}_{l,1}^T\vec{\Sigma}_{l,2}}{\text{num}_1\times\text{num}_2}}$$

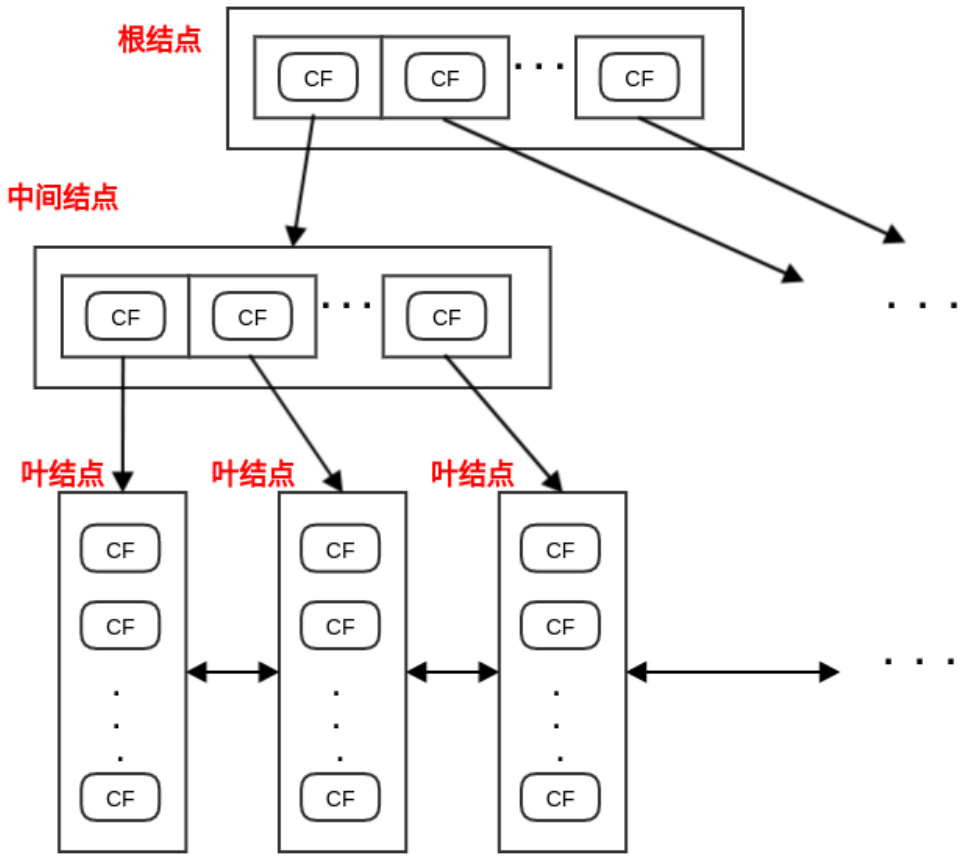
- 全连通平均距离 `average intra-cluster distance`：

$$\begin{aligned}d_3&=\sqrt{\frac{\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{S}_3}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_j\in\mathbb{S}_3}||\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{x}}_j||_2^2}{(\text{num}_1+\text{num}_2)\times(\text{num}_1+\text{num}_2-1)}}\\&=\sqrt{\frac{2(\text{num}_1+\text{num}_2)(\Sigma_{s,1}+\Sigma_{s,2})-2||\vec{\Sigma}_{l,1}-\vec{\Sigma}_{l,2}||_2^2}{(\text{num}_1+\text{num}_2)\times(\text{num}_1+\text{num}_2-1)}}\end{aligned}$$

- 方差恶化距离 `variance incress distance`：$d_4=\rho_3-\rho_1-\rho_2$ 。

### 4.2.2 CF 树

1. `CF` 树的结构类似于平衡 `B+` 树 。树由三种结点构成：根结点、中间结点、叶结点。
   - 根结点、中间结点：由若干个聚类特征 `CF` ，以及这些 `CF` 指向子结点的指针组成。
   - 叶结点：由若干个聚类特征 `CF` 组成。
     - 叶结点没有子结点，因此 `CF` 没有指向子结点的指针。
     - 所有的叶结点通过双向链表连接起来。
     - 在 `BIRCH` 算法结束时，叶结点的每个 `CF` 对应的样本集就对应了一个簇。




2. CF 树有三个关键参数：
   - 枝平衡因子 $\beta$：非叶结点中，最多不能包含超过 $\beta$ 个 CF 。
   - 叶平衡因子 $\lambda$：叶结点中，最多不能包含超过 $\lambda$ 个 CF 。
   - 空间阈值 $\tau$：叶结点中，每个 CF 对应的子簇的大小（通过簇半径 $\rho$ 来描述）不能超过 $\tau$ 。
3. 由于 CF 的可加性，所以 CF 树中，每个父结点的 CF 等于它所有子结点的所有 CF 之和。
4. CF 树的生成算法：
   - 输入：
     - 样本集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$
     - 枝平衡因子 $\beta$
     - 叶平衡因子 $\lambda$
     - 空间阈值 $\tau$
   - 输出： CF 树
   - 算法步骤：
     - 初始化： CF 树的根结点为空。
     - 随机从样本集 $\mathbb{D}$ 中选出一个样本，放入一个新的 CF 中，并将该 CF 放入到根结点中。
     - 遍历 $\mathbb{D}$ 中的样本，并向 CF 树中插入。迭代停止条件为：样本集 $\mathbb{D}$ 中所有样本都插入到 CF 树中。

       迭代过程如下：
       - 随机从样本集 $\mathbb{D}$ 中选出一个样本 $\vec{\mathbf{x}}_i$，从根结点向下寻找与 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 距离最近的叶结点 $\text{leaf}_j$ ，和 $\text{leaf}_j$ 里与 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 最近的 $CF_k$ 。

- 如果 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 加入到 $CF_k$ 对应的簇中之后，该簇的簇半径 $\rho \leq \tau$ ，则将 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 加入到 $CF_k$ 对应的簇中，并更新路径上的所有 `CF` 。本次插入结束。
- 否则，创建一个新的 `CF` ，将 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 放入该 `CF` 中，并将该 `CF` 添加到叶结点 $\text{leaf}_j$ 中。

  如果 $\text{leaf}_j$ 的 `CF` 数量小于 $\lambda$ ，则更新路径上的所有 `CF` 。本次插入结束。
- 否则，将叶结点 $\text{leaf}_j$ 分裂为两个新的叶结点 $\text{leaf}_{j,1},\text{leaf}_{j,2}$ 。分裂方式为：
  - 选择叶结点 $\text{leaf}_j$ 中距离最远的两个 `CF` ，分别作为 $\text{leaf}_{j,1},\text{leaf}_{j,2}$ 中的首个 `CF` 。
  - 将叶结点 $\text{leaf}_j$ 中剩下的 `CF` 按照距离这两个 `CF` 的远近，分别放置到 $\text{leaf}_{j,1},\text{leaf}_{j,2}$ 中。
- 依次向上检查父结点是否也需要分裂。如果需要，则按照和叶子结点分裂方式相同。

### 4.2.3 BIRCH 算法

1. `BIRCH` 算法的主要步骤是建立 `CF` 树，除此之外还涉及到 `CF` 树的瘦身、离群点的处理。
2. `BIRCH` 需要对 `CF` 树瘦身，有两个原因：
   - 将数据点插入到 `CF` 树的过程中，用于存储 `CF` 树结点及其相关信息的内存有限，导致部分数据点生长形成的 `CF` 树占满了内存。因此需要对 `CF` 树瘦身，从而使得剩下的数据点也能插入到 `CF` 树中。
   - `CF` 树生长完毕后，如果叶结点中的 `CF` 对应的簇太小，则会影响后续聚类的速度和质量。
3. `BIRCH` 瘦身是在将 $\tau$ 增加的过程。算法会在内存中同时存放旧树 $\mathcal{T}$ 和新树 $\mathcal{T}'$ ，初始时刻 $\mathcal{T}'$ 为空。
   - 算法同时处理 $\mathcal{T}$ 和 $\mathcal{T}'$ ，将 $\mathcal{T}$ 中的 `CF` 迁移到 $\mathcal{T}'$ 中。
   - 在完成所有的 `CF` 迁移之后，$\mathcal{T}$ 为空， $\mathcal{T}'$ 就是瘦身后的 `CF` 树。
4. `BIRCH` 离群点的处理：
   - 在对 `CF` 瘦身之后，搜索所有叶结点中的所有子簇，寻找那些稀疏子簇，并将稀疏子簇放入待定区。

     稀疏子簇：簇内数据点的数量远远少于所有子簇的平均数据点的那些子簇。

     > 将稀疏子簇放入待定区时，需要同步更新 `CF` 树上相关路径及结点。
   - 当 $\mathbb{D}$ 中所有数据点都被插入之后，扫描待定区中的所有数据点（这些数据点就是候选的离群点），并尝试将其插入到 `CF` 树中。

     如果数据点无法插入到 `CF` 树中，则可以确定为真正的离群点。
5. `BIRCH` 算法：
   - 输入：
     - 样本集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$
     - 枝平衡因子 $\beta$
     - 叶平衡因子 $\lambda$
     - 空间阈值 $\tau$
   - 输出： `CF` 树
   - 算法步骤：
     - 建立 `CF` 树。
     - （可选）对 `CF` 树瘦身、去除离群点，以及合并距离非常近的 `CF` 。
     - （可选）利用其它的一些聚类算法（如： `k-means` ）对 `CF` 树的所有叶结点中的 `CF` 进行聚类，得到新的 `CF` 树。

       这是为了消除由于样本读入顺序不同导致产生不合理的树结构。

> 这一步是对 `CF` 结构进行聚类。由于每个 `CF` 对应一组样本，因此对 `CF` 聚类就是对 $\mathbb{D}$ 进行聚类。

- （可选）将上一步得到的、新的 `CF` 树的叶结点中每个簇的中心点作为簇心，对所有样本按照它距这些中心点的距离远近进行聚类。

  这是对上一步的结果进行精修。

6. `BIRCH` 算法优点：
   - 节省内存。所有样本都存放在磁盘上，内存中仅仅存放 `CF` 结构。
   - 计算速度快。只需要扫描一遍就可以建立 `CF` 树。
   - 可以识别噪声点。
7. `BIRCH` 算法缺点：
   - 结果依赖于数据点的插入顺序。原本属于同一个簇的两个点可能由于插入顺序相差很远，从而导致分配到不同的簇中。

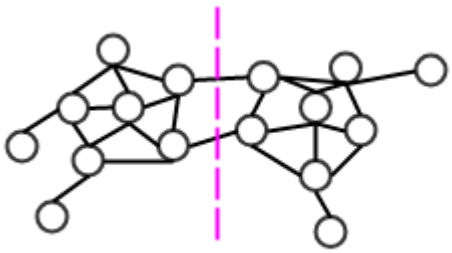
     甚至同一个点在不同时刻插入，也会被分配到不同的簇中。
   - 对非球状的簇聚类效果不好。这是因为簇直径 $\delta$ 和簇间距离的计算方法导致。
   - 每个结点只能包含规定数目的子结点，最后聚类的簇可能和真实的簇差距很大。
8. `BIRCH` 可以不用指定聚类的类别数 $K$ 。
   - 如果不指定 $K$ ，则最终叶结点中 `CF` 的数量就是 $K$ 。
   - 如果指定 $K$ ，则需要将叶结点按照距离远近进行合并，直到叶结点中 `CF` 数量等于 $K$ 。

# 五、谱聚类

1. 谱聚类 `spectral clustering` 是一种基于图论的聚类方法。
2. 谱聚类的主要思想是：基于数据集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$ 来构建图 $\mathcal{G}=(\mathbb{V},\mathbb{E})$ ，其中：
   - 顶点 $\mathbb{V}$ ：由数据集中的数据点组成：$\mathbb{V}=\{1,2,\cdots,N\}$ 。
   - 边 $\mathbb{E}$ ：任意一对顶点之间存在边。

     距离越近的一对顶点，边的权重越高；距离越远的一对顶点，边的权重越低。

   通过对图 $\mathcal{G}$ 进行切割，使得切割之后：不同子图之间的边的权重尽可能的低、各子图内的边的权重尽可能的高。这样就完成了聚类。



## 5.1 邻接矩阵

1. 在图 $\mathcal{G}=(\mathbb{V},\mathbb{E})$ 中，定义权重 $w_{i,j}$ 为顶点 $i$ 和 $j$ 之间的权重，其中 $i,j\in\mathbb{V}$ 。

   定义 $\mathbf{W}=(w_{i,j})_{N\times N}$ 为邻接矩阵：

$$\mathbf{W}=\begin{bmatrix}w_{1,1}&w_{1,2}&\cdots&w_{1,N}\\w_{2,1}&w_{2,2}&\cdots&w_{2,N}\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\w_{N,1}&w_{N,2}&\cdots&w_{N,N}\end{bmatrix}$$

由于 $\mathcal{G}$ 为无向图，因此 $w_{i,j}=w_{j,i}$ 。即： $\mathbf{W}=\mathbf{W}^T$ 。

- 对图中顶点 $i$ ，定义它的度 $d_i$ 为：所有与顶点 $i$ 相连的边的权重之和：$d_i=\sum_{j=1}^N w_{i,j}$ 。

  定义度矩阵 $\mathbf{D}$ 为一个对角矩阵，其中对角线分别为各顶点的度：

$$\mathbf{D}=\begin{bmatrix}d_1&0&\cdots&0\\0&d_2&\cdots&0\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\0&0&\cdots&d_N\end{bmatrix}$$

- 对于顶点集合 $\mathbb{V}$ 的一个子集 $\mathbb{A}\subset\mathbb{V}$，定义 $|\mathbb{A}|$ 为子集 $\mathbb{A}$ 中点的个数；定义 $vol(\mathbb{A})=\sum_{i\in\mathbb{A}}d_i$ ，为子集$\mathbb{A}$ 中所有点的度之和。

2. 事实上在谱聚类中，通常只给定数据集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$，因此需要计算出邻接矩阵 $\mathbf{W}$ 。
   - 基本思想是：距离较近的一对点（即相似都较高），边的权重较高；距离较远的一对点（即相似度较低），边的权重较低。
   - 基本方法是：首先构建相似度矩阵 $\mathbf{S}=(s_{i,j})_{N\times N}$，然后使用 $\epsilon$-近邻法、$K$ 近邻法、或者全连接法。

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix}s_{1,1}&s_{1,2}&\cdots&s_{1,N}\\s_{2,1}&s_{2,2}&\cdots&s_{2,N}\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\s_{N,1}&s_{N,2}&\cdots&s_{N,N}\end{bmatrix}$$

     - 通常相似度采用高斯核：$s_{i,j}=\exp\left(-\frac{||\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{x}}_j||_2^2}{2\sigma^2}\right)$ 。此时有$s_{i,j}=s_{j,i}$ 。即： $\mathbf{S}=\mathbf{S}^T$ 。
     - 也可以选择不同的核函数，如：多项式核函数、高斯核函数、`sigmoid` 核函数。

3. $\epsilon$-近邻法：设置一个距离阈值 $\epsilon$，定义邻接矩阵 $\mathbf{W}$ 为：

$$w_{i,j}=\begin{cases}0,&s_{i,j}>\varepsilon\\\varepsilon,&s_{i,j}\le\varepsilon\end{cases}$$

   即：一对相似度小于 $\epsilon$ 的点，边的权重为 $\epsilon$ ；否则边的权重为 0 。

   $\epsilon$-近邻法得到的权重要么是 0 ，要么是 $\epsilon$，权重度量很不精确，因此实际应用较少。

4. $K$ 近邻法：利用 `KNN` 算法选择每个样本最近的 $K$ 个点作为近邻，其它点与当前点之间的边的权重为 0 。

   这种做法会导致邻接矩阵 $\mathbf{W}$ 非对称，因为当 $\vec{\mathbf{x}}_j$ 是 $\vec{\mathbf{x}}_i$ 的 $K$ 近邻时， $\vec{\mathbf{x}}_i$ 不一定是 $\vec{\mathbf{x}}_j$ 的 $K$ 近邻。

   为了解决对称性问题，有两种做法：

   - 只要一个点在另一个点的 $K$ 近邻中，则认为是近邻。即：取并集。

$$w_{i,j}=w_{j,i}=\begin{cases}0,&\vec{\mathbf{x}}_i\notin KNN(\vec{\mathbf{x}}_j)\text{ and }\vec{\mathbf{x}}_j\notin KNN(\vec{\mathbf{x}}_i)\\s_{i,j},&\vec{\mathbf{x}}_i\in KNN(\vec{\mathbf{x}}_j)\text{ or }\vec{\mathbf{x}}_j\in KNN(\vec{\mathbf{x}}_i)\end{cases}$$

   - 只有两个点互为对方的 $K$ 近邻中，则认为是近邻。即：取交集。

$$w_{i,j}=w_{j,i}=\begin{cases}0, & \vec{\mathbf{x}}_i\notin KNN(\vec{\mathbf{x}}_j)\text{ or }\vec{\mathbf{x}}_j\notin KNN(\vec{\mathbf{x}}_i)\\ s_{i,j}, & \vec{\mathbf{x}}_i\in KNN(\vec{\mathbf{x}}_j)\text{ and }\vec{\mathbf{x}}_j\in KNN(\vec{\mathbf{x}}_i)\end{cases}$$

5. 全连接法：所有点之间的权重都大于 0： $w_{i,j}=s_{i,j}$ 。

## 5.2 拉普拉斯矩阵

1. 定义拉普拉斯矩阵 $\mathbf{L}=\mathbf{D}-\mathbf{W}$ ，其中 $\mathbf{D}$ 为度矩阵、 $\mathbf{W}$ 为邻接矩阵。
2. 拉普拉斯矩阵 $\mathbf{L}$ 的性质：
   - $\mathbf{L}$ 是对称矩阵，即 $\mathbf{L}=\mathbf{L}^T$ 。这是因为 $\mathbf{D},\mathbf{W}$ 都是对称矩阵。
   - 因为 $\mathbf{L}$ 是实对称矩阵，因此它的特征值都是实数。
   - 对任意向量 $\vec{\mathbf{f}}=(f_1,f_2,\cdots,f_N)^T$ ，有： $\vec{\mathbf{f}}^T\mathbf{L}\vec{\mathbf{f}}=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^N\sum_{j=1}^N w_{i,j}(f_i-f_j)^2$ 。
   - $\mathbf{L}$ 是半正定的，且对应的 $N$ 个特征值都大于等于0，且最小的特征值为 0。

     设其 $N$ 个实特征值从小到大为 $\lambda_1,\cdots,\lambda_N$ ，即： $0=\lambda_1\leq\lambda_2\leq\cdots\leq\lambda_N$ 。

## 5.3 谱聚类算法

1. 给定无向图 $\mathcal{G}=(\mathbb{V},\mathbb{E})$，设子图的点的集合 $\mathbb{A}$ 和子图的点的集合 $\mathbb{B}$ 都是 $\mathbb{V}$ 的子集，且 $\mathbb{A}\bigcap\mathbb{B}=\phi$ 。

   定义 $\mathbb{A}$ 和 $\mathbb{B}$ 之间的切图权重为： $W(\mathbb{A},\mathbb{B})=\sum_{i\in\mathbb{A},j\in\mathbb{B}}w_{i,j}$ 。

   即：所有连接 $\mathbb{A}$ 和 $\mathbb{B}$ 之间的边的权重。
2. 对于无向图 $\mathcal{G}=(\mathbb{V},\mathbb{E})$ ，假设将它切分为 $k$ 个子图：每个子图的点的集合为 $\mathbb{A}_1,\cdots,\mathbb{A}_k$ ，满足 $\mathbb{A}_i\bigcap\mathbb{A}_j=\phi,i\neq j$ 且 $\mathbb{A}_1\bigcup\cdots\bigcup\mathbb{A}_k=\mathbb{V}$ 。

   定义切图`cut`为： $cut(\mathbb{A}_1,\cdots,\mathbb{A}_k)=\sum_{i=1}^k W(\mathbb{A}_i,\bar{\mathbb{A}}_i)$ ，其中 $\bar{\mathbb{A}}_i$ 为 $\mathbb{A}_i$ 的补集。

### 5.3.1 最小切图

1. 引入指示向量 $\vec{\mathbf{q}}_j=(q_{j,1},\cdots,q_{j,N})^T,j=1,2,\cdots,k$，定义：

$$q_{j,i}=\begin{cases}0, & i\notin\mathbb{A}_j\\ 1, & i\in\mathbb{A}_j\end{cases}$$

   则有：

$$\vec{\mathbf{q}}_j^T\mathbf{L}\vec{\mathbf{q}}_j=\frac{1}{2}\sum_{m=1}^N\sum_{n=1}^N w_{m,n}(q_{j,m}-q_{j,n})^2$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{m\in\mathbb{A}_j}\sum_{n\in\mathbb{A}_j}w_{m,n}(1-1)^2+\frac{1}{2}\sum_{m\notin\mathbb{A}_j}\sum_{n\notin\mathbb{A}_j}w_{m,n}(0-0)^2+$$

$$\frac{1}{2}\sum_{m\in\mathbb{A}_j}\sum_{n\notin\mathbb{A}_j}w_{m,n}(1-0)^2+\frac{1}{2}\sum_{m\notin\mathbb{A}_j}\sum_{n\in\mathbb{A}_j}w_{m,n}(0-1)^2$$

$$=\frac{1}{2}\left(\sum_{m\in\mathbb{A}_j}\sum_{n\notin\mathbb{A}_j}w_{m,n}+\sum_{m\notin\mathbb{A}_j}\sum_{n\in\mathbb{A}_j}w_{m,n}\right)$$

$$=\frac{1}{2}(cut(\mathbb{A}_j,\bar{\mathbb{A}}_j)+cut(\bar{\mathbb{A}}_j,\mathbb{A}_j))=cut(\mathbb{A}_j,\bar{\mathbb{A}}_j)$$

   因此 $cut(\mathbb{A}_1,\cdots,\mathbb{A}_k)=\sum_{j=1}^k\vec{\mathbf{q}}_j^T\mathbf{L}\vec{\mathbf{q}}_j=tr(\mathbf{Q}^T\mathbf{L}\mathbf{Q})$ 。其中 $\mathbf{Q}=(\vec{\mathbf{q}}_1,\cdots,\vec{\mathbf{q}}_k)$ ， $tr(\cdot)$ 为矩阵的迹。

考虑到顶点 $i$ 有且仅位于一个子图中，则有约束条件：

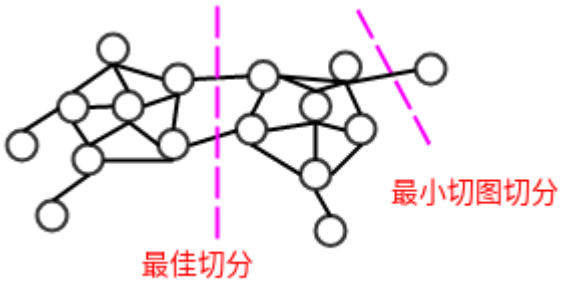
$$q_{j,m}\in\{0,1\},\quad \vec{\mathbf{q}}_i\cdot\vec{\mathbf{q}}_j=\begin{cases}0, & i\neq j\\ |\mathbb{A}|_j, & i=j\end{cases}$$

2. 最小切图算法： $cut(\mathbb{A}_1,\cdots,\mathbb{A}_k)$ 最小的切分。即求解：

$$\min_{\mathbf{Q}} tr(\mathbf{Q}^T\mathbf{L}\mathbf{Q})$$

$$s.t.\ q_{j,m}\in\{0,1\},\quad \vec{\mathbf{q}}_i\cdot\vec{\mathbf{q}}_j=\begin{cases}0, & i\neq j\\ |\mathbb{A}|_j, & i=j\end{cases}$$

3. 最小切图切分使得不同子图之间的边的权重尽可能的低，但是容易产生分割出只包含几个顶点的较小子图的歪斜分割现象。




## 5.3.2 RatioCut 算法

1. `RatioCut` 切图不仅考虑最小化 $cut(\mathbb{A}_1,\cdots,\mathbb{A}_k)$，它还考虑最大化每个子图的点的个数。即：

$$RatioCut(\mathbb{A}_1,\cdots,\mathbb{A}_k)=\sum_{i=1}^{k}\frac{W(\mathbb{A}_i,\bar{\mathbb{A}}_i)}{|\mathbb{A}_i|}$$

   - 最小化 $cut(\mathbb{A}_1,\cdots,\mathbb{A}_k)$：使得不同子图之间的边的权重尽可能的低。
   - 最大化每个子图的点的个数：使得各子图尽可能的大。

2. 引入指示向量 $\vec{\mathbf{h}}_j=(h_{j,1},\cdots,h_{j,N})^T, j=1,2,\cdots,k$，定义：

$$h_{j,i}=\begin{cases}0, & i\notin\mathbb{A}_j\\ \frac{1}{\sqrt{|\mathbb{A}_j|}}, & i\in\mathbb{A}_j\end{cases}$$

则有：

$$\vec{\mathbf{h}}_j^T\mathbf{L}\vec{\mathbf{h}}_j=\frac{1}{2}\sum_{m=1}^{N}\sum_{n=1}^{N}w_{m,n}(h_{j,m}-h_{j,n})^2$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{m\in\mathbb{A}_j}\sum_{n\notin\mathbb{A}_j}w_{m,n}(\frac{1}{\sqrt{|\mathbb{A}_j|}}-0)^2+\frac{1}{2}\sum_{m\notin\mathbb{A}_j}\sum_{n\in\mathbb{A}_j}w_{m,n}(0-\frac{1}{\sqrt{|\mathbb{A}_j|}})^2$$

$$=\frac{1}{2}\left(\sum_{m\in\mathbb{A}_j}\sum_{n\notin\mathbb{A}_j}\frac{w_{m,n}}{|\mathbb{A}_j|}+\sum_{m\notin\mathbb{A}_j}\sum_{n\in\mathbb{A}_j}\frac{w_{m,n}}{|\mathbb{A}_j|}\right)$$

$$=\frac{1}{2}\times\frac{1}{|\mathbb{A}_j|}(cut(\mathbb{A}_j,\bar{\mathbb{A}}_j)+cut(\bar{\mathbb{A}}_j,\mathbb{A}_j))=RatioCut(\mathbb{A}_j,\bar{\mathbb{A}}_j)$$

因此 $RatioCut(\mathbb{A}_1,\cdots,\mathbb{A}_k)=\sum_{j=1}^{k}\vec{\mathbf{h}}_j^T\mathbf{L}\vec{\mathbf{h}}_j=tr(\mathbf{H}^T\mathbf{L}\mathbf{H})$ 。其中 $\mathbf{H}=(\vec{\mathbf{h}}_1,\cdots,\vec{\mathbf{h}}_k)$ ， $tr(\cdot)$ 为矩阵的迹。

考虑到顶点 $i$ 有且仅位于一个子图中，则有约束条件：

$$\vec{\mathbf{h}}_i \cdot \vec{\mathbf{h}}_j = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases}$$

3. `RatioCut` 算法： $RatioCut(\mathbb{A}_1, \cdots, \mathbb{A}_k)$ 最小的切分。即求解：

$$\min_{\mathbf{H}} tr(\mathbf{H}^T \mathbf{L} \mathbf{H})$$
$$s.t. \mathbf{H}^T \mathbf{H} = \mathbf{I}$$

因此只需要求解 $\mathbf{L}$ 最小的 $k$ 个特征值，求得对应的 $k$ 个特征向量组成 $\mathbf{H}$ 。

通常在求解得到 $\mathbf{H}$ 之后，还需要对行进行标准化：$h^*_{i,j} = \frac{h_{i,j}}{\sqrt{\sum_{t=1}^k h_{i,t}^2}}$

4. 事实上这样解得的 $\mathbf{H}$ 不能完全满足指示向量的定义。因此在得到 $\mathbf{H}$ 之后，还需要对每一行进行一次传统的聚类（如：`k-means` 聚类）。
5. `RatioCut` 算法：
   - 输入：
     - 数据集 $\mathbb{D} = \{\vec{\mathbf{x}}_1, \cdots, \vec{\mathbf{x}}_N\}$
     - 降维的维度 $k_1$
     - 二次聚类算法
     - 二次聚类的维度 $k_2$
   - 输出：聚类簇 $\mathcal{C} = \{\mathbb{C}_1, \cdots, \mathbb{C}_{k_2}\}$
   - 算法步骤：
     - 根据 $\mathbb{D}$ 构建相似度矩阵 $\mathbf{S}$ 。
     - 根据相似度矩阵构建邻接矩阵 $\mathbf{W}$、度矩阵 $\mathbf{D}$ ，计算拉普拉斯矩阵 $\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{W}$ 。
     - 计算 $\mathbf{L}$ 最小的 $k_1$ 个特征值，以及对应的特征向量 $\vec{\mathbf{v}}_1, \cdots, \vec{\mathbf{v}}_{k_1}$ ，构建矩阵 $\mathbf{H} = (\vec{\mathbf{v}}_1, \cdots, \vec{\mathbf{v}}_{k_1})$ 。
     - 对 $\mathbf{H}$ 按照行进行标准化：$h^*_{i,j} = \frac{h_{i,j}}{\sqrt{\sum_{t=1}^k h_{i,t}^2}}$ ，得到 $\mathbf{H}^*$ 。
     - 将 $\mathbf{H}^*$ 中每一行作为一个 $k_1$ 维的样本，一共 $N$ 个样本，利用二次聚类算法来聚类，二次聚类的维度为 $k_2$ 。

       最终得到簇划分 $\mathcal{C} = \{\mathbb{C}_1, \cdots, \mathbb{C}_{k_2}\}$ 。

### 5.3.3 Ncut 算法

1. `Ncut` 切图不仅考虑最小化 $cut(\mathbb{A}_1, \cdots, \mathbb{A}_k)$，它还考虑最大化每个子图的边的权重。即：

$$Ncut(\mathbb{A}_1, \cdots, \mathbb{A}_k) = \sum_{i=1}^k \frac{W(\mathbb{A}_i, \bar{\mathbb{A}}_i)}{vol(\mathbb{A}_i)}$$

   - 最小化 $cut(\mathbb{A}_1, \cdots, \mathbb{A}_k)$：使得不同子图之间的边的权重尽可能的低。
   - 最大化每个子图的边的权重：使得各子图内的边的权重尽可能的高。
2. 引入指示向量 $\vec{\mathbf{h}}_j = (h_{j,1}, \cdots, h_{j,N})^T, j = 1, 2, \cdots, k$，定义：

$$h_{j,i} = \begin{cases} 0, & i \notin \mathbb{A}_j \\ \frac{1}{\sqrt{vol(\mathbb{A}_j)}}, & i \in \mathbb{A}_j \end{cases}$$

则有：

$$\vec{\mathbf{h}}_j^T\mathbf{L}\vec{\mathbf{h}}_j=\frac{1}{2}\sum_{m=1}^{N}\sum_{n=1}^{N}w_{m,n}(h_{j,m}-h_{j,n})^2$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{m\in\mathbb{A}_j}\sum_{n\notin\mathbb{A}_j}w_{m,n}(\frac{1}{\sqrt{vol(\mathbb{A}_j)}}-0)^2+\frac{1}{2}\sum_{m\notin\mathbb{A}_j}\sum_{n\in\mathbb{A}_j}w_{m,n}(0-\frac{1}{\sqrt{vol(\mathbb{A}_j)}})^2$$

$$=\frac{1}{2}\left(\sum_{m\in\mathbb{A}_j}\sum_{n\notin\mathbb{A}_j}\frac{w_{m,n}}{vol(\mathbb{A}_j)}+\sum_{m\notin\mathbb{A}_j}\sum_{n\in\mathbb{A}_j}\frac{w_{m,n}}{vol(\mathbb{A}_j)}\right)$$

$$=\frac{1}{2}\times\frac{1}{vol(\mathbb{A}_j)}(cut(\mathbb{A}_j,\bar{\mathbb{A}}_j)+cut(\bar{\mathbb{A}}_j,\mathbb{A}_j))=Ncut(\mathbb{A}_j,\bar{\mathbb{A}}_j)$$

因此 $Ncut(\mathbb{A}_1,\cdots,\mathbb{A}_k)=\sum_{j=1}^k\vec{\mathbf{h}}_j^T\mathbf{L}\vec{\mathbf{h}}_j=tr(\mathbf{H}^T\mathbf{L}\mathbf{H})$ 。其中 $\mathbf{H}=(\vec{\mathbf{h}}_1,\cdots,\vec{\mathbf{h}}_k)$ ， $tr(\cdot)$ 为矩阵的迹。

考虑到顶点 $i$ 有且仅位于一个子图中，则有约束条件：

$$\vec{\mathbf{h}}_i\cdot\vec{\mathbf{h}}_j=\begin{cases}0, & i\neq j\\ \frac{1}{vol(\mathbb{A}_j)}, & i=j\end{cases}$$

3. `Ncut` 算法： $Ncut(\mathbb{A}_1,\cdots,\mathbb{A}_k)$ 最小的切分。即求解

$$\min_{\mathbf{H}}tr(\mathbf{H}^T\mathbf{L}\mathbf{H})$$
$$s.t.\ \mathbf{H}^T\mathbf{D}\mathbf{H}=\mathbf{I}$$

4. 令 $\mathbf{H}=\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{F}$ ， 则有：

$$\mathbf{H}^T\mathbf{L}\mathbf{H}=\mathbf{F}^T\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{L}\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{F}$$
$$\mathbf{H}^T\mathbf{D}\mathbf{H}=\mathbf{F}^T\mathbf{F}=\mathbf{I}$$

令 $\mathbf{L}'=\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{L}\mathbf{D}^{-1/2}$ ， 则最优化目标变成：

$$\min_{\mathbf{H}}tr(\mathbf{F}^T\mathbf{L}'\mathbf{F})$$
$$s.t.\ \mathbf{F}^T\mathbf{F}=\mathbf{I}$$

因此只需要求解 $\mathbf{L}'$ 最小的 $k$ 个特征值，求得对应的 $k$ 个特征向量组成 $\mathbf{F}$ 。然后对行进行标准化： $f_{i,j}^*=\frac{f_{i,j}}{\sqrt{\sum_{t=1}^k f_{i,t}^2}}$ 。

与 `RatioCut` 类似， `Ncut` 也需要对$\mathbf{F}$ 的每一行进行一次传统的聚类（如： `k-means` 聚类）。

5. 事实上 $\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{L}\mathbf{D}^{-1/2}$ 相当于对拉普拉斯矩阵 $\mathbf{L}$ 进行了一次标准化： $l'_{i,j}=\frac{l_{i,j}}{d_i\times d_j}$ 。

6. `Ncut` 算法：
   - 输入：
     - 数据集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$
     - 降维的维度 $k_1$
     - 二次聚类算法
     - 二次聚类的维度 $k_2$
   - 输出：聚类簇 $\mathcal{C}=\{\mathbb{C}_1,\cdots,\mathbb{C}_{k_2}\}$
   - 算法步骤：
     - 根据 $\mathbb{D}$ 构建相似度矩阵 $\mathbf{S}$ 。
     - 根据相似度矩阵构建邻接矩阵 $\mathbf{W}$、度矩阵 $\mathbf{D}$ ， 计算拉普拉斯矩阵 $\mathbf{L}=\mathbf{D}-\mathbf{W}$ 。

- 构建标准化之后的拉普拉斯矩阵 $\mathbf{L}'=\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{L}\mathbf{D}^{-1/2}$ 。
- 计算 $\mathbf{L}'$ 最小的 $k_1$ 个特征值，以及对应的特征向量 $\vec{\mathbf{v}}_1,\cdots,\vec{\mathbf{v}}_{k_1}$，构建矩阵 $\mathbf{F}=(\vec{\mathbf{v}}_1,\cdots,\vec{\mathbf{v}}_{k_1})$ 。
- 对 $\mathbf{F}$ 按照行进行标准化：$f^*_{i,j}=\frac{f_{i,j}}{\sqrt{\sum_{t=1}^k f_{i,t}^2}}$ ，得到 $\mathbf{F}^*$ 。
- 将 $\mathbf{F}^*$ 中每一行作为一个 $k_1$ 维的样本，一共 $N$ 个样本，利用二次聚类算法来聚类，二次聚类的维度为 $k_2$ 。

  最终得到簇划分 $\mathcal{C}=\{\mathbb{C}_1,\cdots,\mathbb{C}_{k_2}\}$ 。

## 5.4 性质

1. 谱聚类算法优点：
   - 只需要数据之间的相似度矩阵，因此处理稀疏数据时很有效。
   - 由于使用了降维，因此在处理高维数据聚类时效果较好。
2. 谱聚类算法缺点：
   - 如果最终聚类的维度非常高，则由于降维的幅度不够，则谱聚类的运行速度和最后聚类的效果均不好。
   - 聚类效果依赖于相似度矩阵，不同相似度矩阵得到的最终聚类效果可能不同。