工 业 和 信 息 化 部 “ 十 二 五 ” 规 划 教 材
“十二五”国家重点图书出版规划项目

模式识别

Pattern Recognition

第4讲 基于谱的聚类与降维

哈尔滨工业大学 计算机学院
模式识别与智能系统研究中心
ISBN 978-7-5603-4763-9

相似图

- 相似图：样本集$\{\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_n\}$可以表示为相似图$G = (V, E)$。图G也可以用邻接矩阵$W = \{w_{ij}\}_{i,j=1,\cdots,n}$描述。

- 利用w_{ij}直观定义样本i与样本j间的相似关系。
- 你可以想到哪些方式?
  - 距离、内积?
  - 任意两个样本之间的相似度为$1/n$——PCA
  - 类内样本相似度为$1/n_k$——LDA
  - $w_{ij} = \begin{cases} exp\left(-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2/\sigma\right), & \mathbf{x}_i \in N_k(\mathbf{x}_j) \vee \mathbf{x}_j \in N_k(\mathbf{x}_i) \\ 0, & otherwise \end{cases}$

拉普拉斯?

1. **微积分中的Laplacian算子——**非混合二阶偏导数之和

$$\Delta f=\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}$$

例如：

$$\Delta f=\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$$

2. 图像处理中的**Laplacian算子——二阶差分和**

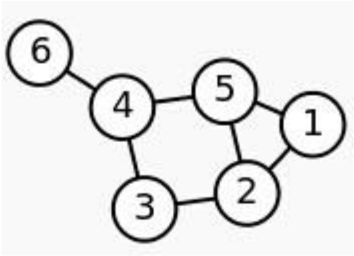
0	−1	0
−1	4	−1
0	−1	0

−1	−1	−1
−1	8	−1
−1	−1	−1

3. **图的Laplacian矩阵——邻接矩阵上的二阶差分和**

相似图的拉普拉斯矩阵

- 相似图：样本集$\{\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_n\}$可以表示为相似图$G = (V, E)$。图G也可以用邻接矩阵$W = \{w_{ij}\}_{i,j=1,\cdots,n}$描述。



- 节点的度：

$$d_i = \sum_{j=1}^{n} w_{ij}; \qquad D = diag(d_i)$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- Laplacian矩阵：

$$L = D - W$$

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 0 & -1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

详细可参考：
https://zhuanlan.zhihu.com/p/362416124

Laplacian矩阵的性质与作用

1. **对任意矢量f $\in R^n$，成立：**

$$\mathbf{f}^t L \mathbf{f} = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}\left(f_i - f_j\right)^2$$

基于谱的求解方法

基于L矩阵的优化问题

⟺

邻接矩阵上的代价函数

基于图的几何解释

证明:

$$\mathbf{f}^t L \mathbf{f} = \mathbf{f}^t D \mathbf{f} - \mathbf{f}^t W \mathbf{f} = \underline{\sum_{i=1}^{n} d_i f_i^2} - \sum_{i,j=1}^{n} w_{ij} f_i f_j$$

$$= \frac{1}{2}\left(\underline{\sum_{i=1}^{n} d_i f_i^2 + \sum_{j=1}^{n} d_j f_j^2} - 2\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij} f_i f_j\right)$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}\left(f_i - f_j\right)^2$$

$$L = D - W$$

$$d_i = \sum_{j=1}^{n} w_{ij}$$

样本降维

- **降维过程：** $\mathbf{y} = f(\mathbf{x})$

$$\mathbf{x} \in R^{m}, \qquad \mathbf{y} \in R^{m'}, \qquad m' \ll m$$

$$\mathbf{X} = [\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_{\mathbf{n}}] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^t \\ \vdots \\ \tilde{\boldsymbol{x}}_m^t \end{bmatrix} \longrightarrow \mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{\mathbf{n}}] = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{y}}_1^t \\ \vdots \\ \tilde{\mathbf{y}}_{m'}^t \end{bmatrix}$$

ISBN 978-7-5603-4763-9

降维的一般谱方法

- 令α_{ij}为样本$\mathbf{x}_i$与$\mathbf{x}_j$之间的相似度，为了保持降维之后样本之间的相似度，可以求解如下的优化问题：

$$\min_{\mathrm{Y}} \sum_{i \neq j} w_{ij} \left\| \mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j \right\|^2 = \min_{\mathrm{Y}} \sum_{i \neq j} w_{ij} \sum_{k=1}^{m'} \left(y_i^{(k)} - y_j^{(k)} \right)^2$$

$$= \min_{\mathrm{Y}} \sum_{k=1}^{m'} \sum_{i \neq j} w_{ij} \left(y_i^{(k)} - y_j^{(k)} \right)^2 = \min_{\mathrm{Y}} \sum_{k=1}^{m'} \tilde{\mathbf{y}}_k^t \mathbf{L} \tilde{\mathbf{y}}_k$$

约束：$\tilde{\mathbf{y}}_k^t \mathbf{B} \tilde{\mathbf{y}}_k = d,\ k = 1, \ldots, m'$

其中：$\mathbf{Y} = [\mathbf{y_1}, \ldots, \mathbf{y_n}] = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{y}}_1^t \\ \vdots \\ \tilde{\mathbf{y}}_{m'}^t \end{bmatrix}$

$$\mathbf{W} = \left(w_{ij} \right),\ \mathbf{D} = diag\left(\sum_{j=1}^{n} w_{ij} \right) \qquad \mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{W}$$

线性降维的优化问题

- f为线性映射时：

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{W}^t \mathbf{x}_i, \qquad \tilde{\mathbf{y}}_k = \mathbf{X}^t \mathbf{w}_k$$

其中：$\mathbf{x}_i$和$\mathbf{w}_k$分别为$\mathbf{X}$和$\mathbf{W}$的列矢量。

- 优化问题：

$$\min_{\mathbf{W}} \sum_{k=1}^{m'} \tilde{\mathbf{y}}_k^t \mathbf{L} \tilde{\mathbf{y}}_k = \sum_{k=1}^{m'} \mathbf{w}_k^t \mathbf{X} \mathbf{L} \mathbf{X}^{\mathbf{t}} \mathbf{w}_k$$

约束：$\mathbf{w}_k^t \mathbf{X} \mathbf{B} \mathbf{X}^{\mathbf{t}} \mathbf{w}_k = d, \quad k = 1, \dots, m'$

或：$\mathbf{w}_k^t \mathbf{w}_k = d$

- 问题的解：广义特征值、特征矢量问题

$$(\mathbf{XLX}^t)\mathbf{w} = \lambda(\mathbf{XBX}^t)\mathbf{w}$$

最小m'个特征值对应的特征矢量。

PCA：Principle Component Analysis

- PCA的优化问题：（最大值问题转换最小值问题——丢掉的最少）

$$\min_{\mathbf{W}} \sum_{k=1}^{m'} \mathbf{w}_k^t \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{w}_k$$

约束：$\mathbf{w}_k^t \mathbf{w}_k = 1$

- 协方差矩阵：

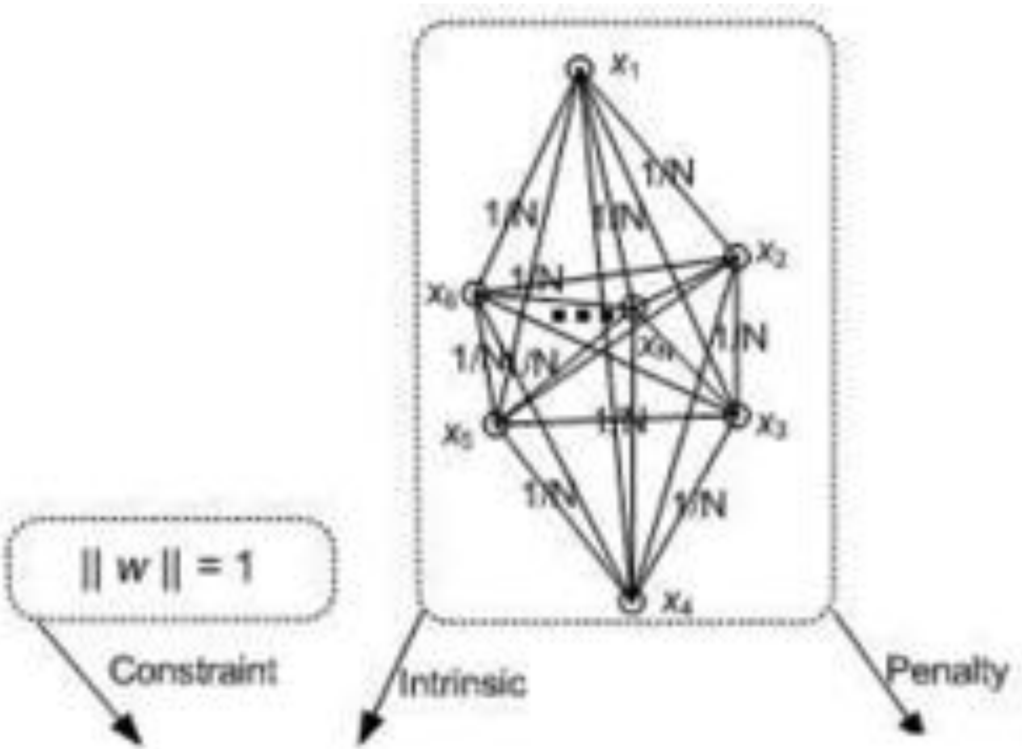
$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^t = \frac{1}{n}\mathbf{X}\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{e}\mathbf{e}^t\right)\mathbf{X}^t$$

- 相似图：Laplacian矩阵$\mathbf{L}$和相似矩阵$\mathbf{A}$（$\mathbf{e=1}$）

$$\mathbf{L} = \mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{e}\mathbf{e}^{\mathbf{t}}, \qquad \mathbf{A} = \frac{1}{n}\mathbf{e}\mathbf{e}^{\mathbf{t}}$$

PCA的相似图

- PCA的相似图为全连接图，任意两个样本之间的相似度为$1/n$ 。



LDA：Linear Discriminant Analysis

- LDA优化的问题：

$$\min_{\mathbf{W}} \sum_{k=1}^{m'} \mathbf{w}_k^t \mathbf{S}_w \mathbf{w}_k$$

约束：$\mathbf{w}_k^t \mathbf{S}_b \mathbf{w}_k = d$

- 类内散布矩阵：

$$\mathbf{S}_w = \sum_{i=1}^{n} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}^{c_i})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}^{c_i})^t = \mathbf{X}\left(\mathbf{I} - \sum_{k=1}^{c} \frac{1}{n_k} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k^t\right)\mathbf{X}^t$$

其中：c_i为$\mathbf{x}_i$的类别，c为类别数，n_k为第k类样本数，$\mathbf{e}_k$为n维指示矢量：

$$e_{ki} = \begin{cases} 1, & \mathbf{x}_i \in \omega_k \\ 0, & otherwise \end{cases}$$

LDA的优化问题

- 类间散布矩阵：

$$\mathbf{S}_b = \sum_{k=1}^{c} n_k(\boldsymbol{\mu}_k - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\mu}_k - \boldsymbol{\mu})^t = n\boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{S}_w$$

因此约束相当于：$\mathbf{w}_k^t\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{w}_k = d$

- 相似图：

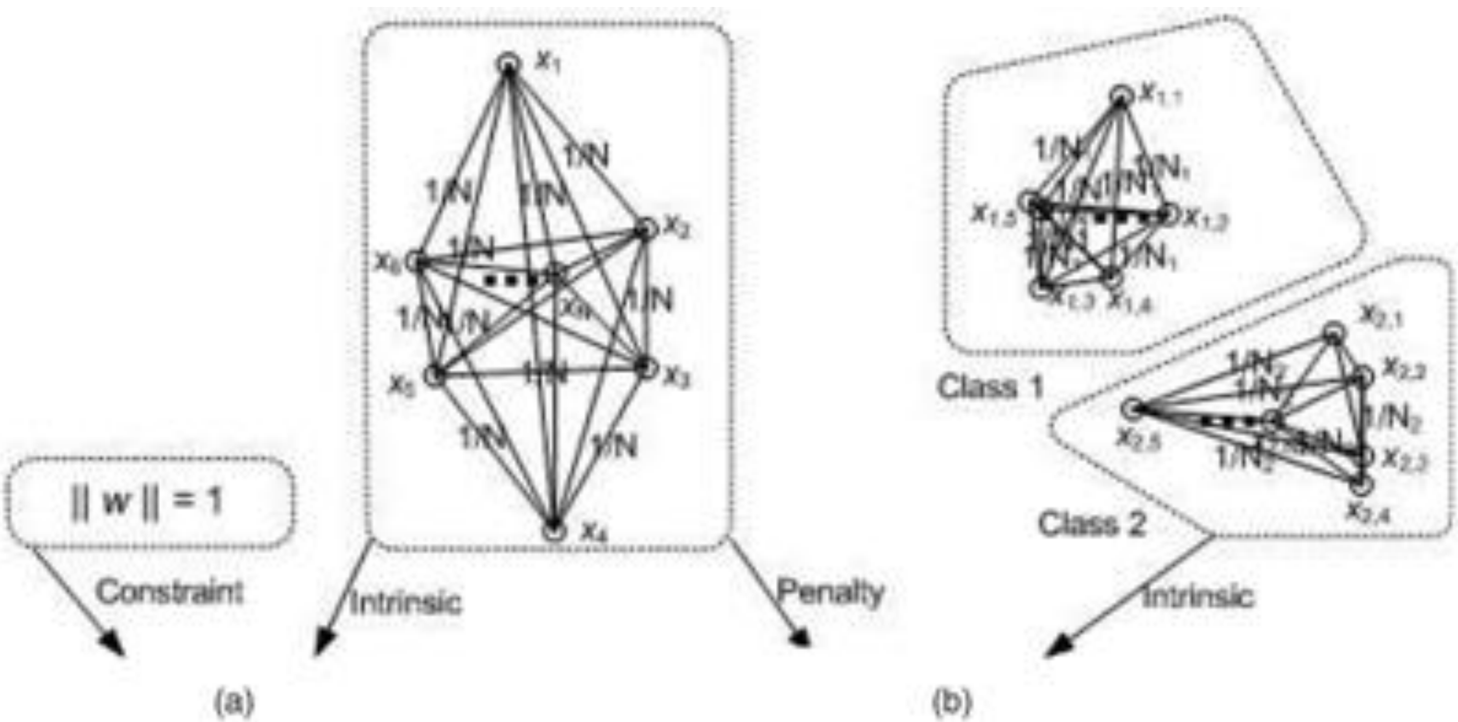
$$\mathbf{L} = \mathbf{I} - \sum_{k=1}^{c} \frac{1}{n_k}\mathbf{e}_k\mathbf{e}_k^t$$

$$\mathbf{W} = \sum_{k=1}^{c} \frac{1}{n_k}\mathbf{e}_k\mathbf{e}_k^t, \qquad \mathbf{B} = \boldsymbol{\Sigma}$$

W实际上是分块矩阵。

LDA的相似图

- **相似图**：类内样本之间全连接，权重为$1/n_c$，类间样本无连接。约束图为所有样本的全连接，权重为$1/n$。



LE: Laplacian Eigenmap 拉普拉斯映射
LPP: Locality Preserving Projection 局部保留投影

- 分别采用k近邻或ε近邻方式定义相似矩阵：

- LE： $w_{ij} = \begin{cases} exp\left(-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2/\sigma\right), & \mathbf{x}_i \in N_k(\mathbf{x}_j) \vee \mathbf{x}_j \in N_k(\mathbf{x}_i) \\ 0, & otherwise \end{cases}$

- LPP： $w_{ij} = \begin{cases} exp\left(-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2/\sigma\right), & \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 < \epsilon \\ 0, & otherwise \end{cases}$

MDS：Multidimensional Scaling 多维尺度变换

- MDS的目标：给定样本之间距离（相似度）的条件下，在低维空间对样本进行表示，力图保证样本之间的距离不变。

- MDS的优化问题：给定距离矩阵$D=\left(d_{ij}\right)_{n\times n}$

$$\min_{\mathbf{y}_1,\dots,\mathbf{y}_n}\sum_{i<j}\left(\|\mathbf{y}_i-\mathbf{y}_j\|-d_{ij}\right)^2$$

- 求解方法很多，一种是直接采用梯度法优化$\mathbf{y}_1,\cdots,\mathbf{y}_n$。

NMDS：Non-metric Multidimensional Scaling

- **NMDS算法**

NMDS

- 根据距离矩阵**D**构造内积矩阵**S**；
- 计算**S**的特征值和特征矢量，保留最大的m'个特征值(矩阵)Λ和特征矢量(矩阵)Γ；
- 构造映射之后的样本矩阵**Y**(相差一个旋转和尺度)：

$$\mathbf{S} = \mathbf{Y}^t\mathbf{Y} = \mathbf{\Gamma}\mathbf{\Lambda}\mathbf{\Gamma}^t$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{\Gamma}^t$$

NMDS与PCA的一致性

- Y的奇异值分解：

$$\mathbf{Y} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{\Gamma}^{t}$$

- 内积矩阵和协方差矩阵：

$$\mathbf{S} = \mathbf{Y}^{t}\mathbf{Y} = \mathbf{\Gamma}\mathbf{\Lambda}\mathbf{\Gamma}^{t}$$

$$\mathbf{\Sigma} = \mathbf{Y}\mathbf{Y}^{t} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{U}^{t}$$

- 两个矩阵的特征值相同，特征矢量不同，分别是**Y**的左奇异矢量和右奇异矢量。

距离矩阵构造内积矩阵

- 距离矩阵$D=\left(d_{ij}\right)_{n\times n}$，内积矩阵$S=\left(s_{ij}\right)_{n\times n}$

$$s_{ij}=\mathbf{x}_i^t\mathbf{x}_j$$

$$\begin{aligned} d_{ij} &= \left(\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j\right)^t\left(\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j\right) \\ &= \mathbf{x}_i^t\mathbf{x}_i+\mathbf{x}_j^t\mathbf{x}_j-2\mathbf{x}_i^t\mathbf{x}_j \\ &= \mathbf{x}_i^t\mathbf{x}_i+\mathbf{x}_j^t\mathbf{x}_j-2s_{ij} \\ &= s_{ii}+s_{jj}-2s_{ij} \end{aligned}$$

- S可以唯一的构造D，而D不可能唯一构造S。平移变换下，距离矩阵不变，而内积矩阵不同。
- 限定坐标原点为样本的中心：$\bar{\mathbf{x}}=0$

距离矩阵构造内积矩阵

- 利用关系：

$$\frac{1}{n}\sum_{j} d_{ij} + \frac{1}{n}\sum_{i} d_{ij} - \frac{1}{n^2}\sum_{i,j} d_{ij}$$
$$= \mathbf{x}_i^t\mathbf{x}_i + \frac{1}{n}\sum_{j}\mathbf{x}_j^t\mathbf{x}_j + \mathbf{x}_j^t\mathbf{x}_j + \frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{i}\mathbf{x}_i^t\mathbf{x}_i - \frac{1}{n}\sum_{i}\mathbf{x}_i^t\mathbf{x}_i - \frac{1}{n}\sum_{j}\mathbf{x}_j^t\mathbf{x}_j$$
$$- \frac{2}{n^2}\sum_{i,j}\mathbf{x}_i^t\mathbf{x}_j = \mathbf{x}_i^t\mathbf{x}_i + \mathbf{x}_j^t\mathbf{x}_j$$

- 有：

$$s_{ij} = -\frac{1}{2}d_{ij} + \frac{1}{2n}\sum_{j} d_{ij} + \frac{1}{2n}\sum_{i} d_{ij} - \frac{1}{2n^2}\sum_{i,j} d_{ij}$$
$$= -\frac{1}{2}\left(d_{ij} - \frac{1}{n}(\mathbf{De})_i - \frac{1}{n}(\mathbf{e}^t\mathbf{D})_j + \frac{1}{n^2}\mathbf{e}^t\mathbf{De}\right)$$

距离矩阵构造内积矩阵

- 矩阵形式：

$$\mathbf{S} = -\frac{1}{2}\left(\mathbf{D} - \frac{1}{n}\mathbf{D}\mathbf{e}\mathbf{e}^t - \frac{1}{n}\mathbf{e}\mathbf{e}^t\mathbf{D} + \frac{1}{n^2}\mathbf{e}\mathbf{e}^t\mathbf{D}\mathbf{e}\mathbf{e}^t\right)$$

$$= -\frac{1}{2}\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{e}\mathbf{e}^t\right)\mathbf{D}\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{e}\mathbf{e}^t\right)$$

NMDS（Non-metric multidimensional scaling) 非度量多维尺度分析

- 内积矩阵S构造相似矩阵W：

$$w_{ij} = \begin{cases} s_{ij}, & i \neq j \\ 0, & i = j \end{cases}$$

- S的行求和：

$$\sum_j s_{ij} = \sum_j \left(-\frac{1}{2} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n} \mathbf{e}\mathbf{e}^t \right) \mathbf{D} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n} \mathbf{e}\mathbf{e}^t \right) \right)_{ij}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_j \left(-d_{ij} - \frac{1}{n} \sum_{i'} d_{i'j} + \frac{1}{n} \sum_{j'} d_{ij'} - \frac{1}{n^2} \sum_{i',j'} d_{i'j'} \right)$$

$$= \left(-\frac{1}{2} \sum_j d_{ij} + \frac{1}{2n} \sum_{j,j'} d_{ij'} \right) + \left(\frac{1}{2n} \sum_{i',j} d_{i',j} - \frac{1}{2n^2} \sum_{i',j'} d_{i',j'} \right) = 0$$

NMDS的相似图

- NMDS相似图上的优化问题：

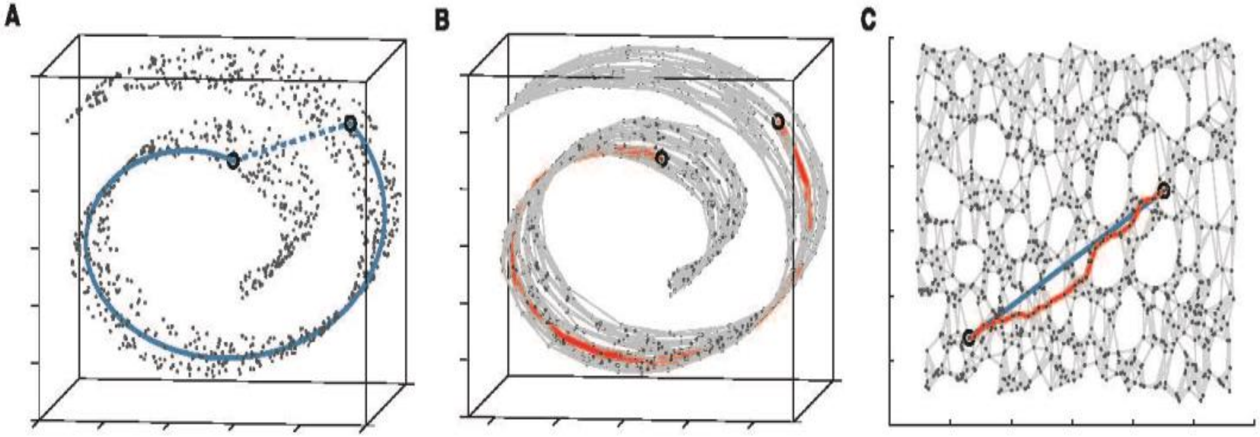
$$arg \max_{\mathbf{y}^t\mathbf{y}=\lambda} \mathbf{y}^t\mathbf{S}\mathbf{y} = arg \max_{\mathbf{y}^t\mathbf{y}=\lambda} \mathbf{y}^t(\mathbf{W}-\mathbf{D})\mathbf{y} = arg \min_{\mathbf{y}^t\mathbf{y}=\lambda} \mathbf{y}^t(\mathbf{D}-\mathbf{W})\mathbf{y}$$

其中矩阵$\mathbf{D} = (d_{ij})$：

$$d_{ij} = \begin{cases} -s_{ij} = \sum_j w_{ij}, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

ISOMAP等距特征映射

- **欧氏距离与测地距离**：



- **ISOMAP的思想**：根据两个样本的测地距离构造相似图，采用MDS完成向低维空间的映射。

ISOMAP算法

- **ISOMAP算法**:

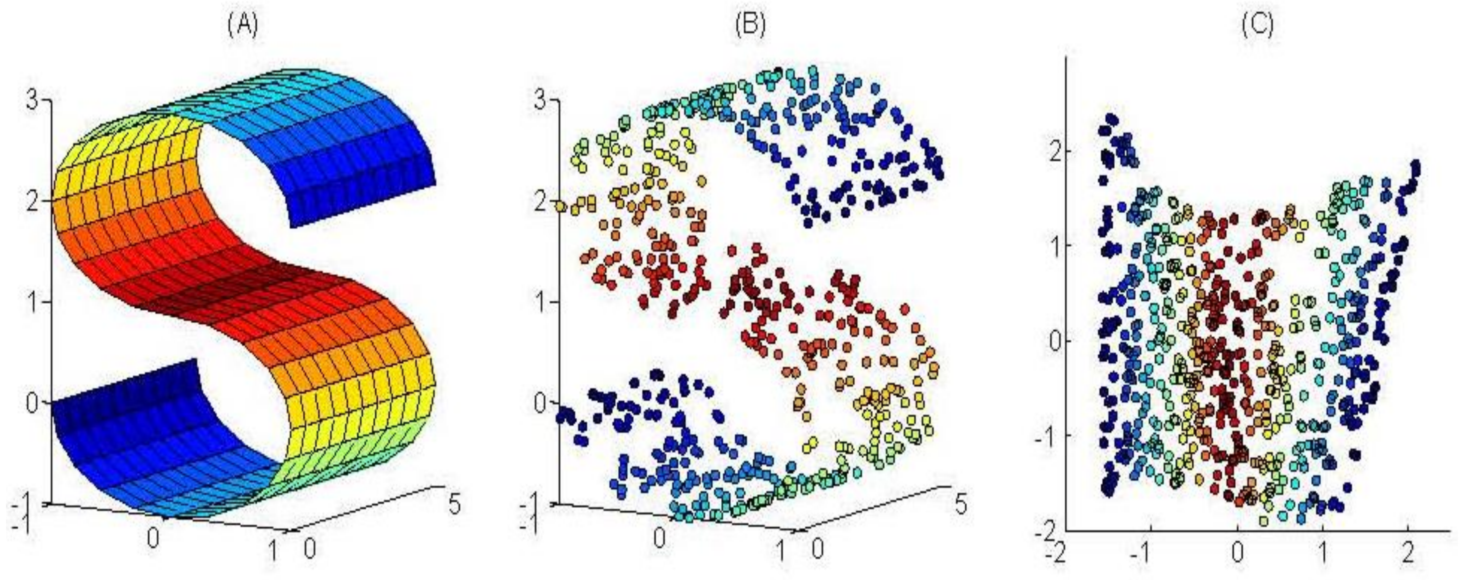
1. 构造样本的ε近邻或k近邻图，连接近邻样本节点，计算相连节点之间的（欧氏）距离$d_G(i,j)$，不相连节点之间$d_G(i,j)=\infty$;
2. 计算测地距离：（Dijkstra算法）

$$d_G(i,j)=\min_{k=1,..,n}\left(d_G(i,j),d_G(i,k)+d_G(k,j)\right)$$

3. $D=\left(d_G(i,j)\right)_{n\times n}$，用NMDS计算低维空间映射。

LLE：Locally Linear Embedding

- **LLE的思想：** 样本分布在一个嵌入于高维空间中的非线性流形，连续非线性流形的局部可以用一个线性流形逼近。



LLE算法

- LLE算法分成两个步骤完成：
  1. 在局部线性流形上计算每个样本的线性表示；
  2. 保持局部线性流形的拓扑不变性，向低维空间映射样本点。

- **LLE算法**
  1. 计算每个样本点的K近邻，求解由K个近邻样本点线性表示当前样本点的最优组合系数：
     ① 由$\mathbf{x}_i$的K近邻$\mathbf{x}^1, \cdots, \mathbf{x}^K$计算局部协方差矩阵$\mathbf{\Sigma}_i$：

$$\mathbf{\Sigma}_i^{jk} = \left(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}^j\right)^t \left(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}^k\right)$$

LLE算法

② 对应$\mathbf{x}^1, \cdots, \mathbf{x}^K$的线性组合系数（如$\mathbf{\Sigma}_i$奇异，则正则化）

$$\mathbf{w}_i = \frac{\mathbf{\Sigma}_i^{-1}\mathbf{e}}{\mathbf{e}^t\mathbf{\Sigma}_i^{-1}\mathbf{e}}$$

③ 扩展$\mathbf{w}_i$至n维矢量，非K近邻样本处置0；

④ 以$\mathbf{w}_i$为行矢量构成局部线性组合系数矩阵$\mathbf{W}$。

2. 计算局部保持的低维映射

① 由$\mathbf{W}$计算矩阵$\mathbf{M}$：

$$\mathbf{M} = (\mathbf{I} - \mathbf{W})^{\mathrm{t}}(\mathbf{I} - \mathbf{W})$$

② 计算M的最小$d+1$个特征值和特征矢量，以第2至$d+1$个特征矢量作为行矢量构造矩阵$\mathbf{Y}$；

③ $\mathbf{Y}$的列矢量即为n个样本的LLE映射结果。

局部重构系数矩阵

- 令$\mathbf{x}$的K个近邻为：$\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_K$，求解如下优化问题：

$$\min_{\mathbf{w}} \left\| \mathbf{x} - \sum_{j=1}^{K} w_j \mathbf{x}_j \right\|^2$$

约束： $\sum_{j=1}^{K} w_j = 1$

- 写成矩阵形式：

$$\left\| \mathbf{x} - \sum_{j=1}^{K} w_j \mathbf{x}_j \right\|^2 = \left\| \sum_{j=1}^{K} w_j (\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \right\|^2 = \sum_{j,k=1}^{K} w_j w_k (\mathbf{x} - \mathbf{x}_j)^t (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)$$

- 优化问题转化为：

$$\min_{\mathbf{w}} \mathbf{w}_t \mathbf{\Sigma} \mathbf{w}$$

约束：

$$\mathbf{w}^t \mathbf{e} = 1$$

局部重构系数矩阵

- 构造拉格朗日函数：

$$L(\mathbf{w}) = \mathbf{w}^t \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{w} - \lambda(\mathbf{w}^t \mathbf{e} - 1)$$

$$\frac{\partial L(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} = 2\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{w} - \lambda \mathbf{e} = \mathbf{0}, \qquad \mathbf{w} = \frac{\lambda}{2} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{e}$$

- 代入约束$\mathbf{w}^t \mathbf{e} = 1$，得到：

$$\lambda = \frac{2}{\mathbf{e}^t \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{e}}$$

- 因此：

$$\mathbf{w} = \frac{\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{e}}{\mathbf{e}^t \, \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{e}}, \qquad w_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^{K} \boldsymbol{\Sigma}_{jk}^{-1}}{\sum_{m,n=1}^{K} \boldsymbol{\Sigma}_{mn}^{-1}}$$

局部拓扑保持的低维映射

- **映射的思想**：映射之前和映射之后的样本具有同样的邻域关系，K个近邻相同，线性组合系数$\mathbf{W}$相同。
- **优化问题**：最小均方误差

$$\min_{\mathbf{y}_1,\dots,\mathbf{y}_n} \sum_{i=1}^{n} \left\| \mathbf{y}_i - \sum_j w_{ij} \mathbf{y}_j \right\|^2$$

- 优化问题的解：对于任意的平移、旋转和尺度缩放是不适定的，需要引入约束条件：

$$\sum_i \mathbf{y}_i = \mathbf{0}, \qquad \frac{1}{\mathrm{n}} \sum_i \mathbf{y}_i \mathbf{y}_i^t = \mathbf{I}$$

局部拓扑保持的低维映射

- 由于：

$$\sum_{i=1}^{n}\left\|\mathbf{y}_i-\sum_{j}w_{ij}\mathbf{y}_j\right\|^2=\sum_{i}\left(\mathbf{y}_i-\sum_{j}w_{ij}\mathbf{y}_j\right)^t\left(\mathbf{y}_i-\sum_{j}w_{ij}\mathbf{y}_j\right)$$
$$=\sum_{i}\left(\mathbf{y}_i^t\mathbf{y}_i-\sum_{j}w_{ij}\mathbf{y}_j^t\mathbf{y}_i-\sum_{j}w_{ij}\mathbf{y}_i^t\mathbf{y}_j+\sum_{j,k}w_{ij}w_{ik}\mathbf{y}_j^t\mathbf{y}_k\right)$$
$$=\sum_{i,j}\left(\delta_{ij}-w_{ij}-w_{ji}+\sum_{k}w_{ki}w_{kj}\right)\mathbf{y}_i^t\mathbf{y}_j$$

- 定义矩阵：

$$\mathbf{M}=\mathbf{I}-\mathbf{W}-\mathbf{W}^t+\mathbf{W}^t\mathbf{W}=(\mathbf{I}-\mathbf{W})^{\mathrm{t}}(\mathbf{I}-\mathbf{W})$$

- 有：

$$\sum_{i=1}^{n}\left\|\mathbf{y}_i-\sum_{j}w_{ij}\mathbf{y}_j\right\|^2=\sum_{i,j}\mathbf{M}_{ij}\mathbf{y}_i^t\mathbf{y}_j$$

局部拓扑保持的低维映射

- 定义变换之后的样本矩阵：

$$\mathbf{Y} = (\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_n)_{d\times n} = \begin{pmatrix} \mathbf{Y}_1^t \\ \vdots \\ \mathbf{Y}_d^t \end{pmatrix}_{d\times n}$$

- 优化目标变为：

$$\sum_{i,j} \mathbf{M}_{ij}\mathbf{y}_i^t\mathbf{y}_j = \sum_{i,j}\sum_{k=1}^{d} \mathbf{M}_{ij} y_{ik} y_{jk} = \sum_{k=1}^{d} \mathbf{Y}_k^t \mathbf{M} \mathbf{Y}_k$$

- 约束变为：

$$\sum_i \mathbf{y}_i = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{Y}_k^t \mathbf{e} = \mathbf{0}$$

$$\frac{1}{n}\mathbf{Y}\mathbf{Y}^t = \frac{1}{n}\sum_i \mathbf{y}_i\mathbf{y}_i^t = \mathbf{I} \Leftrightarrow \mathbf{Y}_i^t\mathbf{Y}_j = \begin{cases} n, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

局部拓扑保持的低维映射

- 重写优化问题：

$$\min_{\mathbf{Y}_1,\dots,\mathbf{Y}_d} \sum_{k=1}^{d} \mathbf{Y}_k^t \mathbf{M} \mathbf{Y}_k$$

约束：

$$\mathbf{Y}_k^t \mathbf{e} = 0,\ \ k = 1, \dots, d$$

$$\mathbf{Y}_i^t \mathbf{Y}_j = \begin{cases} n, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases},\ \ i, j = 1, \dots, d$$

- 问题的解：$\mathbf{Y}_1, \cdots, \mathbf{Y}_d$是矩阵$\mathbf{M}$的特征矢量。

局部拓扑保持的低维映射

- 矩阵$\mathbf{M}$是一个Laplacian矩阵：

$$\sum_j M_{ij} = \sum_j \left(\delta_{ij} - w_{ij} - w_{ji} + \sum_k w_{ki} w_{kj} \right)$$

$$= 1 - 1 - \sum_j w_{ji} + \sum_{j,k} w_{ki} w_{kj} = 0$$

- 因此：$\mathbf{M}$的最小特征值为0，对应特征矢量为$\mathbf{e}$，不满足约束$\mathbf{Y}_k^t \mathbf{e} = 0$。
- 而$\mathbf{M}$为对称矩阵，因此其它特征矢量与$\mathbf{e}$正交。优化问题的解为第2至$d+1$个最小特征矢量。

LLE的相似图

- **相似矩阵**：矩阵$\mathbf{M}$是Laplacian矩阵，显然就可以由$\mathbf{M}$构造相似矩阵$\boldsymbol{\Delta}$

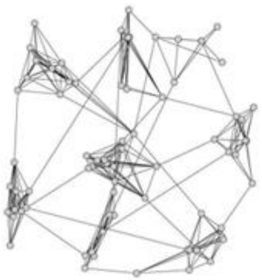
$$\mathbf{M} = \mathbf{I} - \mathbf{W} - \mathbf{W}^t + \mathbf{W}^t\mathbf{W}$$

$$\boldsymbol{\Delta} = \mathbf{W} + \mathbf{W}^t - \mathbf{W}^t\mathbf{W}$$

- 样本i和j之间的相似度为：

$$\delta_{ij} = w_{ij} + w_{ji} - \sum_k w_{ki}w_{kj}$$

谱方法小结



基于图的几何解释

⇩

邻接矩阵上的代价函数

⇩

基于L矩阵的优化问题

⇩

基于谱的求解方法

相似/邻接矩阵$\mathbf{W} = (w_{ij})$

$$\mathbf{D} = diag\left(\sum_{j=1}^{n} w_{ij}\right), \quad \mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{W}$$

$$\mathbf{f}^t L\mathbf{f} = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}\left(f_i - f_j\right)^2$$

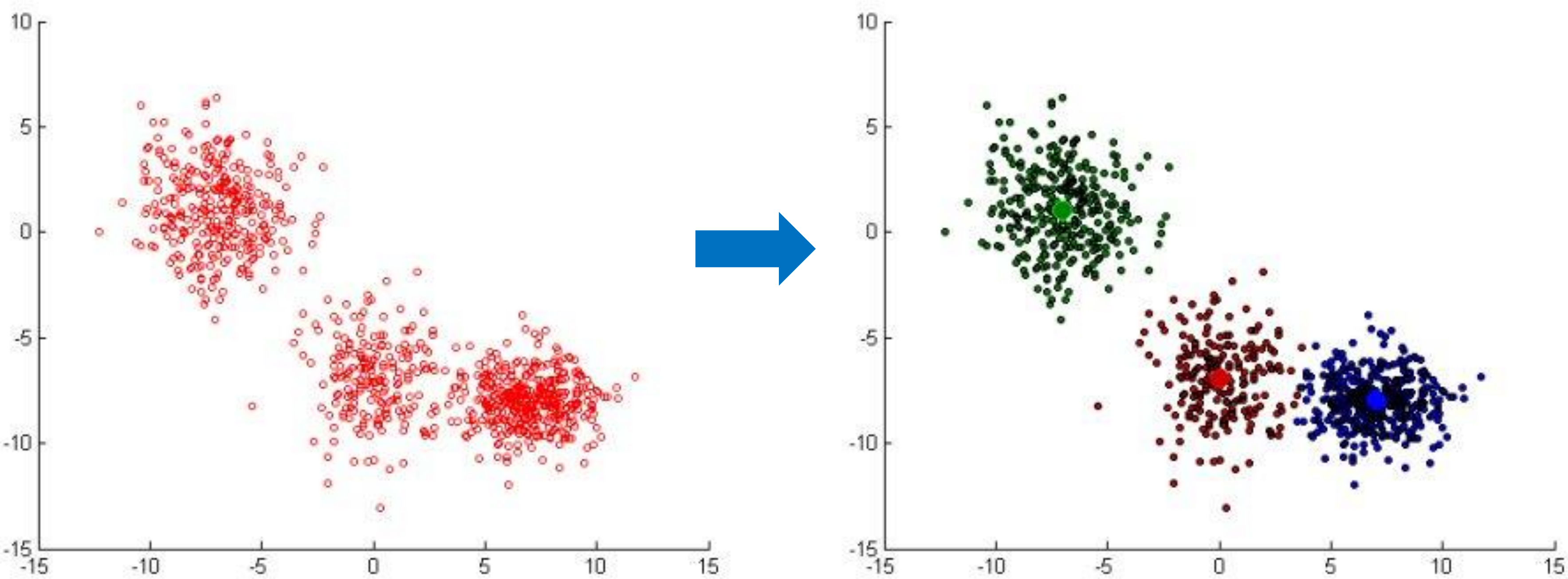
$$\min \sum_k \mathbf{f}_k^t L\mathbf{f}_k \qquad s.t.\mathbf{f}_k^t B\mathbf{f}_k = d, \cdots$$

拉格朗日乘子法、广义瑞利商

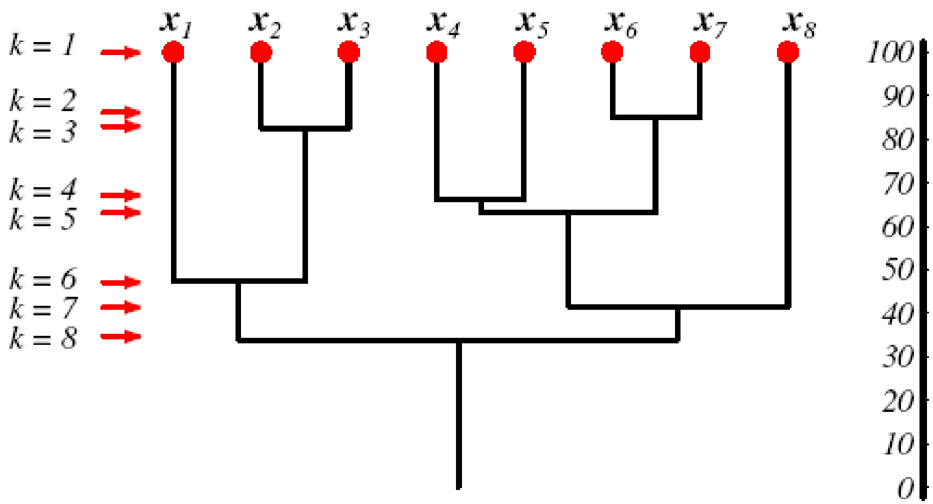
L的特征值、特征向量

聚类和聚类分析

- 聚类：是将数据分类到不同的类或者簇(Cluster)的过程，使得同一个簇中的对象具有最大的***相似性***，不同簇间的对象具有最大的***相异性***。



Connectivity based clustering



Hierarchical Clustering

- 初始化：每个样本作为一个单独的聚类，$C_i = \{\mathbf{x}_i\}$，$i = 1, \cdots, n$。
- 循环，直到所有样本属于一个聚类为止：
  - □ 寻找当前聚类中最相近的两个聚类：

$$d\left(C_i, C_j\right) = \min_{r,s} d(C_r, C_s)$$

  - □ 删除聚类C_i和C_j，增加新的聚类$C_q = C_i \cup C_j$。
- 输出：样本的合并过程，形成层次化谱系。

类与类之间相似性度量

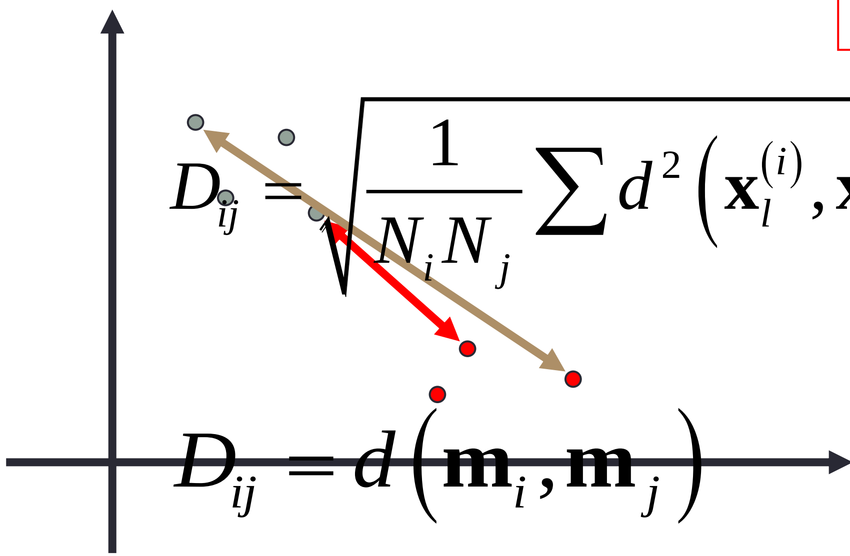
- 最短距离：$$D_{ij} = \min\left(d\left(\mathbf{x}_l^{(i)}, \mathbf{x}_k^{(j)}\right)\right)$$

为第 i 类中所有样本与第 j 类中所有样本之间距离的最小值

- 最长距离：$$D_{ij} = \max\left(d\left(\mathbf{x}_l^{(i)}, \mathbf{x}_k^{(j)}\right)\right)$$

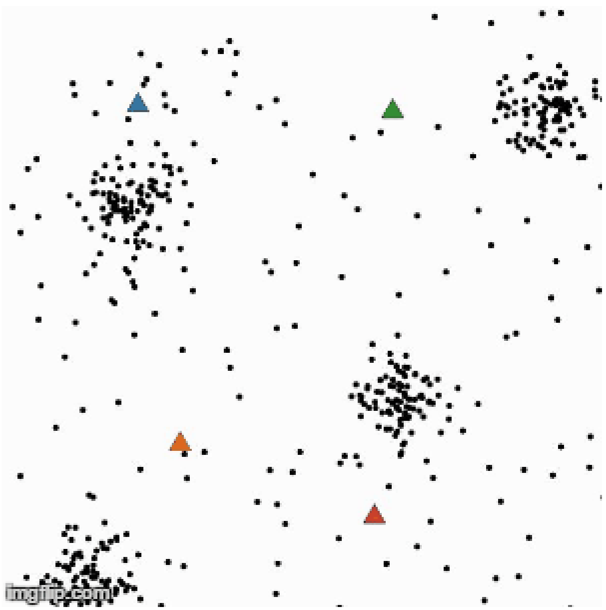
为第 i 类中所有样本与第 j 类中所有样本之间距离的最大值

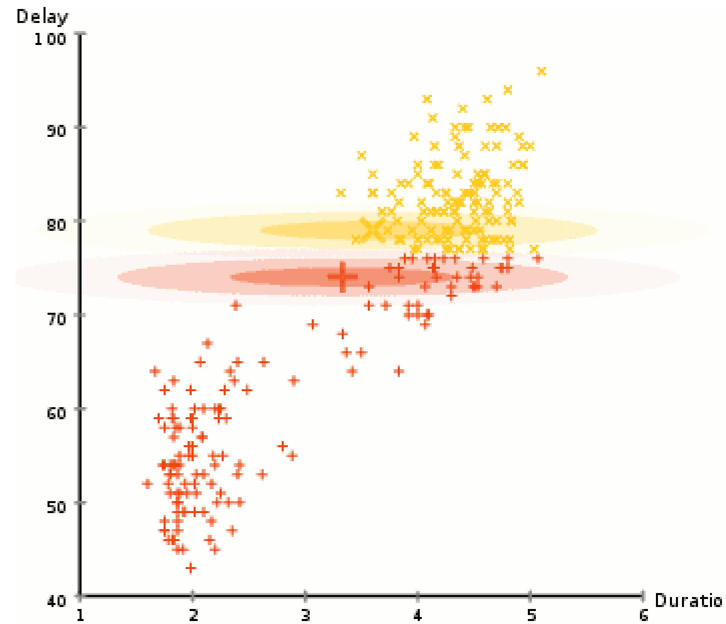
- 平均距离：$$D_{ij} = \sqrt{\frac{1}{N_i N_j}\sum d^2\left(\mathbf{x}_l^{(i)}, \mathbf{x}_k^{(j)}\right)}$$



- 平均样本：$$D_{ij} = d\left(\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_j\right)$$

Centroid-based clustering





K-均值

混合高斯

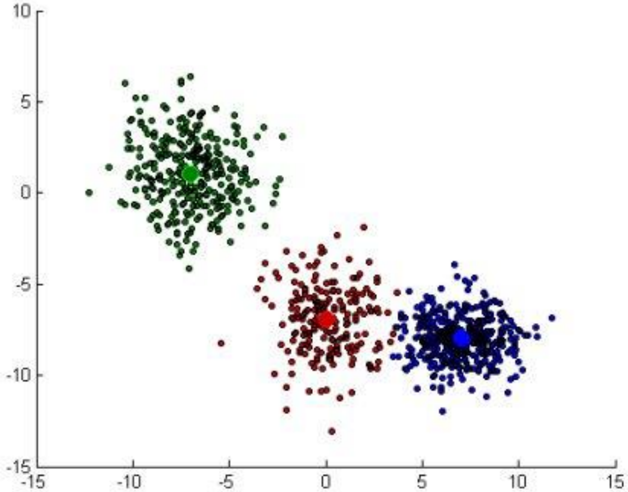
Centroid-based clustering

K-means Clustering

- 初始化：随机选择K个聚类均值$\mathbf{m}_j$，$j = 1, \cdots, K$；
- 循环，直到K个均值都不再变化为止：
  - $C_j = \emptyset$，$j = 1, \cdots, K$；
  - for i = 1 to n

    $$k = \underset{1 \le j \le K}{\operatorname{argmin}} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_j\|, \quad C_k = C_k \cup \{\mathbf{x}_i\}$$
  - end for
  - 更新K个聚类的均值：

    $$\mathbf{m}_j = \frac{1}{n_j} \sum_{\mathbf{x} \in C_j} \mathbf{x}, \quad j = 1, \cdots, K$$
- 输出：聚类$\{C_1, \cdots, C_K\}$



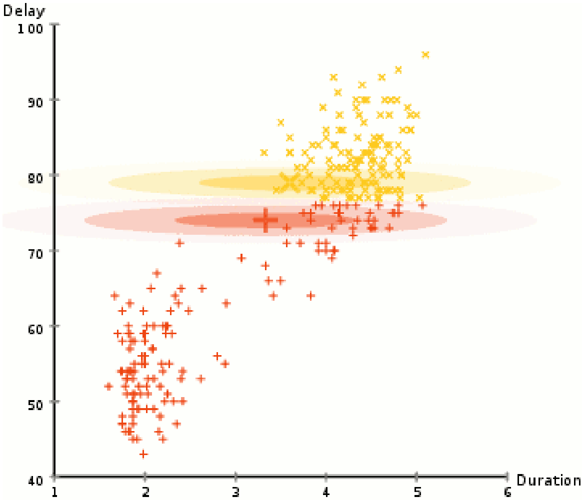
Distribution-based clustering

- **样本的产生过程**：以概率$P(\omega_j)$决定其所属类别ω_j，根据概率密度$p(\mathbf{x}|\omega_j,\boldsymbol{\theta}_j)$生成一个具体的样本$\mathbf{x}$。
- **混合密度模型**：样本$\mathbf{x}$的产生概率密度为

$$p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{j=1}^{K} p(\mathbf{x}|\omega_j,\boldsymbol{\theta}_j)P(\omega_j)$$

- **混合高斯模型：**

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{K} a_i N(\mathbf{x};\boldsymbol{\mu}_i,\boldsymbol{\Sigma}_i)$$



- **参数估计**：EM算法(Expectation-Maximization)

高斯混合模型

复杂的概率密度函数：可以由多个简单的密度函数混合构成：

$$p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{k=1}^{K} a_k p_k(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}_k), \qquad a_k > 0, \quad \sum_{k=1}^{K} a_k = 1$$

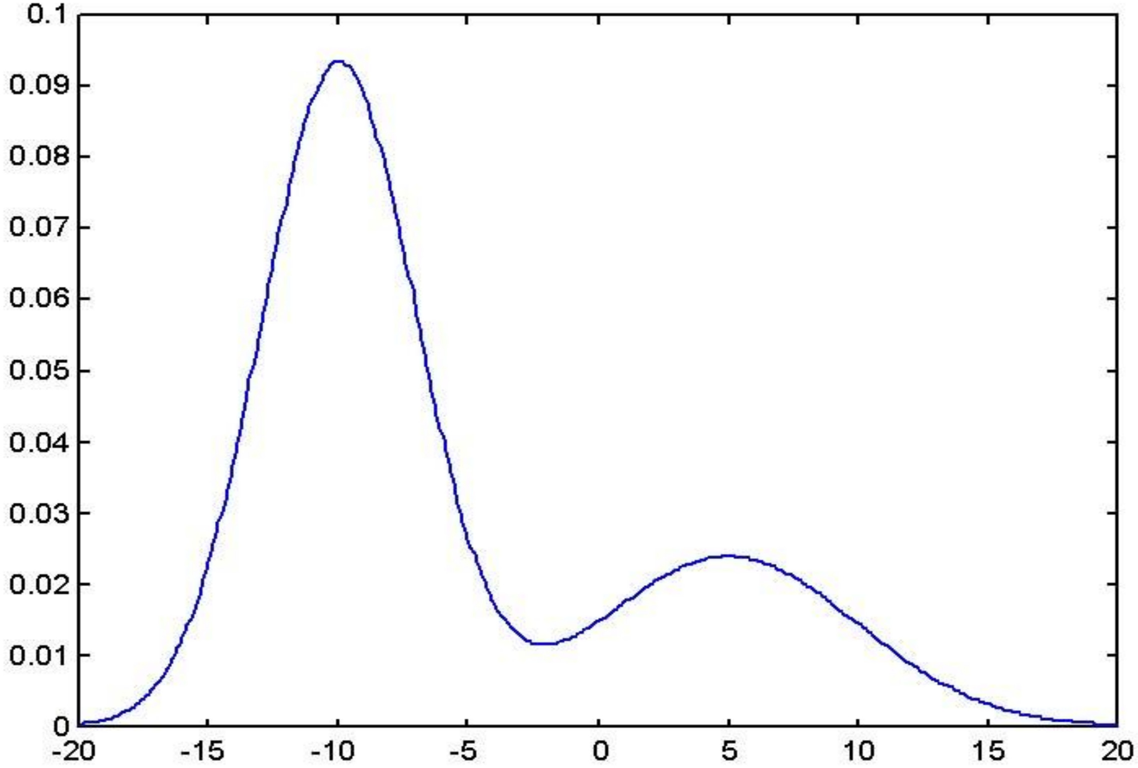
高斯混合模型(GMM，Gauss Mixture Model)：由多个高斯密度函数混合，用于逼近复杂的概率密度

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{K} a_k N(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)$$

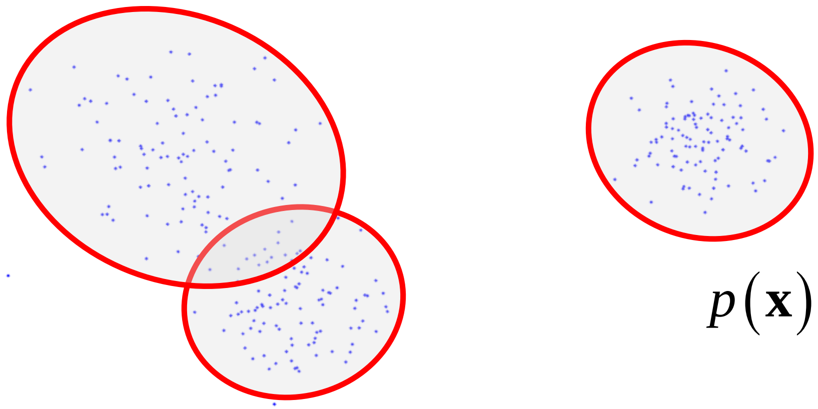
一定条件下，GMM能够以任意精度逼近任意概率密度函数！

两个高斯函数的混合

$$p(x) = 0.7N(-10,2) + 0.3N(5,3)$$



GMM模型的样本产生、参数估计



$$p(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{3} a_k N(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)$$

样本产生：

1）以组合系数 a_k 作为先验概率，随机选择一个高斯分量k

2）利用该分量 $N(\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)$ 产生样本

参数估计：

1）样本 $\mathbf{x}_i$ 是由哪个分量产生的，记为 $y_i \in \{1, 2, \cdots, K\}$

2）高斯分量的先验概率 及参数 $\boldsymbol{\theta}_k = \{a_k, \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k\}$

参数估计： 1）样本 $\mathbf{x}_i$ 是由哪个分量产生的，记为 $y_i \in \{1,2,\cdots,K\}$

2）高斯分量的先验概率及参数 $\boldsymbol{\theta}_k = \{a_k, \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k\}$

已知 $\boldsymbol{\theta}_k$，估计 y_i：

计算分量 k 产生 $\mathbf{x}_n$ 的概率

$$p(\mathbf{x}_i | \boldsymbol{\theta}_k) = N(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)$$

根据最大后验概率估计 y_i

$$y_i = \arg\max_k \alpha_k p(\mathbf{x}_i | \boldsymbol{\theta}_k)$$

已知 y_i，估计 $\boldsymbol{\theta}_k$：单个高斯分量参数估计

$$\alpha_k = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \underline{I(y_i = k)}$$

示性函数 $= \begin{cases} 1, & y_i = k \\ 0, & y_i \neq k \end{cases}$

$$\boldsymbol{\mu}_k = \sum_{i=1}^{n} I(y_i = k)\mathbf{x}_i \Big/ \sum_{i=1}^{n} I(y_i = k)$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_k = \sum_{i=1}^{n} I(y_i = k)(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k)(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k)^t \Big/ \sum_{i=1}^{n} I(y_i = k)$$

两者都未知时：先随机初始化高斯分量参数 $\boldsymbol{\theta}^0$，再迭代优化

根据第t次迭代得到的参数 $\boldsymbol{\theta}^t$， 估计样本集的产生分量 $\mathbf{y}^t$

根据 $\mathbf{y}^t$ 估计新参数 $\boldsymbol{\theta}^{t+1}$

参数估计： 1）样本 $\mathbf{x}_i$ 是由哪个分量产生的，记为 $y_i \in \{1, 2, \cdots, K\}$

2）高斯分量的先验概率及参数 $\boldsymbol{\theta}_k = \{a_k, \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k\}$

两者都未知时：先随机初始化高斯分量参数 $\boldsymbol{\theta}^0$，再迭代优化

根据第t次迭代得到的参数$\boldsymbol{\theta}^t$， 估计样本集的产生分量$\mathbf{y}^t$

根据 $\mathbf{y}^t$ 估计新参数$\boldsymbol{\theta}^{t+1}$

当GMM的混合系数相等、协方差矩阵为相同对角阵时——K均值聚类

示性函数改进： $\mathbf{y}^t$ 是一个不准确估计，采用概率替代示性函数更恰当：

$$I(y_i = k) = P(y_i = k)$$

$$= a_k N(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) \Big/ \sum_{j=1}^{K} a_j N(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)$$

参数估计： 1）样本 $\mathbf{x}_i$ 是由哪个分量产生的，记为 $y_i \in \{1,2,\cdots,K\}$

2）高斯分量的先验概率及参数 $\boldsymbol{\theta}_k = \{a_k, \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k\}$

GMM参数估计：先随机初始化高斯分量参数 $\boldsymbol{\theta}^0$，再迭代优化

根据第t次迭代得到的参数 $\boldsymbol{\theta}^t$， 估计样本集的产生分量 $\mathbf{y}^t$

根据 $\mathbf{y}^t$ 估计新参数 $\boldsymbol{\theta}^{t+1}$

已知 $\boldsymbol{\theta}_k$，估计 y_i：

计算 y_i 由分量 k 产生的概率

$$P(y_i = k) = \frac{a_k N(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)}{\sum_{j=1}^{K} a_j N(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)}$$

已知 y_i，估计 $\boldsymbol{\theta}_k$：单个高斯分量参数估计

$$\alpha_k = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} P(y_i = k)$$

$$\boldsymbol{\mu}_k = \sum_{i=1}^{n} P(y_i = k)\mathbf{x}_i \Big/ \sum_{i=1}^{n} P(y_i = k)$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_k = \sum_{i=1}^{n} P(y_i = k)(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k)(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k)^t \Big/ \sum_{i=1}^{n} P(y_i = k)$$

参数估计： 1）样本 $\mathbf{x}_i$ 是由哪个分量产生的，记为 $y_i \in \{1, 2, \cdots, K\}$

2）高斯分量的先验概率及参数 $\boldsymbol{\theta}_k = \{a_k, \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k\}$

GMM学习算法

- 设置模型中高斯分量的个数 K，随机初始参数 $\boldsymbol{\theta}$

  设置收敛精度 η；
- 循环： $t \leftarrow t+1$
  - □ 计算训练样本由各分量产生的概率 $P(y_i = k)$；
  - □ 重新估计参数 $\boldsymbol{\theta}$；
  - □ 计算似然函数值 $L(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^{n} p(\mathbf{x}_i | \boldsymbol{\theta})$；
- 直到满足收敛条件： $L_t(\boldsymbol{\theta}) - L_{t-1}(\boldsymbol{\theta}) < \eta$

K 的选择：越大拟合能力越强，结构风险越大

参数初始化：

$$a_k > 0, \quad \sum_{k=1}^{K} a_k = 1$$

$\boldsymbol{\Sigma}_k$ 为对称正定矩阵

收敛条件：似然函数变化小于阈值 η

计算稳定性：
对数阈上计算，克服概率过小
样本过少时，约束为对角阵
当协方差矩阵为奇异阵时，叠加小对角阵

期望最大化算法 (Expectation Maximization EM)

样本集合由两部分构成D={X,Y}，其中X已知，Y未知

$$l(\boldsymbol{\theta}) = \ln p(D|\boldsymbol{\theta}) = \ln p(X,Y|\boldsymbol{\theta})$$

Y未知，无法优化；考虑Y所有可能情况下的对数似然函数：

$$Q(\boldsymbol{\theta}) = E_Y\left[\ln p(X,Y|\boldsymbol{\theta})\right] = \int \ln p(X,Y|\boldsymbol{\theta})\, p(Y)\, dY$$

$p(Y)$ 仍然未知，首先设置 $\boldsymbol{\theta}$ 的猜测值 $\boldsymbol{\theta}^g$ ，在已知 X ，$\boldsymbol{\theta}^g$ 的条件下估计 $p(Y|X,\boldsymbol{\theta}^g)$ 替代 $p(Y)$：

E步: $$Q(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{\theta}^g) = \int \ln p(X,Y|\boldsymbol{\theta})\, p(Y|X,\boldsymbol{\theta}^g)\, dY$$

用 $Q(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{\theta}^g)$ 替代对数似然函数进行优化

M步: $$\boldsymbol{\theta}^* = \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} Q(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{\theta}^g)$$

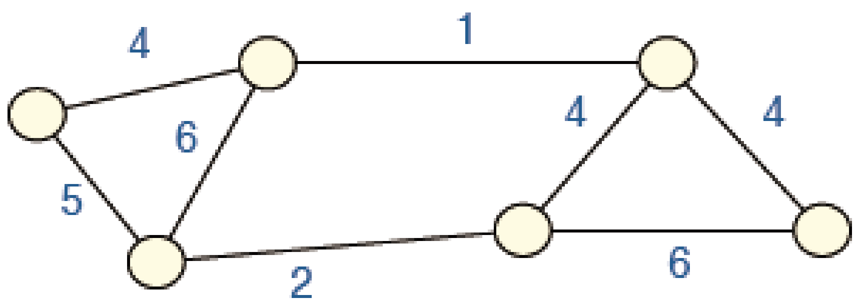
；表示这是关于 $\boldsymbol{\theta}$ 的函数
$\boldsymbol{\theta}^g$是一个相关的固定值

$\boldsymbol{\theta}^*$是假设了 $\boldsymbol{\theta}^g$ 之后的一个改进值

Graph-based clustering

- **相似图**：样本集$\{\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_n\}$可以表示为相似图$G = (V, E)$。连接两个样本的边$e_{ij}$赋予权重$w_{ij}$表示两个样本之间的相似度。图G也可以用邻接矩阵$W = \{w_{ij}\}_{i,j=1,\cdots,n}$描述。
- **无交叠子集$A, B \subset V$之间的连接**：

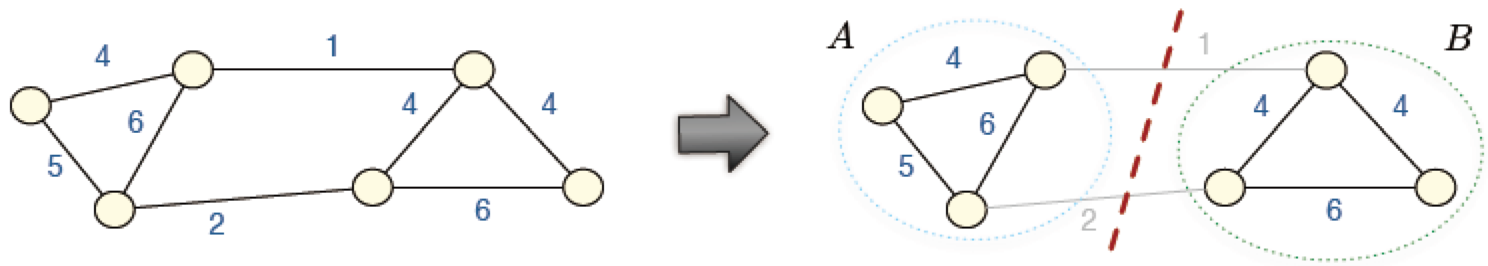
$$W(A, B) = \sum_{i \in A, j \in B} w_{ij}$$



最小割(mincut)

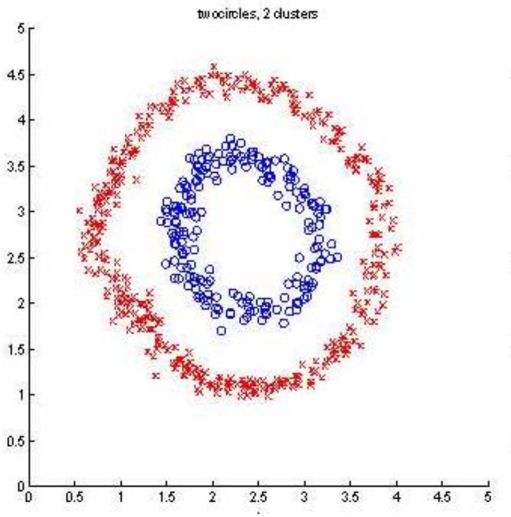
- **最小割**：在相似图上对样本集的聚类可以看作是将图的节点划分为k个子集$A_1,\cdots,A_k$，使得子集之间的连接权重最小

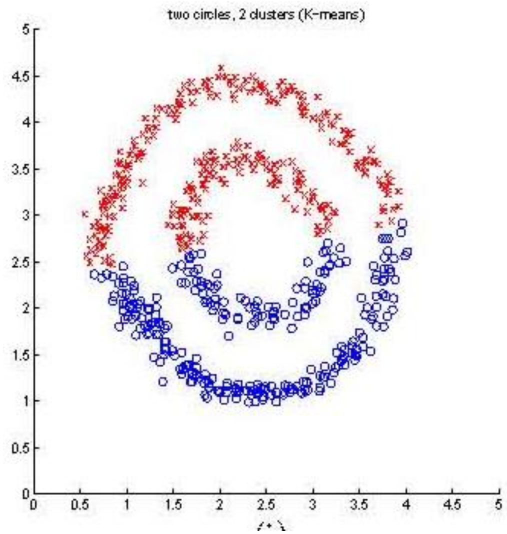
$$\min_{A_1,\cdots,A_k} Cut(A_1,\cdots,A_k)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k}W(A_i,\bar{A}_i)$$

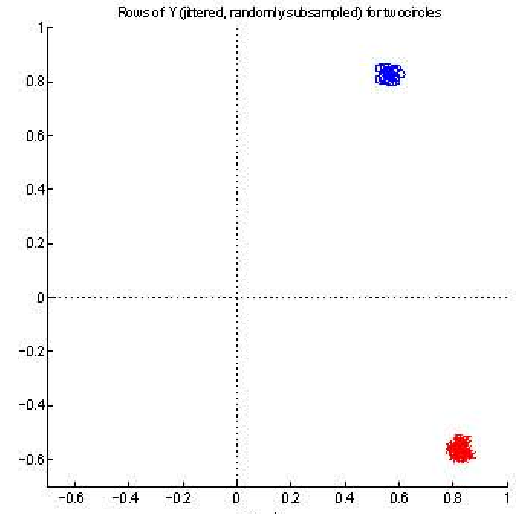


- 最小割 → 最大流算法

谱聚类示例







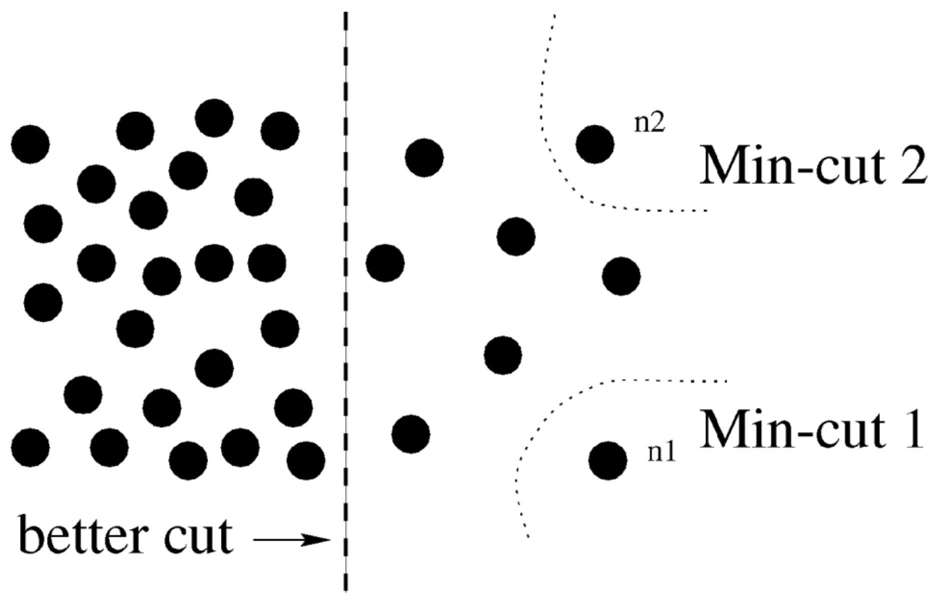
原样本分布

K均值聚类

特征值矩阵的行矢量

Normalized Cut

- MinCut算法在实践应用中很容易造成将单个样本划分为一个子集的现象。



Normalized Cut

- **规格化**：用节点子集的大小规格化子集之间的连接。
- **节点的度**：

$$d_i = \sum_{j=1}^{n} w_{ij}$$

- **节点子集的大小**：$A \subset V$

$$|A| = A\text{中节点的个数}$$

$$vol(A) = \sum_{i \in A} d_i$$

Normalized Cut

- **Normalized Cut**：

$$RatioCut(A_1,\cdots,A_k)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k}\frac{W(A_i,\bar{A}_i)}{|A_i|}=\sum_{i=1}^{k}\frac{Cut(A_i,\bar{A}_i)}{|A_i|}$$

个数归一化

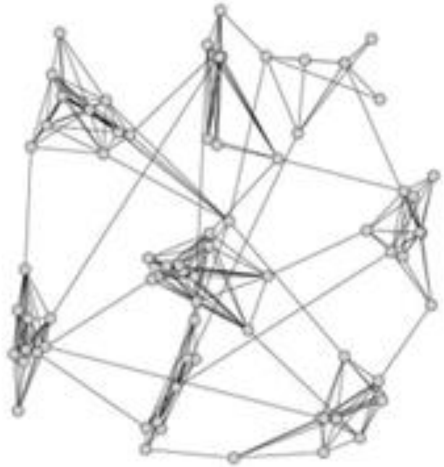
$$NCut(A_1,\cdots,A_k)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k}\frac{W(A_i,\bar{A}_i)}{vol(A_i)}=\sum_{i=1}^{k}\frac{Cut(A_i,\bar{A}_i)}{vol(A_i)}$$

“度”归一化

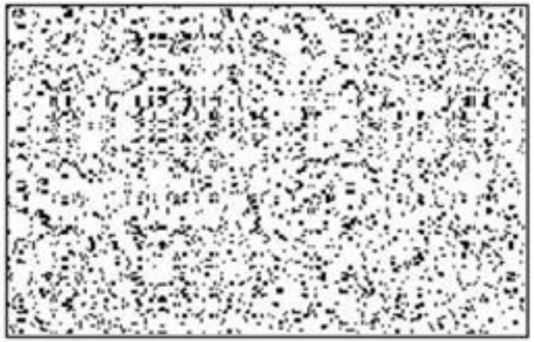
- Normalized Cut的求解是一个NP完全问题。

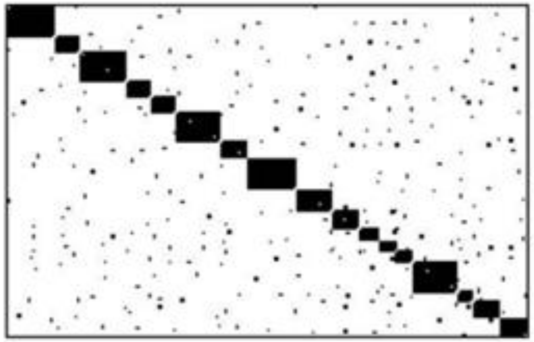
相似图和邻接矩阵

相似图：



邻接矩阵：





Laplacian矩阵的性质

1. **对任意矢量f，成立：**

$$\mathbf{f}^t L\mathbf{f} = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}\left(f_i - f_j\right)^2$$

证明：

$$\mathbf{f}^t L\mathbf{f} = \mathbf{f}^t D\mathbf{f} - \mathbf{f}^t W\mathbf{f} = \sum_{i=1}^{n} d_i f_i^2 - \sum_{i,j=1}^{n} f_i f_j w_{ij}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{n} d_i f_i^2 - 2\sum_{i,j=1}^{n} f_i f_j w_{ij} + \sum_{j=1}^{n} d_j f_j^2\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij} f_i^2 - 2\sum_{i,j=1}^{n} f_i f_j w_{ij} + \sum_{i,j=1}^{n} w_{ij} f_j^2\right)$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}\left(f_i - f_j\right)^2$$

Laplacian矩阵的性质

2. **L为对称的半正定矩阵**

证明：D和W为对称矩阵，L为对称矩阵，实对称矩阵为半正定矩阵。

3. **L的最小特征值为0，对应的特征矢量为$\mathbf{1}$**

证明：$(D-W)\mathbf{1}=\mathbf{0}$，因此0为特征值，$\mathbf{1}$为特征矢量。半正定矩阵，所以0为最小特征值。

RatioCut的近似谱求解: K=2

- **定义**: n维矢量f（指示矢量）

$$f_i = \begin{cases} \sqrt{|\bar{A}|/|A|}, & v_i \in A \\ -\sqrt{|A|/|\bar{A}|}, & v_i \in \bar{A} \end{cases}$$

- **f与RatioCut的关系:**

$$\begin{aligned}
\mathbf{f}^t L\mathbf{f} &= \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}\left(f_i - f_j\right)^2 \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i\in A, j\in\bar{A}} w_{ij}\left(\sqrt{\frac{|\bar{A}|}{|A|}} + \sqrt{\frac{|A|}{|\bar{A}|}}\right)^2 + \frac{1}{2}\sum_{i\in\bar{A}, j\in A} w_{ij}\left(-\sqrt{\frac{|\bar{A}|}{|A|}} - \sqrt{\frac{|A|}{|\bar{A}|}}\right)^2 \\
&= cut\left(A,\bar{A}\right)\left(\frac{|\bar{A}|}{|A|} + \frac{|A|}{|\bar{A}|} + 2\right) \\
&= cut\left(A,\bar{A}\right)\left(\frac{|A|+|\bar{A}|}{|A|} + \frac{|A|+|\bar{A}|}{|\bar{A}|}\right) \\
&= |V|\, RatioCut\left(A,\bar{A}\right)
\end{aligned}$$

RatioCut的近似谱求解: K=2

- **f与矢量1正交:**

$$\sum_{i=1}^{n} f_i = \sum_{i\in A}\sqrt{\frac{|\bar{A}|}{|A|}} - \sum_{i\in \bar{A}}\sqrt{\frac{|A|}{|\bar{A}|}} = |A|\sqrt{\frac{|\bar{A}|}{|A|}} - |\bar{A}|\sqrt{\frac{|A|}{|\bar{A}|}} = 0$$

即:

$$\sum_{i=1}^{n} f_i = \mathbf{f}^t\mathbf{1} = 0$$

- **f的长度平方为n:**

$$\|\mathbf{f}\|^2 = \sum_{i=1}^{n} f_i^2 = |A|\frac{|\bar{A}|}{|A|} + |\bar{A}|\frac{|A|}{|\bar{A}|} = |\bar{A}| + |A| = n$$

RatioCut的优化问题

- **严格的优化问题**:

$$\min_{A \subset V} \mathbf{f}^t L \mathbf{f}$$

约束: $\mathbf{f}^t \mathbf{1} = 0$

$$\sum_{i=1}^{n} f_i^2 = n$$

$$f_i = \begin{cases} \sqrt{|\bar{A}|/|A|}, & v_i \in A \\ -\sqrt{|A|/|\bar{A}|}, & v_i \in \bar{A} \end{cases}$$

- 仍然是一个NP问题。

近似的RatioCut的优化问题

- **近似的优化问题**：放松对**f**中元素的离散性约束

$$\min_{\mathbf{f}\in R^n} \mathbf{f}' L \mathbf{f}$$

$$约束: \mathbf{f} \perp \mathbf{1}, \|\mathbf{f}\| = \sqrt{n}$$

- **问题的解:** 对应L第2小特征值的特征矢量
- **证明:**

1. 不考虑正交约束，问题变成Rayleigh商的优化，解是L的最小特征值对应的特征矢量；
2. 最小特征值对应特征矢量为**1**，不满足正交条件，第2小特征值对应特征矢量满足正交条件（L为实对称矩阵）；

k=2 示例

- 将19个样本分成2个聚类。

$x_1=(0,0)^t$, $x_2=(1,0)^t$, $x_3=(0,1)^t$, $x_4=(1,1)^t$,
$x_5=(2,1)^t$, $x_6=(1,2)^t$, $x_7=(2,2)^t$, $x_8=(3,2)^t$,
$x_9=(6,6)^t$, $x_{10}=(7,6)^t$, $x_{11}=(8,6)^t$, $x_{12}=(7,7)^t$,
$x_{13}=(8,7)^t$, $x_{14}=(9,7)^t$, $x_{15}=(7,8)^t$, $x_{16}=(8,8)^t$,
$x_{17}=(9,8)^t$, $x_{18}=(8,9)^t$, $x_{19}=(9,9)^t$

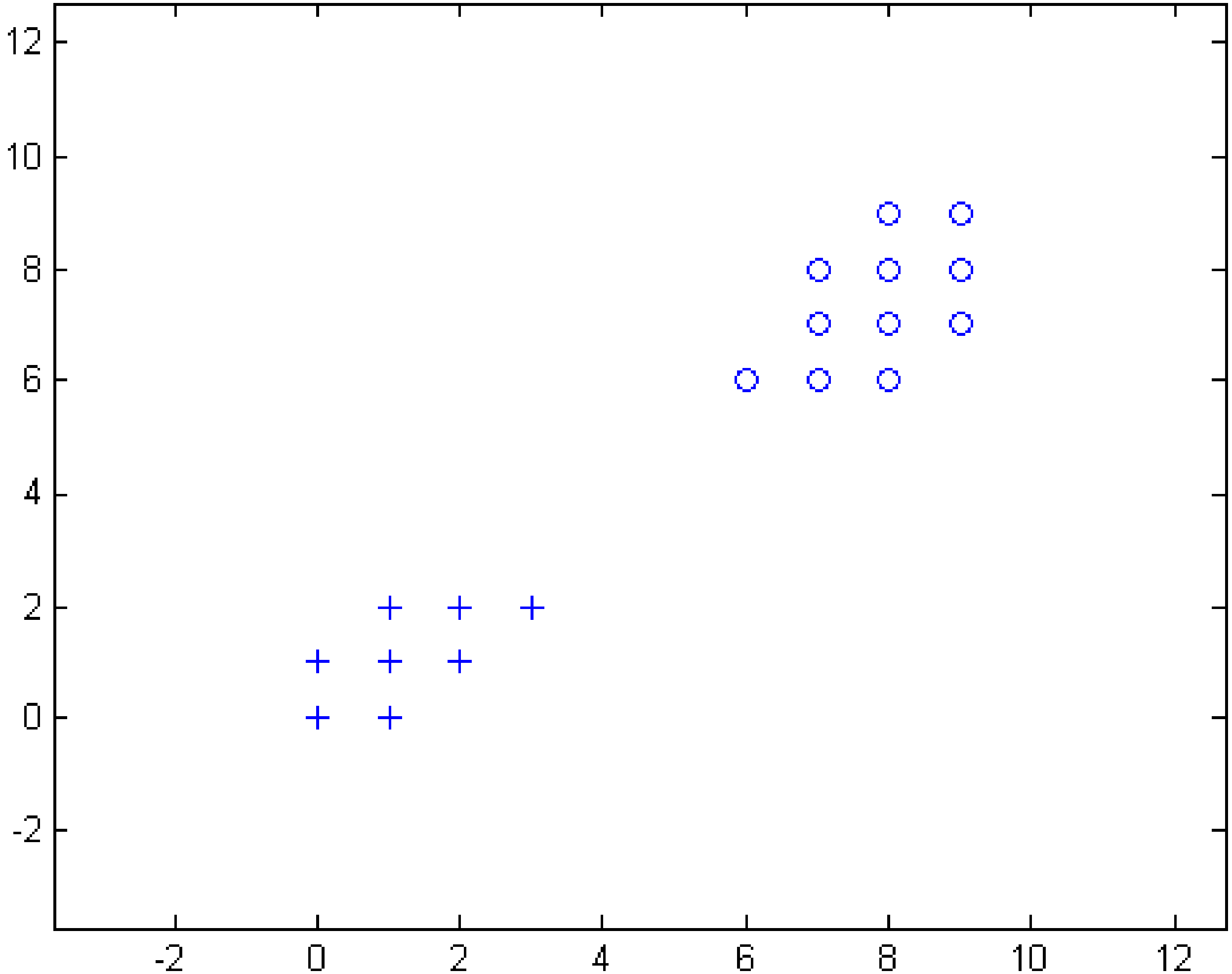
- 特征值

0.0000
0.0682
4.3510
5.1267
5.4904
5.9142
5.9461
6.3080
6.4175
6.4826
6.7696
6.9957
7.3704
7.6983
7.7789
7.9342
8.3716
8.6444
8.8704

特征值前2个特征值对应特征矢量

-0.2294	+0.2740
-0.2294	+0.2728
-0.2294	+0.2731
-0.2294	+0.2715
-0.2294	+0.2694
-0.2294	+0.2699
-0.2294	+0.2655
-0.2294	+0.2553
-0.2294	-0.1838
-0.2294	-0.1920
-0.2294	-0.1954
-0.2294	-0.1953
-0.2294	-0.1968
-0.2294	-0.1978
-0.2294	-0.1969
-0.2294	-0.1977
-0.2294	-0.1984
-0.2294	-0.1985
-0.2294	-0.1991

聚类结果



RatioCut的近似谱求解: K>2

- **定义：** K个指示矢量$\mathbf{h}_k = (h_{1,k}, \cdots, h_{n,K})^t$：
- $$h_{i,k} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{|A_k|}}, & v_i \in A_k \\ 0, & otherwise \end{cases}$$
- **与RatioCut的关系：**

$$\mathbf{h}_k^t L \mathbf{h}_k = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}\left(h_{i,k} - h_{j,k}\right)^2$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\substack{i\in A_k \\ j\in \bar{A}_k}} w_{ij}\left(\frac{1}{\sqrt{|A_k|}}\right)^2 + \frac{1}{2}\sum_{\substack{i\in \bar{A}_k \\ j\in A_k}} w_{ij}\left(-\frac{1}{\sqrt{|A_k|}}\right)^2$$

$$= \frac{1}{|A_k|} Cut\left(A_k, \bar{A}_k\right)$$

$$RatioCut\left(A_1, \cdots, A_K\right) = \sum_{j=1}^{K} \frac{1}{|A_j|} Cut\left(A_j, \bar{A}_j\right) = \sum_{j=1}^{K} \mathbf{h}_j^t L \mathbf{h}_j \quad = \mathrm{Tr}\left(H^t L H\right)$$

例：五个样本，3个指示向量

$$H = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & & \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

将样本从特征空间映射到3维“指示”空间？

RatioCut的优化问题

- **严格的优化问题**：

$$\min_{A_1,\cdots,A_k}\sum_{j=1}^{k}\mathbf{h}_j^t L\mathbf{h}_j$$

约束：

$$\mathbf{h}_i^t\mathbf{h}_j=\begin{cases}1, & i=j\\ 0, & i\neq j\end{cases} \Longrightarrow H^tH=I$$

$$h_{i,j}=\begin{cases}1\Big/\sqrt{|A_j|}, & v_i\in A_j\\ 0, & otherwise\end{cases}$$

$$H^tH=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & & & \\ & & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & & & & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & & \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & & 1\end{pmatrix}$$

- 仍然是NP问题。

近似的RatioCut的优化问题

- 1，放松对**h**的离散性约束，求解连续标签

$$\min_{\mathbf{h}_1,\cdots,\mathbf{h}_k} \sum_{j=1}^{k} \mathbf{h}_j^t L \mathbf{h}_j$$

$$约束:\mathbf{h}_i^t \mathbf{h}_j = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

- h为最小K个特征值对应特征矢量，构成H矩阵

2，标签离散化

H每行是一个样本的k维指示标签（接近离散最优解的连续量）

$$H = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & & \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

对标签进行k均值聚类，获得离散结果

NCut的近似谱求解：K=2

- **定义**：指示矢量f

$$f_i = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{vol(\bar{A})}{vol(A)}}, & v_i \in A \\ -\sqrt{\dfrac{vol(A)}{vol(\bar{A})}}, & v_i \in \bar{A} \end{cases}$$

1. $(D\mathbf{f})^t * \mathbf{1} = 0$

证明：

$$(D\mathbf{f})^t * \mathbf{1} = \sum_{i=1}^{n} d_i f_i$$

$$= \sum_{i \in A} d_i \sqrt{\frac{vol(\bar{A})}{vol(A)}} - \sum_{i \in \bar{A}} d_i \sqrt{\frac{vol(A)}{vol(\bar{A})}}$$

$$= vol(A) * \sqrt{\frac{vol(\bar{A})}{vol(A)}} - vol(\bar{A}) * \sqrt{\frac{vol(A)}{vol(\bar{A})}}$$

$$= 0$$

$$\boxed{vol(A) = \sum_{i \in A} d_i}$$

NCut的近似谱求解：K=2

2. $\mathbf{f}^t D \mathbf{f} = vol(V)$

证明:

$$f_i = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{vol(\bar{A})}{vol(A)}}, & v_i \in A \\ -\sqrt{\dfrac{vol(A)}{vol(\bar{A})}}, & v_i \in \bar{A} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^t D \mathbf{f} &= \sum_{i=1}^{n} d_i f_i^2 \\ &= \sum_{i \in A} d_i \frac{vol(\bar{A})}{vol(A)} + \sum_{i \in \bar{A}} d_i \frac{vol(A)}{vol(\bar{A})} \\ &= vol(\bar{A}) + vol(A) \\ &= vol(V) \end{aligned}$$

$$vol(A) = \sum_{i \in A} d_i$$

NCut的近似谱求解：K=2

$$f_i = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{vol(\bar{A})}{vol(A)}}, & v_i \in A \\ -\sqrt{\dfrac{vol(A)}{vol(\bar{A})}}, & v_i \in \bar{A} \end{cases}$$

3. $\mathbf{f}^t L \mathbf{f} = vol(V) NCut(A, \bar{A})$

证明：

$$\mathbf{f}^t L \mathbf{f} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} w_{ij} \left(f_i - f_j \right)^2$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \in A \\ j \in \bar{A}}} w_{ij} \left(\sqrt{\frac{vol(\bar{A})}{vol(A)}} + \sqrt{\frac{vol(A)}{vol(\bar{A})}} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \in \bar{A} \\ j \in A}} w_{ij} \left(-\sqrt{\frac{vol(\bar{A})}{vol(A)}} - \sqrt{\frac{vol(A)}{vol(\bar{A})}} \right)^2$$

$$= Cut(A, \bar{A}) * \left(\frac{vol(\bar{A})}{vol(A)} + \frac{vol(A)}{vol(\bar{A})} + 2 \right)$$

$$= Cut(A, \bar{A}) * \left(\frac{vol(V)}{vol(A)} + \frac{vol(V)}{vol(\bar{A})} \right)$$

$$= vol(V) NCut(A, \bar{A})$$

$$vol(A) = \sum_{i \in A} d_i$$

NCut的优化问题

- **严格的优化问题**：

$$\min_{A} \mathbf{f}^{t} L \mathbf{f}$$

约束：

$$\left(D\mathbf{f} \right)^{t} \mathbf{1} = 0$$

$$\mathbf{f}^{t} D\mathbf{f} = vol\left(V \right)$$

$$f_i = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{vol\left(\bar{A}\right)}{vol\left(A\right)}}, & v_i \in A \\ -\sqrt{\dfrac{vol\left(A\right)}{vol\left(\bar{A}\right)}}, & v_i \in \bar{A} \end{cases}$$

NCut的近似优化问题

- **近似的优化问题**：放松f的离散性约束

$$\min_{\mathbf{f}} \mathbf{f}^t L \mathbf{f}$$

$$约束: (D\mathbf{f})^t \mathbf{1} = 0$$

$$\mathbf{f}^t D\mathbf{f} = vol(V)$$

- **问题的解**：对应矩阵$(D^{-1}L)$第2小特征值的特征矢量。

证明：

1. 不考虑正交性约束，是一个广义的Rayleigh商问题，解是$(D^{-1}L)$最小特征值对应特征矢量；
2. 最小特征矢量不满足正交性，第2小特征矢量满足。

NCut的近似谱求解：K>2

- **定义**：k个指示矢量$\mathbf{h}_1, \cdots, \mathbf{h}_k$

$$h_{i,j} = \begin{cases} 1\Big/\sqrt{vol\left(A_j\right)}, & v_i \in A_j \\ 0, & v_i \in \bar{A}_j \end{cases}$$

1. $\mathbf{h}_i^t D \mathbf{h}_j = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$

证明：$i \neq j$显然；

$$\mathbf{h}_i^t D\mathbf{h}_i = \sum_{t=1}^{n} d_t h_{t,i}^2 = \frac{1}{vol\left(A_i\right)} \sum_{t \in A_i} d_{\mathrm{t}} = 1$$

NCut的近似谱求解：K>2

2. $NCut(A_1,\cdots,A_k)=\sum_{j=1}^{k}\mathbf{h}_j^t L\mathbf{h}_j$

证明：

$$\mathbf{h}_i^t L\mathbf{h}_i=\frac{1}{2}\sum_{j,t=1}^{n}w_{jt}\left(h_{j,i}-h_{t,i}\right)^2$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{\substack{j\in A_i\\ t\in\bar{A}_i}}\frac{w_{jt}}{vol\left(A_i\right)}+\frac{1}{2}\sum_{\substack{j\in\bar{A}_i\\ t\in A_i}}\frac{w_{jt}}{vol\left(A_i\right)}$$

$$=Cut\left(A_i,\bar{A}_i\right)/vol\left(A_i\right)$$

$$NCut\left(A_1,\cdots,A_k\right)=\sum_{i=1}^{k}\frac{Cut\left(A_i,\bar{A}_i\right)}{vol\left(A_i\right)}=\sum_{i=1}^{k}\mathbf{h}_i^t L\mathbf{h}_i$$

NCut的优化问题：K>2

- **严格的优化问题**：

$$\min_{\mathbf{h}_1,\cdots,\mathbf{h}_k} \sum_{i=1}^{k} \mathbf{h}_i^t L \mathbf{h}_i$$

约束:

$$\mathbf{h}_i^t D \mathbf{h}_j = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

$$h_{i,j} = \begin{cases} 1 \big/ \sqrt{vol\left(A_j\right)}, & v_i \in A_j \\ 0, & v_i \in \bar{A}_j \end{cases}$$

NCut的近似优化问题：K>2

- **近似的优化问题**：放松**h**的离散性约束

$$\min_{\mathbf{h}_1,\cdots,\mathbf{h}_k} \sum_{i=1}^{k} \mathbf{h}_i^t L \mathbf{h}_i$$

$$约束：\mathbf{h}_i^t D \mathbf{h}_j = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

- **问题的解**：广义特征值

$L\mathbf{u} = \lambda D\mathbf{u}$的最小k个特征值对应的特征矢量。

谱聚类算法

https://blog.csdn.net/SL_World/article/details/104423536

- **正则化算法**
  1. 计算相似图的邻接矩阵W；
  2. 计算Laplacian矩阵L；
  3. 求解广义特征值问题$L\mathbf{u}=\lambda D\mathbf{u}$的前k个(最小)特征矢量$\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_k$;
  4. 用$\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_k$作为列矢量构造矩阵U；
  5. $\mathbf{y}_1,\ldots,\mathbf{y}_n$为U的行矢量，用K均值算法将其聚成k个类别。

- **对角矩阵**：$D=diag(d_i)$，$d_i=\sum_{j=1}^{n} w_{ij}$
- **Laplacian矩阵**：$L=D-W$

算法的实现

1. 相似图的构造

- 全连接：

$$w_{ij} = \exp\left(-\frac{\left\| \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j \right\|^2}{\sigma^2} \right)$$

- ε-近邻：

$$w_{ij} = \begin{cases} 1, & \left\| \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j \right\| < \varepsilon \\ 0, & otherwise \end{cases}$$

- 互K-近邻：

$$w_{ij} = \begin{cases} \exp\left(-\frac{\left\| \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j \right\|^2}{\sigma^2} \right), & \mathbf{x}_i \in KNN\left(\mathbf{x}_j\right) \wedge \mathbf{x}_j \in KNN\left(\mathbf{x}_i\right) \\ 0, & otherwise \end{cases}$$

算法的实现

2. **特征矢量的计算**：矩阵具有稀疏性，存在快速算法Lanczos method，最小特征值0对应的特征矢量为1，其它矢量与其正交；

3. **Laplacian矩阵的选择**：

- 非正规化：$L = D - W$
- 随机游走正规化： $L_{rw} = D^{-1}L = I - D^{-1}W$
- 对称正规化： $L_{sym} = D^{-1/2}LD^{-1/2} = I - D^{-1/2}WD^{-1/2}$
- 使用L_{sym}时，特征矢量需要乘$D^{-1/2}$。推荐使用L_{rw}。

算法的实现

4. **聚类数的选择：**

- **理想情况**：样本按照类别的顺序排列，类别之间相似度为0，Laplacian矩阵前K个特征值为0

$$L=\begin{bmatrix} L_1 & & & \\ & L_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & L_k \end{bmatrix}$$

- **一般情况**：根据特征值的分布确定聚类数