Density Peak Clustering

1. 引言

本次Project完成了 [1] 中提出的一种新型聚类算法，对其性能分析，并进行了相关优化。

2. 算法实现

2.1 数据处理

数据来自作者在 Supplementary Materials 中提供的数据。其中存储`1 - 1999`数据点及其各点之间距离，数据格式为$(p1,p2,distance(p1,p2))$，根据给定的数据格式初始化，映射各点对和其距离，保存到字典中，同时计算出数据中数据点个数。

2.1.1 局部密度ρ_i

- **Cut-off Kernel**

给定截断距离$d_c > 0$，采用Cut-off kernel方式计算局部密度，由$\rho_i = \Sigma_j \chi(d_{ij} - d_c)$且$\chi(x) = 1 \text{ if } x < 0 \text{ and } \chi(x) = 0 \text{ otherwise}$，这种方式计算局部密度$\rho_i$为连续值。

- **Gaussian kernel**

给定截断距离$d_c > 0$，采用Gaussian kernel方式计算局部密度，由$\rho_i = \Sigma_j e^{-}(\frac{d_{ij}}{d_c})^2$且$\chi(x) = 1 \text{ if } x < 0 \text{ and } \chi(x) = 0 \text{ otherwise}$，这种方式计算局部密度$\rho_i$为离散值。

2.1.2 最小距离δ_i

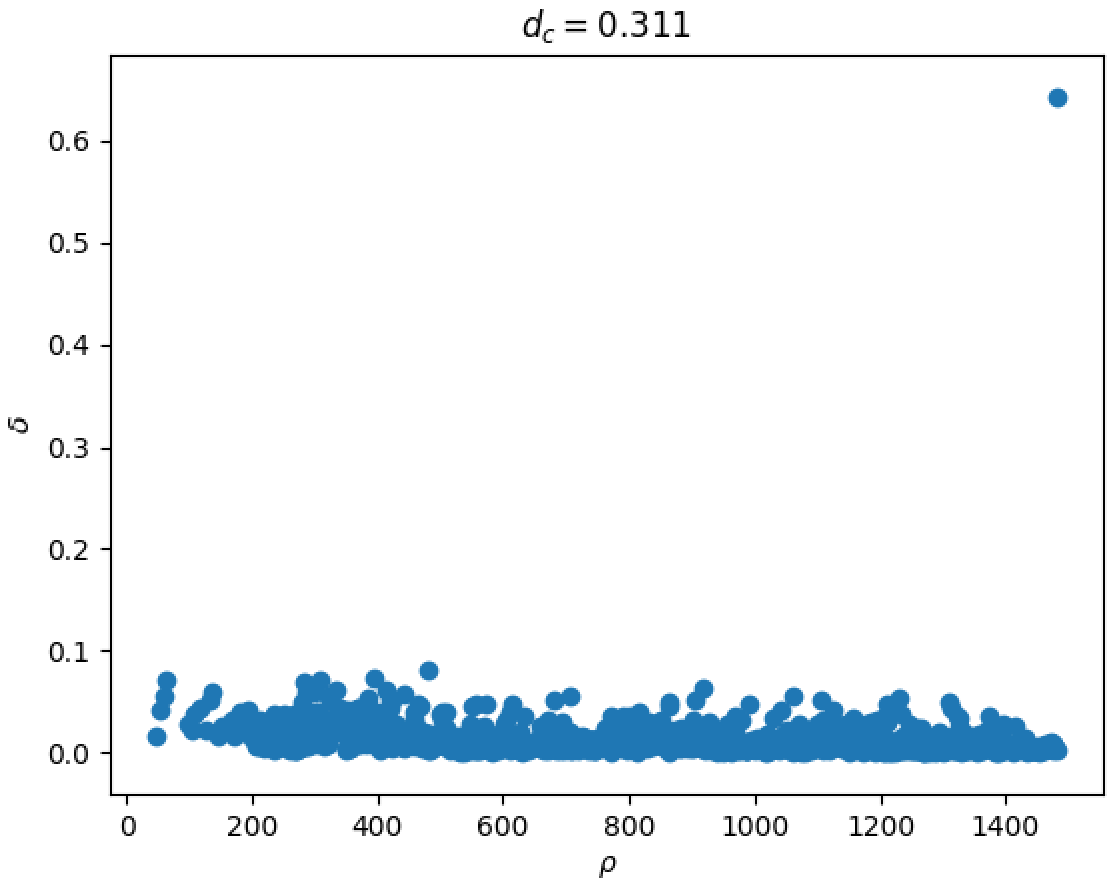
由最小距离的定义可知，当点i不是局部密度最高的点时有$\delta_i = min_{j:\rho_j > \rho_i}(d_{ij})$，否则$\delta_i = max_j(d_{ij})$.

若点i是最高密度点，则其最小距离是点集S中与其距离最大的距离，否则最小距离是局部密度比i高的点中与其距离最小的点。

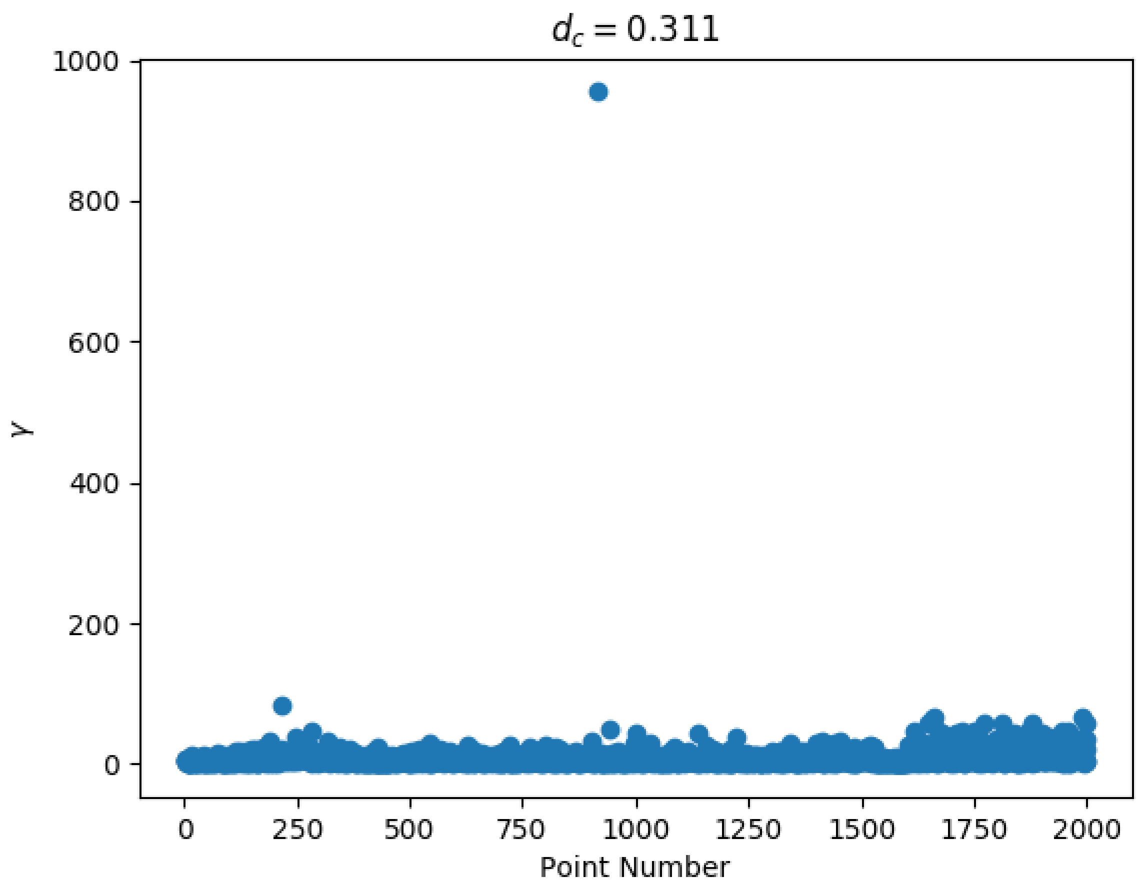
故对局部密度进行降序排序处理后，求最小距离，返回最小距离字典，同时返回最小距离对应的点对字典，方便后面的cluster划分。

2.1.3 聚类中心

对于任意点i，同时具有较大的ρ_i和δ_i，则更有可能成为聚类中心，采用Guassian计算局部密度，截断距离d_c取`0.311`，根据此规则画出(ρ_i,δ_i)的**决策图**如下：



文章中提出对(ρ_i,δ_i)，定义$\gamma_i=\rho_i\delta_i$为聚类中心的划分标准，画出图像如下：



文章中对截断距离d_c的选取没有作任何介绍，只说按照效果自行选择最佳值，这就导致了如上图所示效果，无法选择除了最突出点之外的其余聚类中心，因此对d_c的取值需要衡量，在将值从`0.511`不断下调的过程中发现效果不断变好，但任然不能很准确的判断聚类中心应该选择的个数。

2.2 d_c 优化

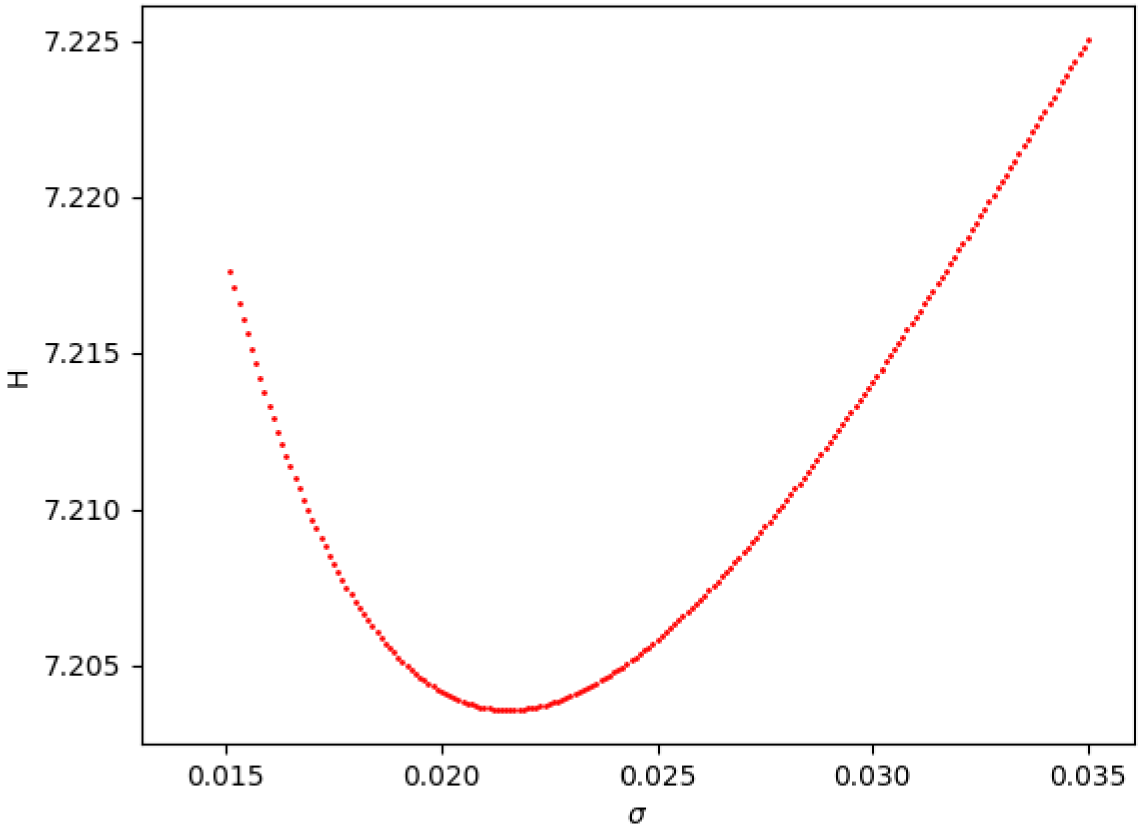
在一篇对[1]的comment中找到了很好的对截断距离进行选择的算法，优化针对的Gaussian function计算的的局部密度，具体见[2]。下面简要介绍其算法：

2.2.1 Potential Of Point(POP)

对一个数据集$\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$，每个点的potential计算公式为$\varphi(x) = \Sigma_{i=1}^{n}(e^{-}(\frac{||x-x_i||}{\sigma})^2)$，类似Gaussian kernel的计算，其中$||x - x_i||$代表欧式几何空间的$x$与$x_i$的距离，$\sigma$为需要确定的变量值。

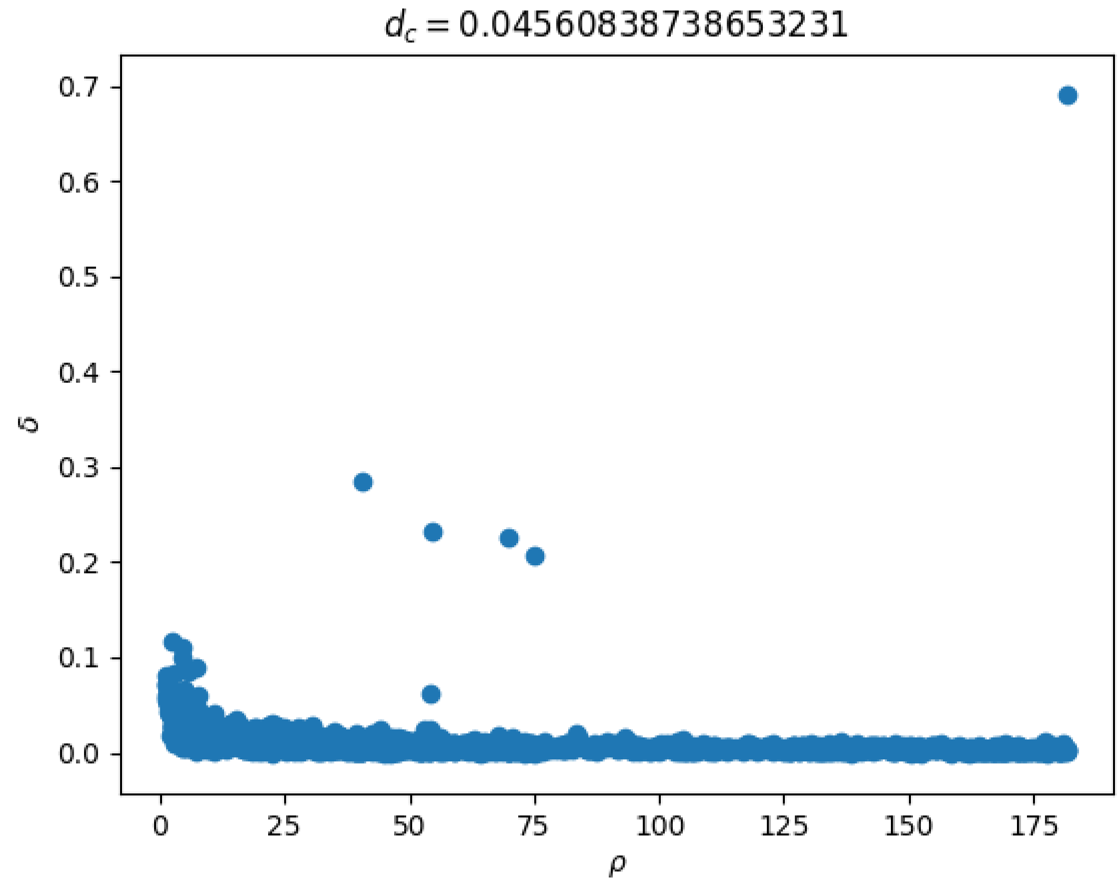
2.2.2 Entropy

对一个POP集$\{\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_n\}$，定义数据域的熵值$H = -\Sigma_{i=1}^{n}(\frac{\varphi_i}{Z})log(\frac{\varphi_i}{Z})$，熵值代表数据域的混乱度，我们需要求使得$H$最小的变量$\sigma$。下图直观展示了$H$随$\sigma$的变化趋势：

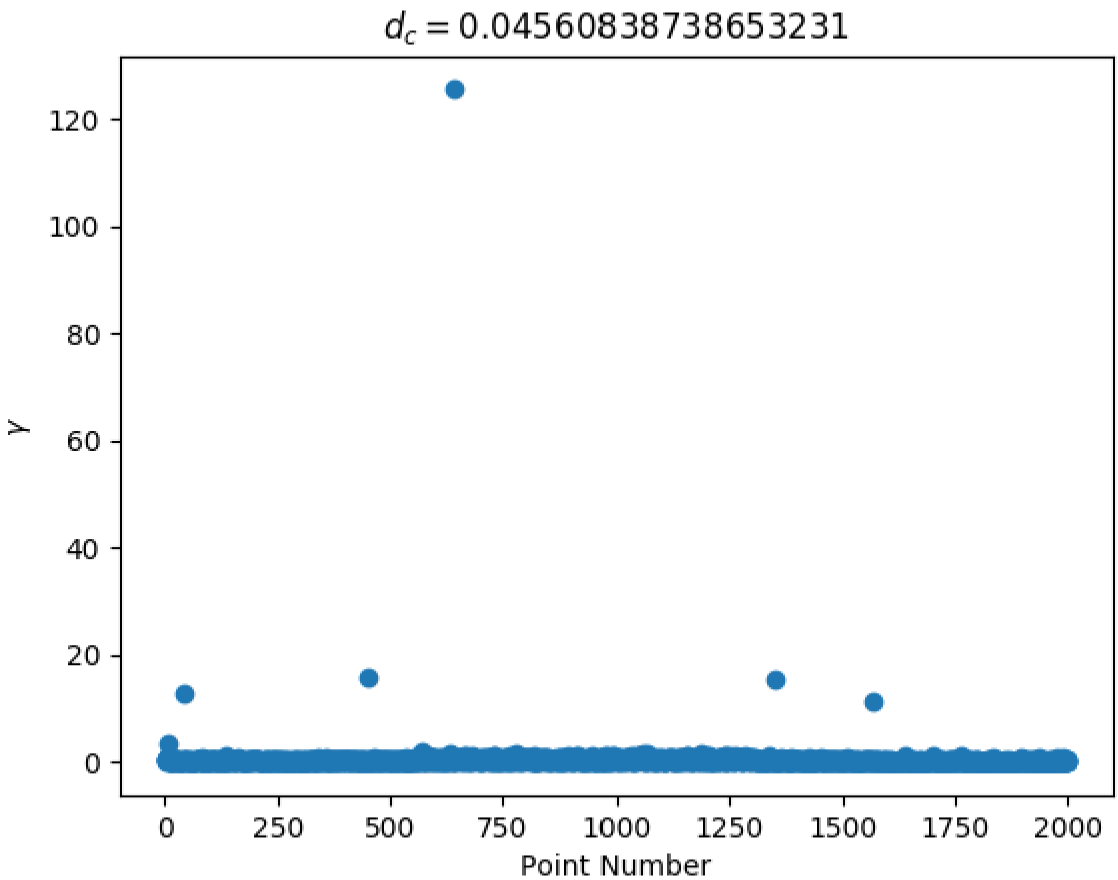


2.2.3 d_c 的选取

随着σ从0不断增加到∞，熵值递减再递增，故取使得熵值最小的σ值，根据Gaussian分布的3B原则，每个点的影响半径为$\frac{3}{\sqrt{2}}\sigma$，取该值为截断距离d_c = `0.0456`，此时生成决策图如下：



定义$\gamma_i = \rho_i \delta_i$为聚类中心的划分标准，图像如下:



2.3 聚类过程

2.3.1 聚类中心

由上图很容易得到聚类中心点共六个，易得聚类中心列表`[1061, 1515, 400, 6, 1566, 614]`。对各点作处理，分为聚类中心和非聚类中心两类：

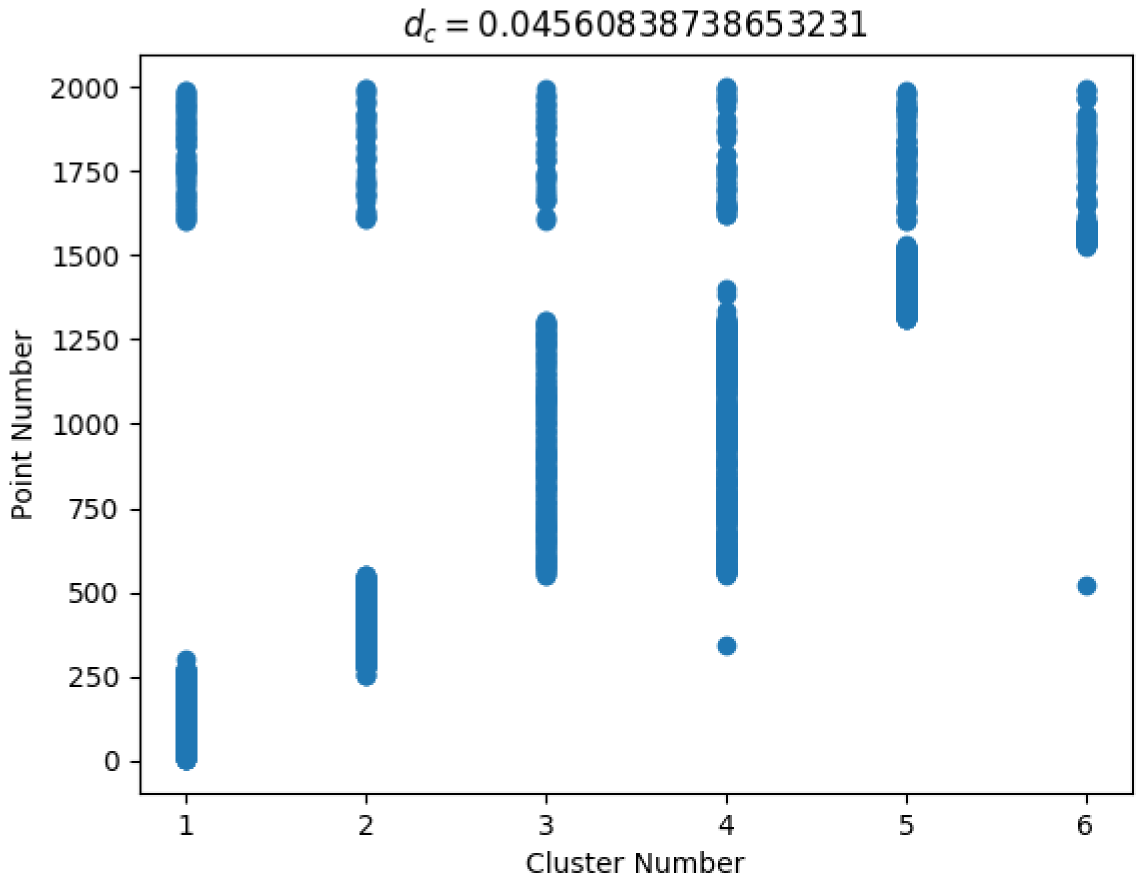
```
# cluster_centers = [1061, 1515, 400, 6, 1566, 614]
tag_info = dict()
cluster_id = 1
for i in range(1, maxid + 1):
    if i in cluster_centers:
        tag_info[i] = cluster_id
        cluster_id += 1
    else:
        tag_info[i] = -1
```

2.3.2 聚类

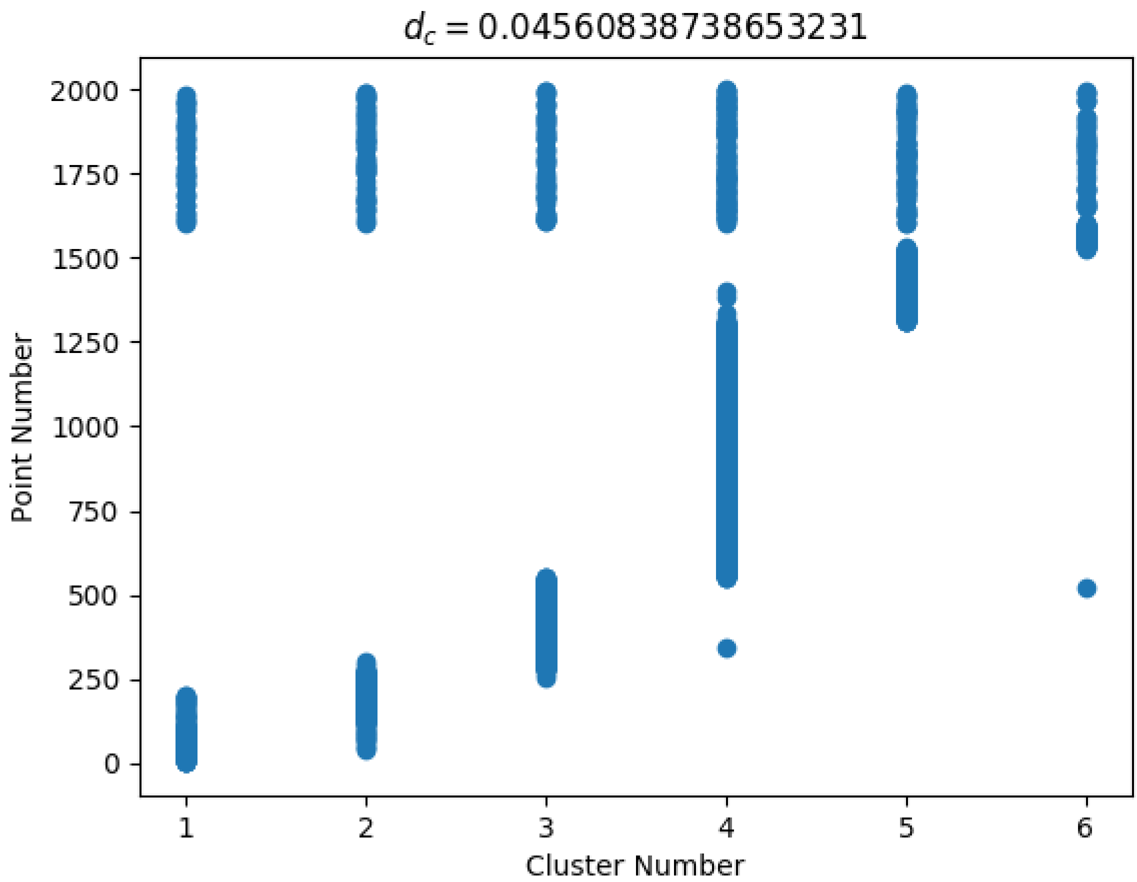
对非聚类中心进行聚类，基本思路是：将点集按照ρ_i降序排列然后遍历，对非聚类点x，在$\{i|\rho_i > \rho_x\}$点集中找与点x距离最小的的点i，将x归类到i。

```
def classify(self, taginfo, srt_dens, min_num, maxid):
    '''
    :taginfo: dict of tag info
    :srt_dens: desc sorted list with density values (point, density)
    :min_num: minimum number dict
    :maxid: number of points
    :rtype: tag dict with classified points not cluster center
    '''
    dens_dict = dict()
    for ele in srt_dens:
        dens_dict[ele[0]] = ele[1]
    for i in dens_dict.keys():
        if taginfo[i] == -1:
            taginfo[i] = taginfo[min_num[i]]
    return taginfo
```

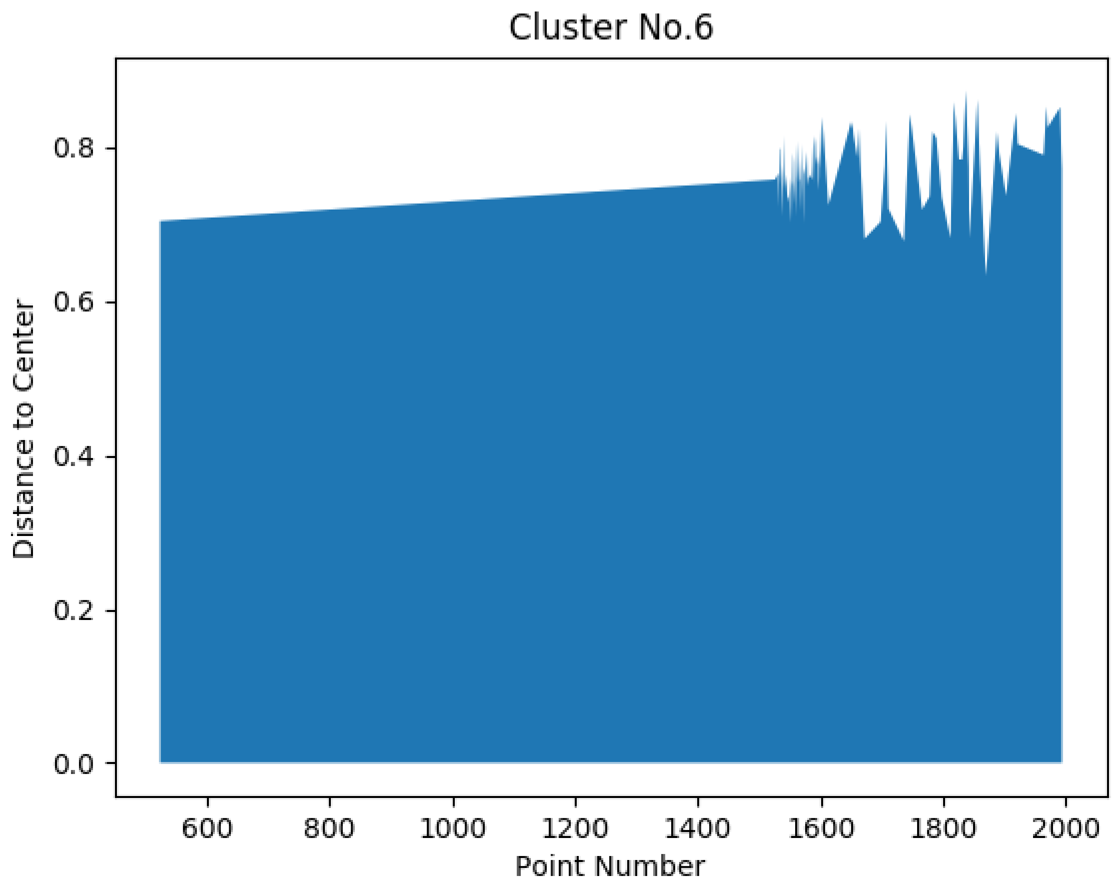
- Cut-off kernel聚类如下图：



- Gaussian kernel聚类如下：



2.3.2 聚类效果

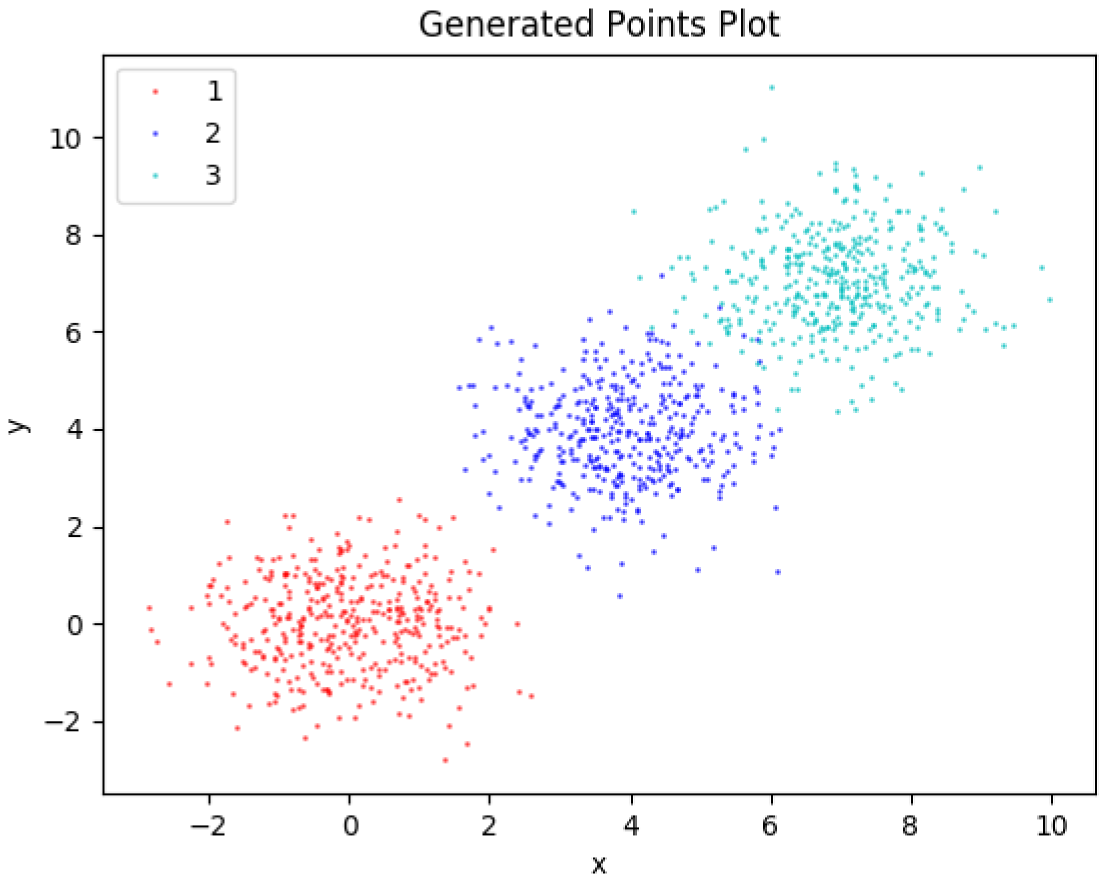


由之前的实验结果可知聚类中心共6个，简单对六个簇的分类情况进行的可视化，横坐标为点标号，纵坐标为点到聚类中心的距离。由于点的个数较多，故采用面积图，如上图所示是第六个簇的效果图。

2.4 聚类测试

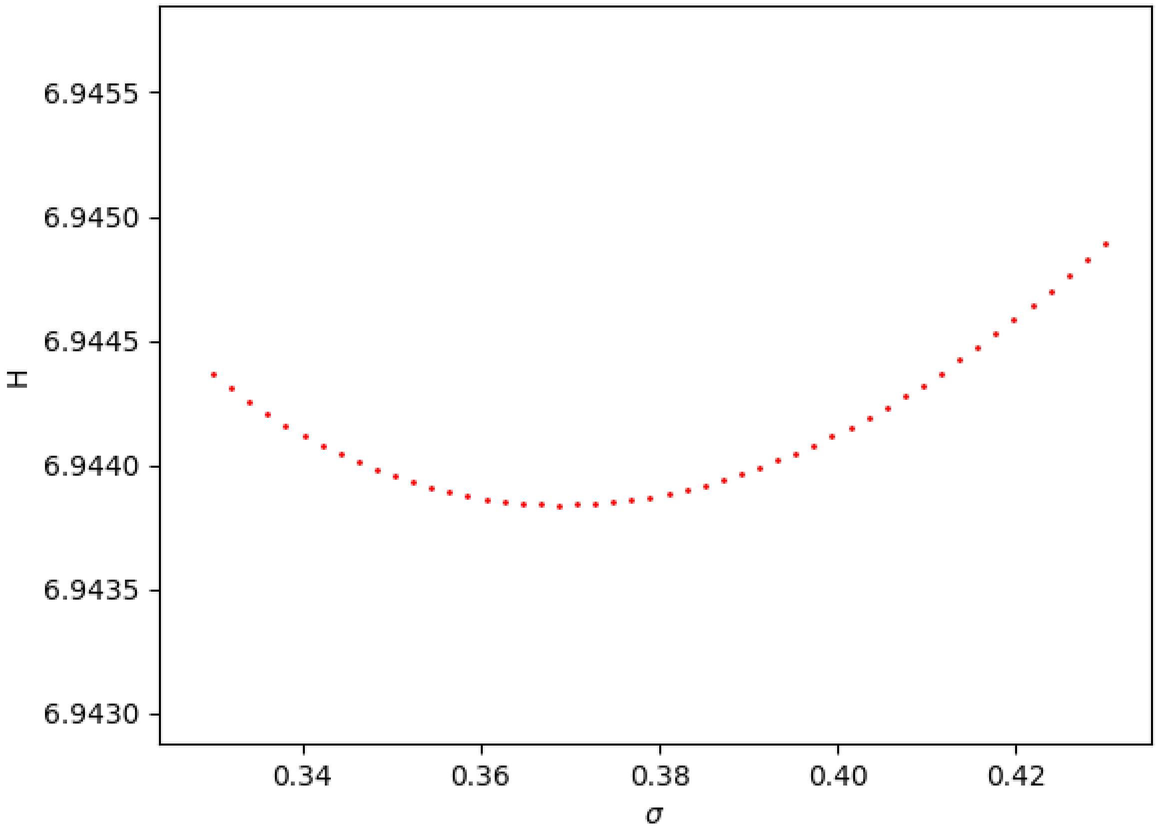
2.4.1 测试数据

编写`generatePoints.py`来生成三个簇，每个簇400个点且均服从高斯分布，分布图如下所示。



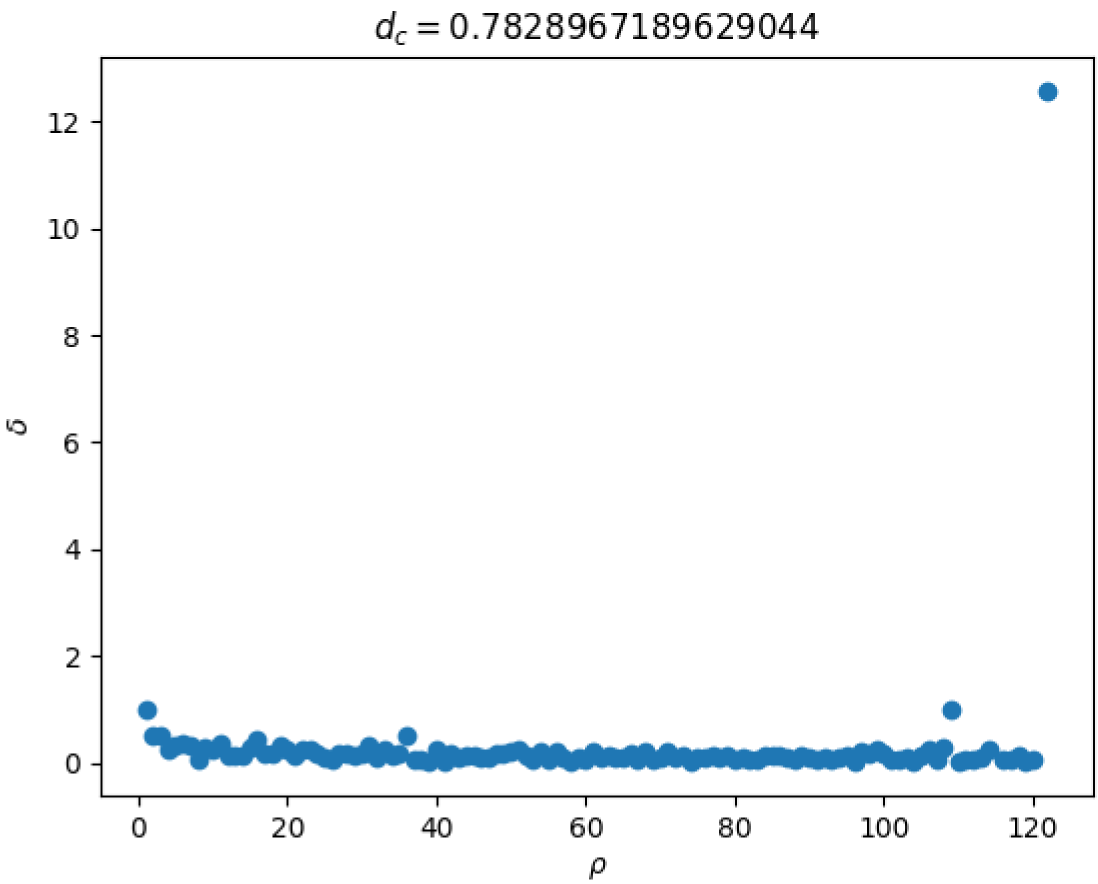
2.4.2 聚类效果

通过求熵值来确定截断距离最佳取值的图如下：



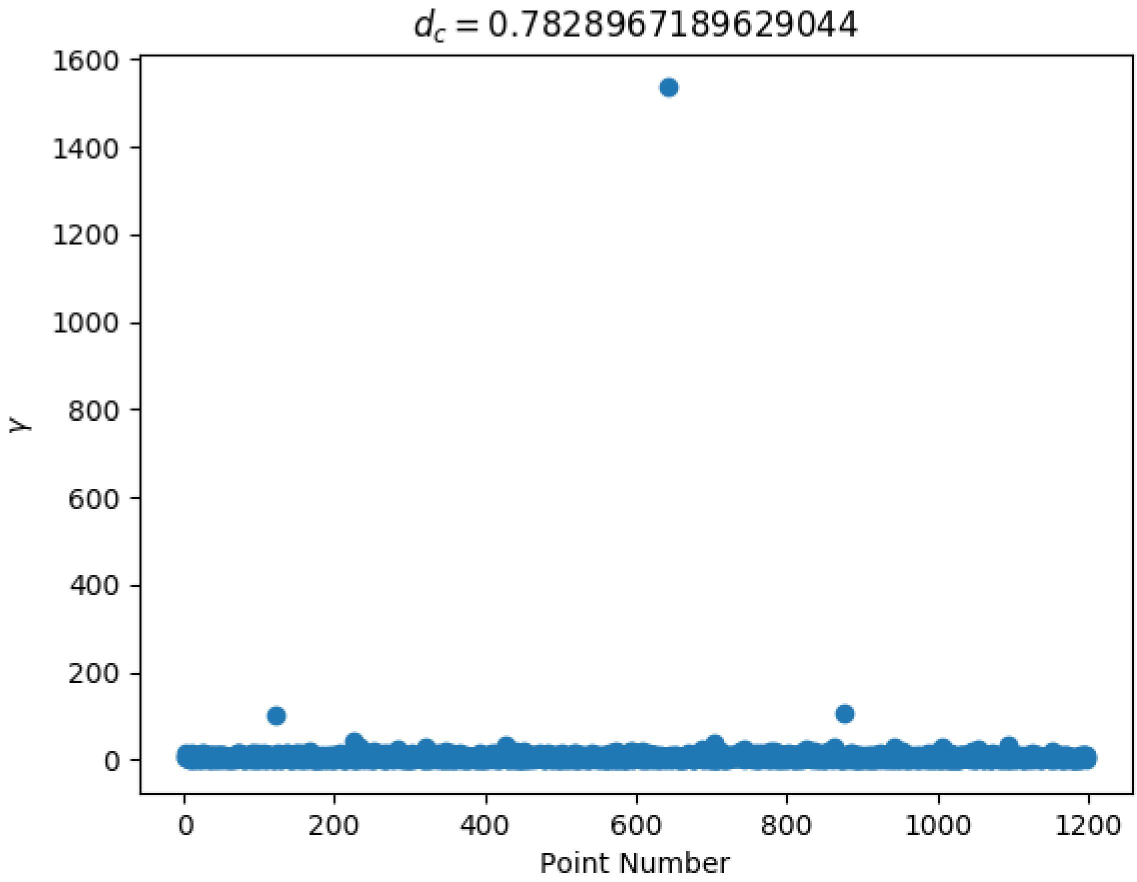
6.9455
6.9450
6.9445
6.9440
6.9435
6.9430
H
0.34
0.36
0.38
0.40
0.42
σ

由画出决策图如下：



$d_c = 0.7828967189629044$
12
10
8
6
4
2
0
δ
0
20
40
60
80
100
120
ρ

定义$\gamma_i = \rho_i \delta_i$为聚类中心的划分标准，画出图像如下：

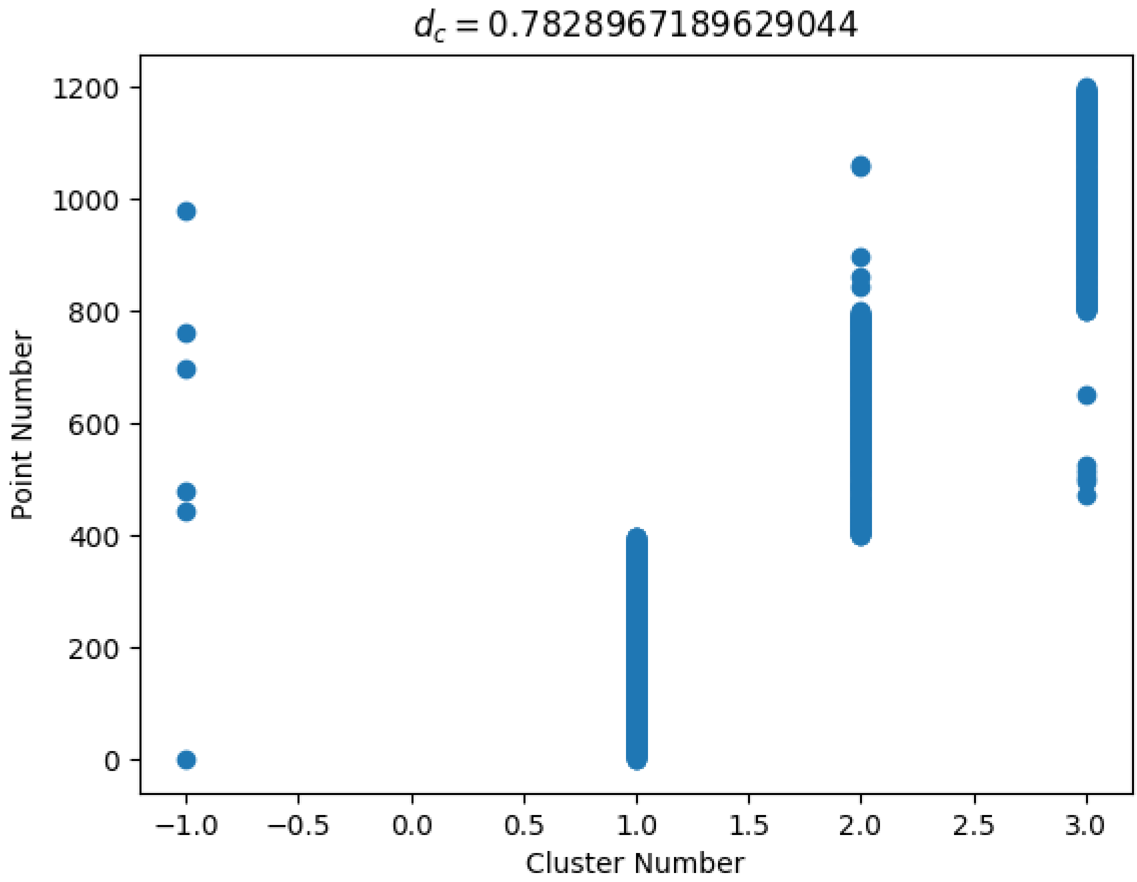


截断距离选择`0.7828`为最佳值，由图能直观看出此时应该划分三个类，和生成三个簇的数据基本相符。

对三个簇进行可视化，画出相应的结果如下图，黑色加粗点为聚类中心：

2.4.3 结果分析

聚类结果与生成图对比发现有的边缘点被忽略了，生成每个聚类簇元素视图如下：



1. 可见有一部分点被分到第-1个簇中，这是在非聚类中心点分类过程中一些距离三个聚类中心都很远的离群点，因此在可视化过程中由聚类中心生成对应的簇时，这些点会被忽略，从而导致聚类结果图中点的缺失。

   对这些离群点进行有效的信息处理和聚类划分，可以是对该算法优化的下一步工作。

2. 对一些交错点划分，可见该算法性能较为朴素，在处理维度过高或者密度过大的点时可能任意出现交错点的错误划分。

   对交错点进行有效的处理可以有效解决这个问题，同时可以提升该算法的健壮性。

3. 总结

由于对距离定义未知，所以没有对初始数据进行六类cluster的plot，只在测试数据集上进行了相关的聚类可视化处理。文章中提到的聚类算法其实只实现了聚类中心的选择，在这基础上阅读了文章的增补内容，进行了聚类过程算法的补全，同时对截断距离的选取进行优化。

在这基础之上还可以对聚类边界进行讨论，对离群点和交叉点进行划分。

对聚类算法的聚类中心选择一直是个研究热点，该算法很朴素但切中要点，能很好地解决聚类中心问题，但是在聚类中心个数的选择上和k-means算法一样，还是需要人为选择，联系对局部密度算法的优化，猜测是否可以对每个点进行熵值计算，寻找聚类中心熵值的特性，从而实现聚类中心个数的自动选择。

参考文献

[1] *Alex Rodriguez, Alessandro Laio. Clustering by fast search and find of density peaks. Science, 27 JUNE 2014 • VOL 344 ISSUE 6191, 1492-1496.*

[2] *Shuliang Wang, Dakui Wang, Caoyuan Li, Yan Li. Comment on "Clustering by fast search and find of density peaks".*