层次聚类

一、原理及方法

1、层次法

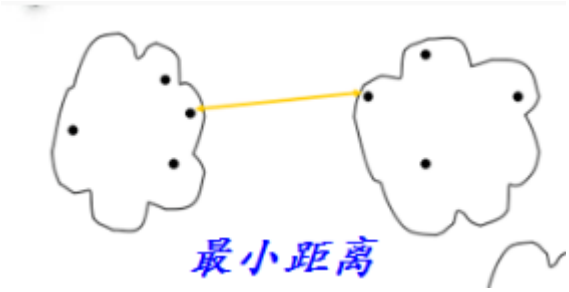
先计算样本之间的距离，每次将距离最近的点合并到同一个类；然后，再计算类与类之间的距离，将距离最近的类合并为一个大类。

2、计算类与类之间的方法

（1）最短距离法（single）：将类与类的距离定义为类与类之间样本的最短距离；

$$d(u,v) = min(dist(u[i], v[j])$$

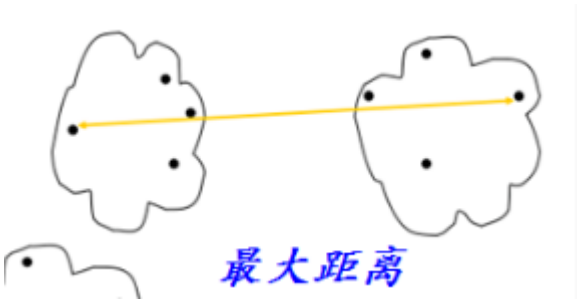
其中：u，v为类；i为u类中的点；j为v类中的点。



（2）最长距离法（complete）：将类与类的距离定义为类与类之间样本的最长距离；

$$d(u,v) = max(dist(u[i], v[j])$$

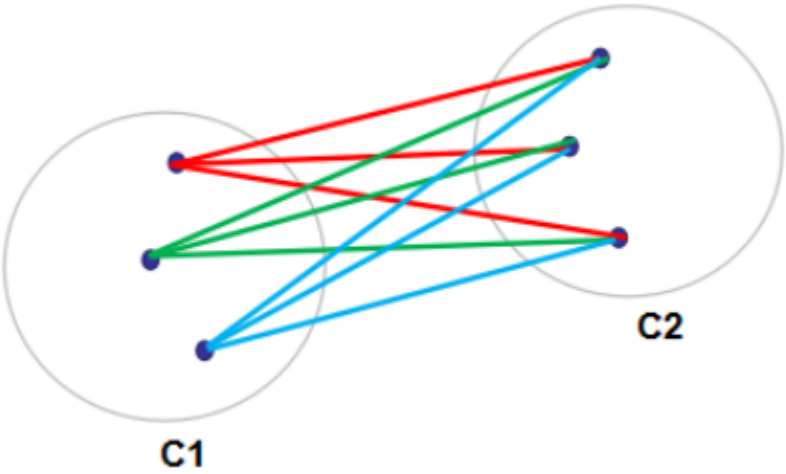
其中：u，v为类；i为u类中的点；j为v类中的点。



（3）均值距离法（average）：计算两个组合数据点中的每个数据点与其他所有数据点的距离，将所有距离的均值作为两个组合数据点间的距离（非加权）；

$$d(u,v) = \sum_{ij} \frac{d(u[i], v[j])}{(|u| * |v|)}$$

其中：|u|，|v|是聚类u和v中元素的的个数。

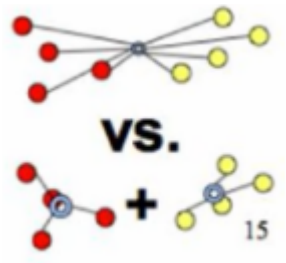


（4）weighted距离法：难以用图和文字说明，直接看公式吧，它和均值距离法得区别可参见下面实际应用中得例子；

$$d(u,v) = (dist(s,v) + dist(t,v))/2$$

其中：u是由s和t形成的，而v是森林中剩余的聚类簇，这被称为WPGMA（加权分组平均）法。

（5）ward方法（沃德方差最小化算法）



- 具体解释如下（摘自CSDN）：

Ⅰ输入距离矩阵，初始化每一个点为cluster，此时每个组内的ESS为 0 ，ESS公式如下：

$$ESS = \sum_{ij}^{n} x_{i}^{2} - \frac{1}{n}\left(\sum_{ij}^{n} x_{i}^{2}\right)^{2} = nVar(X) = nE[(X - E(X))^{2}]$$

Ⅱ 计算合个cluster的成本：

```
cost = ESS（总-合并后）-ESS（总-合并前）
ESS（总-合并前）=ESS（红）+ESS（黄）+ESS（其他没画出来的组）
ESS（总-合并后）=ESS（红黄）+ESS（其他没画出来的组）
```

画的那个树状图的高度，可以认为是上面说的这个“成本”。

- 其中在`python scipy.cluster.hierarchy`算法中又到的目标函数如下：

$$d(u,v) = \sqrt{\frac{|v|+|s|}{T}d(v,s)^2 + \frac{|v|+|t|}{T}d(v,t)^2 - \frac{|v|}{T}d(s,t)^2}$$

u是s和t组成的新的聚类，v是森林中未使用的聚类。T = |v|+|s|+|t|，|*|是聚类簇中观测值的个数。在下一章节中会有具体的例子来说明这一公式。

二、实际应用

假设一样本数据（距离矩阵）如下，根据不同计算距离的方法画出层次聚类图：

	a	b	c	d	e	f
a		21.6	22.6	63.9	65.1	17.7
b	21.6		1	42.3	43.5	3.9
c	22.6	1		41.3	42.5	4.9
d	63.9	42.3	41.3		1.2	46.2
e	65.1	43.5	42.5	1.2		47.4
f	17.7	3.9	4.9	46.2	47.4	

1、最短距离法

（1）两两之间b与c之间的距离最小，先聚合b和c，并重新计算距离距离、更新矩阵：

例如层u(b,c)与a的距离为：
d(u(b,c),a)=min(d(b,a),d(c,a))=min(21.6,22.6)=21.6

第一次更新距离矩阵【b&c聚合】

	a	(b,c)	d	e	f
a		21.6	63.9	65.1	17.7
(b,c)	21.6		41.3	42.5	4.9
d	63.9	41.3		3	46.2
e	65.1	42.5	3		47.4
f	17.7	4.9	46.2	47.4	

第二次更新距离矩阵【d&e聚合】

	a	(b,c)	(d,e)	f
a		21.6	64.5	17.7
(b,c)	21.6		41.3	4.9
(d,e)	64.5	41.3		46.2
f	17.7	4.9	46.2	

第三次更新距离矩阵【u(b,c)&f聚合】

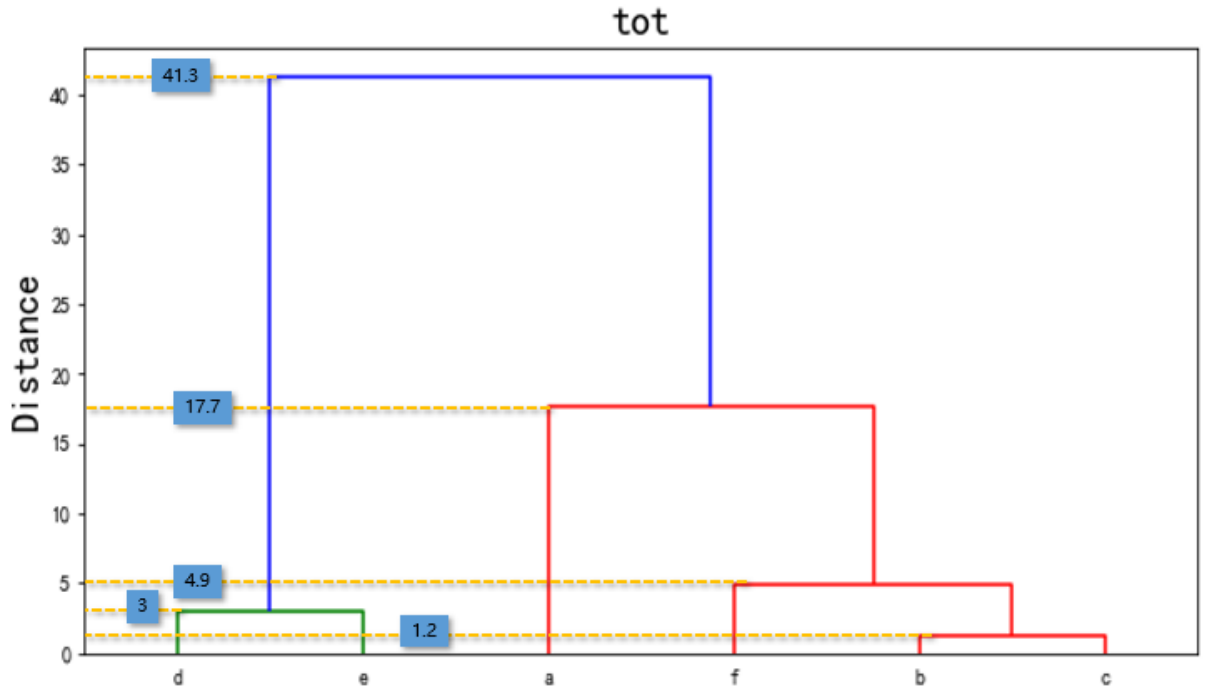
	a	(b,c,f)	(d,e)
a		17.7	64.5
(b,c,f)	17.7		41.3
(d,e)	64.5	41.3	

第四次更新距离矩阵【u(b,c,f)&a聚合】

	(a,b,c,f)	(d,e)
(a,b,c,f)		41.3
(d,e)	41.3	

（2）基于新的距离矩阵，d和e之间的距离最小，聚合d和e，再次更新距离矩阵；

（3）重复以上步骤，知道所有的样本都在一个类中，最后画出层次聚类图。



2、均值距离法

（1）两两之间b与c之间的距离最小，先聚合b和c，并重新计算距离距离、更新矩阵：

例如在第三次更新距离矩阵时层u(b,c,f)与a的距离为：
d(u(b,c,f),a)=sum(d(b,a),d(c,a),d(f,a))/3=(21.6+22.6+17.7)=20.633

第一次更新距离矩阵【b&c聚合】

	a	(b,c)	d	e	f
a		22.1	63.9	65.1	17.7
(b,c)	22.1		41.8	43	7.45
d	63.9	41.8		3	46.2
e	65.1	43	3		47.4
f	17.7	7.45	46.2	47.4	

第二次更新距离矩阵【d&e聚合】

	a	(b,c)	(d,e)	f
a		22.1	64.5	17.7
(b,c)	22.1		42.4	7.45
(d,e)	64.5	42.4		46.8
f	17.7	7.45	46.8	

第三次更新距离矩阵【u(b,c)&f聚合】

	a	(b,c,f)	(d,e)
a		20.6	64.5
(b,c,f)	20.6		42.4
(d,e)	64.5	42.4	

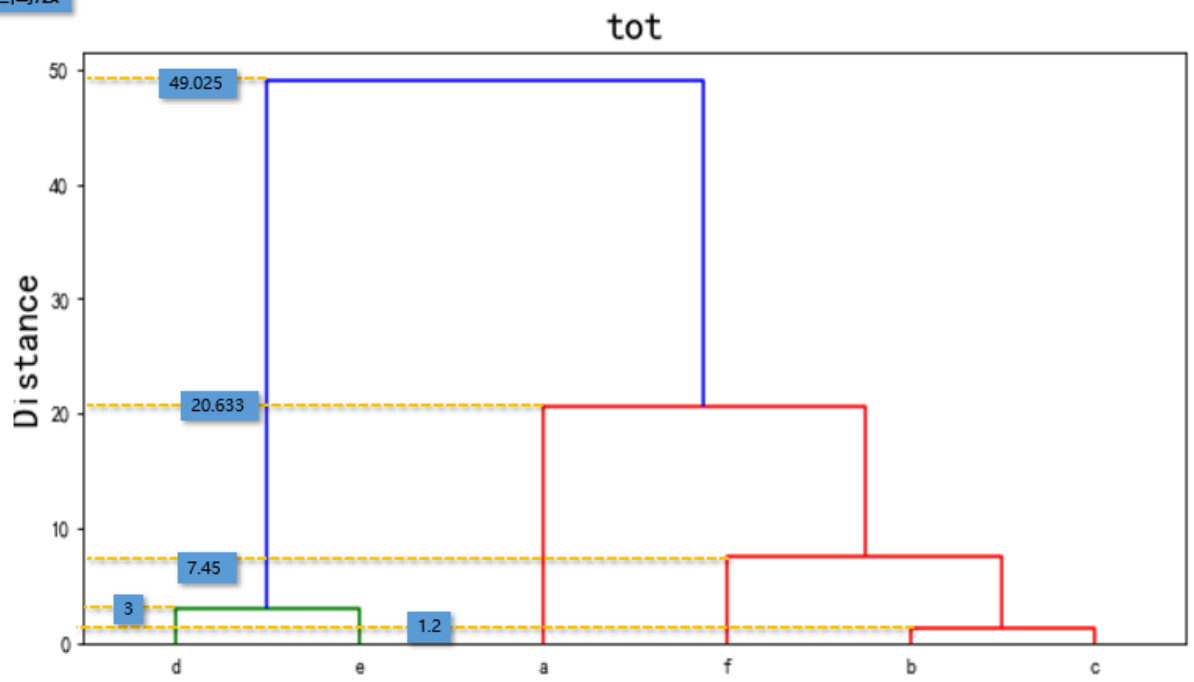
第四次更新距离矩阵【u(b,c,f)&a聚合】

	(a,b,c,f)	(d,e)
(a,b,c,f)		49.025
(d,e)	49.025	

（2）基于新的距离矩阵，d和e之间的距离最小，聚合d和e，再次更新距离矩阵；

（3）重复以上步骤，知道所有的样本都在一个类中，最后画出层次聚类图。

均值距离法



3、weighted距离法

步骤均与以上两种方法相同。通过相同的例子来说明和均值距离法得差别：

例如在第三次更新距离矩阵时层u(b,c,f)与a的距离为【采用第二次更新后的矩阵】：
d(u(b,c,f),a)=sum(d(u(b,c),f),d(f,a))/2=(21.1+17.7)=19.9

第一次更新距离矩阵【b&c聚合】

	a	(b,c)	d	e	f
a		22.1	63.9	65.1	17.7
(b,c)	22.1		41.8	43	7.45
d	63.9	41.8		3	46.2
e	65.1	43	3		47.4
f	17.7	7.45	46.2	47.4	

第二次更新距离矩阵【d&e聚合】

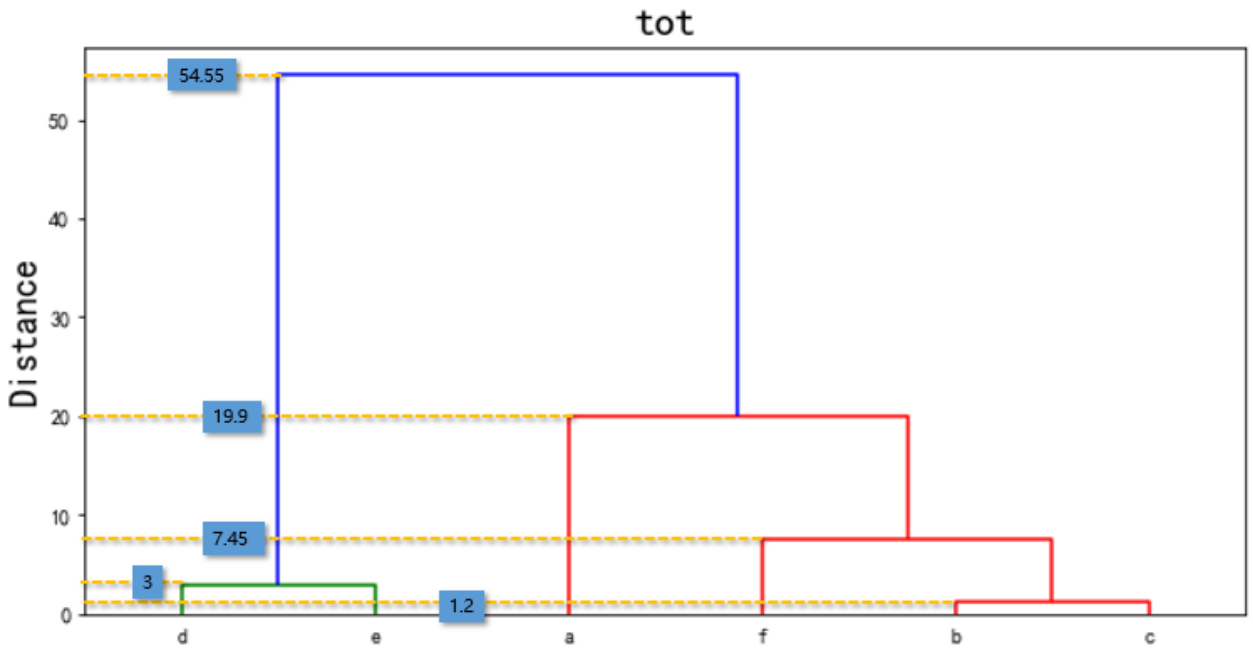
	a	(b,c)	(d,e)	f
a		22.1	64.5	17.7
(b,c)	22.1		42.4	7.45
(d,e)	64.5	42.4		46.8
f	17.7	7.45	46.8	

第三次更新距离矩阵【u(b,c)&f聚合】

	a	(b,c,f)	(d,e)
a		19.9	64.5
(b,c,f)	19.9		44.6
(d,e)	64.5	44.6	

第四次更新距离矩阵【u(b,c,f)&a聚合】

	(a,b,c,f)	(d,e)
(a,b,c,f)		54.55
(d,e)	54.55	



4、ward距离法

下面以第三次更新矩阵后为例，计算层`u(d,e)`与`u(b,c,f)`之间的距离：

- 根据公式中提到的u是s和t组成的新的聚类，v是森林中未使用的聚类。
- 在该例中新的聚类u极为u(b,c,f),s为u(b,c),v为f。
- T = |v|+|s|+|t|=2+1+2=5

因此公式为：

$$d(u(b,c,f),u(b,c)) = \sqrt{\frac{4}{5}d(u(b,c),u(d,e))^2 + \frac{3}{5}d(f,u(d,e))^2 - \frac{2}{5}d(f,u(b,c))^2} = \sqrt{\frac{4}{5}59.93^2 + \frac{3}{5}54.0^2 - \frac{2}{5}9.07^2} = 67.76$$

第一次更新距离矩阵【b&c聚合】

	a	(b,c)	d	e	f
a		25.5	63.9	65.1	17.7
(b,c)	25.5		48.26	49.65	9.07
d	63.9	48.26		3	46.2
e	65.1	49.65	3		47.4
f	17.7	9.07	46.2	47.4	

第二次更新距离矩阵【d&e聚合】

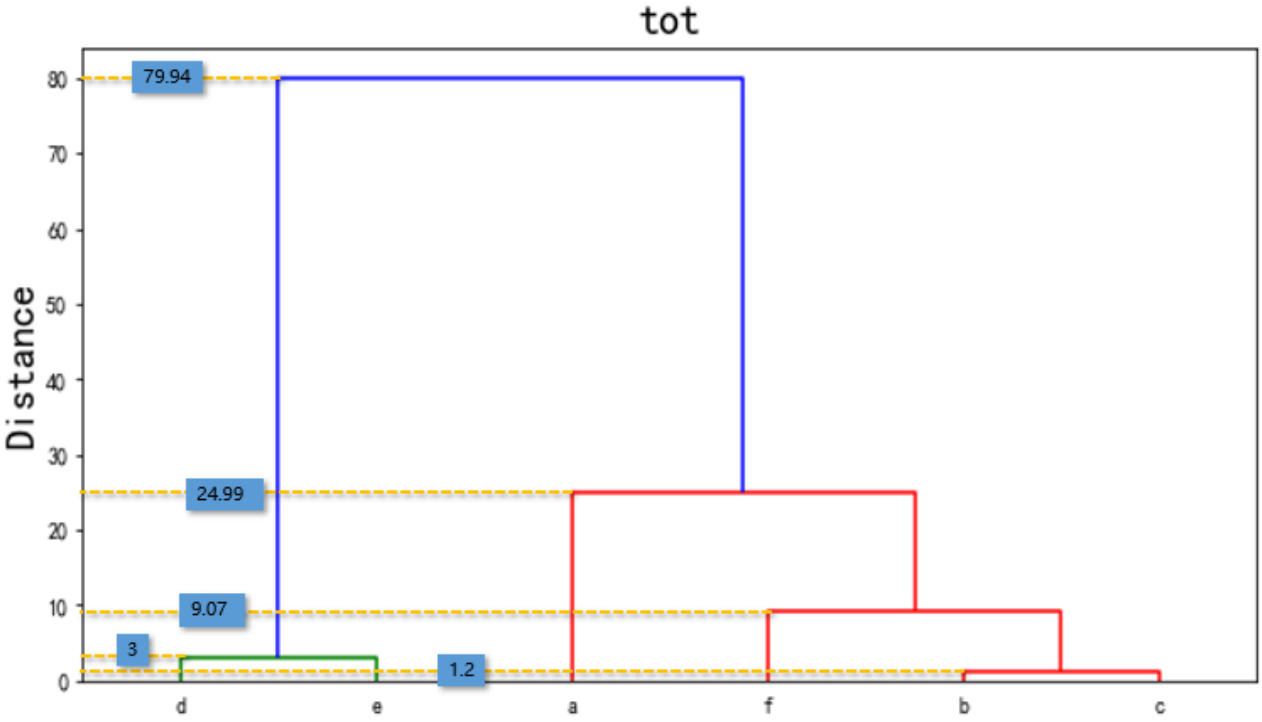
	a	(b,c)	(d,e)	f
a		25.5	74.5	17.7
(b,c)	25.5		59.93	9.07
(d,e)	74.5	59.93		54.02
f	17.7	9.07	54.0	

第三次更新距离矩阵【u(b,c)&f聚合】

	a	(b,c,f)	(d,e)
a		24.99	74.46
(b,c,f)	24.99		67.76
(d,e)	74.5	67.76	

第四次更新距离矩阵【u(b,c,f)&a聚合】

	(a,b,c,f)	(d,e)
(a,b,c,f)		79.94
(d,e)	79.94	


tot
Distance
80
70
60
50
40
30
20
10
0
79.94
24.99
9.07
3
1.2
d
e
a
f
b
c