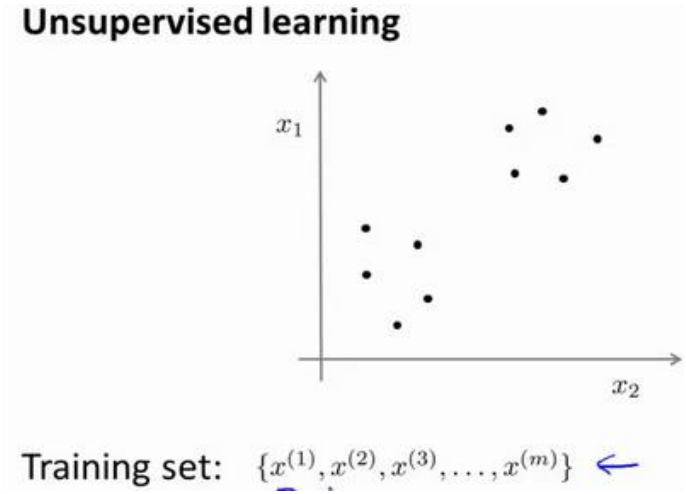
聚 类

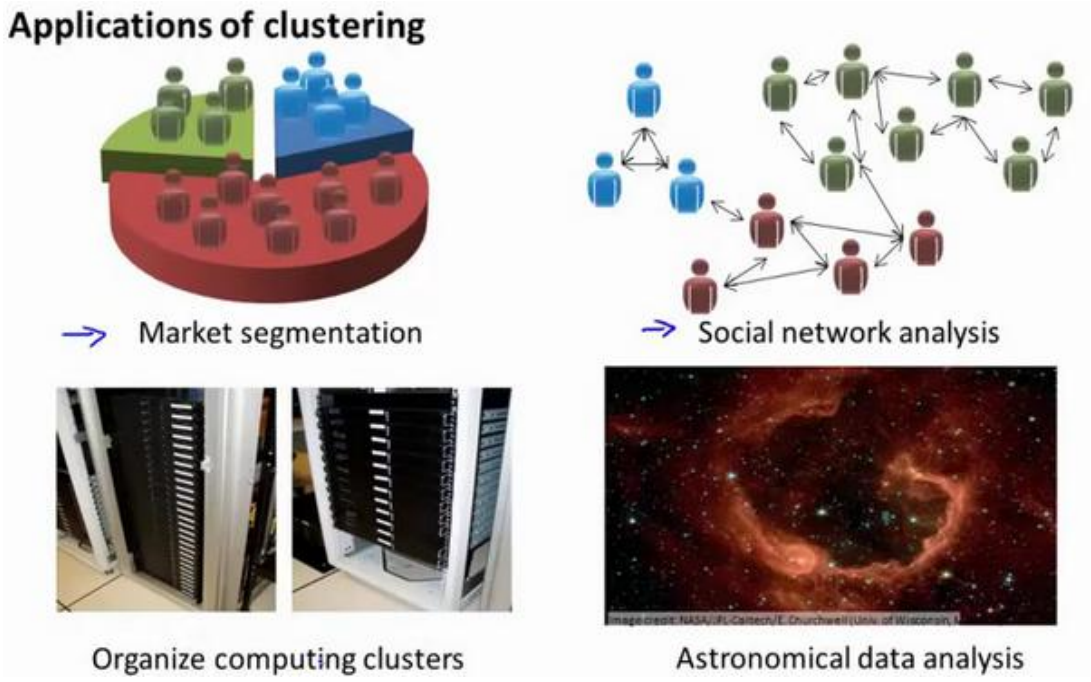
主要内容

- 理解相似度度量的各种方法与相互联系
- 掌握K-means聚类的思路和方法
- 了解层次聚类的思路和方法
- 理解密度聚类的基本原理
  - DBSCAN

什么是聚类？

- 聚类就是对大量未知标注的数据集，按数据的内在相似性将数据集划分为多个类别，使类别内的数据相似度较大而类别间的数据相似度较小
  - 无监督





相似度/距离计算方法总结

- 闵可夫斯基距离Minkowski/欧式距离 $$dist(X,Y)=\left(\sum_{i=1}^{n}|x_i-y_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}$$
- 杰卡德相似系数(Jaccard) $$J(A,B)=\frac{|A\cap B|}{|A\cup B|}$$
- 余弦相似度(cosine similarity) $$\cos(\theta)=\frac{a^T b}{|a|\cdot|b|}$$
- Pearson相似系数 $$\rho_{XY}=\frac{\mathrm{cov}(X,Y)}{\sigma_X\sigma_Y}=\frac{E[(X-\mu_X)(Y-\mu_Y)]}{\sigma_X\sigma_Y}=\frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i-\mu_X)(Y_i-\mu_Y)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(X_i-\mu_X)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(Y_i-\mu_Y)^2}}$$
- 相对熵(K-L距离) $$D(p\|q)=\sum_x p(x)\log\frac{p(x)}{q(x)}=E_{p(x)}\log\frac{p(x)}{q(x)}$$
- Hellinger距离 $$D_\alpha(p\|q)=\frac{2}{1-\alpha^2}\left(1-\int p(x)^{\frac{1+\alpha}{2}}q(x)^{\frac{1-\alpha}{2}}dx\right)$$

相对熵(K-L距离)

- 相对熵(K-L距离)

$$D(p\|q)=\sum_x p(x)\log\frac{p(x)}{q(x)}=E_{p(x)}\log\frac{p(x)}{q(x)}$$

  - 衡量相同事件空间的两个概率分布的差异情况。
  - 不满足对称性、三角不等式条件
  - 在信息检索、统计自然语言方面有重要的应用

Hellinger distance

$$D_\alpha(p\|q)=\frac{2}{1-\alpha^2}\left(1-\int p(x)^{\frac{1+\alpha}{2}}q(x)^{\frac{1-\alpha}{2}}dx\right)$$

$$\Rightarrow D_H(p\|q)=2\left(1-\int\sqrt{p(x)q(x)}dx\right)\qquad s.t.\quad \alpha=0$$

$$=2-2\int\sqrt{p(x)q(x)}dx$$

$$=\int p(x)dx+\int q(x)dx-\int 2\sqrt{p(x)q(x)}dx$$

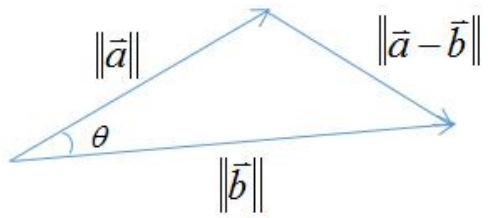
$$=\int\left(p(x)-2\sqrt{p(x)q(x)}+q(x)\right)dx$$

$$=\int\left(\sqrt{p(x)}-\sqrt{q(x)}\right)^2dx$$

- 满足三角不等式，是对称、非负距离

余弦相似度与Pearson相似系数

- n维向量x和y的夹角记做θ，根据余弦定理，其余弦值为：



$$\cos(\theta)=\frac{x^T y}{|x|\cdot|y|}=\frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n} y_i^2}}$$

- 这两个向量的相关系数是：

数据进行标准化处理 $\frac{x-\bar{x}}{\sigma}$

$$\rho_{XY}=\frac{\mathrm{cov}(X,Y)}{\sigma_X\sigma_Y}=\frac{E[(X-\mu_X)(Y-\mu_Y)]}{\sigma_X\sigma_Y}=\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu_X)(y_i-\mu_Y)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu_X)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\mu_Y)^2}}$$

- Pearson系数是把两组数据标准化处理后的向量夹角的余弦
  - 文档间求距离一般使用夹角余弦——因为这一物理量表征了文档去均值化后的随机向量间相关系数

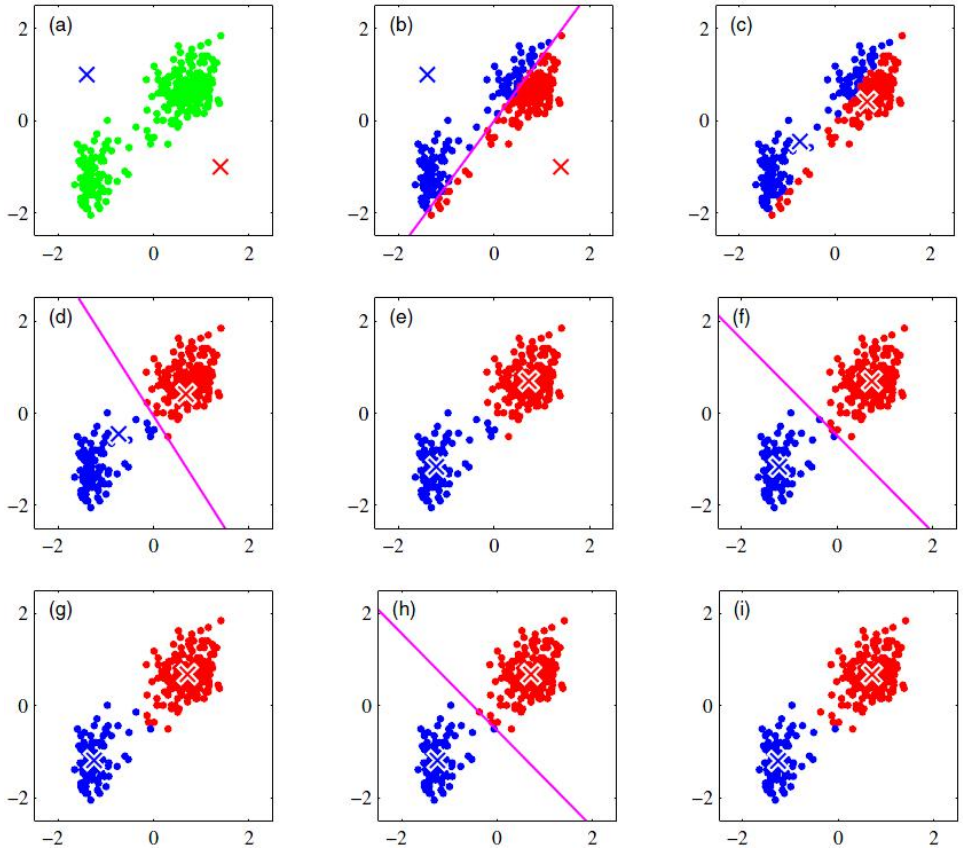
聚类的基本思想

- 给定一个有N个对象的数据集，构造数据的k个簇，k≤n。满足下列条件：
  - 每一个簇至少包含一个对象
  - 每一个对象属于且仅属于一个簇
  - 将满足上述条件的k个簇称作一个合理划分
- 基本思想：对于给定的类别数目k，首先给出初始划分，通过迭代改变样本和簇的隶属关系，使得每一次改进之后的划分方案都较前一次好。

k-Means算法

- k-Means算法，称为k-平均或k-均值，一种广泛使用的聚类算法，或者成为其他聚类算法的基础。
- 假定输入样本为S=$x_1,x_2,\ldots,x_m$，则算法步骤为：
  - 选择初始的k个类别中心$\mu_1\mu_2\ldots\mu_k$
  - 对于每个样本x_i，将其标记为距离类别中心最近的类别，即：$label_i = \arg\min_{1\le j\le k} \|x_i - \mu_j\|$
  - $\mu_j = \frac{1}{|c_j|}\sum_{i\in c_j} x_i$
  - 将每个类别中心更新为隶属该类别的所有样本的均值
  - 重复最后两步，直到类别中心的变化小于某阈值。
- 中止条件：
  - 迭代次数/簇中心变化率/最小平方误差MSE(Minimum Squared Error)

k-Means过程



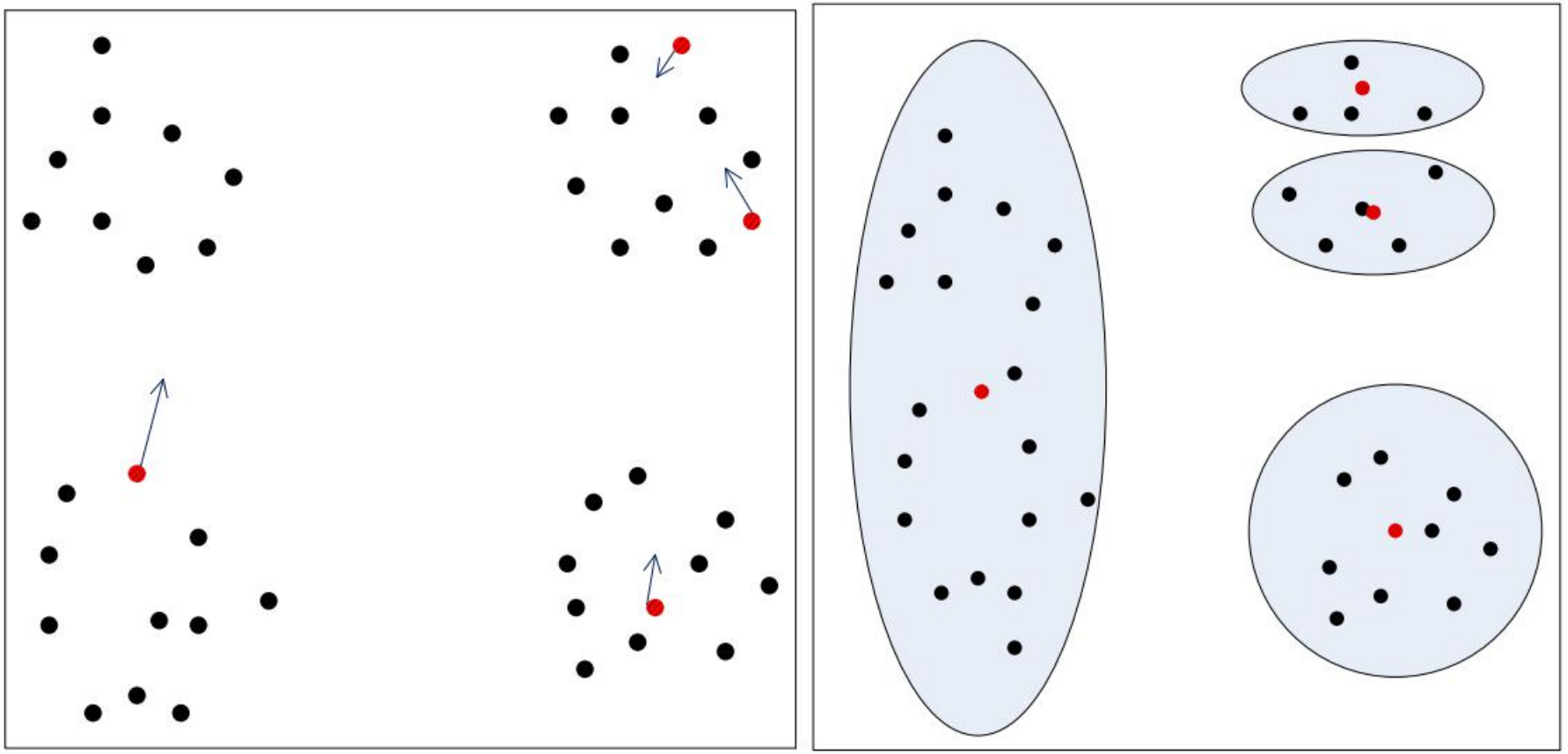

```
def k_means(data):
    m = len(data)
    n = len(data[0])
    cluster = [-1 for x in range(m)]      # 所有样本尚未聚类
    cluster_center = [[] for x in range(k)]  # 聚类中心
    cc = [[] for x in range(k)]           # 下一轮的聚类中心
    c_number = [0 for x in range(k)]      # 每个簇中样本的数目

    # 随机选择簇中心
    i = 0
    while i < k:
        j = random.randint(0, m-1)
        if is_similar(data[j], cluster_center):
            continue
        cluster_center[i] = data[j][:]
        cc[i] = [0 for x in range(n)]
        i += 1
    for times in range(40):
        for i in range(m):
            c = nearest(data[i], cluster_center)
            cluster[i] = c       # 第i个样本归于第c簇
            c_number[c] += 1
            add(cc[c], data[i])
        for i in range(k):
            divide(cc[i], c_number[i])
            c_number[i] = 0
            cluster_center[i] = cc[i][:]
            zero_list(cc[i])
        print times, cluster_center
    return cluster
```

对k-Means的思考

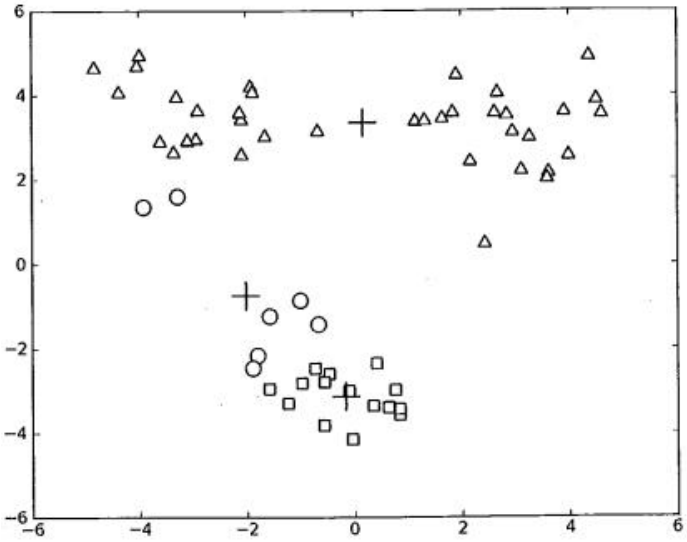
- 在k-Means迭代过程中，将簇中所有点的均值作为新质心，若簇中含有异常点，将导致均值偏离严重。以一维数据为例：
  - 数组1、2、3、4、100的均值为22，显然距离“大多数”数据1、2、3、4比较远
  - 改成求数组的中位数3，在该实例中更为稳妥。
  - 这种聚类方式即k-Mediods聚类(K中值距离)
- 初值的选择，对聚类结果有影响吗？
  - 如何避免？

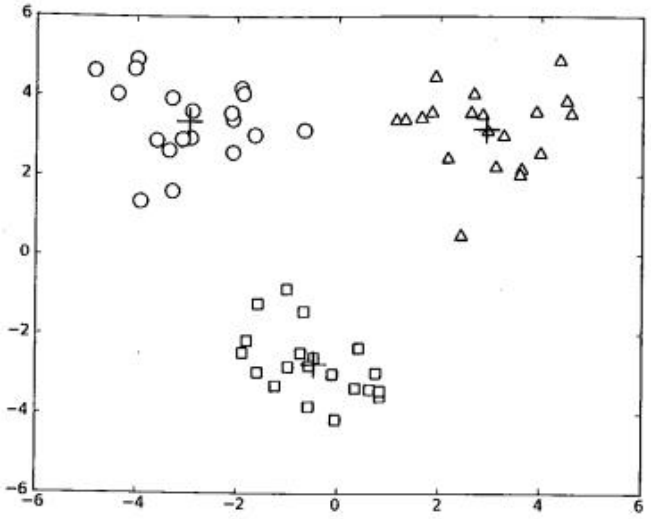
k-Means是初值敏感的



二分k-Means

- 首先将所有点作为一个簇，然后将该簇一分为二
- 选择能最大程度降低聚类代价函数（也就是误差平方和）的簇划分为两个簇（或者选择最大的簇等，选择方法多种）
- 重复上一步，直到簇的数目等于用户给定的数目k为止
- 优点：
  - 二分K均值可以加速K-means的执行速度，因为相似度计算少了
  - 不受初始化问题的影响，因为不存在随机点的选取，且每一步都保证了误差最小





Code2

```
def k_means(data):
    m = len(data)       # 样本个数
    n = len(data[0])    # 维度
    cluster_center = np.zeros((k, n))  # 聚类中心

    # 选择合适的初始聚类中心
    j = np.random.randint(m)    # [0,m)
    cluster_center[0] = data[j][:]
    dis = np.zeros(m)-1           # 样本到当前所有聚类中心的最近距离
    i = 0
    while i < k-1:
        for j in range(m):        # j:样本
            d = (cluster_center[i]-data[j]) ** 2  # data[j]与最新聚类中心cluster_center[ii]的距离平方
            d = np.sum(d)
            if (dis[j] < 0) or (dis[j] > d):
                dis[j] = d
        j = random_select(dis)  # 按照dis加权选择样本j
        i += 1
        cluster_center[i] = data[j][:]

    # 聚类
    cluster = np.zeros(m, dtype=np.int) - 1     # 所有样本尚未聚类
    cc = np.zeros((k, n))          # 下一轮的聚类中心
    c_number = np.zeros(k)     # 每个簇中样本的数目
    for times in range(40):
        for i in range(m):
            c = nearest(data[i], cluster_center)
            cluster[i] = c      # 第i个样本归于第c簇
            c_number[c] += 1
            cc[c] += data[i]
        for i in range(k):
            cluster_center[i] = cc[i] / c_number[i]
        cc.flat = 0
        c_number.flat = 0
    return cluster
```

k-Means的公式化解释

- 记K个簇中心为 $\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_k$，每个簇的样本数目为 $N_1, N_2, \cdots, N_k$
- 使用平方误差作为目标函数：$J(\mu_1, \mu_2, \cdots \mu_k) = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{K}\sum_{i=1}^{N_j}(x_i - \mu_j)^2$
- 对关于 $\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_k$ 的函数求偏导，其驻点为：

$$\frac{\partial J}{\partial \mu_j} = -\sum_{i=1}^{N_j}(x_i - \mu_j) \xrightarrow{令} 0 \Rightarrow \mu_j = \frac{1}{N_j}\sum_{i=1}^{N_j} x_i$$

如果使用其他相似度/距离度量

- 如：余弦相似度：
$$\cos\left(x_i, x_j\right)=\frac{x_i^T \cdot x_j}{\left|x_i\right| \cdot \left|x_j\right|}$$
- 使用余弦相似度平方作为目标函数：
$$J\left(\mu_1, \mu_2, \cdots \mu_k\right)=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{K}\sum_{i=1}^{N_j}\cos^2\left(x_i, \mu_j\right)$$
- 对关于 $\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_k$ 的函数求偏导，其驻点为：

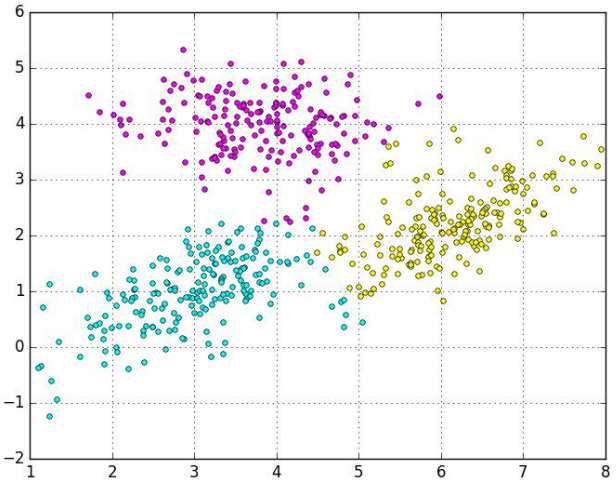
$$\frac{\partial J}{\partial \mu_j}=-\sum_{i=1}^{N_j}\cos\left(x_i, \mu_j\right)\sin\left(x_i, \mu_j\right)\cdot x_i \xrightarrow{\text{令}} 0 \Rightarrow \mu_j=?$$

Mini-batch k-Means算法描述

- k-Means在大数据量下的计算时间过长是一个重要问题
- Mini Batch K-Means保持聚类准确性，大幅度降低计算时间
- 从不同类别的样本中抽取一部分样本来代表各自类型进行计算。计算样本量少，减少运行时间，但因抽样必然会带来准确度下降。

Mini-batch k-Means

Given: k, mini-batch size b, iterations t, data set X
Initialize each $\mathbf{c} \in C$ with an $\mathbf{x}$ picked randomly from X
$\mathbf{v} \leftarrow 0$
for $i = 1$ to t **do**
  $M \leftarrow b$ examples picked randomly from X
  for $\mathbf{x} \in M$ **do**
    $\mathbf{d}[\mathbf{x}] \leftarrow f(C, \mathbf{x})$ // Cache the center nearest to $\mathbf{x}$
  end for
  for $\mathbf{x} \in M$ **do**
    $\mathbf{c} \leftarrow \mathbf{d}[\mathbf{x}]$ // Get cached center for this $\mathbf{x}$
    $\mathbf{v}[\mathbf{c}] \leftarrow \mathbf{v}[\mathbf{c}] + 1$ // Update per-center counts
    $\eta \leftarrow \frac{1}{\mathbf{v}[\mathbf{c}]}$ // Get per-center learning rate
    $\mathbf{c} \leftarrow (1 - \eta)\mathbf{c} + \eta\mathbf{x}$ // Take gradient step
  end for
end for



Code3

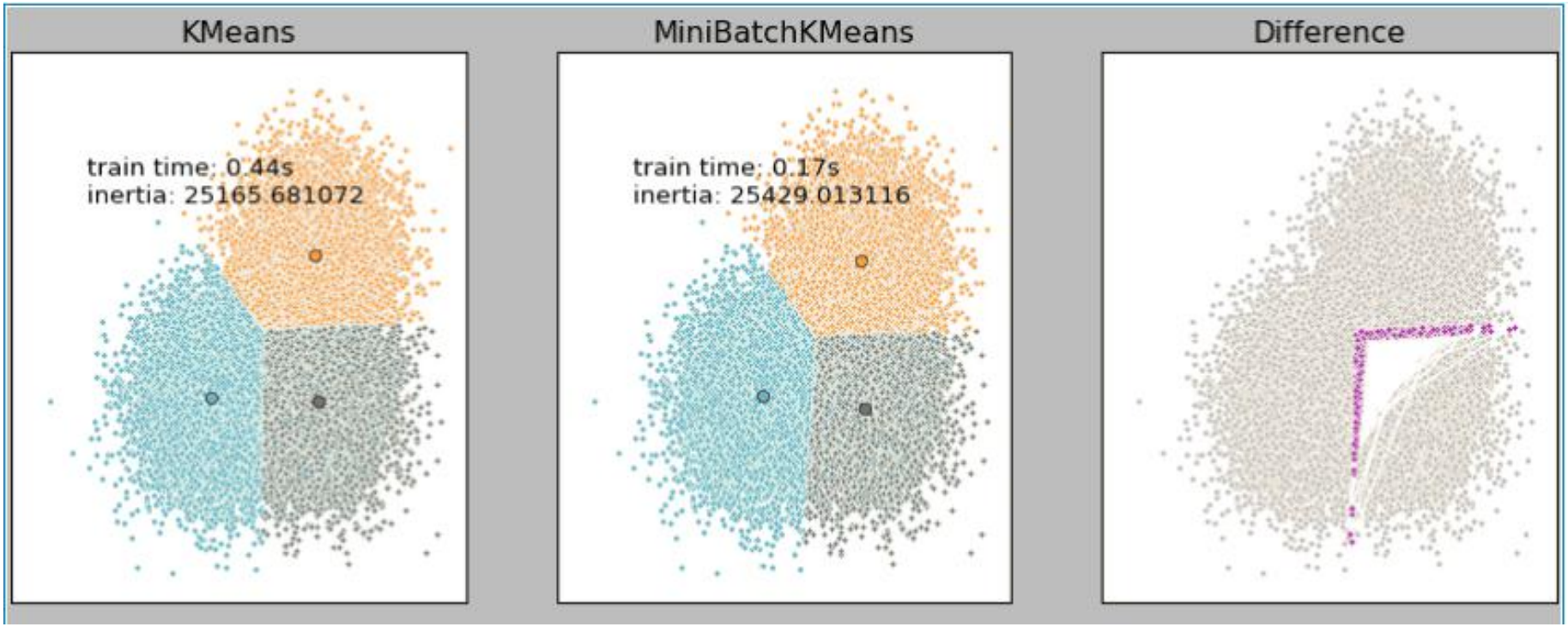
```
def k_means(data, k):
    m = len(data)       # 样本个数
    n = len(data[0])    # 维度
    cluster_center = np.zeros((k, n))  # 聚类中心

    # 选择合适的初始聚类中心
    j = np.random.randint(m)    # [0,m)
    cluster_center[0] = data[j][:]
    dis = np.zeros(m)-1          # 样本到当前所有聚类中心的最近距离
    i = 0
    while i < k-1:
        for j in range(m):        # j:样本
            d = (cluster_center[i]-data[j]) ** 2  # data[j]与最新聚类中心cluster_center[ii]的距离平方
            d = np.sum(d)
            if (dis[j] < 0) or (dis[j] > d):
                dis[j] = d
        j = random_select(dis)  # 按照dis加权选择样本j
        i += 1
        cluster_center[i] = data[j][:]
        print "Find Cluster Center:", i

    # 聚类
    cluster = np.zeros(m, dtype=np.int) - 1     # 所有样本尚未聚类
    cc = np.zeros((k, n))      # 下一轮的聚类中心
    c_number = np.zeros(k)     # 每个簇的样本数目
    times = 50
    for t in range(times):
        for i in range(m):
            if np.random.random() * m > 100:
                continue
            c = nearest(data[i], cluster_center)
            cluster[i] = c      # 第i个样本归于第c簇
            cc[c] += data[i]
            c_number[c] += 1
        for i in range(k):
            cluster_center[i] = cc[i] / c_number[i]
        cc.flat = 0
        c_number.flat = 0
        print t, '%.2f%%' % (100 *float(t) / times)
        print cluster_center
    return cluster
```

Mini-batch k-Means效果

- 3万样本点，二者的运行时间相差2倍多，但聚类结果差异却很小

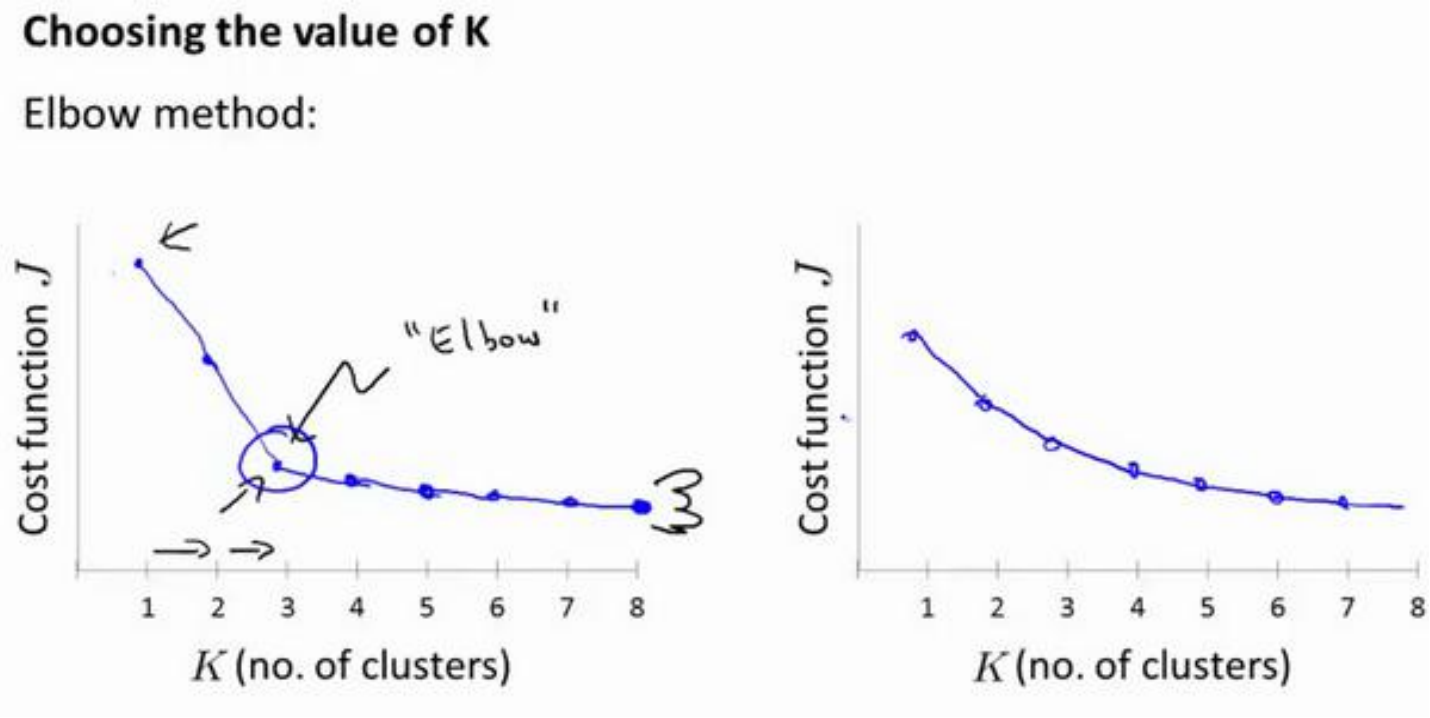


k-Means聚类方法总结

- 优点：
  - 是解决聚类问题的一种经典算法，简单、快速
  - 对处理大数据集，该算法保持可伸缩性和高效率
  - 当簇近似为高斯分布时，它的效果较好
- 缺点
  - 在簇的平均值可被定义的情况下才能使用，可能不适用于某些应用
  - 必须事先给出k(要生成的簇的数目)，而且对初值敏感，对于不同的初始值，可能会导致不同结果。
  - 不适合于发现非凸形状的簇或者大小差别很大的簇
  - 对躁声和孤立点数据敏感

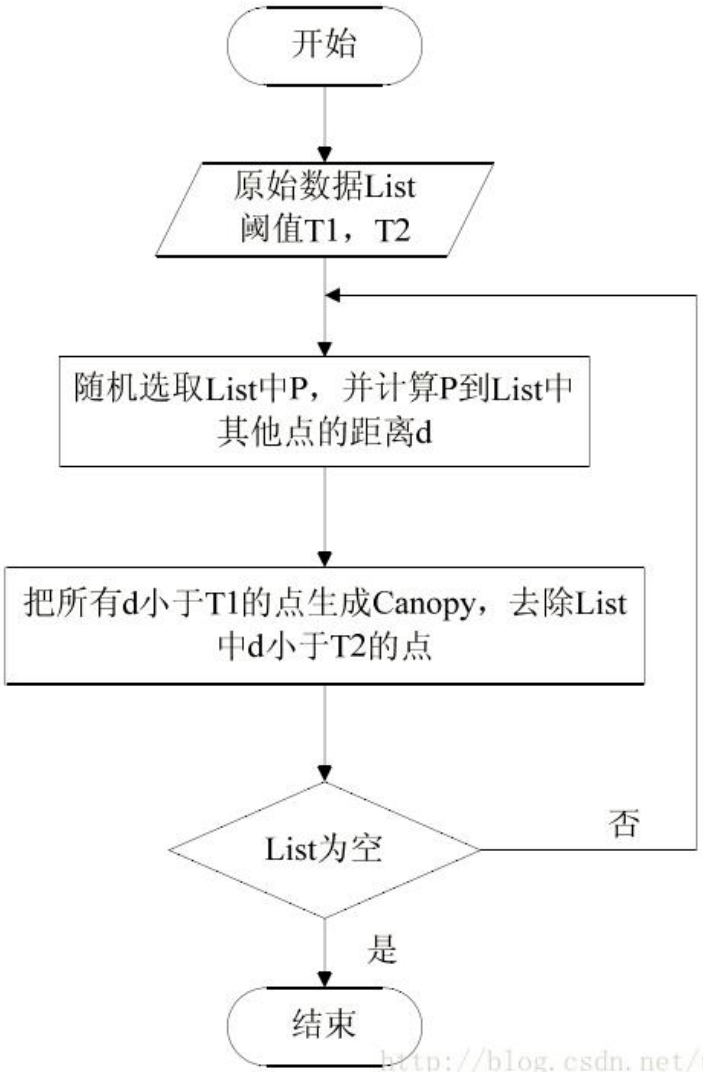
肘部法则

- “肘部法则”是选择聚类数目的一种方法。
- 我们所需要做的是改变K值，也就是聚类类别数目的总数。我们用一个聚类来运行K均值聚类方法。这就意味着，所有的数据都会分到一个聚类里，然后计算成本函数或者计算代价函数



Canopy算法

- Canopy算法一般用在K均值之前的粗聚类，算法如下：



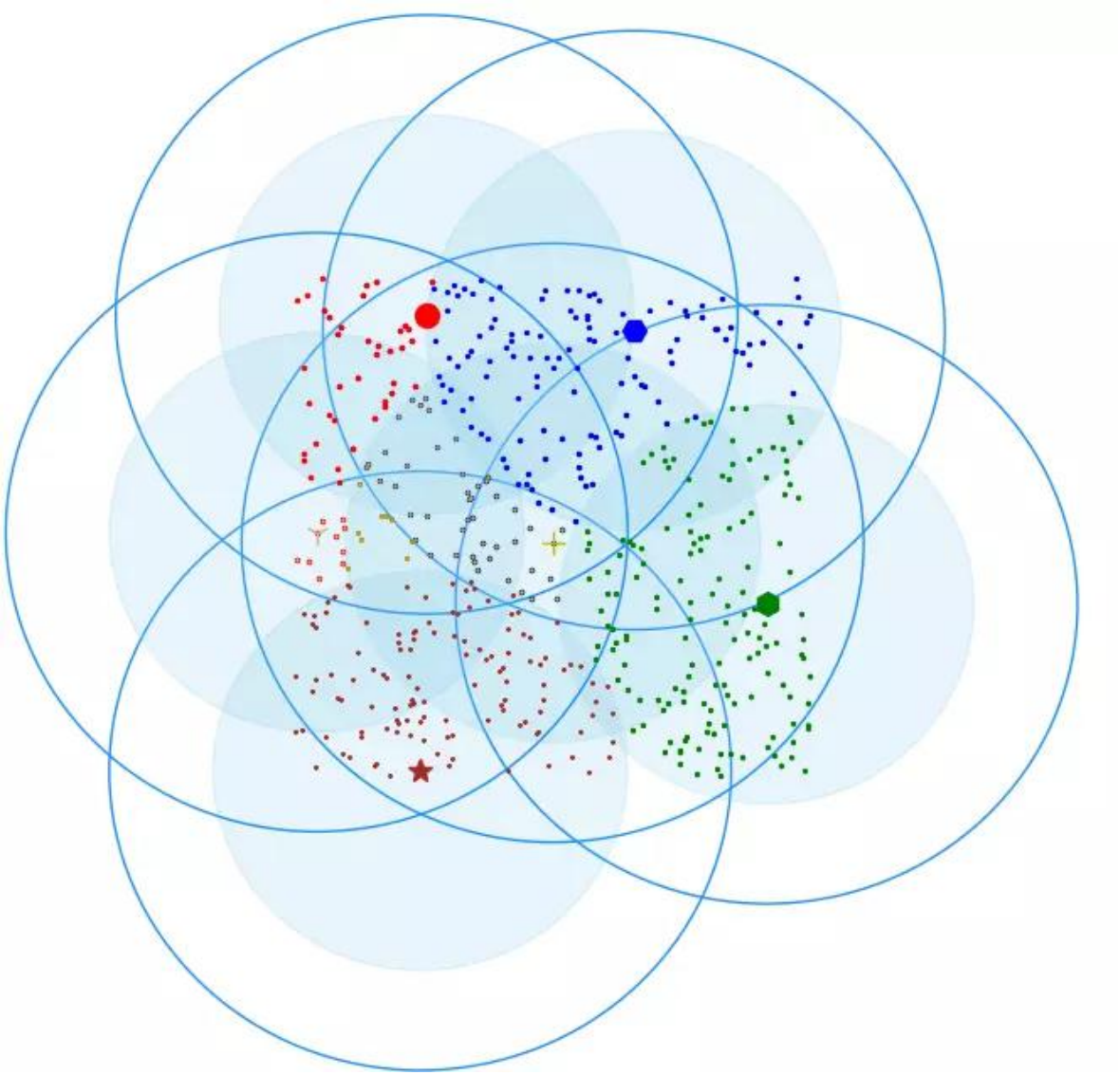
T1>T2

- 优点：
  - Canopy选择出来的每个Canopy的中心点作为Kmeans比较科学。
  - 只针对每个Canopy的内容做Kmeans聚类，减少相似计算的数量。

Code

```
def canopy(data, d_near, d_far):          # d_near < d_far
    m = len(data)          # 样本个数
    cluster = [[] for i in range(m)]
    center = []
    has = m
    while has > 0:
        i = np.random.randint(has)
        i = find_new_canopy(cluster, i)      # 查找cluster中第i个为空的值
        center.append(i)                     # canopy中心
        if i == -1:
            break
        for j in range(m):    # 针对新canopy中心data[i]，计算所有样本与之距离
            d = distance(data[i], data[j])
            if d < d_near:
                cluster[j] = [i]
            elif d < d_far:
                cluster[j].append(i)
        has = calc_candidate(cluster)
    return cluster, center
```

Canopy可视化结果



聚类的衡量指标

- 均一性
  - Homogeneity

$$h=\begin{cases}1 & if\ H(C)=0\\ 1-\dfrac{H(C\mid K)}{H(C)} & otherwise\end{cases}$$

  - 一个簇只包含一个类别的样本，则满足均一性
  - 条件经验熵H(C|K)，值越大则均一性越小
- 完整性
  - Completeness

$$c=\begin{cases}1 & if\ H(K)=0\\ 1-\dfrac{H(K\mid C)}{H(K)} & otherwise\end{cases}$$

  - 同类别样本被归类到相同簇中，则满足完整性
  - 条件经验熵H(K|C)，值越大则完整性越小
- V-measure

$$v_\beta=\frac{(1+\beta)\cdot h\cdot c}{\beta\cdot h+c}$$

  - 均一性和完整性的加权平均

调整兰德指数（ARI)

- 数据集S共有N个元素，两个聚类结果分别是：

$$X=\{X_1,X_2,\cdots X_r\}\quad Y=\{Y_1,Y_2,\cdots Y_s\}$$

C	Y_1	Y_2	$\cdots$	Y_s	sum
X_1	n_{11}	n_{12}	$\cdots$	n_{1s}	a_1
X_2	n_{21}	n_{22}	$\cdots$	n_{2s}	a_2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$
X_r	n_{r1}	n_{r2}	$\cdots$	n_{rs}	a_r
sum	b_1	b_2	$\cdots$	b_s	N

- X和Y的元素个数为：$a=\{a_1,a_2,\cdots a_r\}\quad b=\{b_1,b_2,\cdots b_s\}$
- 记：$n_{ij}=\left|X_i\bigcap Y_i\right|$
- 则：

$$ARI=\frac{Index-EIndex}{MaxIndex-EIndex}=\frac{\sum_{i,j}C_{n_{ij}}^2-\left[\left(\sum_i C_{a_i}^2\right)\cdot\left(\sum_j C_{b_j}^2\right)\right]\Big/C_n^2}{\frac{1}{2}\left[\left(\sum_i C_{a_i}^2\right)+\left(\sum_j C_{b_j}^2\right)\right]-\left[\left(\sum_i C_{a_i}^2\right)\cdot\left(\sum_j C_{b_j}^2\right)\right]\Big/C_n^2}$$

取值范围是[−1, 1]，值越大表示聚类结果和真实情况越吻合

轮廓系数(Silhouette)

- Silhouette系数是对聚类结果有效性的解释和验证
- 计算样本i到同簇其他样本的平均距离a_i。a_i越小，说明样本i越应该被聚类到该簇。将a_i称为样本i的簇内不相似度。
  - 簇C中所有样本的a_i均值称为簇C的簇不相似度。
- 计算样本i到其他某簇C_j的所有样本的平均距离b_{ij}，称为样本i与簇C_j的不相似度。定义为样本i的簇间不相似度：
  - b_i越大，说明样本i越不属于其他簇。

$$b_i = \min\{b_{i1}, b_{i2}, \cdots\cdots b_{i,K}\}$$

轮廓系数(Silhouette)

- 根据样本i的簇内不相似度a_i和簇间不相似度b_i，定义样本i的轮廓系数：

$$s(i)=\frac{b(i)-a(i)}{\max\{a(i),b(i)\}}$$

$$s(i)=\begin{cases}1-\dfrac{a(i)}{b(i)}, & a(i)<b(i)\\ 0, & a(i)=b(i)\\ \dfrac{b(i)}{a(i)}-1, & a(i)>b(i)\end{cases}$$

- s_i接近1，则说明样本i聚类合理；s_i接近-1，则说明样本i更应该分类到另外的簇；若s_i近似为0，则说明样本i在两个簇的边界上
- 所有样本的s_i的均值称为聚类结果的轮廓系数，是该聚类是否合理、有效的度量。

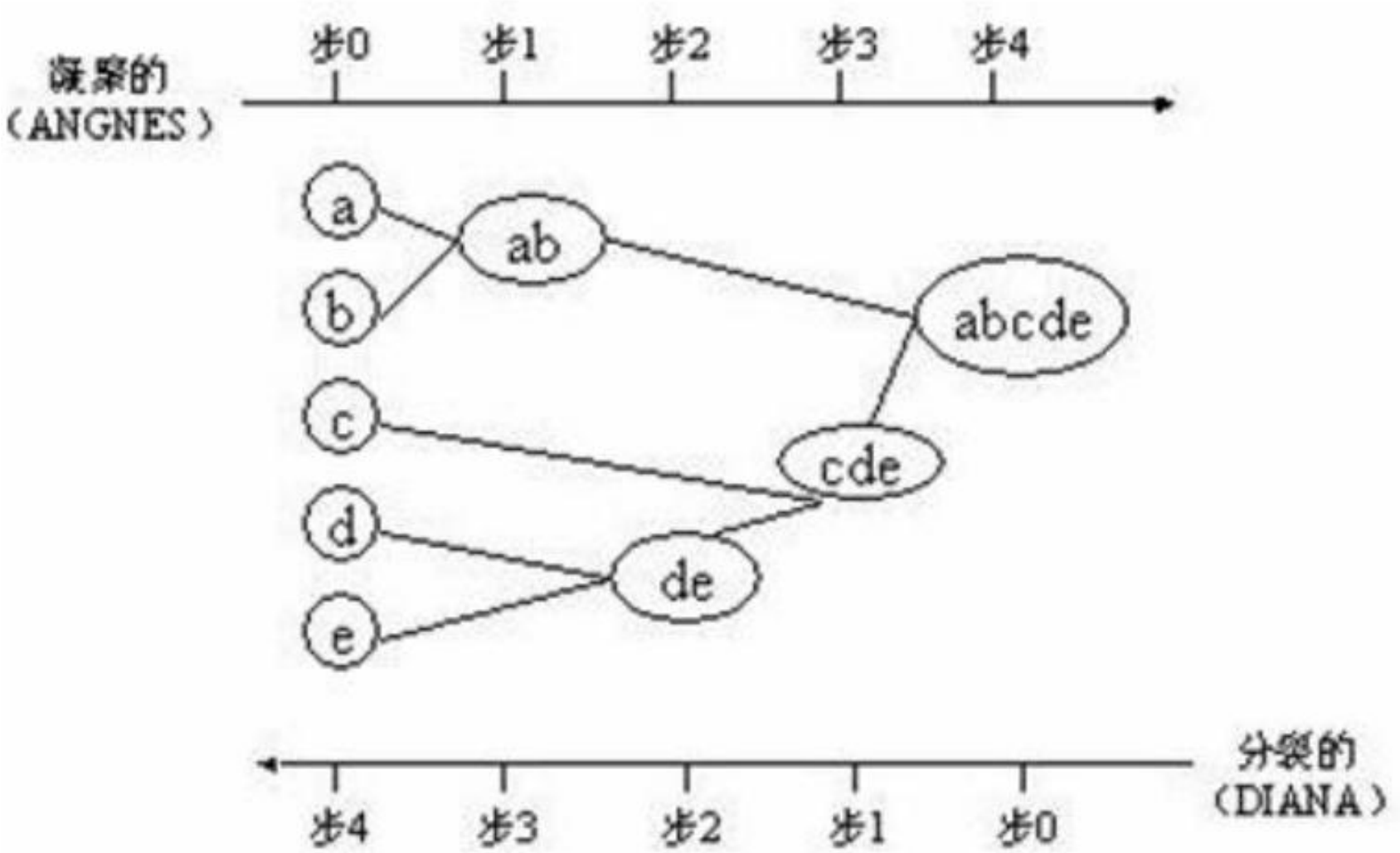
层次聚类方法

- 层次聚类方法对给定的数据集进行层次的分解，直到某种条件满足为止。具体又可分为：
- 凝聚的层次聚类：AGNES算法
  - 一种自底向上的策略，首先将每个对象作为一个簇，然后合并这些原子簇为越来越大的簇，直到某个终结条件被满足。
- 分裂的层次聚类：DIANA算法
  - 采用自顶向下的策略，它首先将所有对象置于一个簇中，然后逐渐细分为越来越小的簇，直到达到了某个终结条件。

AGNES和DIANA算法

- AGNES (AGglomerative NESting)算法最初将每个对象作为一个簇，然后这些簇根据某些准则被一步步地合并。两个簇间的距离由这两个不同簇中距离最近的数据点对的相似度来确定；聚类的合并过程反复进行直到所有的对象最终满足簇数目。
- DIANA (DIvisive ANAlysis)算法是上述过程的反过程，属于分裂的层次聚类，首先将所有的对象初始化到一个簇中，然后根据一些原则(比如最大的欧式距离)，将该簇分类。直到到达用户指定的簇数目或者两个簇之间的距离超过了某个阈值。

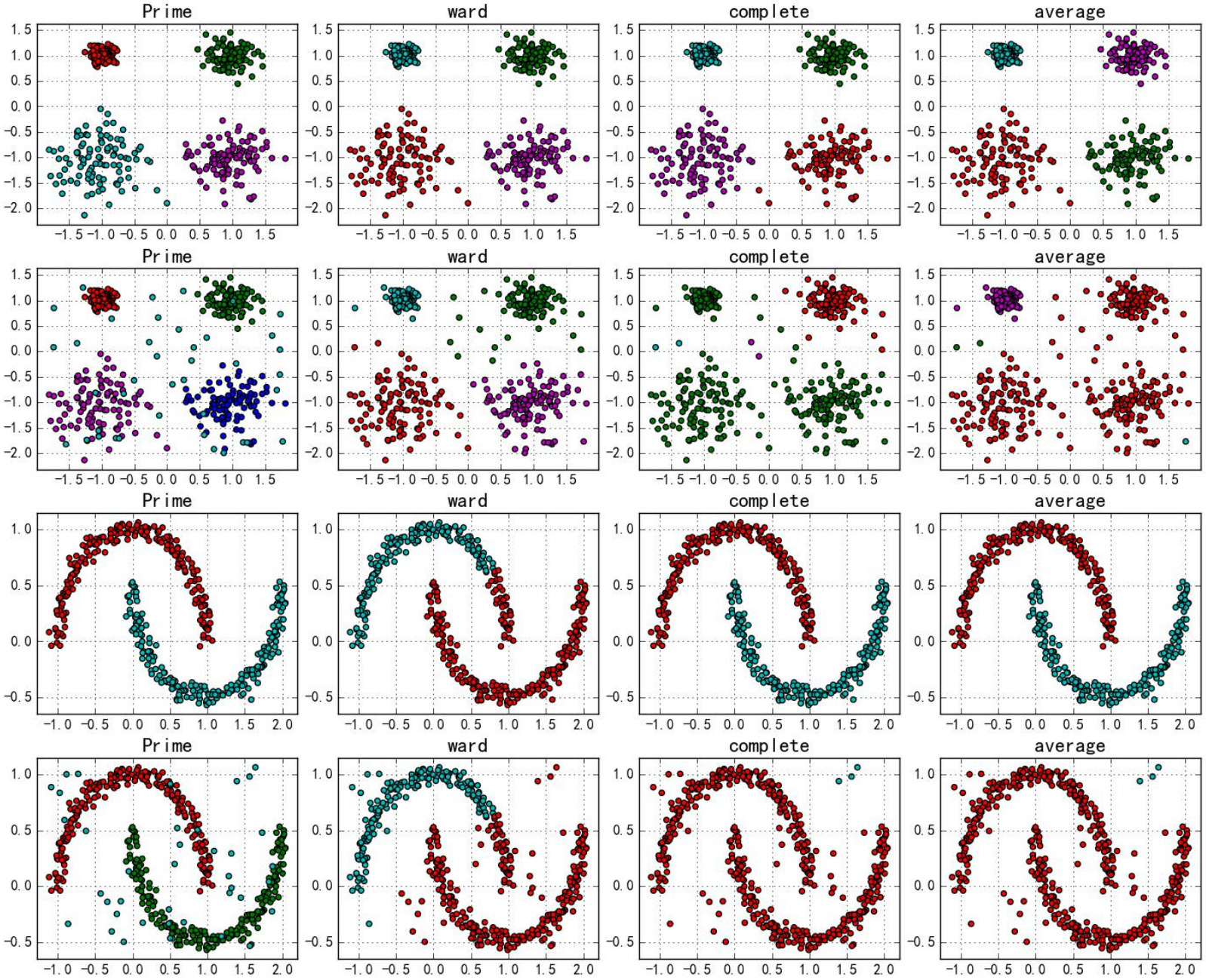
层次聚类示意图


凝聚的
(ANGNES)
步0
步1
步2
步3
步4
a
b
c
d
e
ab
de
cde
abcde
步4
步3
步2
步1
步0
分裂的
(DIANA)

AGNES中簇间距离的不同策略

- 最小距离
  - 两个集合中最近的两个样本的距离（Prime）
  - 容易形成链状结构
- 最大距离
  - 两个集合中最远的两个样本的距离（complete）
  - 若存在异常值，则不稳定
- 平均距离
  - 1、两个集合中样本间两两距离的平均值(average)
  - 2、两个集合中样本间两两距离的平方和(ward)

层次聚类的不同合并策略



密度聚类方法

- 密度聚类方法的指导思想是，只要样本点的密度大于某阈值，则将该样本添加到最近的簇中。
- 这类算法能克服基于距离的算法只能发现“类圆形”(凸)的聚类的缺点，可发现任意形状的聚类，且对噪声数据不敏感。但计算密度单元的计算复杂度大，需要建立空间索引来降低计算量。
  - DBSCAN

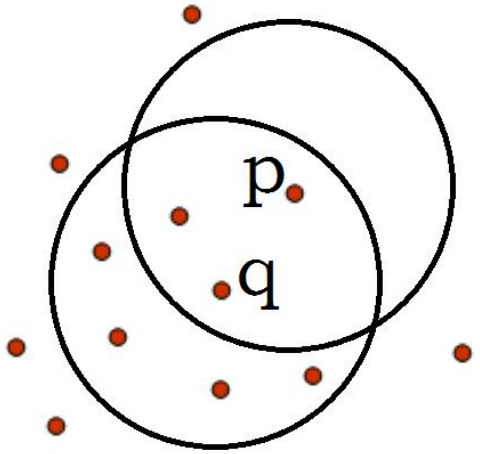
DBSCAN算法

- DBSCAN(Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise)
- 一个比较有代表性的基于密度的聚类算法。
- 与划分和层次聚类方法不同，它将簇定义为密度相连的点的最大集合，能够把具有足够高密度的区域划分为簇，并可在有“噪声”的数据中发现任意形状的聚类。

DBSCAN算法的若干概念

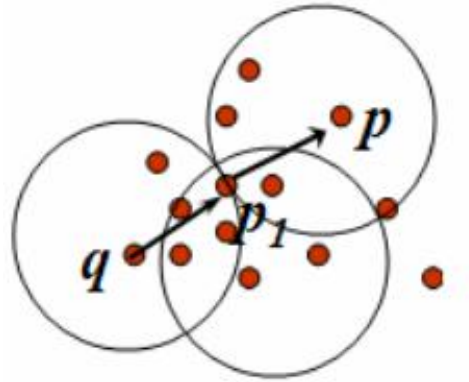
- 对象的 ε -邻域：给定对象在半径 ε 内的区域。
- 核心对象：对于给定的数目m，如果一个对象的 ε -邻域至少包含m个对象，则称该对象为核心对象。
- 直接密度可达(密度直达)：给定一个对象集合D，如果p是在q的 ε -邻域内，而q是一个核心对象，我们说对象p从对象q出发是直接密度可达的。

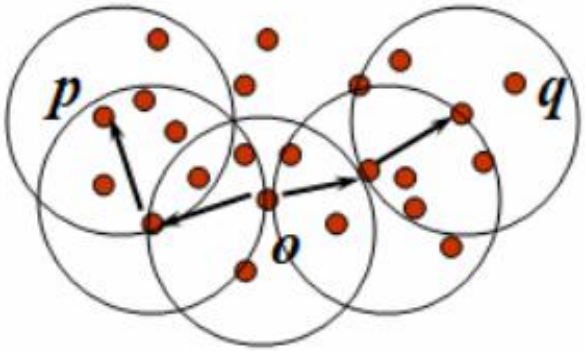
- 如图 ε =1cm，m=5，q是一个核心对象，从对象q出发到对象p是直接密度可达的。

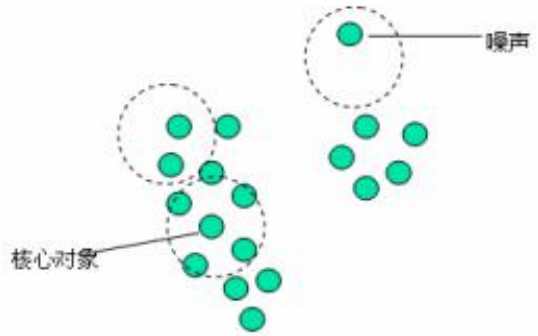


DBSCAN算法的若干概念

- 密度可达：如果存在一个对象链$p_1p_2\cdots p_n$，$p_1=q$，$p_n=p$，对$p_i \in D$，$(1 \leqslant i \leqslant n)$，$p_{i+1}$是从$p_i$关于 ε 和m直接密度可达的，则对象p是从对象q关于 ε 和m密度可达的。
- 密度相连：如果对象集合D中存在一个对象o，使得对象p和q是从o关于 ε 和m密度可达的，那么对象p和q是关于 ε 和m密度相连的。
- 簇：一个基于密度的簇是最大的密度相连对象的集合。
- 噪声：不包含在任何簇中的对象称为噪声。

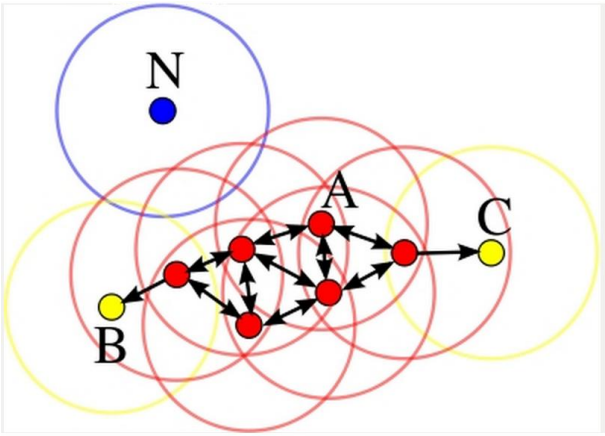


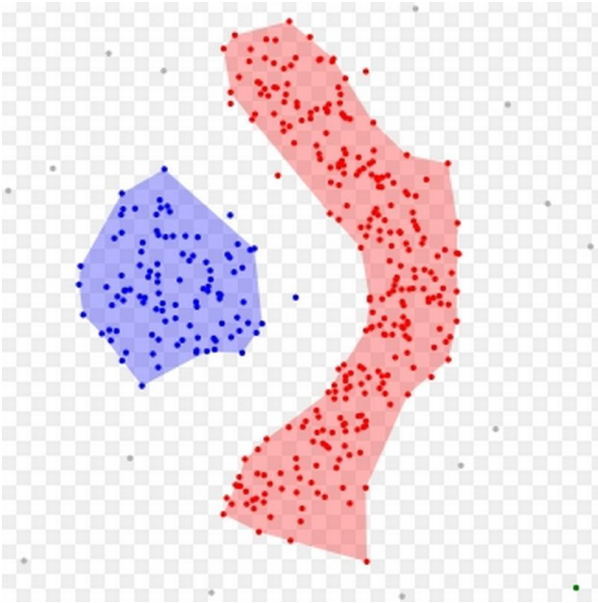




DBSCAN算法

- DBSCAN算法流程：
  - 如果一个点p的 ε -邻域包含多于m个对象，则创建一个p作为核心对象的新簇
  - 寻找并合并核心对象直接密度可达的对象
  - 没有新点可以更新簇时，算法结束
- 有上述算法可知：
  - 每个簇至少包含一个核心对象
  - 非核心对象可以是簇的一部分，构成了簇的边缘(edge)
  - 包含过少对象的簇被认为是噪声





DBSCAN算法

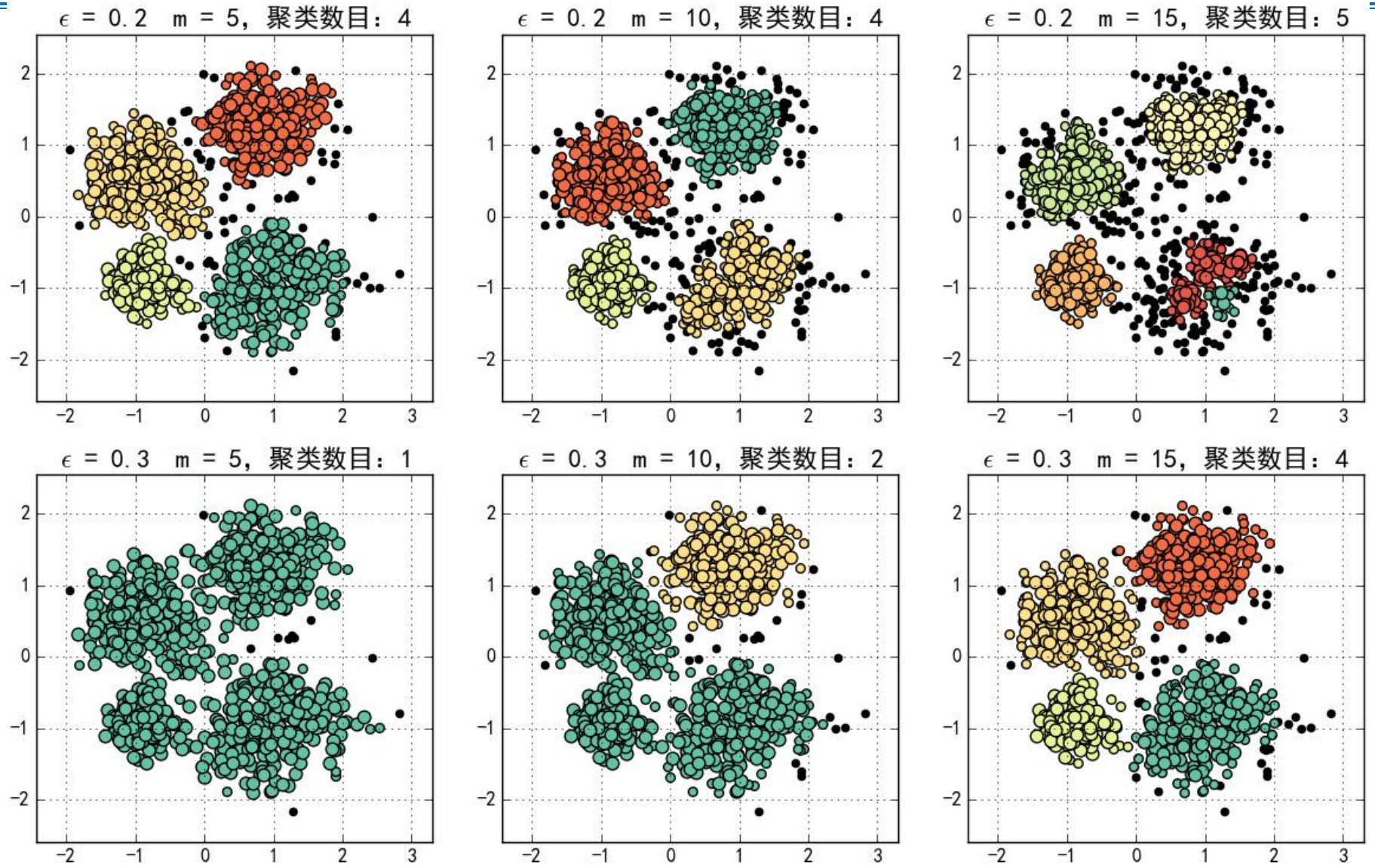
输入: 样本集 $D = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_m\}$;
邻域参数 $(\epsilon, MinPts)$.

过程:

初始化核心对象集合: $\Omega = \varnothing$
for $j = 1, 2, \ldots, m$ **do**
  确定样本 $\boldsymbol{x}_j$ 的 ϵ-邻域 $N_\epsilon(\boldsymbol{x}_j)$;
  if $|N_\epsilon(\boldsymbol{x}_j)| \geqslant MinPts$ **then**
    将样本 $\boldsymbol{x}_j$ 加入核心对象集合: $\Omega = \Omega \bigcup \{\boldsymbol{x}_j\}$
  end if
end for
初始化聚类簇数: $k = 0$
初始化未访问样本集合: $\Gamma = D$
while $\Omega \neq \varnothing$ **do**
  记录当前未访问样本集合: $\Gamma_{\text{old}} = \Gamma$;
  随机选取一个核心对象 $\boldsymbol{o} \in \Omega$, 初始化队列 $Q = < \boldsymbol{o} >$;
  $\Gamma = \Gamma \setminus \{\boldsymbol{o}\}$;
  while $Q \neq \varnothing$ **do**
    取出队列 Q 中的首个样本 $\boldsymbol{q}$;
    if $|N_\epsilon(\boldsymbol{q})| \geqslant MinPts$ **then**
      令 $\Delta = N_\epsilon(\boldsymbol{q}) \bigcap \Gamma$;
      将 Δ 中的样本加入队列 Q;
      $\Gamma = \Gamma \setminus \Delta$;
    end if
  end while
  $k = k + 1$, 生成聚类簇 $C_k = \Gamma_{\text{old}} \setminus \Gamma$;
  $\Omega = \Omega \setminus C_k$
end while

输出: 簇划分 $\mathcal{C} = \{C_1, C_2, \ldots, C_k\}$

DBSCAN聚类


ϵ = 0.2 m = 5，聚类数目：4
ϵ = 0.2 m = 10，聚类数目：4
ϵ = 0.2 m = 15，聚类数目：5
ϵ = 0.3 m = 5，聚类数目：1
ϵ = 0.3 m = 10，聚类数目：2
ϵ = 0.3 m = 15，聚类数目：4

总结

- 在数据量极大的情况下，可以优先选择kMeans聚类
  - 伸缩性好，时间复杂度为
- 在需要给定K或其他超参数的聚类算法中，如果业务逻辑无法提供先验信息，可以考虑elbow方法、轮廓系数等指标

参考文献

- Alex Rodriguez, Alessandro Laio. *Clustering by fast search and find of density peak*. Science. 2014
- Ulrike von Luxburg. *A tutorial on spectral clustering.* 2007
- Lang K. *Fixing two weaknesses of the spectral method*. Advances in Neural Information Processing Systems 18, 715–722. MIT Press, Cambridge, 2006
- Bach F, Jordan M. *Learning spectral clustering*. Advances in Neural Information Processing Systems 16 (NIPS). 305–312. MIT Press, Cambridge,2004
- Andrew Rosenberg, Julia Hirschberg, *V-Measure: A conditional entropy-based external cluster evaluation measure*, 2007.
- W. M. Rand. *Objective criteria for the evaluation of clustering methods*. Journal of the American Statistical Association. 1971
- Nguyen Xuan Vinh, Julien Epps, James Bailey, *Information theoretic measures for clusterings comparison*, ICML 2009
- Peter J. Rousseeuw, *Silhouettes: a Graphical Aid to the Interpretation and Validation of Cluster Analysis*. Computational and Applied Mathematics 20: 53–65, 1987
- https://en.wikipedia.org/wiki/Rand_index
- https://en.wikipedia.org/wiki/Adjusted_mutual_information

实验平台说明

- 上机实践平台：
  - **http://10.134.171.240**
  - 用户名：学号
  - 初始密码：**123456**
  - 在“我的课程”进入本课程，第四次实验“聚类实验”
  - 要求完成扩展实验，并提交实验报告
  - 实验报告统一发助教邮箱，实验报告命名“第n次实验-学号-姓名”