

一. 任务

深度（图）聚类

二. 关键问题

不同类别实例的特征相似性通常会使模型在决策过程中产生混淆，从而限制深度聚类算法性能的提升。如何加强样本的类内一致性与类间区分度，使无监督聚类模型能够学习更具有判别力的特征，是一个难点问题。

这里建议针对三种方法，选一个具体的例子，演示一下从输入到输出，这个例子中每一步的运算当前研究：操作和运算过程有哪一些，分别是怎么计算的。把这一点讲透。具体到数学表达式。

1. DEC (2016 ICML) / IDEC (2017 IJCAI) （基于自编码器的聚类模型）：早期经典方法，仅利用特征信息对数据重构。

这里第2点，对应算法性能不好是因为这里非图像数据通常比较稀疏，而图像数据通常比较致密吗？有一个问题，图像数据通常是怎样构造邻接矩阵的呢？

2. GAE&VGAE (2016 NIPS) / DAEGC (2019 IJCAI) / EGAE-JOCAS (2020 arxiv) （基于图自编码器的聚类模型）：仅利用邻接矩阵重构图（非常依赖数据的邻接信息），忽略了节点特征信息的作用。此类方法处理图数据集时表现良好，处理非图数据或稀疏邻接关系的图数据时，效果较差。

3. SDCN (2020 WWW) （自编码器+图卷积聚类模型）：首次结合特征信息与邻接信息来完成深度聚类任务。存在问题：1) 在特征传递过程中，特征信息与邻接信息不加选择地进行融合，特征相似的不同类别实例被选中的概率均等。2) 邻接信息实际上并没有辅助自编码器生成置信度更高的隐空间特征，此反馈过程是单向的。

是不是说特征压缩过程和邻接信息的提取过程是彼此独立的呢？能不能结合SDCN的具体操作过程再分析一下这两点。直观上来看好像SDCN每次更新完特征之后再辅助新的图像的生成好像已经考虑了特征的变化对图结构的构造了。

三. 动机

1. 图自编码器：擅长学习邻接信息；自编码器：擅长学习特征信息。

如果他们之前没有这种交互机制我认为这是一个很好的点。

1) 拟利用两者的优势，建立一种面向图自编码器与自编码器的互反馈机制。

2) 编码两种自编码器的共识信息，寻找每个节点中判别能力较强的特征（或更能代表当前节点的部分特征），为后续 Group-wise 建模做铺垫。

什么是他们的共识信息呢？

2. Group-wise 建模：Non-local 操作擅长建模样本与全局样本之间的关系。希望模型学习置信度更高的特征分布来构建伪标签（或称“实际”分布），进而使各子分布与更准确的“实际”分布进行对齐。这里特征分布指的是什么东西？

这里group的概念是怎么得到的？怎么定义group？什么是子分布？

这里可以画一张图来介绍这一段的内容。

1) 对特征相似的不同类别实例，仅依赖稀疏的邻接信息进行判别具有一定的局限性。例如，节点 A 共有 2 个邻居 B 和 C，若 A 和 B、C 特征相似（假设相似度分别为 90%，85%）且为邻居关系，则可推断 A 和 B、C 大概率为同一类别；若 A 和 D 特征相似（假设相似度为 80%）且不为邻居关系，则 A 和 D 可能为同一类别，也可能是特征相似却属于不同类别的情况。如果能够获得 B 与 D 之间的关系，假设 B 与 D 的相似度为 30%，继而结合 A 的邻接信息，可推断出 A 和 D 大概率不属于同一类别。

四. 拟采取方案 这一句话不太理解，两个字编码器分别对应特征和图吗？怎么相互作用呢？为什么置信度更高呢？

概括：通过图自编码器与自编码器的隐空间特征相互作用获得置信度更高的公共隐空间特征（我称为“共识信息”），继而利用共识信息生成更准确的伪标签（或称“实际分布”），最后通过与伪标签的对齐操作校对每个自编码器的隐空间特征分布（我称为“子分布”）。

1. 拟提出一种无监督图自编码器

A和X分别是怎么构造的？

对于不同类型的数据而言，这个A和X的获取方式肯定不一样。这一点也可以好好研究一下。

研究一下数据的构造方式。

这里每一步的具体数学运算也详细解释一下哈。每一步怎么运算的。说清楚。

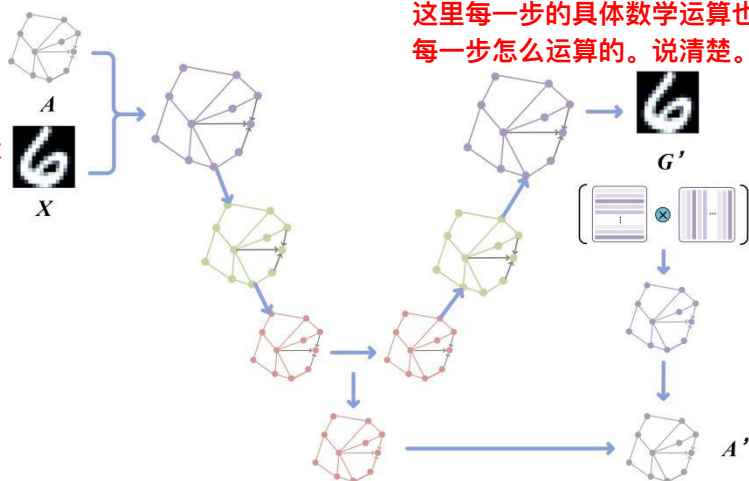
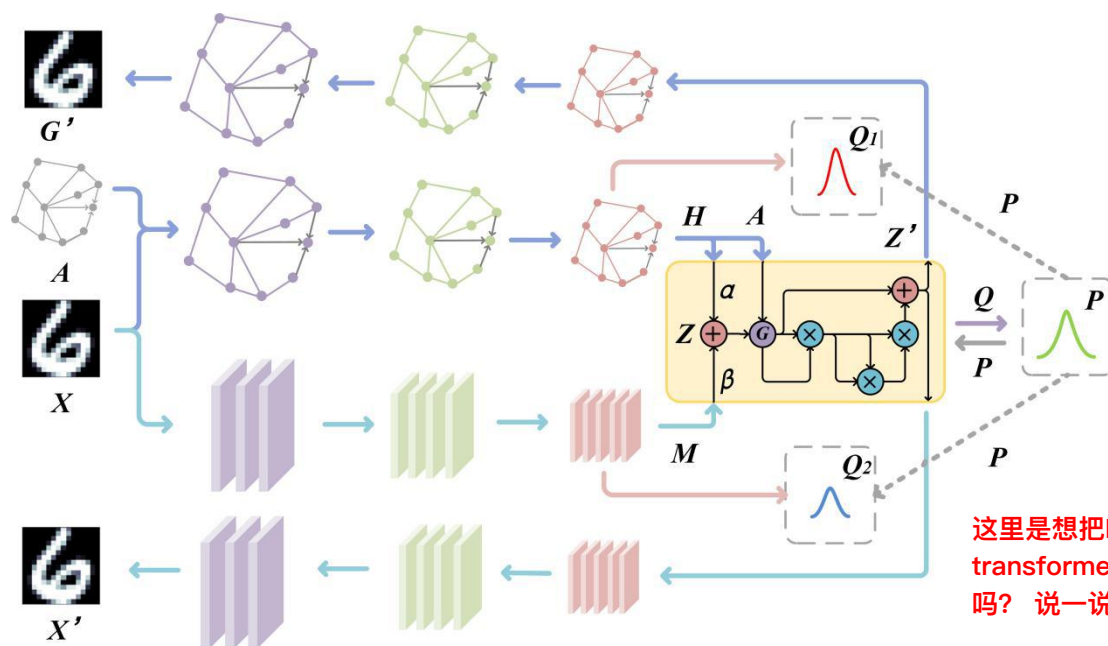


图 1

如图 1 所示：

- 1) A 表示邻接矩阵， X 表示特征矩阵， G' 表示生成图， A' 表示融合后邻接矩阵。
- 2) 重构 G' 与 $A \times X$ ，实际上是对图进行重构，维持图的完整性。
- 3) 重构 A' 与初始 A 融合后的邻接矩阵，猜想可以适当缓解过平滑（有待进一步实验验证）。

2. 拟提出一种无监督深度聚类框架



这里是想把M, H, A和transformer中的QKV对应起来吗？说一说这么做的想法？

图 2

图 3 为图 2 中黄框内容（生成共识信息过程）：

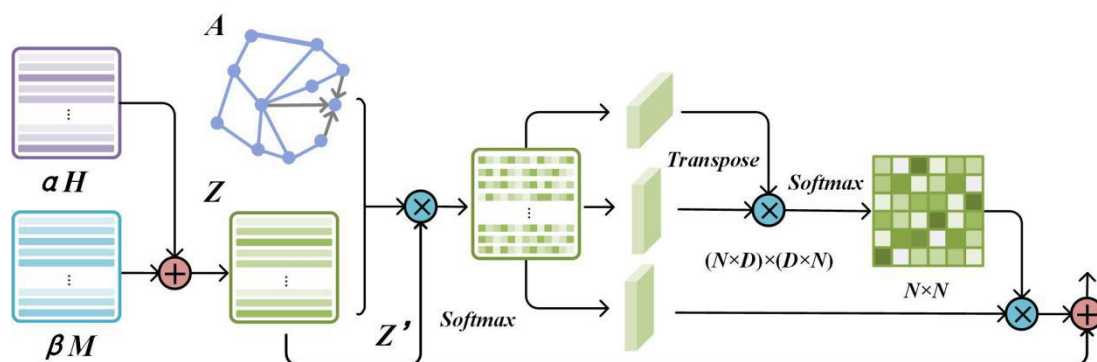


图 3

- 如图 2 所示， A 表示邻接矩阵， X 表示特征矩阵， G' 表示生成图， X' 表示生成特征矩阵。图自编码器记为 GAE，自编码器记为 AE。 H 表示由 GAE 生成的隐空间特征， M 表示由 AE 生成的隐空间特征。 α 和 β 表示两个可学的平衡因子，皆为 0-1 范围内。 Z 表示隐空间融合特征， $Z = \alpha H + \beta M$ 。 Q_1 和 Q_2 分别为隐空间特征 H 与 M 的预测分布， Q 为共识信息的预测分布， P 为 Q 生成的伪标签（或称“实际”分布）。

关于Z的构造方式，测试一下是拼接好还是相加好。

- 如图 3 所示，步骤 1) 粗融合。首先生成两个隐空间的融合信息 Z ， α 和 β 为可学参数，分别用于度量 H 与 M 的特征利用率，此过程由模型在训练过程中寻找最优粗融合选项；步骤 2) 聚合邻居。整合邻居信息，即 $Z' = A \times Z$ ，目的是为了增强 Z 中节点之间的结构化关系，特征相似且非邻居关系的节点不参与当前节点

且 -> 但

这里我们还需要梳理一下这里面进行的操作才行，把黄色方框里开展的运算也列举出来。我们一步一步的推导！他的数学运算必须要支持你的判断才行。

点的聚合过程；步骤3)对 Z' 进行**自增强（稀疏化）**。此过程仅需要学习每个节点的代表性特征，使模型在训练过程中加强对有效特征的响应，弱化无效特征(包括无关噪声、背景信息等)的响应，从而使所有节点主要保留判别能力强的特征。步骤4)构建所有样本的 Group-wise 关系。在步骤3)的基础上计算所有节点的相似度矩阵，类似 non-local 的方式，建模每个节点与其他所有节点的关系。5)残差连接。融合 Z' 与步骤4)的结果。

注：

在步骤2)的前提下，特征相似且非邻居关系的节点(可能同类也可能异类，我在此称为“可疑节点”)没有参与当前节点的步骤3)的过程，即排除了可疑节点参与节点自增强的可能性。否则，特征相似且非邻居关系的异类节点在步骤3)与步骤4)中被强化，这大概率造成模型误判。

在步骤4)中，由于步骤3)的作用，相似度矩阵更“纯”，这可能更利于节点之间关系的评估。特征相似且非邻居关系的同类节点可通过 Group-wise 获得同类节点的响应，特征相似且非邻居关系的异类节点可能通过 Group-wise 对异类节点的产生间接抑制。 **这些推断都需要有数学或者是实验上的支持才行哈。...**

3. 如图2所示，建立自监督学习模式。利用上述步骤5)的结果生成预测分布 Q ，并通过 Q 构造“实际”分布 P (伪标签)，同时生成隐空间特征 H 与 M 的预测分布 Q_1 和 Q_2 。我认为伪标签的好坏影响整个模型的性能上限，由于 Q 是由图自编码器与自编码器发挥各自优势、在相互作用下“共识”的产物，因此通过 Q 构造的伪标签大概率比通过 Q_1 或 Q_2 构造的伪标签精准，或者说 P 更逼近原始数据的实际分布。最后使 Q_1 和 Q_2 分别对齐伪标签 P ，将误差反馈给模型，希望模型在下次迭代在生成更优的子预测分布 Q_1 和 Q_2 。

这里可能也要看 A 和 X 的互补性。可能需要可视化，或者做一些简单的toy experiments验证一下。最好能够得到本文算法在哪些场景下，在什么条件下一定有效，或者在某些场景下倾向获得更好的结果。讲的更加具体和明确。...

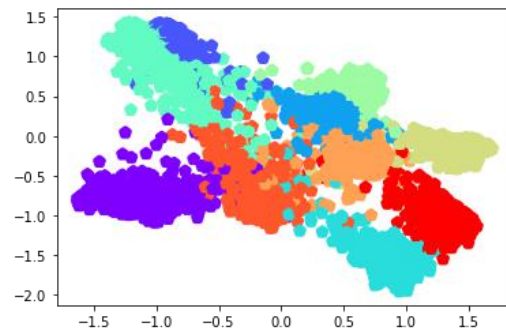
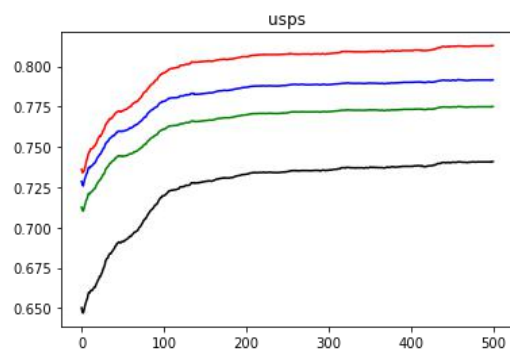
五. 实验

1. 数据

Dataset	Type	Samples	Classes	Dimension
USPS	Image	9298	10	256
HHAR	Record	10299	6	561
Reuters	Text	10000	4	2000
ACM	Graph	3025	3	1870
DBLP	Graph	4058	4	334
Citeseer	Graph	3327	6	3703

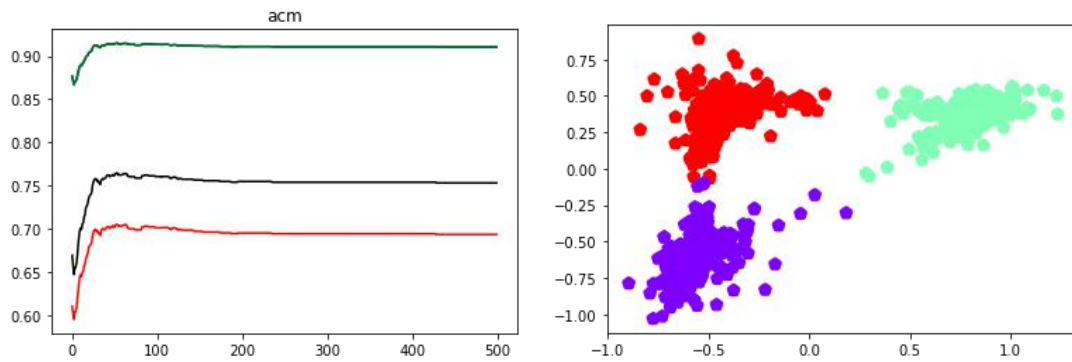
1) USPS (10 类)

Model	ACC	NIM	ARI	F1
SDCN (2020 WWW)	78.08	79.51	71.84	76.98
Ours	79.16	81.28	74.09	77.50
	↑	↑	↑	↑



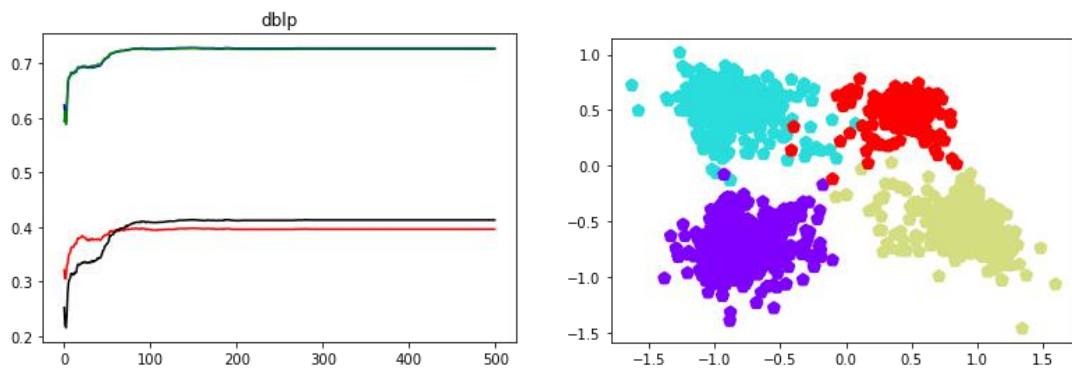
2) ACM (3 类)

Model	ACC	NIM	ARI	F1
SDCN (2020 WWW)	90.45	68.31	73.91	90.42
Ours	91.30	70.53	75.33	91.05
	↑	↑	↑	↑



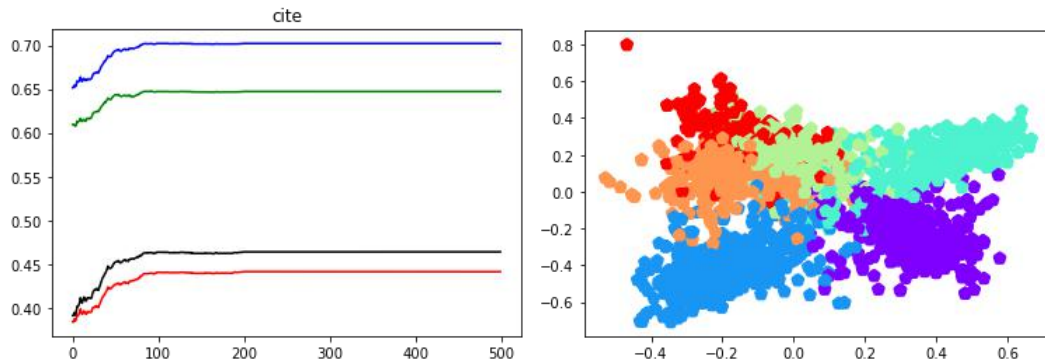
3) DBLP (4 类)

Model	ACC	NIM	ARI	F1
SDCN (2020 WWW)	68.05	39.50	39.15	67.71
Ours	72.66	40.33	41.32	72.54
	↑	↑	↑	↑



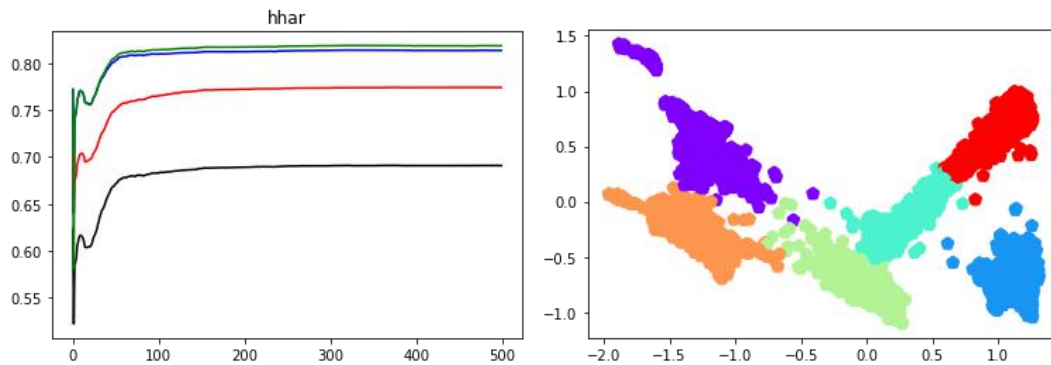
4) CITE (6 类)

Model	ACC	NIM	ARI	F1
SDCN (2020 WWW)	65.96	38.71	40.17	63.62
Ours	70.21	44.11	46.32	64.71
	↑	↑	↑	↑



5) HHAR (6 类)

Model	ACC	NIM	ARI	F1
SDCN (2020 WWW)	84.26	79.90	72.84	82.58
Ours	81.40	77.44	69.09	81.90
	↓	↓	↓	↓



6) REUT (4 类)

Model	ACC	NIM	ARI	F1
SDCN (2020 WWW)	79.30	56.89	59.5	66.15
Ours	-	-	-	-