NJ 算法 (原始定义版):

- 1. 将所有类初始化为一棵星状树,即每个分类单元成一类。
- 2. 对所有的分类单元, 计算其到主中心的距离(枝长)为:

$$d_u = \frac{1}{n-2} \sum_{i \neq u} d_{ui}$$

- 3. 如果有三个以上的分类存在,则继续执行循环:
 - a) 选择一对分类单元 x 与 y,使 $d_{xy} d_x d_y$ 最小
 - b) 将 x 与 y 归并为新类 z, 在星形树中添加一个新节点 z,
 - c) 新节点 z 代表新生成的分类, 计算 x 和 y 到新节点 z 的距离, 即 x, y 的枝长:

$$d_{xz} = \frac{1}{2}(d_{xy} + d_x - d_y)$$
$$d_{yz} = \frac{1}{2}(d_{xy} + d_y - d_x)$$

d) 计算新类 z 与其它类 u 的距离, 更新距离矩阵:

$$d_{uz} = \frac{1}{2}(d_{xu} + d_{yu} - d_{xy})$$

- e) 重复步骤 2 (更新其它类 u 的枝长, 计算新增类 z 的枝长)
- 4. 对于最后三个节点(x,y,z),每个节点的枝长为 $\frac{1}{2}(d_x-d_{yz})$

简化 NJ 算法:

使用 \mathbf{u} 节点到所有其它节点之和 D_{uv} 代替其到星状树中心的距离 d_{uv} 。

- 1. 将所有类初始化为一棵星状树,即每个分类单元成一类。
- 2. 对所有的分类单元,计算其到所有节点的距离之和为:

$$D_u = \sum_{i \neq u} d_{ui}$$

- 3. 如果有三个以上的分类存在,则继续执行循环:
 - a) 选择一对分类单元 x 与 y, 使 $d_{xy} \frac{1}{n-2}(D_x + D_y)$ 最小
 - b) 从星状树中删除 x 与 y, 并将它们作为新类 z 的子类
 - c) 变化后, x, y 的枝长为:

$$d'_{x} = \frac{1}{2} [d_{xy} + \frac{1}{n-2} (D_{x} - D_{y})]$$

$$d'_{y} = \frac{1}{2} [d_{xy} - \frac{1}{n-2} (D_{x} - D_{y})]$$

d) 新加入类 z 到其它类 u 的距离之和

$$D'_z = \frac{1}{2} \times (d_x + d_y - n \cdot d_{xy})$$

e) 计算新类 z 与其它类 u 的距离,以及 z 与 u 到其它节点的距离之和:

$$d_{uz} = \frac{1}{2} (d_{xu} + d_{yu} - d_{xy})$$

$$D'_{u} = D_{u} - d_{xu} - d_{yu} + d_{uz}$$

4. 对于最后三个节点(x,y,z),每个节点的枝长为 $\frac{1}{2}(D_x-d_{yz})$ 。(n=3 时 $D_x=d_x)$