

深度聚类算法研究综述(A Survey of Deep Clustering Algorithms)

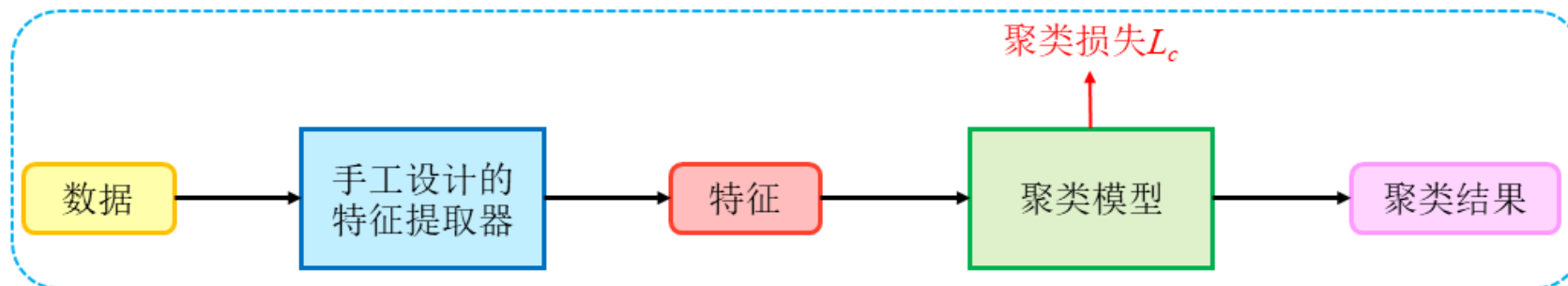
作者：凯鲁嘎吉 - 博客园 <http://www.cnblogs.com/kailugaji/>

[深度聚类](#)的博客写了几篇，也曾总结过专门的一篇博客：[深度聚类算法](#)，但并不全面。这篇博客对现有的深度聚类算法进行全面综述与总结，大部分内容来自于：[第40期：基于深度神经网络的聚类算法——郭西风](#)以及郭西风博士论文：[基于深度神经网络的图像聚类算法研究](#)。现有的深度聚类算法大都由聚类损失与网络损失两部分构成，博客从两个视角总结现有的深度聚类算法，即聚类模型与神经网络模型。

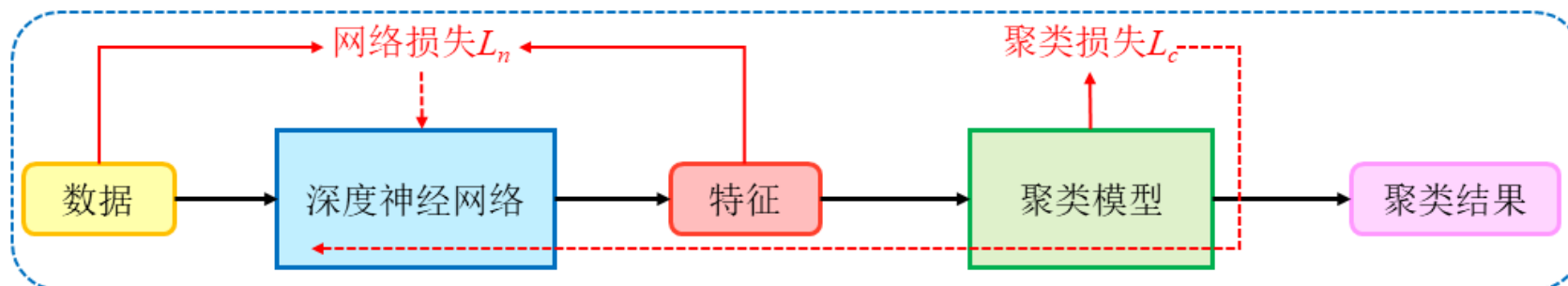
1. 什么是深度聚类？

► 什么是深度聚类?

• 传统聚类



• 深度聚类



□ 深度聚类核心思想：学习到的高质量的特征有助于提升聚类算法的性能，而聚类结果反过来可以引导神经网络学习更好的特征。其流程与有监督深度学习类似，都是同时完成特征学习任务 and 后续任务(分类、回归)。

□ 深度聚类一般范式：网络损失与聚类损失的组合

$$\min L = \alpha L_n + \beta L_c, \alpha \geq 0, \beta > 0$$

2. 从两个视角看深度聚类

➤ 从两个视角看深度聚类

一、从聚类模型看深度聚类

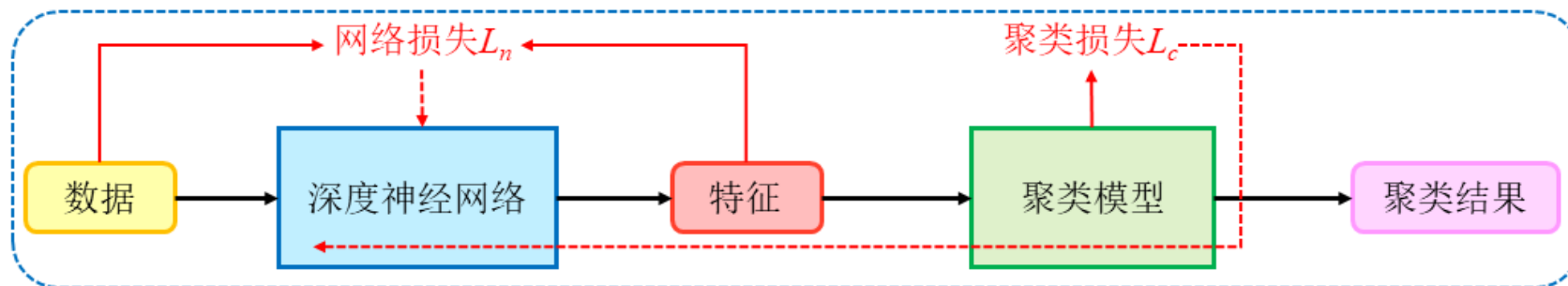
$$\min L = \alpha L_n + \beta L_c$$

- 基于K-means的深度聚类
- 基于谱聚类的深度聚类
- 基于子空间聚类的深度聚类
- 基于GMM的深度聚类
- 基于互信息的深度聚类
- 基于KL散度的深度聚类

二、从神经网络模型看深度聚类

$$\min L = \alpha L_n + \beta L_c$$

- 基于自编码器的深度聚类
- 基于变分自编码器的深度聚类
- 基于生成对抗网络的深度聚类
- 基于孪生网络/对比学习的深度聚类
- 基于图神经网络的深度聚类



3. 从聚类模型看深度聚类

3.1 基于K-means的深度聚类

一、从聚类模型看深度聚类

$$L = \alpha L_n + \beta L_c$$

• 基于K-means的深度聚类

传统聚类

给定 N 个样本 x 和 K 个初始化的聚类中心 μ , K-means通过最小化类内均方误差实现对样本的划分。对应的损失函数为:

$$L_c(\mu, s) = \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K s_{ik} \|x_i - \mu_k\|_2^2$$

其中, s_{ik} 指示样本是否属于类别 k , 是为1, 否为0。

深度聚类

样本 x 所在空间不易划分, 将其变换到新空间进行聚类。用 f_w 表示以 w 为参数的神经网络, 则基于K-means的深度聚类损失函数如下:

$$L_c(w, \mu, s) = \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K s_{ik} \|f_w(x_i) - \mu_k\|_2^2$$

使用该损失函数同时对 w , μ , s 进行更新即可实现特征学习与聚类过程的联合训练。

- ❑ 但直接最小化这个损失函数 $L_c(w, \mu, s)$ 有可能得到退化解: 神经网络 f_w 将所有样本 x 都映射到同一个点, 此时损失函数为0, 但所有样本都在同一个类里。
- ❑ 需要加入额外约束消除退化解, 比如加入网络损失 L_n [1-4], 或显式约束样本在各类均匀分布[5]。
- ❑ **优点:** 简单直观, 与单独使用K-means相比聚类性能有较大幅度提升。
- ❑ **缺点:** 继承了K-means受初始化影响大、不能处理簇形状非凸的数据、无法得到全局最优解等。

[1] YANG B, et al. Towards kmeansfriendly spaces: Simultaneous deep learning and clustering[C]//ICML. 2017.

[2] TIAN K, et al. Deepcluster: A general clustering framework based on deep learning[C]//ECML/PKDD. 2017.

[3] ALQAHTANI A, et al. A deep convolutional autoencoder with embedded clustering[C]//ICIP. 2018.

[4] MA Q, et al. Learning representations for time series clustering[C]//NeurIPS. 2019.

[5] CARON M, et al. Deep clustering for unsupervised learning of visual features[C]//ECCV. 2018.

一、从聚类模型看深度聚类

$$L = \alpha L_n + \beta L_c$$

• 基于谱聚类的深度聚类

传统聚类

给定样本集 x 和聚类个数 K 后, 先根据样本之间的距离构建相似性矩阵 A , 然后通过最小化下列损失, 函数求解谱嵌入特征 Z :

$$L_c(Z) = \text{Tr}(Z^T LZ) = \sum_{i,j} A_{ij} \|z_i - z_j\|^2 \quad s.t. \quad Z^T Z = I$$

其中, z_i 为 Z 的第 i 行, 对应第 i 个样本 x_i 的谱嵌入特征。

深度聚类

谱聚类并没有显式求出样本 x_i 到特征 z_i 的映射 f 。很自然的想法是使用深度神经网络来实现 f , 使用以下损失函数训练神经网络 f_w , 称为SpectralNet:

$$L_c(w, Z) = \sum_{i,j} A_{ij} \|z_i - z_j\|^2$$

$$s.t. \quad z_i = f_w(x_i), Z^T Z = I$$

- ❑ 性能受限于相似性矩阵 A 的质量, Yang[1]使用自编码器的嵌入层特征作为SpectralNet[2]输入。
- ❑ Huang等[3]将SpectralNet扩展到多视图场景。
- ❑ Yang等[4]扩展了谱嵌入的方式, 由原来的最小化在嵌入空间的欧式距离变为最小化样本之间的后概率分布。
- ❑ **优点:** 通过显式求解特征映射, 可以使用批量训练的策略, 提高向大规模数据的可扩展性。同时与基于K-means的深度聚类算法相比, 能充分利用数据的拓扑结构, 实现对非凸数据的聚类。
- ❑ **缺点:** 显式求解的特征映射不能保证是全局最优的。使用同样的相似性矩阵 A , 性能更差。

[1] YANG X, et al. Deep spectral clustering using dual autoencoder network[C]//CVPR. 2019.

[2] SHAHAM U, et al. Spectralnet: Spectral clustering using deep neural networks[C]//ICLR. 2018.

[3] HUANG S, et al. Multi-spectralnet: Spectral clustering using deep neural network for multiview data[J]. IEEE Transactions on Computational Social Systems, 2019.

[4] YANG L, et al. Deep clustering by gaussian mixture variational autoencoders with graph embedding[C]//ICCV. 2019.

参考: [多视图子空间聚类/表示学习\(Multi-view Subspace Clustering/Representation Learning\)](#), [关于“On the eigenvectors of p-Laplacian”目标函数的优化问题](#) - 凯鲁嘎吉 - 博客园

3.3 基于子空间聚类(Subspace Clustering, SC)的深度聚类

一、从聚类模型看深度聚类

$$L = \alpha L_n + \beta L_c$$

• 基于子空间聚类(Subspace Clustering, SC)的深度聚类

传统聚类

SC假设同一个类数据分布在同一个子空间上,不同类数据处在不同子空间中。它认为任何一个样本都可由和其属于同一个类的其他样本进行线性表达,即数据的自表达。SC一般使用以下损失函数:

$$L_c(C) = \|C\|_p, s.t. X = CX, \text{diag}(C) = 0$$

其中 X 为数据矩阵,每一行表示一个样本, C 为用于自表达的样本组合系数。

深度聚类

通过神经网络 f_w 后将数据 X 映射到特征 Z ,然后用 Z 做子空间聚类,同时对特征 Z 进行迭代更新,对应损失函数如下,称为DSC-Net:

$$L_c(w, C) = \|C\|_p + \lambda \|Z - CZ\|_F^2$$

$$s.t. z_i = f_w(x_i), \text{diag}(C) = 0$$

设计一个自表达层插入自编码器中间,完成 $Z=CZ$ 的运算,而将 C 作为该层可训练的参数。

❑ 后续的深度子空间聚类[1-5]基本上都延续了DSCNet[6]定义自表达层的做法,研究热点集中在如何给系数矩阵 C 施加额外的约束以及使用不同的网络结构等。

❑ **优点:** 与传统子空间聚类算法相比,深度子空间聚类算法能充分利用神经网络强大的特征提取能力,使用更具判别性的特征寻找更准确的子空间。与其他深度聚类算法相比,对处理高维数据具有比较好的效果。

❑ **缺点:** 时间空间复杂度都很高。自表达层参数 C 的元素数是样本数的平方,很难向大规模扩展。

[1] ZHANG J, et al. Self-supervised convolutional subspace clustering network[C]//CVPR. 2019.

[2] ZHOU P, et al. Deep adversarial subspace clustering[C]//CVPR. 2018.

[3] ZHOU L, et al. Latent distribution preserving deep subspace clustering[C]//IJCAL. 2019.

[4] JIANG Y, et al. When to learn what: Deep cognitive subspace clustering[C]//ACM Multimedia. 2018.

[5] ZHANG T, et al. Neural collaborative subspace clustering[C]//ICML. 2019.

[6] JI P, et al. Deep subspace clustering networks[C]//NIPS. 2017.

参考: [深度多视图子空间聚类](#), [多视图子空间聚类/表示学习\(Multi-view Subspace Clustering/Representation Learning\)](#), [字典更新与K-SVD](#) - 凯鲁嘎吉 - 博客园

3.4 基于高斯混合模型(Gaussian Mixture Model, GMM)的深度聚类

一、从聚类模型看深度聚类

$$L = \alpha L_n + \beta L_c$$

• 基于高斯混合模型(Gaussian Mixture Model, GMM)的深度聚类

传统聚类

GMM假设每个类的样本服从单独的高斯分布，整体数据服从多个高斯分布的混合。通过最大化似然函数求解GMM的参数。

$$L_c(\pi, \mu, \Sigma) = -\sum_{i=1}^N \ln \left\{ \sum_{k=1}^K \pi_k \mathcal{N}(x_i | \mu_k, \Sigma_k) \right\}$$

其中 π_k 为样本属于第 k 个类的概率， μ_k, Σ_k 为第 k 类的均值与协方差矩阵。

深度聚类

将样本原有表达 x 变为经过神经网络映射的特征 $z = f_w(x)$ ，则基于GMM的深度聚类算法的损失函数可写为以下形式：

$$L_c(w, \pi, \mu, \Sigma) = -\sum_{i=1}^N \ln \left\{ \sum_{k=1}^K \pi_k \mathcal{N}(z_i | \mu_k, \Sigma_k) \right\}$$

$$s.t. z_i = f_w(x_i)$$

从概率图模型的角度可将 Z 视为新的隐变量，期望可以通过 Z 更简单准确的推断原数据的分布。

- ❑ 该想法可以通过变分推断来实现，在深度学习领域则使用变分自编码器来实现，如[1]。
- ❑ Willetts等[2]将高斯混合模型用于变分梯子自编码器中，实现对数据的层次划分。
- ❑ Yin等[3]将VaDE[1]扩展到多视图聚类任务，让不同视图共享由高斯混合模型生成的隐变量。
- ❑ **优点：**可得到比传统GMM更好的聚类结果。与基于K-means的方法相比，对数据的簇的"形状"要求没那么高。
- ❑ **缺点：**存在计算复杂度高、收敛缓慢以及训练不稳定的问题。

[1] JANG Z, et al. Variational deep embedding: An unsupervised and generative approach to clustering[C]//IJCAI. 2017.

[2] WILETTS M, et al. Disentangling to cluster: Gaussian mixture variational ladder autoencoders[J]. ArXiv, 2019.

[3] YIN M, et al. Shared generative latent representation learning for multi-view clustering[C]//IJCAI. 2020.

参考：[聚类——GMM](#)，[基于图嵌入的高斯混合变分自编码器的深度聚类\(Deep Clustering by Gaussian Mixture Variational Autoencoders with Graph Embedding, DGG\)](#) - 凯鲁嘎吉 - 博客园

3.5 基于互信息的深度聚类

一、从聚类模型看深度聚类

$$L = \alpha L_n + \beta L_c$$

• 基于互信息的深度聚类

互信息最大化聚类算法的目标是求一个参数为 w 的条件模型 $p(y|x;w)$ ，在给定样本 x 时可以预测标签 y 的分布。可通过最大化输入变量 X 与输出变量 Y 之间的互信息来达到该目标。互信息定义：

$$I(X;Y) = H(Y) - H(Y|X) = \mathbb{E}_{p(y)}[-\log p(y)] - \mathbb{E}_{p(x)}[\mathbb{E}_{p(y|x)}[-\log p(y|x)]]$$

引入条件模型 $p(y|x;w)$ ，则 $\hat{p}(y;w) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p(y|x_i;w)$ ，可求得互信息的经验估计值为：

$$I_w(X;Y) = \mathbb{E}_{\hat{p}(y;w)}[-\log \hat{p}(y;w)] - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbb{E}_{p(y|x_i;w)}[-\log p(y|x_i;w)]$$

最终，损失函数定义为： $L_c(w) = R(w, \lambda) - I_w(X;Y)$

其中， R 为某种正则化约束， λ 为正则化项系数。

❑ Hu等[1]通过用深度神经网络 f_w 实现条件模型 $p(y|x;w)$ 将互信息最大化聚类算法扩展到深度聚类。

❑ 文献[2]用生成式对抗网络的判别器实现条件模型 $p(y|x;w)$ 。

❑ 除了直接计算经验互信息。文献[3, 4]则选择最大化互信息 $I(X;Y)$ 的下界。

❑ **优点：**不对数据分布做任何假设，更倾向于平衡的聚类，从而缓解了退化解问题(所有样本划为同一类)。

❑ **缺点：**存在计算复杂度高、收敛缓慢以及训练不稳定的问题。

[1] HU W, et al. Learning discrete representations via information maximizing self-augmented training[C]//ICML. 2017.

[2] SPRINGENBERG J T. Unsupervised and semi-supervised learning with categorical generative adversarial networks[C]//ICLR. 2016.

[3] ZHAO J, et al. Deep image clustering with category-style representation[C]//ECCV. 2020.

[4] YANG X, et al. Deep spectral clustering using dual autoencoder network[C]//CVPR. 2019.

参考：[COMPLETER: 基于对比预测的缺失视图聚类方法](#)，[Meta-RL——Decoupling Exploration and Exploitation for Meta-Reinforcement Learning without Sacrifices](#) - 凯鲁嘎吉 - 博客园

3.6 基于KL的深度聚类

一、从聚类模型看深度聚类

$$L = \alpha L_n + \beta L_c$$

• 基于KL散度的深度聚类

给定样本的嵌入特征 z 和在嵌入空间初始的聚类中心 μ ，使用学生 t 分布衡量第 i 个样本属于第 j 个类的概率为 Q ，然后根据 Q 定义目标分布 P (sharp处理):

$$q_{ij} = \frac{(1 - \|z_i - \mu_j\|^2)^{-1}}{\sum_j (1 - \|z_i - \mu_j\|^2)^{-1}} \quad p_{ij} = \frac{q_{ij}^2 / \sum_i q_{ij}}{\sum_j (q_{ij}^2 / \sum_i q_{ij})}$$

则KL散度损失定义为: $L_c(w, \mu) = KL(P \| Q) = \sum_i \sum_j p_{ij} \ln \frac{p_{ij}}{q_{ij}}$, s.t. $z_i = f_w(x_i)$

- ❑ 通过最小化KL损失，可实现将距离簇中心近的样本变得更近，使数据在特征空间更易划分。
- ❑ Xie等[1]最先提出该损失并用其微调一个预训练好的编码器，称为DEC算法[1]。
- ❑ 有的使用其他神经网络结构，有的向迁移学习、多视图学习、缺失多视图学习等领域扩展[2-7]。
- ❑ **优点**：结构简单、效率高和易扩展等。
- ❑ **缺点**：对网络预训练要求较高。若使用预训练的特征得到的聚类精度较低，则经过KL散度损失微调精度也不能提高很多。目标分布由学生 t 分布得到，对其进行更新的频率作为算法超参数，对不同的数据集较为敏感。

[1] XIE J, et al. Unsupervised deep embedding for clustering analysis[C]//ICML. 2016.

[2] LI F, et al. Discriminatively boosted image clustering with fully convolutional autoencoders[J]. Pattern Recognition, 2018.

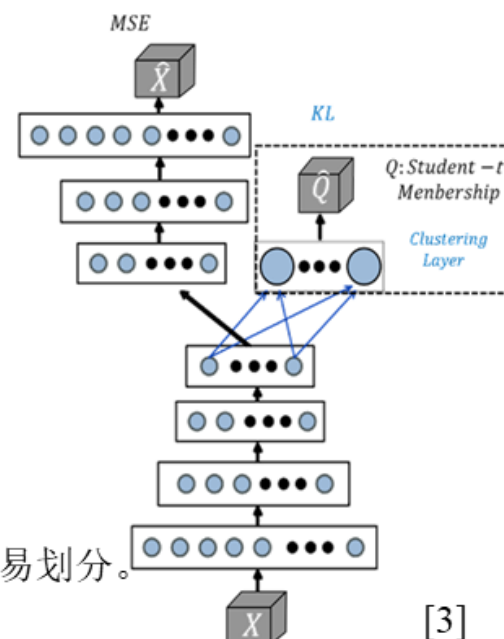
[3] GUO X, et al. Improved deep embedded clustering with local structure preservation[C]//IJCAI. 2017.

[4] DIZAJI K G, et al. Deep clustering via joint convolutional autoencoder embedding and relative entropy minimization[C]//ICCV. 2017.

[5] WANG C, et al. Attributed graph clustering: A deep attentional embedding approach[C]//IJCAI. 2019.

[6] HAN K, et al. Learning to discover novel visual categories via deep transfer clustering[C]//ICCV. 2019.

[7] XU C, et al. Adversarial incomplete multi-view clustering[C]//IJCAI. 2019.



参考: [Deep Clustering Algorithms](#), 关于“Unsupervised Deep Embedding for Clustering Analysis”的优化问题, 结构深层聚类网络, 具有协同训练的深度嵌入多视图聚类 - 凯鲁嘎吉 - 博客园

4. 从神经网络模型看深度聚类

4.1 基于自编码器(AutoEncoder, AE)的深度聚类

二、从神经网络模型看深度聚类 $L = \alpha L_n + \beta L_c$

• 基于自编码器(AutoEncoder, AE)的深度聚类

AE是最常用的以无监督方式训练的神经网络，也是最早和最广泛用于聚类任务的网络。AE一般由编码器 f_w 和解码器 g_u 两个子网络组成，通过对输入样本进行重建来学习样本特征 $z_i = f_w(x_i)$ ，即损失函数为：

$$L_n(w, u) = \sum_i \|x_i - g_u(f_w(x_i))\|_2^2$$

通过与包含 $f_w(x_i)$ 项的聚类损失 L_c (K-means, 谱聚类, 子空间聚类等)合作，完成深度聚类任务。AE可看作是聚类模型的"正则化项"，用来约束特征 z_i ，降低退化解风险。

❑ 与K-means损失结合[1, 2]

❑ Pros:

- Easy to implement

❑ 与谱聚类损失结合 [3, 4]

❑ Cons:

- Introduce a hyper-parameter to balance the two losses
- Limited network depth

❑ 与子空间聚类结合 [5-8]

❑ 与KL散度损失结合 [9,10]

[1] YANG B, et al. Towards kmeans-friendly spaces: Simultaneous deep learning and clustering[C]//ICML. 2017.

[2] MA Q, et al. Learning representations for time series clustering[C]//NeurIPS. 2019.

[3] YANG X, et al. Deep spectral clustering using dual autoencoder network[C]//CVPR. 2019.

[4] ZHANG J, et al. Self-supervised convolutional subspace clustering network[C]//CVPR. 2019.

[5] JI P, et al. Deep subspace clustering networks[C]//NIPS. 2017.

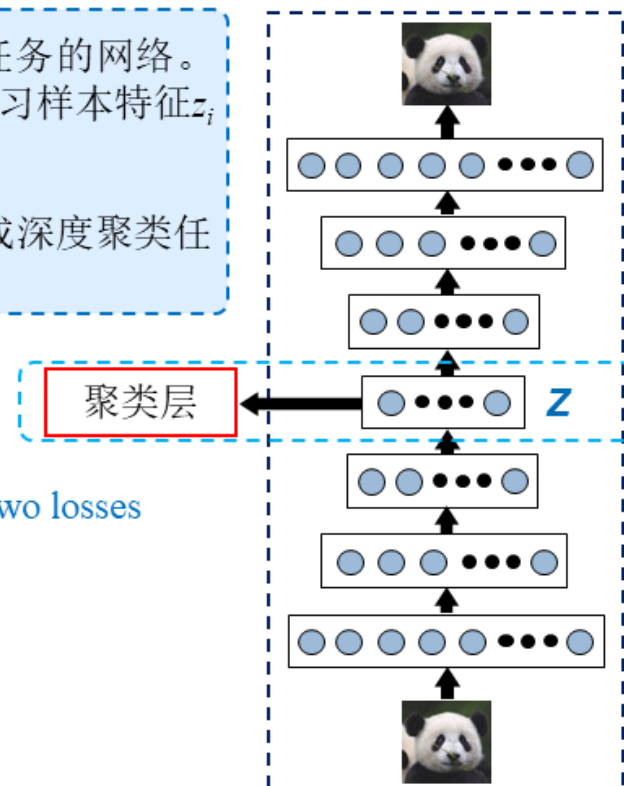
[6] ZHOU P, et al. Deep adversarial subspace clustering[C]//CVPR. 2018.

[7] ZHOU L, et al. Latent distribution preserving deep subspace clustering[C]//IJCAI. 2019.

[8] ZHANG T, et al. Neural collaborative subspace clustering[C]//ICML. 2019.

[9] GUO X, et al. Improved deep embedded clustering with local structure preservation[C]//IJCAI. 2017.

[10] DIZAJI K G, et al. Deep clustering via joint convolutional autoencoder embedding and relative entropy minimization[C]//ICCV. 2017.



参考: [Deep Clustering Algorithms](#) - 凯鲁嘎吉 - 博客园 (DEC, IDEC, DFKM, DCEC)

4.2 基于变分自编码器(Variational AutoEncoder, VAE)的深度聚类

二、从神经网络模型看深度聚类 $L = \alpha L_n + \beta L_c$

• 基于变分自编码器(Variational AutoEncoder, VAE)的深度聚类

VAE的目的是构建一个生成模型，使其逼近数据 x 的真实分布 $p(x)$ 。通过最大化 X 的对数似然函数以及贝叶斯推断，可以得到：

$$\ln p(X) \geq L_{ELBO}(X) = \mathbb{E}_{z \sim q} [\ln p(X|z)] - KL(q(z|X) \| p(z))$$

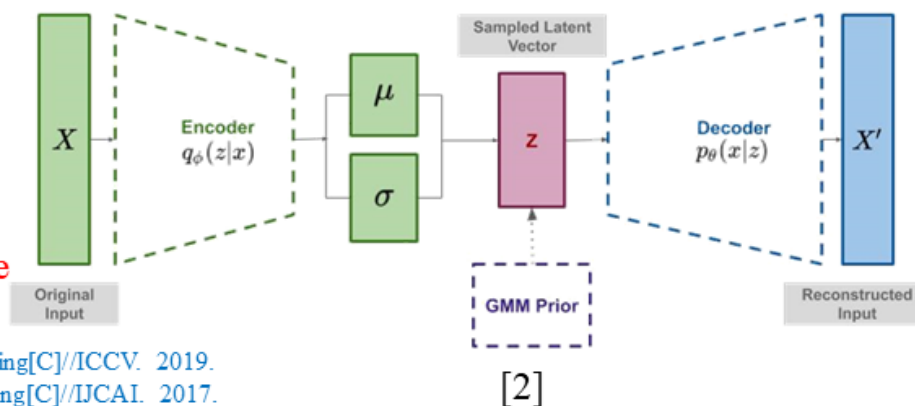
其中 L_{ELBO} 称为证据下界， z 为隐变量，一般约束其服从标准正态分布。

用编码器 f_w 实现 $q(z|x_i)$ ，解码器 g_u 实现 $p(x_i|z)$ ，则第一项就是对样本 x_i 编码和解码的过程，第二项是约束编码器的隐层分布与 $p(z)$ 一致，即标准正态分布。所以VAE的损失函数为：

$$L_n(w, u) = \sum_i \|x_i - g_u(\text{Sampling}(f_w(x_i)))\|_2^2 + KL(f_w(x_i) \| p(z))$$

其中Sampling表示从一个高斯分布中随机采样一个点，均值和方差是由编码器 f_w 推断。

- ❑ 由于原始的VAE假设隐变量 z 服从标准正态分布，因此 z 并不能体现样本的类别信息。
- ❑ 如果假设隐变量 z 服从混合高斯分布，则可以捕获数据的类别信息，从而实现聚类功能。
- ❑ 文献[1-4]都是使用该思路将VAE用于深度聚类任务的。
- ❑ **Pros:** Capable to generate samples, Decent theoretical guarantee
- ❑ **Cons:** High-computational complexity



- [1] YANG L, et al. Deep clustering by gaussian mixture variational autoencoders with graph embedding[C]//ICCV. 2019.
- [2] JIANG Z, et al. Variational deep embedding: An unsupervised and generative approach to clustering[C]//IJCAI. 2017.
- [3] LI X, et al. Learning latent superstructures in variational autoencoders for deep multidimensional clustering[C]//ICLR. 2019.
- [4] YIN M, et al. Shared generative latent representation learning for multi-view clustering[C]//AAAI. 2020.

10

参考：[变分推断与变分自编码器](#)，[变分深度嵌入\(Variational Deep Embedding, VaDE\)](#)，[基于图嵌入的高斯混合变分自编码器的深度聚类\(Deep Clustering by Gaussian Mixture Variational Autoencoders with Graph Embedding, DGG\)](#)，[元学习——Meta-Amortized Variational Inference and Learning](#)，[RL——Deep Reinforcement Learning amidst Continual/Lifelong Structured Non-Stationarity](#) - 凯鲁嘎吉 - 博客园

4.3 基于生成对抗网络(Generative Adversarial Network, GAN)的深度聚类

二、从神经网络模型看深度聚类 $L = \alpha L_n + \beta L_c$

• 基于生成对抗网络(Generative Adversarial Network, GAN)的深度聚类

与VAE类似，GAN也是试图通过设计样本生成器来捕获数据的分布。GAN一般由生成器G和判别器D组成，其中生成器试图从随机变量 z 生成与数据集中的样本尽量相似的伪样本，而判别器试图将伪样本与真实样本区分开。通过两个网络不断进行对抗，最终生成器可以生成以假乱真的伪样本，那么就说明生成器捕获了数据的分布。目标函数为：

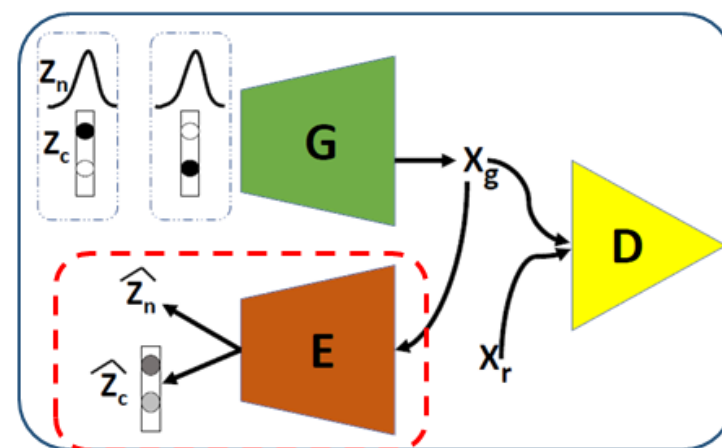
$$\min_G \max_D V(D, G) = \mathbb{E}_{x \sim p_{data}(x)} [\ln D(x)] + \mathbb{E}_{z \sim p_z(z)} [\ln(1 - D(G(z)))]$$

可见GAN和VAE一样，都是从随机变量 z 来生成样本。那么很自然的想法也是对随机变量 z 的分布做一些限定，使其能用于聚类任务。除了约束 z 的分布，还要实现从样本 x 到 z 的映射关系。

- ❑ 文献[1]将随机变量的分布定义为one-hot编码的离散变量和高斯分布的连续变量的混合分布。新加入了一个逆映射网络，将伪样本 $G(z)$ 映射到与 z 同维度的向量。然后将生成器-逆映射网络组成自编码器，通过最小化重建损失来实现随机变量与样本的隐藏特征之间的对应。
- ❑ Dizaji等[2]约束 z 的各个维度是正交的，从而可以反映类别信息。新加入了一个网络，称为聚类网络，实现将真实样本 x 映射到与 z 同维度的向量上。

❑ **Pros:** Capable to generate samples, Flexible

❑ **Cons:** Hard to converge, Mode collapse



[1] MUKHERJEE S, et al. Clustergan : Latent space clustering in generative adversarial networks[C]//AAAI. 2019.

[2] DIZAJI K G, et al. Balanced self-paced learning for generative adversarial clustering network[C]//CVPR. 2019.

[1]

11

参考: [生成对抗网络\(GAN与W-GAN\)](#), [ClusterGAN: 生成对抗网络中的潜在空间聚类](#), [双层优化问题: 统一GAN, 演员-评论员与元学习方法\(Bilevel Optimization Problem unifies GAN, Actor-Critic, and Meta-Learning Methods\)](#) - 凯鲁嘎吉 - 博客园

4.4 基于孪生网络(Siamese Neural Network)/对比学习(Contrastive Learning)的深度聚类

二、从神经网络模型看深度聚类 $L = \alpha L_n + \beta L_c$

• 基于孪生网络(Siamese Neural Network)/对比学习(Contrastive Learning)的深度聚类

孪生网络用于学习两个样本的相似度，一般由两个共享权重的神经网络组成。输入一个样本对 $\langle x_i, x_j \rangle$ ，以及指示这两个样本是否相似的标签 y_{ij} ，如果相似 $y_{ij}=1$ ，否则 $y_{ij}=0$ 。神经网络映射用 f_w 表示，则孪生网络的损失函数为：

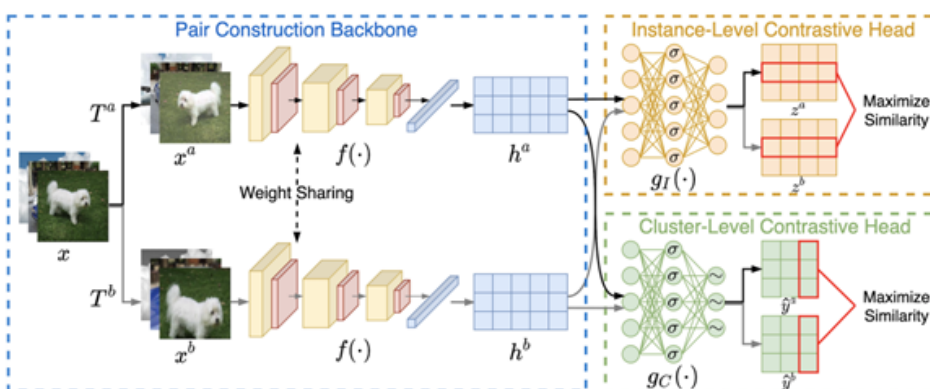
$$L_n(w) = \sum_{i,j} l(y_{ij}, f_w(x_i), f_w(x_j))$$

孪生网络一般用于有监督学习任务中，即样本之间的关系 y_{ij} 是预先给定的。但在聚类任务中， y_{ij} 是不知道的。为了将孪生网络用于无监督深度聚类，现有方法一般会新增一个模型来预测 y_{ij} ，然后使用预测的 y_{ij} 训练孪生网络。

- [1, 2]利用自步学习逐步生成 y_{ij} 。即直接计算两个样本对应的网络输出 z_i, z_j 之间的内积，作为对这两个样本相似度的衡量，先把相似度最高的那些样本对打上标签1，最低的打上0，然后阈值逐渐变化，给更多样本打上标签。最后使用打了标签的样本对孪生网络进行训练。[3-7]采用不同方法生成样本对。

□ **Pros:** 对于样本量较少的数据也能起到比较好的效果。

□ **Cons:** 由于孪生网络以样本对作为输入，正负样本对非常不均衡，需要额外的机制处理该问题。



[7]

- [1] CHANG J, et al. Deep adaptive image clustering[C]//ICCV. 2017.
- [2] CHANG J, et al. Deep self-evolution clustering[J]. TPAMI, 2018.
- [3] YAN Y, et al. Image clustering via deep embedded dimensionality reduction and probability based triplet loss[J]. TIP, 2020.
- [4] HU W, et al. Learning discrete representations via information maximizing self-augmented training[C]//ICML. 2017.
- [5] DAS D, et al. Deep representation learning characterized by interclass separation for image clustering[C]//WACV. 2019.
- [6] TAO Y, et al. Rdec: Integrating regularization into deep embedded clustering for imbalanced datasets[C]//ACML. 2018.
- [7] LI Y, et al. Contrastive clustering[C]//AAAI. 2021.

参考: [从对比学习\(Contrastive Learning\)到对比聚类\(Contrastive Clustering\)](#), [COMPLETER: 基于对比预测的缺失视图聚类方法](#) - 凯鲁嘎吉 - 博客园

4.5 基于图神经网络(Graph Neural Network)的深度聚类

二、从神经网络模型看深度聚类 $L = \alpha L_n + \beta L_c$

• 基于图神经网络(Graph Neural Network)的深度聚类

图神经网络专门用来处理图数据，以图的邻接矩阵和节点的特征矩阵为输入，不断将节点的邻居信息进行聚合，从而将节点间的关系信息融合到节点的嵌入特征表示中。以图卷积神经网络(Graph Convolutional Network, GCN)为例，第 l 个图卷积层执行下列操作：

$$H^{(l+1)} = \sigma(\tilde{D}^{-\frac{1}{2}} \tilde{A} \tilde{D}^{-\frac{1}{2}} H^{(l)} W^{(l)})$$

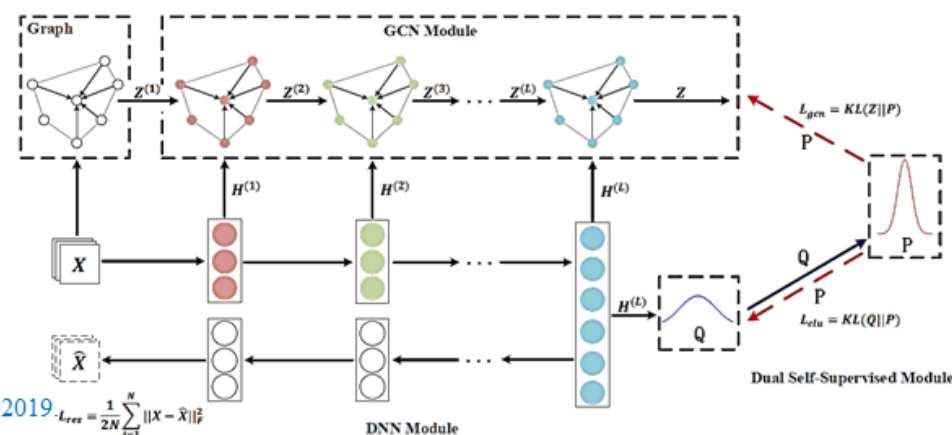
图自编码器(Graph AutoEncoder, GAE)可实现无监督学习，编码器由图卷积神经网络组成，输出节点的嵌入特征矩阵 z ；解码器通过对嵌入矩阵做内积和非线性激活来重建原邻接矩阵 A ，即 $A_r = \sigma(ZZ^T)$, $Z = GCN(X, A)$ 通过最小化 A_r 与输入的邻接矩阵 A 之间的差异，图自编码器即可无监督地学习到嵌入表征矩阵 Z 。

$$L_n = \sum_i \|A_r - A\|^2, \text{ s.t. } A_r = \sigma(ZZ^T), Z = GCN(X, A)$$

❑ 与基于自编码器的深度聚类类似，可以对嵌入特征 z 施加聚类损失约束，实现聚类。

❑ Pros: 天然适用于图数据(graph data)。

❑ Cons: 对于图像数据，一般做法是先抽取特征向量，然后使用特征向量构建图(比如使用K近邻)，从而得到图神经网络的输入，但构造的图的质量难以保证。



- [1] WANG C, et al. Attributed graph clustering: A deep attentional embedding approach[C]//IJCAI. 2019.
- [2] BO D, et al. Structural deep clustering network[C]//WWW. 2020.
- [3] LI X, et al. Embedding graph auto-encoder with joint clustering via adjacency sharing[J]. ArXiv, 2020.
- [4] LIX, et al. Adaptive graph auto-encoder for general data clustering[J]. ArXiv, 2020.

[2]

13

参考: [结构深层聚类网络](#) - 凯鲁嘎吉 - 博客园

5. 参考文献

- [1] 第40期: 基于深度神经网络的聚类算法——郭西风 https://www.bilibili.com/video/BV1H3411t7Vk?spm_id_from=333.999.0.0

[2] [物以类聚人以群分：聚类分析的一些挑战和进展](#) - 凯鲁嘎吉 - 博客园

[3] [A Survey of Deep Clustering Algorithms](#) - 凯鲁嘎吉 - 博客园

[4] [Deep Clustering | Deep Learning Notes](#)

[5] 郭西风. [基于深度神经网络的图像聚类算法研究](#)[D]. 国防科技大学, 2020.

最新的一篇深度聚类综述：四川大学彭玺团队 - 2024.6 - 《A Survey on Deep Clustering: From the Prior Perspective》<https://arxiv.org/abs/2406.19602v1>。