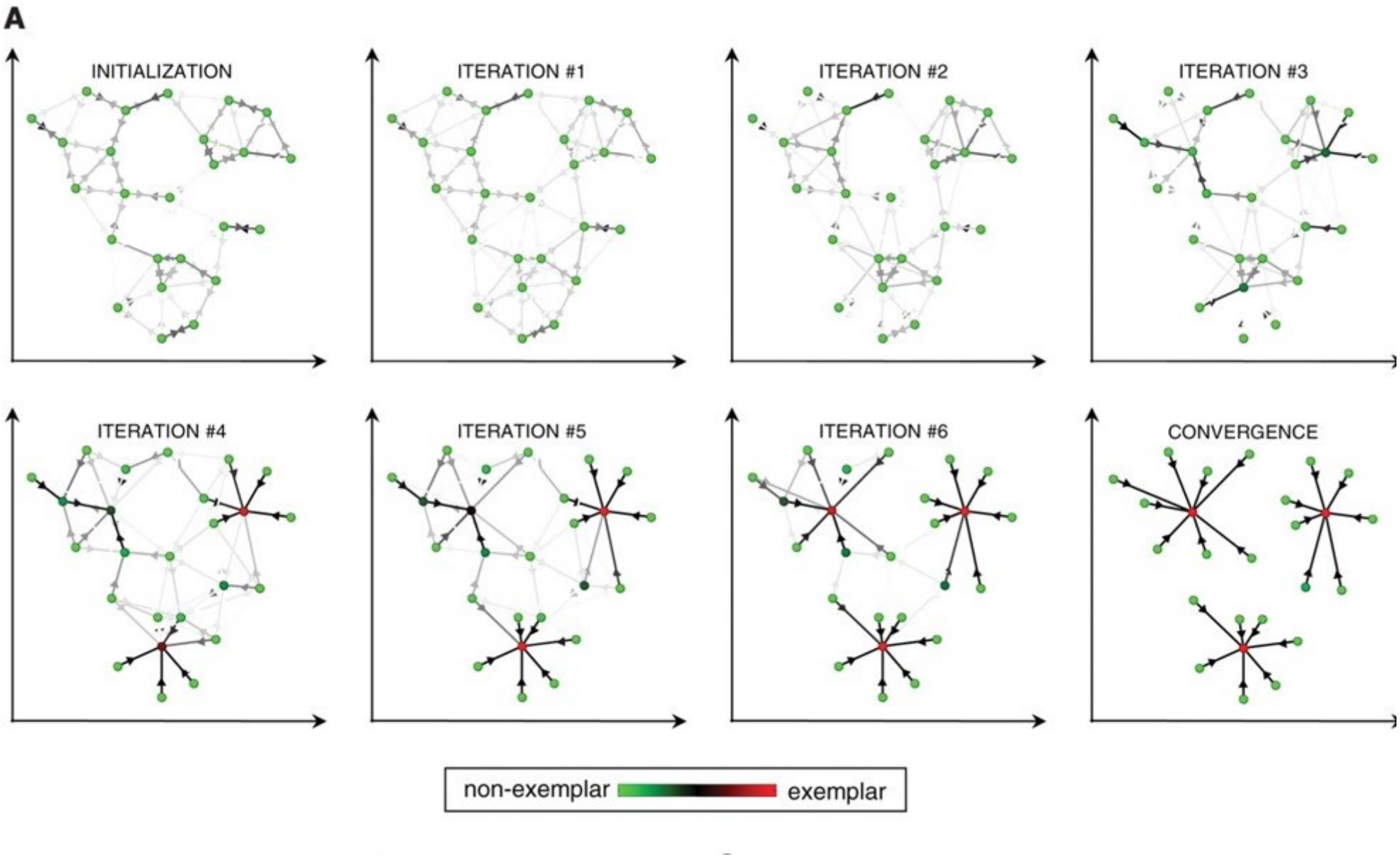
近邻传播聚类算法

原文：https://www.cntofu.com/book/85/ml/cluster/ap.md

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

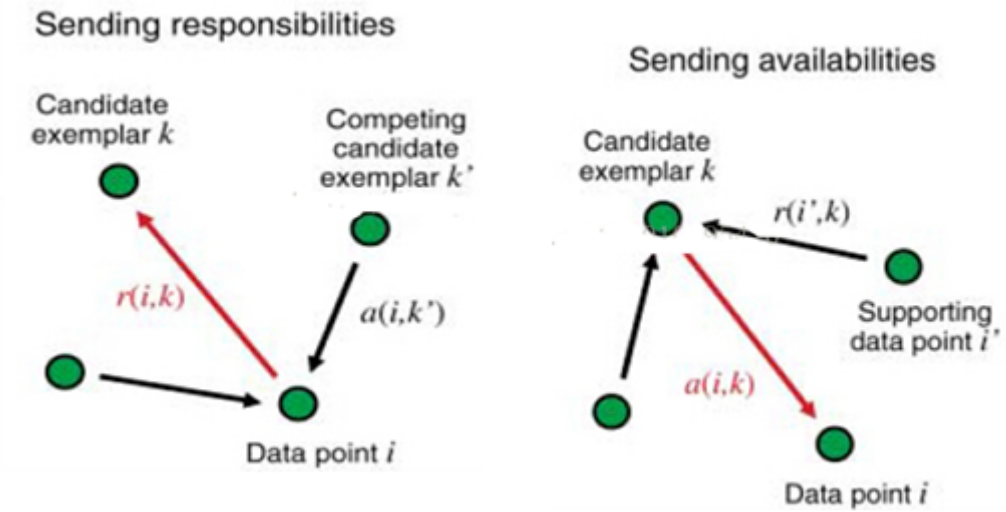
1.算法简介

AP(Affinity Propagation)通常被翻译为近邻传播算法或者仿射传播算法，是在2007年的Science杂志上提出的一种新的聚类算法。AP算法的基本思想是将全部数据点都当作潜在的聚类中心(称之为exemplar)，然后数据点两两之间连线构成一个网络(相似度矩阵)，再通过网络中各条边的消息(responsibility和availability)传递计算出各样本的聚类中心。



2.相关概念(假如有数据点i和数据点j)

	A	B	C	D	E
A	S(a,a)	S(a,b)	S(a,c)	S(a,d)	S(a,e)
B	S(b,a)	S(b,b)	S(b,c)	S(b,d)	S(b,e)
C	S(c,a)	S(c,b)	S(c,c)	S(c,d)	S(c,e)
D	S(d,a)	S(d,b)	S(d,c)	S(d,d)	S(d,e)
E	S(e,a)	S(e,b)	S(e,c)	S(e,d)	S(e,e)



1）相似度： 点j作为点i的聚类中心的能力，记为S(i,j)。一般使用负的欧式距离，所以S(i,j)越大，表示两个点距离越近，相似度也就越高。使用负的欧式距离，相似度是对称的，如果采用其他算法，相似度可能就不是对称的。

2）相似度矩阵：N个点之间两两计算相似度，这些相似度就组成了相似度矩阵。如图1所示的黄色区域，就是一个5*5的相似度矩阵(N=5)

3) preference：指点i作为聚类中心的参考度(不能为0)，取值为S对角线的值(图1红色标注部分)，此值越大，最为聚类中心的可能性就越大。但是对角线的值为0，所以需要重新设置对角线的值，既可以根据实际情况设置不同的值，也可以设置成同一值。一般设置为S相似度值的中值。(有的说设置成S的最小值产生的聚类最少，但是在下面的算法中设置成中值产生的聚类是最少的)

4）Responsibility(吸引度):指点k适合作为数据点i的聚类中心的程度，记为r(i,k)。如图2红色箭头所示，表示点i给点k发送信息，是一个点i选点k的过程。

5）Availability(归属度):指点i选择点k作为其聚类中心的适合程度，记为a(i,k)。如图3红色箭头所示，表示点k给点i发送信息，是一个点k选diani的过程。

6）exemplar：指的是聚类中心。

7）r (i, k)加a (i, k)越大,则k点作为聚类中心的可能性就越大,并且i点隶属于以k点为聚类中心的聚类的可能性也越大

3.数学公式

1）吸引度迭代公式:

$$R_{t+1}(i,k)=(1-\lambda)\cdot R_{t+1}(i,k)+\lambda\cdot R_t(i,k)$$

$$\text{其中，}\ R_{t+1}(i,k)=\begin{cases}S(i,k)-\max\limits_{j\neq k}\{A_t(i,j)+R_t(i,j)\}, & \text{若}i\neq k\\ S(i,k)-\max\limits_{j\neq k}\{S(i,j)\}, & \text{若}i=k\end{cases}$$

（公式一）

说明1：Rt+1(i,k)表示新的R(i,k)，Rt(i,k)表示旧的R(i,k)，也许这样说更容易理解。其中λ是阻尼系数，取值[0.5,1)，用于算法的收敛 说明2：网上还有另外一种数学公式：

$$\mathrm{r(i,k)} \leftarrow \mathrm{s(i,k)} - \max_{k'\ s.t.\ k'\neq k}\{a(i,k')+s(i,k')\}$$

（公式二）

sklearn官网的公式是：

$$r(i,k)\leftarrow s(i,k)-max[a(i,\acute{k})+s(i,\acute{k})\forall\acute{k}\neq k]$$

（公式三）

我试了这两种公式之后，发现还是公式一的聚类效果最好。同样的数据都采取S的中值作为参考度，我自己写的算法聚类中心是5个，sklearn提供的算法聚类中心是十三个，但是如果把参考度设置为p=-50，则我自己写的算法聚类中心很多，sklearn提供的聚类算法产生标准的3个聚类中心(因为数据是围绕三个中心点产生的)，目前还不清楚这个p=-50是怎么得到的。

2）归属度迭代公式

$$A_{t+1}(i,k)=(1-\lambda)\cdot A_{t+1}(i,k)+\lambda\cdot A_t(i,k)$$

$$\text{其中，}\ A_{t+1}(i,k)=\begin{cases}\min\left\{0,R_{t+1}(k,k)+\sum_{j\notin\{i,k\}}\max\left\{0,R_{t+1}(j,k)\right\}\right\}, & \text{若}i\neq k\\ \sum_{j\neq k}\max\left\{0,R_{t+1}(j,k)\right\}, & \text{若}i=k\end{cases}$$

说明：At+1(i,k)表示新的A(i,k)，At(i,k)表示旧的A(i,k)。其中λ是阻尼系数，取值[0.5,1)，用于算法的收敛

4.详细的算法流程

1）设置实验数据。使用sklearn包中提供的函数，随机生成以[1, 1], [-1, -1], [1, -1]三个点为中心的150个数据。

2）计算相似度矩阵，并且设置参考度，这里使用相似度矩阵的中值

3）计算吸引度矩阵，即R值。

如果有细心的同学会发现，在上述求R和求A的公式中，求R需要A，求A需要R，所以R或者A不是一开始就可以求解出的，需要先初始化，然后再更新。(我开始就陷入了这个误区，总觉得公式有问题，囧)

4）计算归属度矩阵，即A值

5）迭代更新R值和A值。终止条件是聚类中心在一定程度上不再更新或者达到最大迭代次数

6）根据求出的聚类中心，对数据进行分类

这个步骤产生的是一个归类列表，列表中的每个数字对应着样本数据中对应位置的数据的分类

5. 参考文献

近邻传播算法

Frey B J, Dueck D. Clustering by passing messages between data points[J]. science, 2007, 315(5814): 972-976.