

# 1 COCLUSTERING BY BLOCK VALUE DECOMPOSITION

Seja  $X$  uma matriz de dados que representam dados em algum domínio de aplicação, sendo  $X \in \mathbb{R}_+^{n \times m}$ , contendo números reais positivos com  $n$  linhas e  $m$  colunas. Esta matriz é formada por um conjunto de linhas  $\mathcal{X} = \{x_1, \dots, x_n\}$  e um conjunto de colunas  $\mathcal{Y} = \{y_1, \dots, y_m\}$ .

Um dos primeiros algoritmos propostos na literatura para a resolução do problema de *co-clustering* baseado em NMF, é o Decomposição de Valores em Blocos (*Block Value Decomposition* - DVB). Este algoritmo tem o objetivo de clusterizar a matriz de dados  $X$  simultaneamente em  $k$  clusters de  $\mathcal{X}$  exclusivos e  $l$  clusters de  $\mathcal{Y}$ .

A ideia do algoritmo é reconstruir a matriz de dados  $X$  através de combinações lineares dos centros dos blocos de  $X$ , similar a alguns tipos de estratégias de *clustering* tradicional, como *k-means*.

**Definition 1** (A resolução do problema de *coclustering* em  $X$  dada pela otimização do problema).

$$\begin{aligned} \underset{U, S, V}{\text{minimizar}} \quad & \|X - USV^T\|_F^2 \\ \text{sujeito a} \quad & U \geq 0, S \geq 0, V \geq 0 \end{aligned}$$

onde  $U \in \mathbb{R}_+^{n \times k}$ ,  $S \in \mathbb{R}_+^{k \times l}$ ,  $V \in \mathbb{R}_+^{m \times l}$  e  $\|\cdot\|$  denota a norma de Frobenius para matrizes.

This is a co-clustering algorithm called Block Value Decomposition (BVD) based on Nonnegative Matrix Factorization (NMF) technique. The goal is to find a factorization for the data matrix  $X \in \mathbb{R}_+^{N \times M}$ , where  $N$  is the number of objects,  $M$  is the number of features of these objects and the factorization takes the form

$$X \approx USV^T$$

, where  $U \in \mathbb{R}_+^{N \times L}$  is a matrix of rows factors representing features clusters,  $S \in \mathbb{R}_+^{L \times K}$  is a block matrix representing how blocks are related, and  $V \in \mathbb{R}_+^{M \times K}$  is a matrix of columns factors representing rows clusters.

This algorithm solves the following optimization problem:

$$\min \|X - USV^T\|^2 \text{ s.t. } U \geq 0, S \geq 0, V \geq 0$$

The optimization problem can be solved using Lagrange multipliers ( $\lambda$ ), optimizing the following Lagrange function:

$$\mathcal{L} = \|X - USV^T\|^2 - \text{tr}(\lambda_1 U^T) - \text{tr}(\lambda_2 S^T) - \text{tr}(\lambda_3 V^T)$$

Then  $\mathcal{L}$  must satisfy the K.K.T. conditions:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial U} = 0$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial S} = 0$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial V} &= 0 \\ \lambda_1 \odot U &= 0 \\ \lambda_2 \odot S &= 0 \\ \lambda_3 \odot V &= 0\end{aligned}$$

Solving the derivatives and equal them to 0, is possible to solve the optimization problem by applying gradient ascending on  $\mathcal{L}$  with the following update rules:

$$\begin{aligned}U &\leftarrow U \odot \frac{XVS^T}{USV^T VS^T} \\ V &\leftarrow V \odot \frac{U^T XV}{U^T USV^T V} \\ S &\leftarrow S \odot \frac{S^T U^T X}{S^T U^T USV^T}\end{aligned}$$