

single cell biclustering

jihyeon

November 2021

1 Objective function

$$\begin{aligned} z &: n \times p \\ X_i &: i\text{-th row of } X \\ X^j &: j\text{-th column of } X \\ \Omega &: \{(i, j) : z_{ij} = 0\} \\ X_\Omega &: n \times p \\ \text{s.t. } [X_\Omega]_{ij} &= \begin{cases} x_{ij} & \text{if } (i, j) \in \Omega \\ 0 & \text{if } (i, j) \notin \Omega \end{cases} \end{aligned}$$

Objective function:

$$\min_{X \in R^{n \times p}} \frac{1}{2} \|Z - X\|_F^2 + \gamma \|X_\Omega\|_F^2 + \sum_{i < j} P_\lambda(\|X_i - X_j\|) + \sum_{k < l} P_\lambda(\|X^k - X^l\|) \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \min_{X \in R^{n \times p}} \frac{1}{2} \|Z - X\|_F^2 + \gamma \|X_\Omega\|_F^2 + \sum_{i < j} P_\lambda(\|A_{ij}\|) + \sum_{k < l} P_\lambda(\|B_{kl}\|) \\ \text{s.t. } X_i - X_j = A_{ij}, \quad X^k - X^l = B_{kl} \end{aligned} \quad (2)$$

Lagrangian form:

$$\begin{aligned} L_\delta(X, A, B, U, V) = & \frac{1}{2} \|Z - X\|_F^2 + \gamma \|X_\Omega\|_F^2 + \sum_{i < j} P_\lambda(\|A_{ij}\|) \\ & + \sum_{k < l} P_\lambda(\|B_{kl}\|) + \sum_{i < j} U_{ij}^T (A_{ij} - (X_i - X_j)) + \frac{\delta}{2} \sum_{i < j} \|A_{ij} - (X_i - X_j)\|_2^2 \\ & + \sum_{k < l} V_{kl}^T (B_{kl} - (X^k - X^l)) + \frac{\delta}{2} \sum_{k < l} \|B_{kl} - (X^k - X^l)\|_2^2 \end{aligned} \quad (3)$$

2 ADMM updates

2.1 update X

$$X^{(k)} = \arg \min_x \frac{1}{2} \|Z - X^{(k-1)}\|_F^2 + \gamma \|X_\Omega^{(k-1)}\|_F^2 - \sum_S U_{ij}^T (X_i - X_j) + \frac{\delta}{2} \sum_S \|A_{ij} - (X_i - X_j)\|_2^2 - \sum_K V_{ij}^T (X^k - X^l) + \frac{\delta}{2} \sum_K \|B_{kl} - (X^k - X^l)\|_2^2 \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \text{Vec}(X^{(k)}) = \arg \min_{\text{vec}(X)} & \frac{1}{2} \|\text{Vec}(Z) - \text{Vec}(X^{(k-1)})\|_F^2 + \gamma \|E_\Omega \text{Vec}(X^{(k-1)})\|_F^2 - \sum_S U_s^T E_{ij} \text{Vec}(X^{(k-1)}) \\ & + \frac{\delta}{2} \sum_S \|A_{ij} - E_{ij} \text{Vec}(X^{(k-1)})\|_2^2 - \sum_N V_n^T E_{kl} \text{Vec}(X^{(k-1)}) \\ & + \frac{\delta}{2} \sum_N \|B_{ij} - E_{kl} \text{Vec}(X^{(k-1)})\|_2^2 \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} f(X) \stackrel{\text{let}}{=} & \frac{1}{2} \|\text{Vec}(Z) - \text{Vec}(X^{(k-1)})\|_F^2 + \gamma \|E_\Omega \text{Vec}(X^{(k-1)})\|_F^2 - \sum_S U_s^T E_{ij} \text{Vec}(X^{(k-1)}) \\ & + \frac{\delta}{2} \sum_S \|A_{ij} - E_{ij} \text{Vec}(X^{(k-1)})\|_2^2 - \sum_N V_n^T E_{kl} \text{Vec}(X^{(k-1)}) \\ & + \frac{\delta}{2} \sum_N \|B_{ij} - E_{kl} \text{Vec}(X^{(k-1)})\|_2^2 \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(X)}{\text{Vec}(X)} = & -\text{Vec}(Z) + \text{Vec}(X) - \gamma E_\Omega^T E_\Omega \text{Vec}(X) + \sum_S E_{ij}^T U_s - \delta \sum_{i < j} E_{ij}^T A_{ij} \\ & + \delta \sum_{i < j} E_{ij}^T E_{ij} \text{Vec}(X) + \sum_N E_{kl}^T V_n - \delta \sum_{k < l} E_{kl}^T B_{kl} + \delta \sum_{k < l} E_{kl}^T E_{kl} \text{Vec}(X) \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & \text{Vec}(X) - \gamma E_\Omega^T E_\Omega \text{Vec}(X) + \delta \sum_{i < j} E_{ij}^T E_{ij} \text{Vec}(X) + \delta \sum_{k < l} E_{kl}^T E_{kl} \text{Vec}(X) \\ = & \text{Vec}(Z) - \sum_S E_{ij}^T U_s + \delta \sum_{i < j} E_{ij}^T A_{ij} - \sum_N E_{kl}^T V_n + \delta \sum_{k < l} E_{kl}^T B_{kl} \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} & \left(I - \gamma E_\Omega^T E_\Omega + \delta \sum_{i < j} E_{ij}^T E_{ij} + \delta \sum_{k < l} E_{kl}^T E_{kl} \right) \text{Vec}(X) \\ = & \text{Vec}(Z) - \sum_S E_{ij}^T U_s + \delta \sum_{i < j} E_{ij}^T A_{ij} - \sum_N E_{kl}^T V_n + \delta \sum_{k < l} E_{kl}^T B_{kl} \end{aligned} \quad (9)$$

$$Vec(X) = \left(I - \gamma E_{\Omega}^T E_{\Omega} + \delta \sum_{i < j} E_{ij}^T E_{ij} + \delta \sum_{k < l} E_{kl}^T E_{kl} \right)^{-1} \left(Vec(Z) - \sum_S E_{ij}^T U_s + \delta \sum_{i < j} E_{ij}^T A_{ij} - \sum_N E_{kl}^T V_n + \delta \sum_{k < l} E_{kl}^T B_{kl} \right) \quad (10)$$

2.2 update A_{ij}

$$A_{ij}^{(k)} = \arg \min_A \frac{1}{2} \sum_{i < j} P_{\lambda}(\|A_{ij}\|) + \sum_{i < j} U_{ij}^t A_{ij} + \frac{\delta}{2} \sum_{i < j} \|A_{ij} - (X_i - X_j)\|_2^2 \quad (11)$$

2.2.1 if $\|A_{ij}\| \leq \lambda$ and $A_{ij} \neq 0$

$$\frac{1}{2} \lambda \sum_{i < j} \frac{A_{ij}}{\|A_{ij}\|} + \sum_{ij} U_{ij} + \delta \sum (A_{ij} - E_{ij} Vec(X)) = 0 \quad (12)$$

$$\frac{\lambda A_{ij}}{2\|A_{ij}\|} + U_{ij} + \delta(A_{ij} - E_{ij} Vec(X)) = 0 \quad (13)$$

$$\left(1 + \frac{\lambda}{2\|A_{ij}\|\delta}\right) A_{ij} = E_{ij} Vec(X) - \frac{1}{\delta} U_{ij} \quad (14)$$

let $E_{ij} Vec(X) - \frac{1}{\delta} U_{ij} = \gamma_{ij}$

$$\begin{aligned} \|\gamma_{ij}\| &= \left(1 + \frac{\lambda}{2\|A_{ij}\|\delta}\right) \|A_{ij}\| \\ &= \|A_{ij}\| + \frac{\lambda}{2\delta} \end{aligned} \quad (15)$$

$$\|A_{ij}\| = \|\gamma_{ij}\| - \frac{\lambda}{2\delta} \quad (16)$$

back to eq(14)

$$A_{ij} = \left(1 + \frac{\lambda}{2\|A_{ij}\|\delta}\right)^{-1} \left(E_{ij} Vec(X) - \frac{1}{\delta} U_{ij}\right) \quad (17)$$

by eq(16),

$$A_{ij} = \left(1 + \frac{\lambda}{2(\|\gamma_{ij}\| - \frac{\lambda}{2\delta})\delta}\right)^{-1} \left(E_{ij} Vec(X) - \frac{1}{\delta} U_{ij}\right) \quad (18)$$

$$A_{ij} = \left(1 - \frac{\lambda}{2\delta\|\gamma_{ij}\|}\right) \left(E_{ij} Vec(X) - \frac{1}{\delta} U_{ij}\right) \quad (19)$$

2.2.2 if $\|A_{ij}\| \leq \lambda$ and $A_{ij} = 0$

$$\lambda \sum v_{ij} + \sum U_{ij} + \delta \sum (A_{ij} - E_{ij} \text{Vec}(X)) = 0 \quad (20)$$

where v_{ij} is a subgradient of $\|A_{ij}\|$

$$v_{ij} = (\delta E_{ij} \text{Vec}(X) - U_{ij}) \frac{1}{\lambda} \quad (21)$$

$$-\lambda < \delta E_{ij} \text{Vec}(X) - U_{ij} < \lambda \quad (22)$$

2.2.3 if $\lambda < \|A_{ij}\| < \gamma\lambda$ and $A_{ij} \neq 0$

$$P_\lambda(\|A_{ij}\|) = \frac{2\gamma\lambda\|A_{ij}\| - x^2 - \lambda^2}{2(\gamma - 1)} \quad (23)$$

$$A_{ij} = \left(\frac{1}{\delta} - \frac{\gamma\lambda}{2\delta(\gamma - 1)\|\alpha_{ij}\|} \right) \alpha_{ij} \quad (24)$$

where $\alpha_{ij} = \delta E_{ij} \text{Vec}(X) - U_{ij}$

2.2.4 if $\lambda < \|A_{ij}\| < \gamma\lambda$ and $A_{ij} = 0$

$$-\gamma\lambda < 2(\gamma - 1)(\delta E_{ij} \text{Vec}(X) - U_{ij}) < \gamma\lambda \quad (25)$$

2.2.5 if $\|A_{ij}\| \geq \gamma\lambda$

$$A_{ij} = E_{ij} \text{Vec}(X) - \frac{1}{\delta} U_{ij} \quad (26)$$

2.3 update B_{kl}

$$B_{kl}^{(k)} = \arg \min_{B_{kl}} \sum_{k < l} P_\lambda(\|B_{kl}\|) + \sum V^T B_{kl} + \frac{\delta}{2} \sum \|B_{kl} - (X^k - X^l)\|_2^2 \quad (27)$$

similar with A_{ij}

2.4 update U, K

$$U_{ij}^{(k)} = U_{ij}^{(k-1)} + \delta (A_{ij} - (X_i - X_j)) \quad (28)$$

$$V_{kl}^{(k)} = V_{kl}^{(k-1)} + \delta (B_{kl} - (X^k - X^l)) \quad (29)$$