

一种连续的谱聚类优化模型

刘歆^{*} 吴国宝[†] 张瑞[‡] 张在坤[§]

2018 年 3 月 6 日

1 引言

1.1 聚类与图的划分问题

将物理或抽象对象的集合分成由类似的对象组成的多个类的过程被称为聚类. 分到同一类中的两个对象具有较高的相似度, 分到不同类中的两个对象差异比较大. 聚类问题是数据挖掘和统计分析等重要领域的主要研究课题之一, 聚类技术被广泛应用于机器学习、模式识别、图像分析、信息恢复、数据压缩和计算机绘图等众多领域.

通常, 聚类问题可以归结为图划分问题. 例如, $\{x_1, \dots, x_n\}$ 是 n 个数据组成的集合, 假设数据之间已经定义了某种相似度 (x_i, x_j 之间的相似度记为 s_{ij}), 我们可以通过构造一个带权重的无向图 $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ 表示出这组数据以及数据之间的相似度, 进而将对这组数据的聚类问题转化为对图 $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ 的图划分问题. 首先, 构造图 $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ 的顶点集 $\mathcal{V} = \{v_1, \dots, v_n\}$: 图 $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ 有 n 个顶点, 每个顶点分别代表了数据集 $\{x_1, \dots, x_n\}$ 中一个数据, 不妨假设顶点 v_i 对应数据 x_i , 且如果 $x_i \neq x_j$, 那么 $v_i \neq v_j$; 然后构造图 $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ 的边集 \mathcal{E} 并分配边的权重: 如果数据 x_i 和 x_j 之间的相似度 s_{ij} 大于零, 则在顶点 v_i 和 v_j 之间连上一条边 $e_{ij} = (i, j)$, 并将数据 x_i 与 x_j 之间的相似度作为边 e_{ij} 的权重, 即 $w_{ij} = s_{ij}$. 这样, 对数据集 $\{x_1, \dots, x_n\}$ 的聚类问题转化成了对图 $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ 的图划分问题: 删除图中某些边得到独立的连通分支, 使得相似度高的数据所对应的顶点属于同一分支, 相似度较低的数据所对应的顶点属于不同分支.

谱聚类方法已经发展成为最成功的启发式图划分方法之一. 谱聚类方法应用于图划分问题最早出现在 Donath 和 Hoffman (1972, 1973) 的文章 [2, 3]. Donath 和 Hoffman 首次利用图的邻接矩阵的特征值求解图的划分问题. 我们现在称图的拉普拉斯矩阵的最小的第二个特征值的特征向量为 Fiedler 向量, 是因为 Fiedler (1973) 首次用这个向量把一个图分成两块. Ulrike (2007) 在文章 [11]

^{*}中国科学院数学与系统科学研究院, 科学与工程计算国家重点实验室 (liuxin@lsec.cc.ac.cn), 中国科学院大学, 本工作受国家自然科学基金项目 11471325, 91530204 and 11622112, 及国家数学与交叉科学中心资助.

[†]香港浸会大学数学系 (mng@math.hkbu.edu.hk)

[‡]中国科学院大学, 中国科学院数学与系统科学研究院, 科学与工程计算国家重点实验室 (zhangrui@lsec.cc.ac.cn)

[§]香港理工大学应用数学系 (zaikun.zhang@polyu.edu.hk). 本工作受香港理工大学 start-up grant 1-ZVHT 以及香港研究资助局 (RGC) Early Career Scheme grant PolyU 253012/17P 资助.

中总结了近年来最常用的谱聚类方法：优化目标函数 RatioCut 的一般谱聚类方法 [4] 和优化目标函数 Ncut 的规范化谱聚类方法 [9, 8]. 由于谱聚类方法并不需要对聚类对象作出很强的假设，所以谱聚类方法通常比一般聚类方法（比如 k -means 方法）的聚类效果好.

1.2 本文的贡献及文章组织

本文中我们将考虑一个新的整数优化模型，并考虑它的连续优化近似. 我们分析了新模型的性质，并给出了求解该模型的块坐标下降算法. 数值例子显示我们的方法是可行的.

本文共分五章. 下一章我们将介绍本文的记号及拉普拉斯矩阵的基本性质. 第三章我们将给出我们的新模型和模型分析. 在第四章，我们将介绍块坐标下降算法以及数值例子. 最后一章，我们将做一个简要的小结.

2 准备知识

2.1 符号及定义

在整篇论文中我们约定 n 是一个正整数. 我们定义下面几个集合

$$\mathcal{S}^n = \{S \in \mathbb{R}^{n \times n} \mid S \text{ 是对称矩阵}\}, \quad (1)$$

$$\mathcal{S}_0^n = \{S \in \mathbb{R}^{n \times n} \mid S \text{ 是对称矩阵, } S \geq 0, \text{ 且 } \text{diag}(S) = 0\}, \quad (2)$$

其中， $S \geq 0$ 代表矩阵 S 的所有元素都是非负的， $\text{diag}(S)$ 代表由矩阵 S 的对角线上的元素组成的向量. 给定一个对称矩阵 $A \in \mathcal{S}^n$ ，我们用 \mathcal{S}_A^n 表示下面这个线性空间

$$\mathcal{S}_A^n = \{S \in \mathcal{S}^n \mid \text{supp}(S) \subset \text{supp}(A)\}, \quad (3)$$

其中， $\text{supp}(A)$ 是 A 的支撑集，也就是说

$$\text{supp}(A) = \{(i, j) \mid 0 \leq i, j \leq n \text{ 且 } A_{ij} \neq 0\}, \quad (4)$$

其中， A_{ij} 代表矩阵 A 的 (i, j) 位置上的元素. 此外， $[0, 1]^{n \times n}$ 代表元素取值于 $[0, 1]$ 的 $n \times n$ 维矩阵组成的集合， $\{0, 1\}^{n \times n}$ 代表 $n \times n$ 维 0-1 矩阵组成的集合.

给定一个矩阵 $A \in \mathcal{S}^n$ ，我们用

$$\lambda_1(A), \lambda_2(A), \dots, \lambda_n(A) \quad (5)$$

表示矩阵 A 按递增顺序排列的特征值，其中多重特征值出现次数与重数相同.

给定两个维数相同的矩阵 A 和 B ，我们用 $A \leq B$ (或 $A \geq B$) 表示矩阵 A 的每一个元素不大于 (或不小于) 矩阵 B 的每一个元素，而用 $A \preceq B$ (或 $A \succeq B$) 表示 $A - B$ 半负定 (或半正定). 我们用 $A \circ B$ 表示矩阵 A 和 B 的 Hadamard 积.

给定一个实数 a ， $\text{sign}(a)$ 表示 a 的符号. 我们约定 $\text{sign}(0) = 0$. 而 $\lceil a \rceil$ 是不比 a 小的最小的整数. 对于一个实矩阵来说， $\text{sign} A$ 和 $\lceil A \rceil$ 都是 $\text{sign}(\cdot)$ 和 $\lceil \cdot \rceil$ 作用到 A 的每一个元素得到的与 A 同维数的矩阵，即 $\text{sign}(A)_{ij} = \text{sign}(A_{ij})$, $\lceil A \rceil_{ij} = \lceil A_{ij} \rceil$.

如果 J 是集合 $\{1, 2, \dots, n\}$ 的一个子集, 那么我们用符号 $\mathbf{1}_J$ 表示 J 的指标向量, 具体地讲, $\mathbf{1}_J$ 是一个 n 维实向量, 如果 $i \in J$, 那么它的第 i 个分量是 1; 否则, 它的第 i 个分量是 0.

2.2 拉普拉斯矩阵及其性质

对每一个矩阵 $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 我们定义 $\mathcal{L}(M)$ 是一个 $n \times n$ 维的矩阵, 它的分量有如下表达式

$$\mathcal{L}(M)_{ij} = \begin{cases} -M_{ij} & \text{如果 } i \neq j, \\ \sum_{k \neq i} M_{ik} & \text{如果 } i = j. \end{cases} \quad (6)$$

显然 \mathcal{L} 构成 $\mathbb{R}^{n \times n}$ 上的线性算子. 对于每一个矩阵 $A \in \mathcal{S}_0^n$, 我们可以构造一个带权重的无向图 $G(V, A)$, 其中 V 是图的顶点集, 不妨记为 $V = \{1, 2, \dots, n\}$, 矩阵 A 则是该图邻接矩阵. 图 $G(V, A)$ 的顶点 i 和 j 有一条边当且仅当 $(i, j) \in \text{supp}(A)$, 此时 A_{ij} 是边 (i, j) 的权重. 为了叙述简洁, 我们称 $G(V, A)$ 为关于矩阵 A 的图. 在谱聚类理论中, 矩阵 $\mathcal{L}(A)$ 称为图 $G(V, A)$ 的拉普拉斯矩阵 [1].

拉普拉斯矩阵 $\mathcal{L}(A)$ 的谱揭示了图 $G(V, A)$ 的一些基本性质. 特别地, 0 总是 $\mathcal{L}(A)$ 的特征值, 它的重数等于图 $G(V, A)$ 的连通分支数 (参见 [6, Theorem 2.1], [7, Proposition 2.3] 和 [10, Proposition 2]). 我们注意到拉普拉斯矩阵 $\mathcal{L}(A)$ 的属于 0 特征值的特征子空间是矩阵的核空间 $\ker(\mathcal{L}(A))$, 且核空间的维数等于 0 特征值的重数.

引理 2.1 对每一个矩阵 $A \in \mathcal{S}_0^n$ 和关于矩阵 A 的图 $G(V, A)$, 下列结论是成立的:

1. 拉普拉斯矩阵 $\mathcal{L}(A)$ 是奇异的、半正定的.
2. 核空间 $\ker(\mathcal{L}(A))$ 的维数等于图 $G(V, A)$ 的连通分支数.
3. 如果图 $G(V, A)$ 有 κ 个连通分支, 每个连通分支的顶点集分别是 $V_1, V_2, \dots, V_\kappa$, 那么

$$\ker(\mathcal{L}(A)) = \text{span}\{\mathbf{1}_{V_1}, \mathbf{1}_{V_2}, \dots, \mathbf{1}_{V_\kappa}\}. \quad (7)$$

引理 2.2 考虑矩阵 $A, B \in \mathcal{S}_0^n$. 若 $A \geq B$, 则 $\mathcal{L}(A) \succeq \mathcal{L}(B)$.

证明. 因 \mathcal{L} 是一个线性算子, 我们有

$$\mathcal{L}(A) - \mathcal{L}(B) = \mathcal{L}(A - B).$$

上式右端是一个图的拉普拉斯矩阵, 因而半正定. □

引理 2.3 考虑矩阵 $A \in \mathcal{S}_0^n$ 和矩阵 $X \in \mathcal{S}_A^n \cap [0, 1]^{n \times n}$. 对每一个满足下式的整数 r

$$\text{rank}(\mathcal{L}(A \circ X)) \leq r \leq \text{rank}(\mathcal{L}(A)), \quad (8)$$

都存在一个矩阵 $Y \in \mathcal{S}_A^n \cap \{0, 1\}^{n \times n}$ 满足

$$Y \geq X \quad \text{且} \quad \text{rank}(\mathcal{L}(A \circ Y)) = r. \quad (9)$$

证明. 递归地构造一个有限项的矩阵序列 $\{Y_k\}$ 如下: 令 $Y_1 = [X]$; 对每一个 $k \geq 1$, 若 $\text{supp}(Y_k) = \text{supp}(A)$ 则序列构造结束, 否则, 任取 $(i, j) \in \text{supp}(A) \setminus \text{supp}(Y_k)$, 令 Y_{k+1} 之 (i, j) 与 (j, i) 元素为 1, 其余元素与 Y_k 相同.

显然, 上述过程必在有限步内终止. 设序列 $\{Y_k\}$ 共有 ℓ 项, 则 $\text{supp}(Y_\ell) = \text{supp}(A)$, 故 $Y_\ell = \text{sign}(A)$. 因此

$$\text{rank}(\mathcal{L}(A \circ Y_1)) = \text{rank}(\mathcal{L}(A \circ X)) \leq r \leq \text{rank}(\mathcal{L}(A)) = \text{rank}(\mathcal{L}(A \circ Y_\ell)). \quad (10)$$

对任意 $k \in \{1, 2, \dots, \ell\}$, 考虑分别关于矩阵 $A \circ Y_k$ 和 $A \circ Y_{k+1}$ 的图 $G(V, A \circ Y_k)$ 和 $G(V, A \circ Y_{k+1})$. 与前者相比, 后者多一条边, 故至少多一个连通分支. 因此, 由引理 2.1 可知

$$\text{rank}(\mathcal{L}(A \circ Y_{k+1})) \leq \text{rank}(\mathcal{L}(A \circ Y_k)) + 1. \quad (11)$$

(10) 与 (11) 表明必存在 $k_0 \in \{1, 2, \dots, \ell\}$ 满足

$$\text{rank}(\mathcal{L}(A \circ Y_{k_0})) = r.$$

我们取 $Y = Y_{k_0}$ 即可.

□

3 含正交约束的连续优化模型

3.1 一类新的整数优化模型

给定矩阵 $A \in \mathcal{S}_0^n$, 我们考虑通过如下两个目标来建立数学模型: 怎样删除图 $G(V, A)$ 的一些边使得删去的边的总权重尽可能得小; 同时得到尽可能多的连通分支.

记原图 $G(V, A)$ 的连通分支数为 κ , 假设 $\kappa \ll n$. 引理 2.1 告诉我们

$$\kappa = n - \text{rank}(\mathcal{L}(A)).$$

我们定义一个 0-1 矩阵 $X \in \mathcal{S}_A^n \cap \{0, 1\}^n$ 来反映结果图中边的情况. 具体地讲, 如果结果图中包含边 (i, j) , 那么 $X_{ij} = 1$, 否则, $X_{ij} = 0$. 这样, 图 $G(V, A \circ X)$ 即是从原图 $G(V, A)$ 删除一些边以后得到的结果图. 注意到 $\sum_{i < j} A_{ij} - \frac{1}{2} \text{tr}(AX)$ 是删去的边的总权重, 所以我们建立了下面的模型

$$\begin{aligned} \min \quad & \text{rank}(\mathcal{L}(A \circ X)) - \beta \text{tr}(AX) \\ \text{s.t.} \quad & X \in \mathcal{S}_A^n \cap \{0, 1\}^{n \times n}, \end{aligned} \quad (12)$$

其中, 正参数 β 平衡 “rank(\cdot)” 部分和 “tr(\cdot)” 部分.

3.2 连续优化近似模型

问题 (12) 是离散的、不可微的, 因而难以求解. 现在将 X 松弛到空间 $\mathcal{S}_A^n \cap [0, 1]^{n \times n}$, 并且用核范数最小化近似秩的最小化. 假设我们对结果图的连通分支数有一个可靠的估计 (不妨记为 d),

因此 $\kappa \approx d \ll n$), 那么我们只需考虑矩阵 $A \circ X$ 的前 d 个最小特征值. 下面是我们得到的一个连续优化谱聚类模型:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(X, H) = \text{tr}[H^T \mathcal{L}(A \circ X) H] - \beta \text{tr}(AX) \\ \text{s.t.} \quad & X \in \mathcal{S}_A^n \cap [0, 1]^{n \times n} \\ & H^T H = I_d. \end{aligned} \quad (13)$$

我们将分析问题 (13) 的全局最优解的性质. 为此, 我们作出如下假设.

假设 3.1 $\text{rank}(\mathcal{L}(A)) > n - d$, 也就是说, 图 $G(V, A)$ 的连通分支数少于 d 个.

3.3 全局解的性质

命题 3.1 如果 (X^*, H^*) 问题 (13) 的一个全局解, 那么 $(\lceil X^* \rceil, H^*)$ 也是一个全局解.

证明. 注意到函数 $f(X, H^*)$ 关于变量 X 是线性的 (参看 (45)). 由 X^* 的最优性知, 如果 X^* 的某个分量不是 0 或 1, 那么 $f(X, H^*)$ 关于这个分量的偏导数必定为 0. 因此, 我们可以将这个分量的值变为 1 而不改变目标函数值, 从而 $f(\lceil X^* \rceil, H^*) = f(X^*, H^*)$. 这就证明了 $(\lceil X^* \rceil, H^*)$ 的全局最优性. \square

命题 3.2 如果 (X^*, H^*) 是问题 (13) 的一个全局解, 那么或者

$$\text{tr}[(H^*)^T \mathcal{L}(A \circ X^*) H^*] > 0 \quad (14)$$

成立, 或者

$$X^* \in \{0, 1\}^{n \times n} \quad \text{和} \quad \text{rank}(\mathcal{L}(A \circ X^*)) = n - d \quad (15)$$

成立, 但是不可能两种情况同时成立.

命题 3.2 是一个二择一命题, 它表明两种情况中有且只有一种情况会成立. 在证明这个命题之前我们指出: 由于 H^* 的最优性, 表达式 (14) 实际上与

$$\text{rank}(\mathcal{L}(A \circ X^*)) > n - d \quad (16)$$

等价. 由这个命题我们知道, 只要 (X^*, H^*) 是全局解, 必然有

$$\text{rank}(\mathcal{L}(A \circ X^*)) \geq n - d.$$

换言之, 图 $G(\mathcal{L}(A \circ X^*))$ 至多有 d 个连通分支.

证明. 显然, 由于 H^* 的最优性, 表达式 (14) 和 (15) 是互斥的. 假设

$$\text{tr}[(H^*)^T \mathcal{L}(A \circ X^*) H^*] = 0, \quad (17)$$

那么我们只需证明 (15) 成立.

由等式 (17) 和假设 3.1 知

$$\text{rank}(\mathcal{L}(A \circ X^*)) \leq n - d < \text{rank}(\mathcal{L}(A)). \quad (18)$$

从而由引理 2.3 知, 存在一个矩阵 \bar{X} 满足

$$\bar{X} \geq X^*, \quad \bar{X} \in \mathcal{S}_A^n \cap \{0, 1\}^{n \times n} \quad \text{和} \quad \text{rank}(\mathcal{L}(A \circ \bar{X})) = n - d. \quad (19)$$

选一个矩阵 \bar{H} 满足

$$\bar{H} \in \underset{H^T H = I_d}{\text{Argmin}} \text{tr}[H^T \mathcal{L}(A \circ \bar{X}) H], \quad (20)$$

那么

$$\text{tr}[\bar{H}^T \mathcal{L}(A \circ \bar{X}) \bar{H}] = 0 = \text{tr}[(H^*)^T \mathcal{L}(A \circ X^*) H^*]. \quad (21)$$

由 (X^*, H^*) 的全局最优性和 $\beta > 0$ 知,

$$\text{tr}(A \bar{X}) \leq \text{tr}(A X^*). \quad (22)$$

另一方面, 由 $\bar{X} \geq X^*$ 和 $A \geq 0$ 得到 $A \circ \bar{X} \geq A \circ X^*$. 从而

$$A \circ \bar{X} = A \circ X^*. \quad (23)$$

注意到 \bar{X} 和 X^* 都属于 \mathcal{S}_A^n , 我们有

$$\bar{X} = X^*. \quad (24)$$

证明完毕. \square

命题 3.3 存在一个正数 $\bar{\beta}$ 使得当 $\beta > \bar{\beta}$ 时, 问题 (13) 的每一个全局解 (X^*, H^*) 都满足下式:

$$\text{tr}[(H^*)^T \mathcal{L}(A \circ X^*) H^*] > 0. \quad (25)$$

证明. 由 H^* 的最优性与 Rayleigh-Ritz 定理 (参看 [5] 的 5.2.2.(6)), 不等式 (25) 等价于

$$\text{rank}(\mathcal{L}(A \circ X^*)) > n - d. \quad (26)$$

下面我们证明 $\beta > \bar{\beta} \equiv 1$ 时必有

$$X^* = \text{sign}(A),$$

因而 $A \circ X^* = A$, 进而 (26) 依假设 3.1 成立.

为此, 定义函数

$$\phi(X) = \min_{H^T H = I_d} f(X, H).$$

由 (X^*, H^*) 的最优性知 X^* 为

$$\min_{X \in \mathcal{S}_A^n \cap [0, 1]^{n \times n}} \phi(X) \quad (27)$$

的一个最优解. 现在我们研究函数 ϕ . 由 Rayleigh-Ritz 定理知,

$$\phi(X) = \sum_{i=1}^d \lambda_i[\mathcal{L}(A \circ X)] - \beta \text{tr}(A X).$$

注意到

$$\text{tr}(AX) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{ij} X_{ij} = \text{tr}[\mathcal{L}(A \circ X)],$$

我们有

$$\begin{aligned} \phi(X) &= \sum_{i=1}^d \lambda_i[\mathcal{L}(A \circ X)] - \beta \text{tr}[\mathcal{L}(A \circ X)] \\ &= (1 - \beta) \text{tr}(\mathcal{L}(A \circ X)) - \sum_{i=d+1}^n \lambda_i[\mathcal{L}(A \circ X)]. \end{aligned} \quad (28)$$

我们将用该式说明 $\beta > 1$ 蕴含 $X^* = \text{sign}(A)$. 任给 $X \in \mathcal{S}_A^n \cap [0, 1]^{n \times n}$ 且 $X \neq \text{sign}(A)$. 注意到 $A \circ \text{sign}(A) \geq A \circ X$, 根据引理 2.2, 我们有

$$\mathcal{L}(A \circ \text{sign}(A)) \succeq \mathcal{L}(A \circ X).$$

另外, 显然 $\mathcal{L}(A \circ \text{sign}(A)) \neq \mathcal{L}(A \circ X)$. 故

$$\text{tr}[\mathcal{L}(A \circ \text{sign}(A))] > \text{tr}[\mathcal{L}(A \circ X)].$$

同时, 由特征值的 Weyl 不等式可知, $\lambda_i[\mathcal{L}(A \circ \text{sign}(A))] \geq \lambda_i[\mathcal{L}(A \circ X)]$ ($1 \leq i \leq n$). 因此, 根据 (28), 当 $\beta > 1$ 时,

$$\phi(\text{sign}(A)) < \phi(X).$$

故 $X^* = \text{sign}(A)$ 是问题 (27) 之唯一最优解. 证明完毕. \square

命题 3.4 存在一个正数 $\underline{\beta}$ 使得当 $0 < \beta \leq \underline{\beta}$ 时, 问题 (13) 的每一个全局解 (X^*, H^*) 都满足下式:

$$X^* \in \{0, 1\}^{n \times n} \quad \text{且} \quad \text{rank}(\mathcal{L}(A \circ X^*)) = n - d. \quad (29)$$

证明. 我们证明

$$\underline{\beta} = \frac{1}{\sum_{i,j} A_{ij}} \min \{ \lambda_+(\mathcal{L}(A \circ X)) \mid X \in \mathcal{S}_A^n \cap \{0, 1\}^{n \times n} \text{ 且 } \mathcal{L}(A \circ X) \neq 0 \} \quad (30)$$

满足要求, 其中, $\lambda_+(\cdot)$ 表示一个非零半正定矩阵的最小的正特征值. 为方便起见, 记

$$\mu = \min \{ \lambda_+(\mathcal{L}(A \circ X)) \mid X \in \mathcal{S}_A^n \cap \{0, 1\}^{n \times n} \text{ 且 } \mathcal{L}(A \circ X) \neq 0 \}. \quad (31)$$

因为 μ 是有限个正数的最小值, 所以 $\mu > 0$, 从而 $\underline{\beta} > 0$.

假设 $0 < \beta \leq \underline{\beta}$ 以及 (X^*, H^*) 是问题 (13) 的一个全局最优解. 由命题 3.2 知, 我们要证明 (29) 只需证明

$$\text{tr}[(H^*)^T \mathcal{L}(A \circ X^*) H^*] = 0. \quad (32)$$

根据引理 2.2,

$$\mathcal{L}(A \circ [X^*]) \succeq \mathcal{L}(A \circ X^*).$$

假定 (32) 不成立, 则

$$\text{tr}[(H^*)^\top \mathcal{L}(A \circ [X^*]) H^*] \geq \text{tr}[(H^*)^\top \mathcal{L}(A \circ X^*) H^*] > 0. \quad (33)$$

据命题 3.1, $([X^*], H^*)$ 也是问题 (13) 的一个全局最优解. 故

$$\text{tr}[(H^*)^\top \mathcal{L}(A \circ [X^*]) H^*] = \min_{H^\top H = I_d} \text{tr}[H^\top \mathcal{L}(A \circ [X^*]) H] = \sum_{i=1}^d \lambda_i(\mathcal{L}(A \circ [X^*])). \quad (34)$$

由 (33) 与 (34) 可知 $\lambda_d(\mathcal{L}(A \circ [X^*])) > 0$, 进而由 μ 的定义可得

$$\lambda_d(\mathcal{L}(A \circ [X^*])) > \mu,$$

从而 (34) 蕴含

$$\text{tr}[(H^*)^\top \mathcal{L}(A \circ X^*) H^*] \geq \mu. \quad (35)$$

由 f 的定义以及 $0 < \beta \leq \underline{\beta}$, 我们有

$$f([X^*], H^*) \geq \mu - \beta \text{tr}(A[X^*]) \geq \mu - \underline{\beta} \sum_{i,j} A_{ij} \geq 0 = f(\mathbf{0}, H^*). \quad (36)$$

故由 $([X^*], H^*)$ 的全局最优性知 $(\mathbf{0}, H^*)$ 也是问题 (13) 的一个全局最优解. 但是命题 3.2 告诉我们这是不可能的, 因为 $(\mathbf{0}, H^*)$ 既不满足 (14) 也不满足 (15). 证明完毕. \square

根据命题 3.4, 我们容易得到以下结论.

命题 3.5 假设已经确定了命题 3.4 中一个正数 $\underline{\beta}$, 如果 $0 < \beta \leq \underline{\beta}$, 那么问题 (13) 和下述问题

$$\begin{aligned} \min \quad & -\text{tr}(AX) \\ \text{s.t.} \quad & X \in \{0, 1\}^{n \times n} \cap \mathcal{S}_A^n \\ & \text{rank}(\mathcal{L}(A \circ X)) = n - d \end{aligned} \quad (37)$$

有相同的全局解集.

用图的语言说, 那就是: 问题 (37) 是希望删去权重和尽可能少的一些边使得结果图恰好有 d 个连通分支.

4 块坐标下降算法

我们已经将谱聚类问题转换成一个连续的非凸优化问题 (13). 我们采用块坐标下降 (Block Coordinate Descent, 简称 BCD) 算法求解这个问题.

4.1 算法描述

算法 1: 块坐标下降算法

步 1. 输入图 $G(V, A)$ 的邻接矩阵 A , 规定误差容忍度 $\epsilon > 0$. 取初始点 $X^0 \in \mathcal{S}_A^n$, $k := 0$.

步 2. 更新 $H^{k+1} \in \underset{H^T H = I_d}{\text{Argmin}} f(H, X^k)$.

步 3. 更新 $X^{k+1} \in \underset{X \in \mathcal{S}_A^n \cap [0, 1]^{n \times n}}{\text{Argmin}} f(H^{k+1}, X)$.

步 4. 如果 $\|X_{k+1} - X_k\|_F < \epsilon$ 成立, 输出 (X_{k+1}, H_{k+1}) ; 否则, 令 $k = k + 1$, 转步 2.

下面我们阐述算法 1 中对 H 与 X (即步 2 与步 3) 的更新具体如何实现.

更新 H . 在算法 1 中, 步 2 实际上是计算拉普拉斯矩阵 $\mathcal{L}(A \circ X^k)$ 的前 d 个最小的特征值 $\lambda_1(\mathcal{L}(A \circ X^k)), \dots, \lambda_d(\mathcal{L}(A \circ X^k))$ 所对应的特征向量. 根据 f 的定义, H^{k+1} 是下面这个迹最小化问题的一个解

$$\begin{aligned} \min \quad & \text{tr} [H^T \mathcal{L}(A \circ X^k) H] \\ \text{s.t.} \quad & H^T H = I_d. \end{aligned}$$

由 Rayleigh-Ritz 定理 [5, 5.2.2.(6)] 知, 我们可以取

$$H^{k+1} = [u_1, \dots, u_d],$$

其中向量 u_1, \dots, u_d 是特征值 $\lambda_1(\mathcal{L}(A \circ X^k)), \dots, \lambda_d(\mathcal{L}(A \circ X^k))$ 所对应的 d 个正交的特征向量.

更新 X . 在算法 1 中, 步 3 实际上是求解一个线性规划问题. 事实上, $f(X, H^{k+1})$ 是 X 的一个线性函数 (参看 (45)), 而 X^{k+1} 是下面这个线性优化问题的解

$$\begin{aligned} \min \quad & f(X, H^{k+1}) \\ \text{s.t.} \quad & X \in \mathcal{S}_A^n \cap [0, 1]^{n \times n}. \end{aligned}$$

由命题 A.1 和 A.2 知, $f(X, H^{k+1})$ 关于 X_{ij} 的系数是

$$\nabla_x f(X, H^{k+1})_{ij} = A_{ij}[(H^{k+1}(H^{k+1})^T)_{ii} - (H^{k+1}(H^{k+1})^T)_{ji} - \beta].$$

所以, 我们可以取

$$X_{ij}^{k+1} = \begin{cases} 0 & \text{若 } \nabla_x f(X, H^{k+1})_{ij} + \nabla_x f(X, H^{k+1})_{ji} \geq 0, \\ 1 & \text{若 } \nabla_x f(X, H^{k+1})_{ij} + \nabla_x f(X, H^{k+1})_{ji} < 0. \end{cases} \quad (38)$$

注意, 若 X_{k+1} 由 (38) 确定, 则 $\{X_k\}$ 为一列 0-1 矩阵, 因而算法 1 的终止条件 $\|X_{k+1} - X_k\| < \epsilon$ 实际上等价于 $X_{k+1} = X_k$ (假设 $\epsilon \leq 1$).

4.2 数值实验

已知如图1所示的顶点集 $V = \{v_1, v_2, \dots, v_{266}\}$ 有 266 个顶点, 这些顶点分布在 $[-1, 1]^2$ 这个方形空间里. 我们用高斯函数给每一对顶点分配一个权重. 顶点 v_i 和 v_j 之间的权重为

$$w_{ij} = e^{\frac{-\|v_i - v_j\|_2^2}{2\sigma^2}}, \quad i, j = 1, 2, \dots, 266. \quad (39)$$

我们分别令 $\sigma = 0.1, 0.15$, 得到 v_1, v_2, \dots, v_{266} 为顶点、以式(39)为权重的图, 它们的拉普拉斯矩阵都只有一个 0 特征值, 引理2.1 告诉我们上述原图都是连通图.

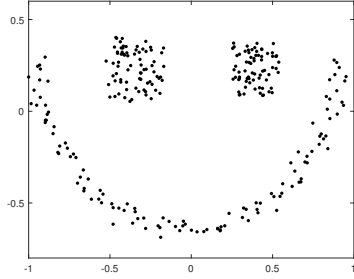


图 1: 顶点集

表 1: $\mathcal{L}(A)$ 最小的 6 个特征值

σ	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_6	原图
0.1	0	4.3×10^{-4}	0.004	0.054	0.202	0.446	连通
0.15	0	0.075	0.163	0.479	0.95	1.75	连通

下面我们用块坐标下降算法1对顶点集 $V = \{v_1, v_2, \dots, v_{266}\}$ 聚类. 原图由明显的三部分构成, 所以我们分别设 $d = 2, 3, 4, 5$. 在整个数值实验中, 我们设置最大的迭代步数为 $\text{MaxIter} = 10^4$, 设置误差容忍度为 10^{-5} . 对每一对 (β, d) , 我们会随机产生 X^0 重复执行 10 次实验. 表格 2 列出了块坐标下降算法的平均表现, 比如结果图的平均分支数 ($\# \text{Blocks}$), 迭代步数的平均值 (Iter), CPU 时间的平均值 (Time).

在表格 2 的 (d) 和 (e) 里, 属于同一类的顶点被标记了相同的颜色, 属于不同类的顶点被标记了不同的颜色. 我们发现

1. 当结果图的连通分支数 $\# \text{Blocks} = 1, 2, 3, 4$ 时, 块坐标下降算法求得的数值解分别只有一个; 当 $\# \text{Blocks}$ 取其他值时数值解不只一个 (见表 2 的 (d) 和 (e));
2. 当取合适的 β 和 d 时, 块坐标下降算法可以将原图分为 3 块 (见表 2 的 (a)-(c)), 符合人的主观感知;
3. 在这个聚类例子中, 由表 2 的 (a) 和 (b) 知, 参数 σ 取 0.15 比取 0.1 聚类难度更大, 将顶点集分成 3 类更加困难.

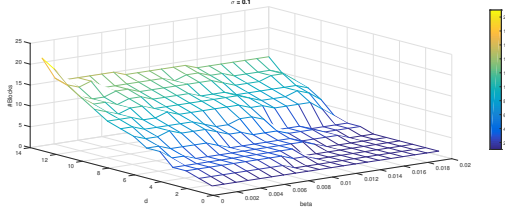
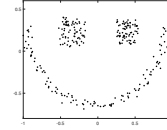
5 总结

本文综述了谱聚类和图划分问题的进展, 提出了一类新的连续优化模型. 我们理论分析了新模型的性质, 并给出了块坐标下降算法. 数值实验验证了新模型及算法的有效性.

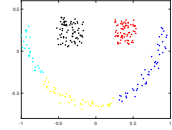
d	β	#Blocks	Iter	Time (s)
2	0.004	2	3	1.224242
	0.006	2	3	1.140432
	0.008	2	3	1.167251
	0.010	1	2	0.394383
	0.012	1	2	0.399520
3	0.004	3	3	1.988304
	0.006	3	3	1.930554
	0.008	3	3	2.081353
	0.010	2	3	1.755979
	0.012	1	3	0.678588
4	0.004	3	3	2.328548
	0.006	3	3	2.250303
	0.008	3	3	2.230278
	0.010	3	3	2.180295
	0.012	1	4	2.001127
5	0.004	3	8	4.629578
	0.006	3	4	2.627945
	0.008	3	4	2.396763
	0.010	3	3	1.891989
	0.012	3	3	1.837274

(a) $\sigma = 0.1$

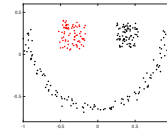
d	β	#Blocks	Iter	Time (s)
2	0.004	1	4	0.980380
	0.006	1	3	0.751833
	0.008	1	3	0.772886
	0.010	1	3	0.723845
	0.012	1	2	0.427631
3	0.004	2	5	2.410831
	0.006	2	4	1.956297
	0.008	2	4	1.811271
	0.010	1	4	1.648492
	0.012	1	5	1.179030
4	0.004	3	5	2.657940
	0.006	3	4	2.020349
	0.008	3	5	2.431373
	0.010	3	13	5.465099
	0.012	1	6	2.888150
5	0.004	4	11	5.581889
	0.006	3	7	3.802894
	0.008	3	7	3.661708
	0.010	3	6	3.183617
	0.012	3	5	2.946219

(b) $\sigma = 0.15$ (c) $\sigma = 0.1$ 时, $(\beta, d, \text{\#Blocks})$ 的关系

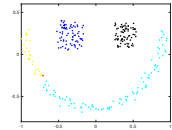
#Blocks = 1



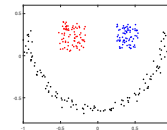
#Blocks = 5



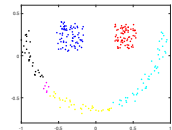
#Blocks = 2



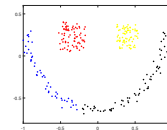
#Blocks = 5



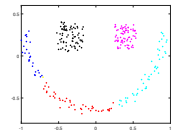
#Blocks = 3



#Blocks = 6



#Blocks = 4



#Blocks = 6

(d) unique solution

(e) not unique solution

表 2: 块坐标下降算法的数值结果

A \mathcal{L} 的 Hermitian 伴随算子和函数 f 的导数

在线性空间 $\mathbb{R}^{n \times n}$ 中装备以下 Frobenius (或 Schmidt-Hilbert) 内积

$$\langle M, N \rangle = \text{tr}(MN^T), \quad M, N \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad (40)$$

则线性空间 $\mathbb{R}^{n \times n}$ 构成一个实的 Hilbert 空间. \mathcal{L} 作为这个空间上的线性算子有一个 Hermitian 伴随算子, 不妨记为 \mathcal{L}^H . 由伴随算子的定义知, $\mathcal{L}^H : \mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ 是满足以下条件的唯一一个线性算子: 对所有矩阵 $M, N \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 等式

$$\langle \mathcal{L}(M), N \rangle = \langle M, \mathcal{L}^H(N) \rangle \quad (41)$$

恒成立. 由此, 我们可以得到 Hermitian 伴随算子 \mathcal{L}^H 的精确表达式.

命题 A.1 对每一个矩阵 $N \in \mathbb{R}^{n \times n}$,

$$\mathcal{L}^H(N)_{ij} = N_{ii} - N_{ij}. \quad (42)$$

证明. 显然, 由表达式 (41) 确定的 \mathcal{L}^H 是 Hilbert 空间 $\mathbb{R}^{n \times n}$ 上的线性算子. 对任意两个矩阵 M 和 $N \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 根据 \mathcal{L} 的定义, 我们有

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{L}(M), N \rangle &= \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i}^n \mathcal{L}(M)_{ij} N_{ij} + \sum_{i=1}^n \mathcal{L}(M)_{ii} N_{ii} \\ &= - \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i}^n M_{ij} N_{ij} + \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j \neq i}^n M_{ij} \right) N_{ii} \\ &= - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n M_{ij} N_{ij} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n M_{ij} N_{ii} \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n M_{ij} (N_{ii} - N_{ij}). \end{aligned} \quad (43)$$

故由 (41) 确定的算子 \mathcal{L}^H 满足表达式 (42). \square

我们可以利用伴随算子 \mathcal{L}^H 简洁地表示出问题 (13) 的目标函数的微分. 显然, 目标函数 f 是关于 X 的线性函数. 因此一定存在一个由 H 唯一确定而与 X 无关的矩阵 M , 满足: 对任意一个矩阵 $X \in \mathbb{R}^{n \times n}$,

$$f(X, H) = \langle X, M \rangle \quad (44)$$

恒成立. 进而, 函数 f 关于 X 的 Fréchet 偏导数是 M . 事实上,

$$\begin{aligned} f(X, H) &= \text{tr}[H^T \mathcal{L}(A \circ X) H] - \beta \text{tr}(AX) \\ &= \langle \mathcal{L}(A \circ X), HH^T \rangle - \beta \langle X, A \rangle \\ &= \langle A \circ X, \mathcal{L}^H(HH^T) \rangle - \beta \langle X, A \rangle \\ &= \langle X, A \circ \mathcal{L}^H(HH^T) \rangle - \beta \langle X, A \rangle. \\ &= \langle X, A \circ \mathcal{L}^H(HH^T) - \beta A \rangle. \end{aligned} \quad (45)$$

因此,

$$\nabla_X f(X, H) = A \circ \mathcal{L}^H(HH^T) - \beta A. \quad (46)$$

偏导数 $\nabla_H f(X, H)$ 可直接由下式计算

$$\nabla_H \text{tr}(H^T C H) = (C + C^T) H, \quad (47)$$

其中 $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是与 H 无关的任意一个矩阵. 综上所述, 以下命题成立:

命题 A.2 问题 (13) 的目标函数 f 作为 Hilbert 空间 $\mathbb{R}^{n \times n} \times \mathbb{R}^{n \times d}$ 上的一个函数有如下偏导数

$$\nabla_X f(X, H) = A \circ \mathcal{L}^H(HH^\top) - \beta A, \quad (48)$$

$$\nabla_H f(X, H) = 2\mathcal{L}(A \circ X)H, \quad (49)$$

其中 $\mathcal{L}^H: \mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ 是 \mathcal{L} 的 Hermitian 伴随算子, 其表达式参见命题 A.1.

参考文献

- [1] F. Chung. *Spectral Graph Theory*. Number 92 in Regional Conferences in Mathematics. American Mathematical Society, Providence, 1997.
- [2] W. E. Donath and A. J. Hoffman. Algorithms for partitioning graphs and computer logic based on eigenvectors of connection matrices. *IBM Technical Disclosure Bulletin*, 15(3):938–944, 1972.
- [3] W. E. Donath and A. J. Hoffman. Lower bounds for the partitioning of graphs. *IBM Journal of Research and Development*, 17(5):420–425, 1973.
- [4] L. Hagen and A. B. Kahng. New spectral methods for ratio cut partition and clustering. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, 11(9):1074–1085, 1992.
- [5] H. Lütkepohl. *Handbook of matrices*. John Wiley & Sons, New York, 1996.
- [6] B. Mohar. The Laplacian spectrum of graphs. In Y. Alavi, G. Chartrand, O. R. Oellermann, and J. Schwenk, A, editors, *Graph Theory, Combinatorics, and Applications: Proceedings of the Sixth Quadrennial International Conference on the Theory and Applications of Graphs*, volume 2, pages 871–898. Wiley, New York, 1991.
- [7] B. Mohar. Some applications of Laplace eigenvalues of graphs. In G. Hahn and G. Sabidussi, editors, *Graph Symmetry: Algebraic Methods and Applications*, volume 497 of *Nato Science Series C*, pages 225–275. Springer Netherlands, Dordrecht, 1997.
- [8] A. Y. Ng, M. I. Jordan, and Y. Weiss. On spectral clustering: Analysis and an algorithm. In T. G. Dietterich, S. Becker, and Z. Ghahramani, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems 14*, pages 849–856. MIT Press, 2002.
- [9] J. Shi and J. Malik. Normalized cuts and image segmentation. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 22(8):888–905, 2000.
- [10] U. von Luxburg. A tutorial on spectral clustering. *Statistics and Computing*, 17(4):395–416, 2007.
- [11] U. von Luxburg, O. Bousquet, and M. Belkin. On the convergence of spectral clustering on random samples: the normalized case. In *International Conference on Computational Learning Theory*, pages 457–471. Springer, 2004.