

知识引导的基于锚图学习的多视图聚类方法研究

梁 科 马慧敏 刘溯源 刘新旺

(国防科技大学计算机学院 长沙 410073)

摘 要 传统的多视图聚类方法采用相似度矩阵以刻画样本之间关联性,然而样本间的关系可以天然地用知识图谱进行描述。但是现有方法既没有观察到这一现象,也没有设计有效的机制对其加以利用,以至于使得方法的性能次优。为了有效地利用这部分信息,本文首次提出了一种知识引导增强的基于锚图学习的多视图聚类方法(Knowledge-guided Anchor-graph-based Multi-view Clustering, KAMVC)。具体地,该方法除了以现有的锚图学习方法作为基线模型以外,设计了知识引导的锚图增强模块,包括三个步骤:锚图特征映射、结构知识预处理和对齐学习。所设计的模块简单却有效地利用了结构知识中所蕴含的样本级别的相关性信息,并且便于与各类基于锚图学习的多视图聚类方法相结合,为其赋能。本文在MV-Nation、MV-WordNet、MV-UMLS三个数据集上开展了大量实验,从优越性、有效性、迁移性、敏感性、收敛性五个方面验证了所提出方法的突出性能。尤其地,在MV-Nation数据集上,本文方法具有显著的优势。相较于传统方法,KAMVC在ACC、NMI、PUR指标上分别提升了26.38%、23.76%和26.00%。

关键词 聚类;多视图聚类;锚图学习;知识表征;图机器学习

中图法分类号 TP18 DOI号 10.11897/SP.J.1016.2025.01749

Research on Knowledge-Guided Anchor-Based Multi-View Clustering

LIANG Ke MA Hui-Min LIU Su-Yuan LIU Xin-Wang

(College of Computer Science and Technology, National University of Defense Technology, Changsha 410073)

Abstract Traditional multi-view clustering methods use similarity matrices to describe the sample-level correlations. However, the correlations between samples can naturally be described by knowledge graphs. Existing methods have neither observed it nor designed effective mechanisms to utilize it, leading to suboptimal performance. Meanwhile, graph-based multi-view clustering methods can also generate correlation graphs to describe the relations between samples. Therefore, it is easy to think about whether we can better leverage these two views of correlations. To this end, this paper proposes a novel method, named the Knowledge-guided Anchor-graph-based Multi-view Clustering (KAMVC). Specifically, besides using existing anchor-based MVC methods as backbone models, KAMVC first designs a knowledge-guided anchor-graph enhancement module, which includes three steps: (1) anchor-graph feature projection, (2) structural knowledge encoding, and (3) alignment learning. Such a module is simple yet effective in utilizing the sample-level correlation information underlying related KGs, and it can also be easily integrated with different anchor-graph-based multi-view clustering methods to enhance their capabilities. Extensive experiments were conducted on three datasets, i. e., MV-Nation, MV-WordNet, and MV-UMLS, to validate KAMVC's promising

收稿日期:2025-03-08;在线发布日期:2025-05-14。本课题得到国家自然科学基金杰出青年科学基金项目(62325604)、国家自然科学基金专项项目(62441618)、国家自然科学基金面上项目(62276271)资助。梁科,博士,讲师,主要研究领域为多视图聚类、图机器学习、知识表征与推理。E-mail: liangke22@nudt.edu.cn。马慧敏,博士生,主要研究领域为多视图聚类。刘溯源,博士生,主要研究领域为多视图聚类。刘新旺(通信作者),博士,教授,国家杰出青年科学基金入选者,中国计算机学会(CCF)杰出会员,主要研究领域为多视图聚类、核学习、数据挖掘。E-mail: xinwangliu@nudt.edu.cn。

performance from five aspects, including superiority, effectiveness, transferability, sensitivity, and convergence. In particular, compared to traditional methods, KAMVC improves the ACC, NMI, and PUR metrics by 26.38%, 23.76%, and 26.00% on MV-Nation, respectively.

Keywords clustering; multi-view clustering; anchor graph learning; knowledge representation; graph machine learning

1 引 言

人们往往可以从不同的视角对同一对象进行观察,而得到的多视图信息通常互为补充、互相支撑,以更全面地描述目标对象的特点和属性。现实中的多视图数据往往难以标注,如何利用一种无监督的学习方式充分利用多个视图的信息,是近年来多视图学习中的热点问题之一。

现有的多视图聚类方法有很多种,比如基于核学习的方法^[1-6]、基于子空间聚类的方法^[7-11]、基于图学习的方法^[12-17]等。虽然这些方法都获得了相对广泛的成功,但是随着数据规模的不断增大,现有方法往往面临着可拓展性差、算法效率低等问题。这些问题在基于图学习的多视图聚类方法上尤其的凸显,这是由于基于图学习的方法往往需要构建样本

之间的相似度图。如图1所示,当样本数量为 N 时,这种步骤会生成一个空间复杂度为 $\mathcal{O}(N^2)$ 的矩阵。为了解决这个问题,锚点被引入到了基于图学习的多视图聚类方法之中。比如锚点数量为 m ,多视图聚类方法的空间复杂度会降低至 $\mathcal{O}(m \times N)$,这使得现有的基于图的多视图学习方法可以获得更好的拓展性。现有的基于锚点图学习的多视图聚类方法主要可以分为两种,其一是锚点固定的方法,其二是锚点更新的方法。前者往往基于经验,针对不同的数据采用诸如均匀采样^[18-19], k-means 采样^[20-22]等启发式策略进行锚点的筛选,进而服务于后续的聚类任务。其中典型的锚点固定方法包括FMCNOF^[23], LMVSC^[24], 而典型的锚点更新方法包括FMVACC^[25], FIMVC-VIA^[26]等。本文的研究则也是针对基于锚点图学习的多视图聚类方法开展的。

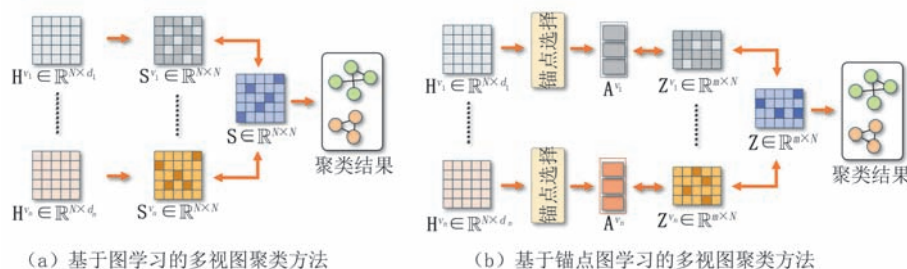


图1 基于图学习的多视图聚类方法与基于锚点图学习的多视图聚类方法流程对比

但是无论是上述哪一种方法,它们都采用相似度矩阵以刻画样本之间关联性,相似度矩阵中的值则是由相似度度量函数计算得来的。如图2(a)所示,对于 N 个样本而言,样本之间的相关性往往用一个 $N \times N$ 的相似图矩阵进行描述。但是这种所描述的样本之间的相关性很依赖于(1)有效的样本特征信息和(2)适合的相似度度量函数。这种启发式的策略很依赖于人类的经验,进而导致方法可拓展性差。尤其当现有视图中的数据存在缺失、冗余时,依赖于当前视图中的数据生成相关性矩阵的可靠性也会受到影响。与此同时,图数据在现实应用中是最常用,也最适合用于描绘样本之间关系的数据类型。如图2(b)所示,

针对图(a)中的同一组样本,可以提前构建出这些实体之间的知识图谱以描述各个样本之间的结构化关系。在这类图结构中,实体与实体之间的关系,往往用具有标签的边来进行描述。例如(达·芬奇,画,蒙娜丽莎)则表示画家达·芬奇是作品蒙娜丽莎的作者这一关系。利用结构编码器对上述图谱数据进行编码,可以得到维度为 $N \times d_s$ 的特征矩阵。由于所得特征描述的是图结构信息,每一行 $1 \times d_s$ 的特征向量则表达的是不同样本在当前图中的结构信息,而这种结构信息实则描述了当前样本在整个图结构中的相对位置关系。那么是否可以将这种外界结构知识引入到现有的基于图学习的多视图聚类方法中呢?

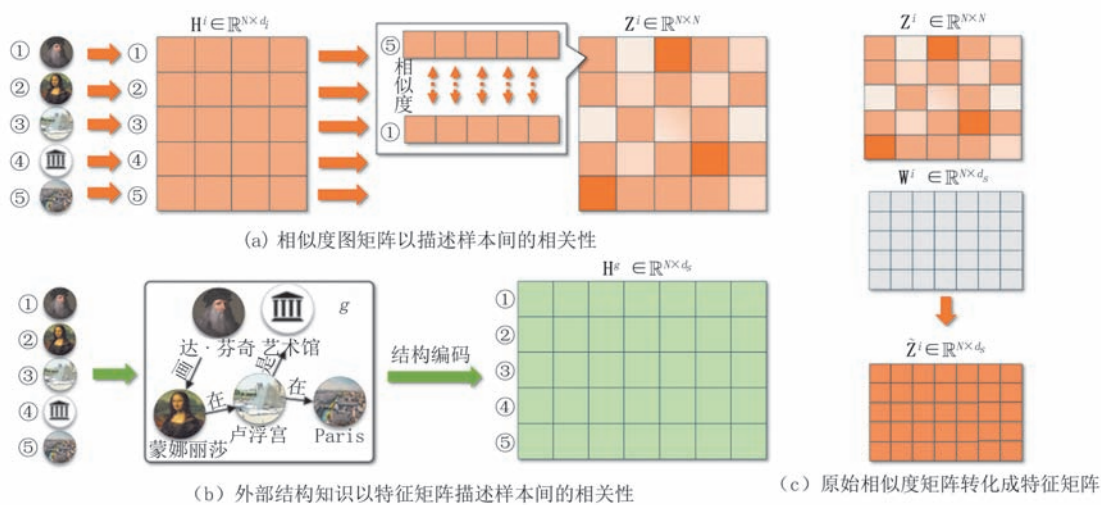


图2 相似度图与外部结构知识对于样本相关性不同的描述示意图

不管是以往的相似度矩阵,还是隐藏在图谱内的结构知识,它们都是对于样本相关性不同层面的描述。宏观来说他们之间是具备一定的相似性的,然而基于特征的相关性表达则更具可学性,也更具可拓展性。与此同时,近年来,度量学习在机器学习领域具有广泛的影响。它被广泛地应用于增强各类基础方法,以丰富信息表达。受其启发,本文将原先方法中的相似度矩阵投影至低维向量空间,并引入的额外结构知识特征对齐,从而在学习的过程中将引入的结构信息迁移至可学的转化矩阵中(如图2(c)中 $W^i \in \mathbb{R}^{N \times d_i}$)。其中,本文方法引入了一个新颖的结构知识预处理模块以引入新的额外结构知识。

综上所述,本文在基础多视图锚图学习聚类范式^[12,27-30]上引入了知识引导的锚图增强模块,该模块包含三个步骤:(1)锚图特征映射,(2)结构知识预处理,和(3)对齐学习。通过这三个步骤,本文有效地将外界结构知识引入现有的基于锚图学习的多视图聚类方法中,以改善原有方法对样本之间相关性表达不充分以至于方法性能不高的问题。本文所提出的方法简单却有效,且具有可拓展性,填补了将外界结构知识与现有基于锚图学习的多视图聚类方法结合的技术空白,为后续相关研究奠定了基础。

本文的主要贡献总结如下:

(1)本文首次观察到外部结构知识可以有效增强方法对样本间的相关性的描述,并基于这一点设计锚图增强模块对现有基于图相似度的方法的表达能力进行增强。

(2)本文所设计的知识引导的锚图增强模块,包含锚图特征映射、结构知识预处理和对齐学习。

该模块简单却有效,并且具有较好的可拓展性,可以为各类基于图学习的方法赋能。

(3)本文在MV-Nation、MV-WordNet、MV-UMLS三个数据集上开展了大量实验,从优越性、有效性、迁移性、敏感性、收敛性五个方面验证了所提出方法的突出性能。尤其地,在MV-Nation数据集上,本文方法具有显著的优势。相较于传统方法,KAMVC在ACC、NMI、PUR指标上分别提升了26.38%、23.76%和26.00%。

本文的其他章节构成如下。第二节简要介绍了一些相关工作,而第三节则描述了所提出的知识引导的基于锚图优化的多视图聚类方法,其中包括文中使用的主要符号、所提出方法的优化算法和复杂性分析。相关的实验验证与分析呈现于第四节中,包括实验的设置、数据集描述、结果呈现和性能分析。最后,本文的结论和展望于第五节被总结。

2 相关工作

本章节包括主要讨论了现有基于图学习的多视图聚类方法,以及基于锚点的多视图聚类方法,为读者对本文的理解打下基础。

2.1 基于图学习的多视图聚类方法

基于图的方法为每个视图根据数据结构信息构建一个图嵌入矩阵,并可以通过进一步的自适应加权融合生成一个统一的图矩阵。多视图图聚类通常遵循以下步骤:(1)为每个视图构建相似性图;(2)获得共识相似性图;(3)从共识图中生成聚类结果。针对这类方法,近些年主要有两种变体,其一是将原有方法范式中

常用的共识矩阵正则化项改为张量形式,其二则是探索更丰富的场景。关于前者,由于张量方法可以有效地将视图融合从二维提升到更高维度,因此可以进一步探索各个视图相似度矩阵之间更复杂的内部关系,从而提升聚类的质量。比如,文献[31]工作在原有的图学习方法的基础上引入了加权张量核范数,从而提升张量核范数的灵活性。此外,为了提升所引入张量在大规模场景下的适应性和精度,文献[32]进一步引入了秩约束和二部图的概念。关于后者,现实场景中数据往往存在缺失和规模大等挑战,为了使得现有基于图学习的多视图聚类方法更实用,大量的研究者开始探索其在缺失、大规模场景下的范式变体。关于数据缺失的场景,文献[26]将对缺失行和列的预测操作与现有方法相结合,以通过探索缺失场景下视图内和视图间信息来学习一致的表示。此外,文献[16]则引入了视图特异的划分矩阵,并通过拉伸和融合各个视图下的划分矩阵进一步指导聚类任务。而关于大规模场景的多视图聚类方法,大多数方法借鉴了原型学习^[33-35]的思路,在数据中定义具有代表性的锚点,以降低学习过程的计算复杂度,从而使之具备处理大规模数据集的能力,这也是本文方法所属于的范畴。

2.2 基于锚点的多视图聚类方法

现有的多视图聚类(MVC)方法在处理大规模数据时面临显著的计算挑战。例如,在多视图子空间聚类中,高时间复杂度主要源于相似度图的构建和谱聚类中的特征值分解。

为解决这一问题,已有多种方法被提出,其中结合锚点图学习是一种颇具前景的策略。近年来,锚点图通过从原始样本中选择少量代表性点(称为锚点),然后在锚点与原始样本之间学习一个锚点图,从而被应用于大规模数据聚类。该方法将亲和力图 $n \times n$ 替换为 $n \times m$ 的锚点图,其中 m 表示锚点的数量。锚点的引入能够显著降低子空间聚类的复杂度,经典的基于锚点的MVC目标函数为^[36]:

$$\begin{aligned} \min_{\alpha, \mathbf{W}^{v_p}, \mathbf{A}, \mathbf{Z}} \sum_{p=1}^V \alpha_p^2 \left\| \mathbf{H}^{v_p} - \mathbf{Z} \mathbf{A} \mathbf{W}^{v_p} \right\|_F^2 \\ \text{s.t. } \alpha^\top \mathbf{1} = 1, \mathbf{W}^{v_p} \mathbf{W}^{v_p \top} = \mathbf{I}_k, \mathbf{A}^\top \mathbf{A} = \mathbf{I}_k, \\ \mathbf{Z} \geq 0, \mathbf{Z} \mathbf{1} = 1 \end{aligned} \quad (1)$$

这里, $\{\mathbf{W}^{v_p}\}_{p=1}^V$ 表示用于共识锚点引导的投影矩阵。与现有的锚点采样策略不同,该方法将锚点选择和图构建整合到一个统一的框架中,使得两者能够相互促进和优化。通过这种方式,学习到的共识锚点能够更好地捕捉多视图信息。

此外,许多研究还提出了针对锚点学习策略的各

种优化方法。首先,一些模型通过添加约束项来提升聚类性能。例如,文献[25]通过利用特征和结构信息实现灵活的跨视图锚点融合,解决了大规模多视图聚类中的锚点对齐问题。文献[37]通过关联多个潜在空间生成多尺度的视图共享锚点,从而增强视图间的多样性,并采用线性复杂度的集成方案来处理大规模数据。文献[38]通过基于聚类的锚点学习和预定义的共识聚类指示矩阵,提升了子空间表示的判别能力,确保锚点具有明确的聚类结构。其次,引入多样化的锚点与图构建策略是另一些模型改进的关键方向。文献[39]将锚点图与k-means策略结合,在不需额外后处理的情况下实现了高效的聚类结果。文献[40]通过自适应视图权重并应用秩约束,确保最终图中具有固定的连通分量。文献[30]通过利用视图间的相关性构建一致的锚点图,显著提升了聚类性能。最后,一些模型采用独特的策略进一步优化聚类性能。文献[14]通过优化预设数量锚点的贡献权重,允许不同视图的锚点数量具有多样性,并引入灵活的锚点图融合策略。文献[32]设计了一种基于方差的去相关锚点选择策略,构建二分图并最小化张量 Schatten p -范数以挖掘视图间的相似性。同时,通过正则化和连通性约束探索同一视图内的相似性,构建了一种编码判别信息并直接揭示数据簇的图结构。

近年来,文献[41]是一种复杂数据聚类框架,用图滤波来融合几何结构和属性信息,并且能够自适应地学习高质量的锚点来降低复杂度,从而以线性复杂度高效地处理不同类型的数据;而文献[42]则提出了大规模图学习框架,利用锚点思想、二部图和谱图性质同时考虑图结构、可扩展性和样本外问题,从而能够在线性复杂度中学习具有明确簇结构的图。文献[43]提出自适应锚点加权机制,动态优化锚点重要性以提升聚类效果;引入多样性正则化,降低冗余锚点权重,增强多视图数据表示能力。文献[44]则提出基于概念分解的多视图聚类方法,通过语义关联建模锚点与簇中心的关系,并设计高效的四步优化算法,实现近线性复杂度的大规模数据处理。文献[45]创新性地结构图与多视图属性特征融合,同时考虑低秩概率相似性图和混合阶相关性。文献[46]则提出基于锚图重构的非负表示学习框架,通过相关熵准则保留多视图结构信息;将锚图分解与共识表示学习统一,实现高效的大规模多视图聚类。文献[47]提出变分图生成器,通过先验假设推断多视图共识图结构;结合特征与图嵌入学习,同步利用视图共性和特性信息提升聚类效果。

文献[48]则提出自加权对比融合框架,通过分层特征融合分离一致性与重构目标;采用自适应权重策略强化有效视图信息,缓解多视图表示退化问题。

现有的多视图聚类(MVC)方法面临着巨大的计算挑战,难以处理大规模数据。例如,在多视图子空间聚类中,高时间复杂度主要来源于相似性图的构建和谱聚类中的特征值分解。

3 方 法

如图3所示,所提出的知识引导的基于锚图学

习的多视图聚类方法旨在以多源特征为输入,输出融合后的一致性表征。具体而言,本文方法包括两个主要的部分:锚点生成模块和结构知识增强的锚图生成模块。其中,锚点生成模块旨在筛选每个视图下具有代表性的样本,以提升多视图聚类方法的效率。此外,由于引进了外部结构化知识,所提出的结构知识增强的锚图生成模块旨在通过特征对齐的方式,将结构化知识引入到模型中,提升锚图的质量,以进一步学习到更好的一致性特征。文中涉及的符号描述具体见表1。各部分具体内容如下文所述。

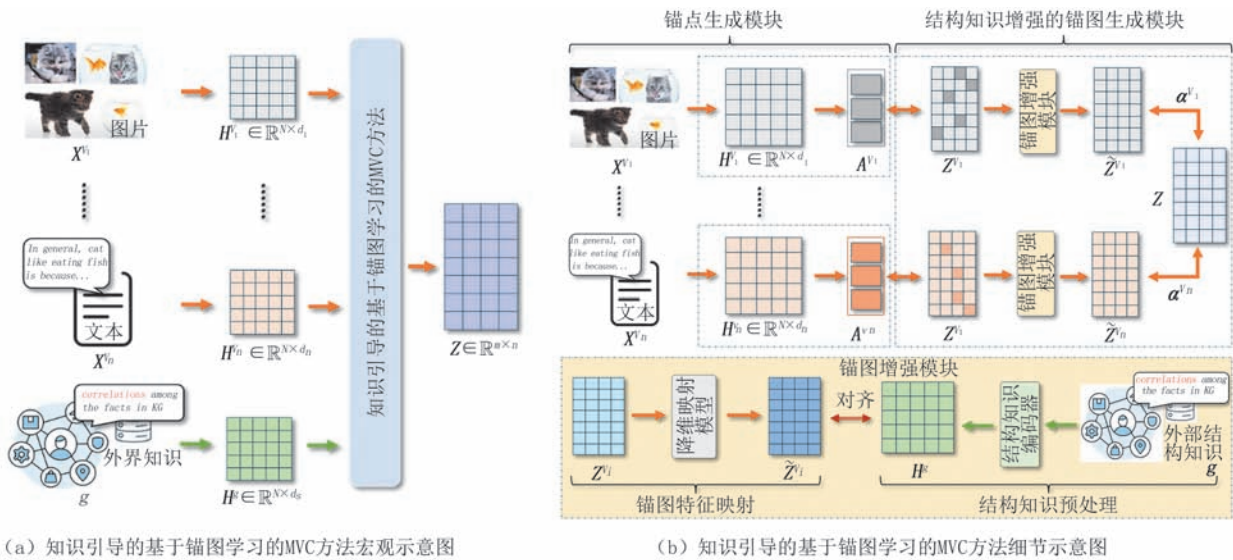


图3 知识引导的基于锚图学习的多视图聚类方法(KAMVC)框架图

表1 数学符号表

符号	维度	说明
$\{X^{v_p}\}_{p=1}^V$	$X^{v_p} \in \mathbb{R}^{d_p \times n}$	原始数据矩阵
$\{H^{v_p}\}_{p=1}^V$	$H^{v_p} \in \mathbb{R}^{d_p \times n}$	特征矩阵
$\{W^{v_p}\}_{p=1}^V$	$W^{v_p} \in \mathbb{R}^{d_p \times m}$	投影矩阵
$\{A^{v_p}\}_{p=1}^V$	$A^{v_p} \in \mathbb{R}^{d_p \times n}$	锚点矩阵
H_g	$H_g \in \mathbb{R}^{d_g \times n}$	外部图谱结构
$\{Z^{v_p}\}_{p=1}^V$	$Z^{v_p} \in \mathbb{R}^{m \times n}$	原始锚图矩阵
$\{\tilde{Z}^{v_p}\}_{p=1}^V$	$\tilde{Z}^{v_p} \in \mathbb{R}^{m \times n}$	样本级锚图特征矩阵
Z	$\mathbb{R}^{m \times n}$	一致性锚图特征矩阵
γ	$\mathbb{R}^{1 \times V}$	视图权重向量
n	$\mathbb{R}^{1 \times 1}$	样本数量
m	$\mathbb{R}^{1 \times 1}$	锚点数量
V	$\mathbb{R}^{1 \times 1}$	总视图数量
v_p	$\mathbb{R}^{1 \times 1}$	第 p 个视图 ($p \leq V$)

3.1 锚点生成

该部分旨在基于现有的特征 H^{v_p} 生成该视图下的锚点以及其初始对应的锚图,具体包括两个步骤:(1)特征提取;(2)锚点和锚图初始化。

针对第一个步骤,给定视图 v_p 的原始数据 X^{v_p} ,针对不同视图采用不同的特征提取器 $f(\cdot)$ 提取具体的特征,如BERT^[49]、DeepSeek^[50]用于提取文本特征,ViT^[51]用于提取图像特征。

$$H^{v_p} = f(X^{v_p}) \quad (2)$$

针对第二个步骤,视图 v_p 下的特征 H^{v_p} 理想情况可以拆解成锚点特征 A^{v_p} 和锚图 Z^{v_p} 的结合,其中锚图表示的是所选 n 个锚点与其余样本之间的关联。如前文所述,这种样本间相关性的描述用的是一种相似图的形式,在外部知识的引入下可以被进一步增强,以赋能原始模型。

$$H^{v_p} = A^{v_p} Z^{v_p} \quad (3)$$

3.2 结构知识增强的锚图生成

针对蕴含在结构知识内的样本间的信息,本文提供了一种基于特征对齐的方法。具体而言,整个锚图增强模块有三个步骤,包括(1)锚图特征映射;(2)结构知识预处理^[52-55]; (3)特征对齐。

锚图特征映射旨在通过引入一个可学的转换矩阵 \mathbf{W}^{v_p} , 以进一步将原始锚图 \mathbf{Z}^{v_p} 映射至与结构知识特征相同的向量空间, 形成样本级别的锚图特征 $\tilde{\mathbf{Z}}^{v_p}$ 。

$$\tilde{\mathbf{Z}}^{v_p} = \mathbf{W}^{v_p} \mathbf{Z}^{v_p} \quad (4)$$

结构知识预处理则旨在通过现有的图谱表示学习方法(Knowledge Graph Embedding, KGE)将外界的图谱结构 \mathcal{G} 映射到特征空间。

$$\mathbf{H}_{\mathcal{G}} = \text{KGE}(\mathcal{G}) \quad (5)$$

最后在特征对齐过程中, 本文方法将式(4)中的样本级别的锚图特征 $\tilde{\mathbf{Z}}^{v_p}$ 与外部结构知识特征 $\mathbf{H}_{\mathcal{G}}$ 对齐, 使得方法在优化的过程中将信息结合进最后的一致性特征中。

3.3 总体目标函数

总体的目标函数如式(6)所示:

$$\begin{aligned} \min_{\Theta} & \left(\gamma_{\rho}^2 \left\| \mathbf{H}^{v_p} - \mathbf{A}^{v_p} \mathbf{Z} \right\|_F^2 + \left\| \mathbf{W}^{v_p} \mathbf{Z}^{v_p} - \mathbf{H}_{\mathcal{G}} \right\|_F^2 \right. \\ & \left. + \left\| \mathbf{Z}^{v_p} - \mathbf{Z} \right\|_F^2 \right) \\ \text{s.t. } & \gamma^T \mathbf{1} = 1, \mathbf{A}^{v_p T} \mathbf{A}^{v_p} = \mathbf{I}_m, \mathbf{W}^{v_p T} \mathbf{W}^{v_p} = \mathbf{I}_m, \\ & \mathbf{Z} \geq 0, \mathbf{Z}^T \mathbf{1} = 1, \mathbf{Z}^{v_p} \geq 0, \mathbf{Z}^{v_p T} \mathbf{1} = 1 \end{aligned} \quad (6)$$

其中, $\Theta = \left\{ \gamma, \left\{ \mathbf{A}^{v_p} \right\}_{p=1}^V, \mathbf{Z}, \left\{ \mathbf{Z}^{v_p} \right\}_{p=1}^V, \left\{ \mathbf{W}^{v_p} \right\}_{p=1}^V \right\}$, 各个矩阵的维度分别为 $\mathbf{H}^{v_p} \in \mathbb{R}^{d_p \times n}$, $\mathbf{H}_{\mathcal{G}} \in \mathbb{R}^{d_g \times n}$, $\mathbf{A}^{v_p} \in \mathbb{R}^{d_p \times n}$, $\mathbf{W}^{v_p} \in \mathbb{R}^{d_g \times m}$, $\mathbf{Z}^{v_p} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 。

3.4 总体目标函数

为了解决公式(6)中的优化问题, 采用交替优化算法求解。

3.4.1 优化锚点矩阵 $\left\{ \mathbf{A}^{v_p} \right\}_{p=1}^V$

当其他变量固定时, 关于锚点矩阵 $\left\{ \mathbf{A}^{v_p} \right\}_{p=1}^V$ 的优化可以写作如下形式:

$$\begin{aligned} \min_{\left\{ \mathbf{A}^{v_p} \right\}_{p=1}^V} & \sum_{p=1}^V \gamma_{\rho}^2 \left\| \mathbf{H}^{v_p} - \mathbf{A}^{v_p} \mathbf{Z} \right\|_F^2 \\ \text{s.t. } & \mathbf{A}^{v_p T} \mathbf{A}^{v_p} = \mathbf{I}_m \end{aligned} \quad (7)$$

优化时, 每个 \mathbf{A}^{v_p} 互不相关, 通过移除不相关项, 公式(7)可以转换为如下形式:

$$\min_{\mathbf{A}^{v_p}} \text{Tr}(\mathbf{A}^{v_p T} \mathbf{A}_p) \text{s.t. } \mathbf{A}^{v_p T} \mathbf{A}^{v_p} = \mathbf{I}_m \quad (8)$$

其中, $\mathbf{A}_p = \mathbf{H}^{v_p} \mathbf{Z}^T$ 。通过对 \mathbf{A}_p 进行奇异值分解, 能

够得到 \mathbf{A}^{v_p} 的最优解为 $\Sigma_m \mathbf{\Psi}_m^T$, 其中 Σ_m 和 $\mathbf{\Psi}_m^T$ 分别表示 \mathbf{A}_p 的前 m 个左奇异向量和前 m 个右奇异向量组成的矩阵。求解得到所有最优的 $\left\{ \mathbf{A}^{v_p} \right\}_{p=1}^V$ 需要耗费 $\mathcal{O}(nmd + m^2 d)$ 的时间复杂度, 其中 $d = \sum_{i=1}^V d_p$ 。

3.4.2 优化投影矩阵 $\left\{ \mathbf{W}^{v_p} \right\}_{p=1}^V$

当其他变量固定时, 关于 $\left\{ \mathbf{W}^{v_p} \right\}_{p=1}^V$ 的优化可以写作如下形式:

$$\begin{aligned} \min_{\left\{ \mathbf{W}^{v_p} \right\}_{p=1}^V} & \sum_{p=1}^V \left\| \mathbf{W}^{v_p} \mathbf{Z}^{v_p} - \mathbf{H}_{\mathcal{G}} \right\|_F^2 \\ \text{s.t. } & \mathbf{W}^{v_p T} \mathbf{W}^{v_p} = \mathbf{I}_m \end{aligned} \quad (9)$$

优化时, 每个 \mathbf{W}^{v_p} 互不相关, 通过移除不相关项, 公式(9)可以转换为如下形式:

$$\min_{\mathbf{W}^{v_p}} \text{Tr}(\mathbf{W}^{v_p T} \mathbf{I}^{v_p}) \text{s.t. } \mathbf{W}^{v_p T} \mathbf{W}^{v_p} = \mathbf{I}_m \quad (10)$$

其中, $\mathbf{I}^{v_p} = \mathbf{H}_{\mathcal{G}} \mathbf{Z}^{v_p T}$ 。与优化 \mathbf{A}^{v_p} 的方法类似, 通过对 \mathbf{I}^{v_p} 进行奇异值分解, 能够得到 \mathbf{W}^{v_p} 的最优解。

3.4.3 优化视图级锚图 $\left\{ \mathbf{Z}^{v_p} \right\}_{p=1}^V$

固定其他变量, 关于 $\left\{ \mathbf{Z}^{v_p} \right\}_{p=1}^V$ 的优化问题可以写作:

$$\begin{aligned} \min_{\left\{ \mathbf{Z}^{v_p} \right\}_{p=1}^V} & \sum_{p=1}^V \left(\left\| \mathbf{W}^{v_p} \mathbf{Z}^{v_p} - \mathbf{H}_{\mathcal{G}} \right\|_F^2 + \left\| \mathbf{Z}^{v_p} - \mathbf{Z} \right\|_F^2 \right) \\ \text{s.t. } & \mathbf{Z}^{v_p} \geq 0, \mathbf{Z}^{v_p T} \mathbf{1} = 1 \end{aligned} \quad (11)$$

由于各个视图锚图优化互不相关, 因此各个视图上的 \mathbf{Z}^{v_p} 能够独立进行优化:

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{Z}^{v_p}} & \left\| \mathbf{W}^{v_p} \mathbf{Z}^{v_p} - \mathbf{H}_{\mathcal{G}} \right\|_F^2 + \left\| \mathbf{Z}^{v_p} - \mathbf{Z} \right\|_F^2 \\ \text{s.t. } & \mathbf{Z}^{v_p} \geq 0, \mathbf{Z}^{v_p T} \mathbf{1} = 1 \end{aligned} \quad (12)$$

公式(12)等同于优化:

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{Z}^{v_p}} & \text{Tr}(\mathbf{Z}^{v_p T} \mathbf{Z}^{v_p} (\mathbf{W}^{v_p T} \mathbf{W}^{v_p} + \mathbf{I}_m) - (\mathbf{H}_{\mathcal{G}}^T \mathbf{W}^{v_p} + \mathbf{Z}^T) \mathbf{Z}^{v_p}) \\ \text{s.t. } & \mathbf{Z}^{v_p} \geq 0, \mathbf{Z}^{v_p T} \mathbf{1} = 1 \end{aligned} \quad (13)$$

进一步地, 公式(13)可以转换为

$$\min_{\mathbf{Z}^{v_p}} \left\| \mathbf{Z}^{v_p} - \mathbf{M}^{v_p} \right\|_F^2 \text{s.t. } \mathbf{Z}^{v_p} \geq 0, \mathbf{Z}^{v_p T} \mathbf{1} = 1 \quad (14)$$

其中, $\mathbf{M}^{v_p} = \frac{1}{2}(\mathbf{H}_{\mathcal{G}}^T \mathbf{W}^{v_p} + \mathbf{Z}^T)$, 由于关于变量 \mathbf{Z}^{v_p} 的约束分别对应每一列, 优化问题能够转换为

$$\min_{\mathbf{Z}_{:,i}^{v_p}} \left\| \mathbf{Z}_{:,i}^{v_p} - \mathbf{M}_{:,i}^{v_p} \right\|_F^2$$

算法 1. 关于知识引导的基于锚图优化的多视图聚类方法的优化算法

输入: 样本矩阵 $\left\{ \mathbf{H}^{v_p} \right\}_{p=1}^V$, 知识引导的锚图矩阵

$\mathbf{H}_g \in \mathbb{R}^{d_g \times n}$.

输出: 对 \mathbf{Z} 进行奇异值分解。

1. 初始化 $\{\mathbf{A}^{v_p}\}_{p=1}^V, \mathbf{Z}, \{\mathbf{W}^{v_p}\}_{p=1}^V$ 且 $\gamma_p = \frac{1}{V}$.
2. 若未达到收敛条件
3. 通过公式(8)更新 $\{\mathbf{A}^{v_p}\}_{p=1}^V$;
4. 通过公式(10)更新 $\{\mathbf{W}^{v_p}\}_{p=1}^V$;
5. 通过公式(18)更新 $\{\mathbf{Z}^{v_p}\}_{p=1}^V$;
6. 通过公式(25)更新 \mathbf{Z} ;
7. 通过公式(27)更新 γ ;
8. 结束

$$s.t. \mathbf{Z}_{i,:}^{v_p} \geq 0, \mathbf{Z}_{i,:}^T \mathbf{1} = 1, i = 1, 2, \dots, m \quad (15)$$

其拉格朗日函数写作:

$$\mathcal{L}(\mathbf{Z}_{i,:}^{v_p}, \alpha_p, \beta_p) = \frac{1}{2} \|\mathbf{Z}_{i,:}^{v_p} - \mathbf{M}_{i,:}^{v_p}\|_F^2 + \alpha_p (\mathbf{Z}_{i,:}^{v_p} - \mathbf{I}) + \beta_p, \mathbf{Z}_{i,:}^{v_p} \quad (16)$$

其中, $\beta_p \in \mathbb{R}^n < 0$, 且 α_p 是拉格朗日乘子。结合 KKT 条件^[56], 能够得到:

$$\mathbf{Z}_{i,:}^{v_p} - \mathbf{M}_{i,:}^{v_p} + \alpha_p \mathbf{I}^T + \beta_p \mathbf{I}^T = 0, \mathbf{Z}_{i,:}^{v_p} \beta_p = 0 \quad (17)$$

带入 \mathbf{Z}^{v_p} 每列求和为 1 的约束, 能够进一步得到:

$$\mathbf{Z}_{i,:}^{v_p} = \max(\mathbf{M}_{i,:}^{v_p} - \alpha_p \mathbf{I}^T, 0), \quad \alpha_p = \frac{1 + \mathbf{M}_{i,:}^{v_p} \mathbf{1}}{n} \quad (18)$$

3.4.4 优化一致锚图 \mathbf{Z}

当其他变量固定时, 优化 \mathbf{Z} 相当于优化以下问题:

$$\min_{\mathbf{Z}} \sum_{p=1}^V \left(\gamma_p^2 \|\mathbf{H}^{v_p} - \mathbf{A}^{v_p} \mathbf{Z}\|_F^2 + \|\mathbf{Z}^{v_p} - \mathbf{Z}\|_F^2 \right) \quad s.t. \mathbf{Z} \geq 0, \mathbf{Z}^T \mathbf{1} = 1 \quad (19)$$

公式(19)等同于优化:

$$\max_{\mathbf{Z}} \text{Tr}(\mathbf{Z}^T (\mathbf{A}^{v_p T} \mathbf{A}^{v_p} + \mathbf{I}_m) - (\mathbf{H}^{v_p T} \mathbf{A}^{v_p} + \mathbf{Z}^{v_p T}) \mathbf{Z}) \quad s.t. \mathbf{Z} \geq 0, \mathbf{Z}^T \mathbf{1} = 1 \quad (20)$$

进一步地, 公式(20)可以转化为如下形式:

$$\min_{\mathbf{Z}} \|\mathbf{Z} - \mathbf{M}\|_F^2 \quad s.t. \mathbf{Z} \geq 0, \mathbf{Z}^T \mathbf{1} = 1 \quad (21)$$

其中, $\mathbf{M}^{v_p} = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^V (\gamma_p^2 \mathbf{H}^{v_p T} \mathbf{A}^{v_p} + \mathbf{Z}^{v_p T})$, 由于关于变量 \mathbf{Z} 的约束分别对应每一列, 优化问题能够转换为:

$$\min_{\mathbf{Z}_{i,:}} \|\mathbf{Z}_{i,:} - \mathbf{M}_{i,:}\|_F^2 \quad s.t. \mathbf{Z}_{i,:} \geq 0, \mathbf{Z}_{i,:} \mathbf{1} = 1, i = 1, 2, \dots, m \quad (22)$$

首先写出拉格朗日函数:

$$\mathcal{L}(\mathbf{Z}_{i,:}, \alpha, \beta) = \frac{1}{2} \|\mathbf{Z}_{i,:} - \mathbf{M}_{i,:}\|_F^2 + \alpha (\mathbf{Z}_{i,:} - \mathbf{I}) + \beta, \mathbf{Z}_{i,:} \quad (23)$$

其中, $\beta \in \mathbb{R}^n < 0$, 且 α 是拉格朗日乘子。结合 KKT 条件, 能够得到:

$$\mathbf{Z}_{i,:} - \mathbf{M}_{i,:} + \alpha \mathbf{I}^T + \beta \mathbf{I}^T = 0, \quad \mathbf{Z}_{i,:} \beta = 0 \quad (24)$$

与优化 \mathbf{Z}^{v_p} 的方法相同, 代入 \mathbf{Z} 每列求和为 1 的约束, 能够进一步得到:

$$\mathbf{Z}_{i,:} = \max(\mathbf{M}_{i,:} - \alpha \mathbf{I}^T, 0), \alpha = \frac{1 + \mathbf{M}_{i,:} \mathbf{1}}{n} \quad (25)$$

3.4.5 优化视图权重 γ

当其他变量固定时, 关于 γ 的优化问题可以表示为:

$$\min_{\gamma} \sum_{p=1}^V (\gamma_p^2 \epsilon_p) \quad s.t. \gamma^T \mathbf{1} = 1, \gamma \geq 0 \quad (26)$$

其中, $\epsilon_p = \|\mathbf{H}^{v_p} - \mathbf{A}^{v_p} \mathbf{Z}\|_F^2$, γ 的最优解可以由 Cauchy-Schwarz 不等式^[48]得到:

$$\gamma = \frac{\boldsymbol{\delta}}{\sum_{p=1}^V \delta_p} \quad (27)$$

其中, $\boldsymbol{\delta} = [\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_V]$, 且 $\delta_i = (1/\epsilon_p)$ 。优化 γ 的时间复杂度为 $O(nmd)$ 。

综上, 总体的优化算法如算法 1 所示。

3.5 讨论

本章节包括复杂度分析与优化式讨论两个部分。

3.5.1 复杂度分析

在优化过程中, 每次迭代优化 $\{\mathbf{A}^{v_p}\}_{p=1}^V$ 的代价为 $O(nmd + m^2 d)$; 优化 $\{\mathbf{W}^{v_p}\}_{p=1}^V$ 的代价为 $O(nmd_g + m^2 d_g)$ 。迭代优化视图锚图时, 各个视图上时间复杂度为 $O(nmd_p)$, 优化一致锚图时, 时间复杂度为 $O(nmd)$ 。更新视图权重 γ 的时间复杂度为 $O(nmd)$ 。因此优化阶段每次迭代的时间复杂度为 $O(nmd + m^2 d)$ 。注意到这里 m, d 和 d_g 比样本数量 n 小得多, 因此所提出的优化算法是关于样本数量 n 的线性复杂度。优化后, 在 \mathbf{Z} 上执行 SVD 和 k -means 需要 $O(nm^2)$ 的复杂度, 该复杂度同样与样本数量 n 呈线性相关。简而言之, 本文提出的 KAMVC 能够在线性复杂度上处理 MVC 问题。

3.5.2 优化式讨论

本小节对所提出的方法进行了进一步的讨论。首先需要为了利于读者更好理解图 3 中的方法, 式(4)展示了 $\tilde{\mathbf{Z}}^{v_p}$ 与 $\mathbf{W}^{v_p} \mathbf{Z}^{v_p}$ 之间的关联, 其中 \mathbf{W}^{v_p} 和 \mathbf{Z}^{v_p} 是可优化的变量, 因此在目标优化式(6)中仅体

现了 \mathbf{W}^{v_p} 和 \mathbf{Z}^{v_p} 。此外,本文方法超参数少,仅有锚点数量这一个超参。再者,本文优化式虽然是一个具体的表达式,但是其中结构知识增强的锚图生成模块是一个即插即用的模块,可以便于与各种典型基于锚图优化的多视图聚类方法相结合。此外,在本文方法的优化式中,第二项与第三项的比例为 1:1。由后文章节结果体现,该比例是简单却有效的。

4 实 验

本章节主要是探讨了对本文所提方法的实验验证,具体从以下五个方面进行了探讨。

(1)优越性:所提方法相较于典型的多视图聚类方法是否体现了其优越性?

(2)有效性:引入的结构知识以及所提出的结构知识预处理模块是否有效?

(3)迁移性:所提出的模块是否可以与其他基于图学习的多视图聚类方法相结合?

(4)敏感性:所提出的方法是否受到超参数的影响?

(5)收敛性:所提出的方法收敛速度和收敛性如何?

关于上述五个问题,本文分别在 4.2、4.3、4.4、4.5、4.6 节中进行了实验分析与讨论。而在这之前,本节首先在章节 4.1 节中介绍了实验设置。

4.1 实验设置

本小节主要介绍了实验设置,具体包括数据集描述、对比方法、实施细节和评估指标四个方面。

4.1.1 数据集描述

根据我们的观察,数据在现实中可以自然以图的形式进行表达。为了验证本文所提出的方法,我们所采用的数据集,是基于已有图谱出发进而构建的多视图数据集。本文采用了三个基于知识图谱所构建的多视图聚类数据集,包括 MV-Nation、MV-WordNet 和 MV-UMLS。其具体意义如下,相关的数据集统计数据如表 2 所示。

(1)MV-Nation:基于 Nation^[57]构建,描述了国家之间的关系。

(2)MV-WordNet:基于 WordNet^[58]构建,描述了词汇数据库中的语义关系,例如单词之间的同义词、下义词和部分词关系。

(3)MV-UMLS:基于 UMLS^[59]构建,描述了统一医学语言系统(UMLS)中的关系。

4.1.2 对比方法

本文对比了 11 个典型的多视图聚类方法,可以分为两类:(1)基于锚图学习的多视图聚类方法和(2)其他多视图聚类方法。其中基于锚图学习的方法包括:AEVC、FastMICE、FMCNOF、FPMVS-CAG、LMVSC、SMVSC、UDBGL 8 种;而其他多视图聚类方法包括:NystromMKC、GLSEF、MKC-AE、Orth-NTF 4 种。相关方法的具体描述如下:

(1)NystromMKC^[60]:是一种多核聚类(MKC)方法,它通过一种有效的策略(即 Nystrom 方法^[61])改进了 SimpleMKKM^[5]。

(2)GLSEF^[62]:是一种多视图图聚类(MVGC)方法,它采用了两级学习机制,通过 Grassmann 流形^[63]考虑了特征的全局多样性和局部结构。

(3)MKC-AE^[64]:是一种多核聚类(MKC)方法,能够高效地计算样本外数据的嵌入表示。

(4)Orth-NTF^[65]:引入张量 Schatten p -范数正则化,通过结合正交约束和张量分解技术,显著提升了多视图聚类的性能。

(5)AEVC^[30]:提出了一种即插即用的锚点增强策略,能够通过视图相关性,利用相邻视图上锚点和样本之间的关系来增强锚点。

(6)FastMICE^[66]:创新性地提出随机组合视图以捕获不同视图间的关系,设计了混合的早晚期融合策略,实现了有效的多阶段融合。

(7)FMCNOF^[23]:在非负正交分解中引入聚类指示矩阵约束,使指示矩阵直接为数据分配聚类标签,并且很好地适配大规模数据集。

(8)FPMVS-CAG^[36]:统一了锚点选择和子空间图构建步骤,使得两个过程可以相互协商,从而提升聚类质量。

(9)LMVSC^[24]:利用了锚图思想,使多视图聚类算法的计算复杂度有效降至线性。

(10)SMVSC^[67]:在多个视图学习中学习统一的锚点,有效利用了互补的多视图信息。

(11)UDBGL^[17]:利用了二部图视图的特性信息和一致性信息,同时引入约束,实现了在线性的复杂度下直接得到离散的聚类标签。

表 2 数据集统计学数据

数据集	样本数	视图数	种类数	特征维度
MV-Nation	1992	3	55	768/768/600
MV-WordNet	3249	3	11	768/768/601
MV-UMLS	6529	3	46	768/768/602

4.1.3 实施细节和评估指标

所有实验均在一台配备 Intel Core i9-10900X CPU、64 GB 内存以及 MATLAB 2020b (64 位) 的台式计算机上进行。与此同时,本文涉及的优化变量的初始化方式如下:在优化变量 $\Theta = \{\gamma, \{A^{v_p}\}_{p=1}^V, Z, \{Z^{v_p}\}_{p=1}^V, \{W^{v_p}\}_{p=1}^V\}$ 中,除了原始锚图矩阵 $\{Z^{v_p}\}_{p=1}^V$ 是采用单位矩阵初始化方式除外,其余皆采用零矩阵/向量初始化的方式。此外,所有多视图聚类(MVC)基础模型均从官方实现中下载,并且每个 MVC 基础模型的超参数均通过网格搜索进行调整。关于评估指标,聚类性能通过三个指标进行评估,包括准确率(ACC)、归一化互信息(NMI)和聚类纯度(PUR)。这些指标的数值越高,表示性能越好。

4.2 优越性分析

本文所提出的方法与其他 11 种方法在 MV-Nation、MV-WordNet、MV-UMLS 三个数据集上的 ACC、NMI、PUR 结果对比如表 3 所示。观察实验结果可以发现:

(1)所提出方法在 MV-Nation 和 MV-UMLS 数据集的 ACC 指标上表现出非常优越的性能,与次优方法相比性能提升了 26.38% 和 26.01%,另外,在 MV-WordNet 数据集的 ACC 指标上性能也提升了 5.51%。这是因为外部知识为图构建提供了准确的引导,从而间接影响聚类过程,提升了聚类的准确性。

(2)从聚类性能提升效果来看,所提方法在 MV-Nation 数据集上的 ACC、NMI、PUR 指标分别提升了 26.38%、23.76%、26.00%,相较其他方法在所有指标上都达到了极大的性能提升。而在 UMLS 数据集上三个指标的性能提升分别是 26.01%、5.07%、4.42%,一方面是因为其他方法本身在 ACC 指标上表现不好,本文所提方法由于外部知识的引导提升了聚类的正确性,另一方面是由于其他聚类方法大多基于样本对相似度完成聚类,簇内相似度能够在 NMI 和 PUR 指标上表现出来,因此提升空间较小。而在 MV-WordNet 数据集上大多数方法已经表现出了比较好的效果,因此本文所提方法提升空间较小,提升值相较于其他两个数据集表现欠佳。

表 3 主性能表

方法	MV-Nation			MV-WordNet			MV-UMLS		
	ACC	NMI	PUR	ACC	NMI	PUR	ACC	NMI	PUR
NystromMKC ^[60]	35.39	46.00	47.59	53.34	49.43	85.50	47.17	56.05	70.10
GLSEF ^[62]	9.04	19.47	11.09	70.61	68.83	73.01	56.82	75.00	62.66
MKC-AE ^[64]	48.45	59.34	55.88	41.60	55.41	91.03	48.52	63.29	73.25
Orth-NTF ^[65]	13.00	19.61	16.47	39.03	37.14	74.98	26.44	40.91	41.20
AEVC ^[30]	25.09	34.06	28.77	46.92	67.79	93.09	47.01	67.60	71.87
FastMICE ^[66]	10.94	22.43	14.56	70.04	79.30	95.91	60.21	78.57	82.67
FMCNOF ^[23]	7.33	5.30	7.33	59.06	38.54	68.39	27.69	29.87	28.67
FPMVC-CAG ^[36]	27.31	37.31	31.36	68.00	71.94	88.65	56.94	71.33	72.98
LMVSC ^[24]	31.08	39.90	39.91	47.60	58.48	53.33	50.26	70.00	55.45
SMVSC ^[67]	26.99	36.95	31.52	68.11	75.01	91.93	55.83	69.27	70.28
UDBG ^[17]	8.84	16.30	10.09	50.75	76.69	96.86	55.08	76.22	81.90
KAMVC(本文方法)	61.23	73.44	70.41	74.50	83.73	98.08	75.87	82.55	86.32
提升值(相较于次优性能)	26.38%	23.76%	26.00%	5.51%	5.59%	1.26%	26.01%	5.07%	4.42%

4.3 有效性分析

为了说明本文方法的有效性,分别在三个数据集上进行了消融实验,实验结果如图 4 所示。其中 KAMVC 表示本文所提完整的方法,w. o. 知识表示没有外部知识引导模块的所提方法。观察图 4 可以发现:

三个数据集上的各项指标性能均有所下降。在 ACC 指标上分别下降了 4.88%、16.52%、14.56%,在 NMI 指标上分别下降了 0.76%、6.70%、11.17%,在 PUR 指标上分别下降了 4.88%、38.01%、11.10%。这充分说明了外部知识结构引导对聚类性能提升的影响较大。

(1)w. o. 知识的方法相较于完整的 KAMVC 在

(2)在 MV-WordNet 数据集上,w. o. 知识相

较于 KAMVC 在 PUR 指标上表现出了巨大的下降,一方面是由于完整的 KAMVC 在该数据集的 PUR 指标上表现出了优越的性能,因此下降空间

更大,另一方面是由于外部知识的引导,使构建的锚图更具有视图一致性,因此在 PUR 指标上表现出来。

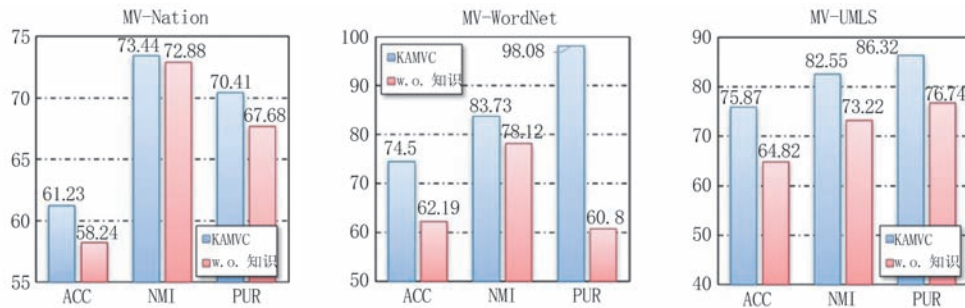


图4 消融实验:关于知识引导增强模块对于本文方法 KAMVC 的影响

4.4 迁移性分析

本文所提出的方法从原理上是普遍适用于各种基于锚图学习的多视图聚类方法。本章节将本文所提出的结构知识增强模块应用于本文的基线方法和 SMVSC^[59],并在 MV-WordNet 数据集上得以验证。观察图 5 可以发现:

(1)本文策略在多个方法上的多个指标中都可以取得提升,在 ACC 指标上分别提升了 19.79%、12.67%,在 NMI 指标上分别提升了 7.18%、8.87%,在 PUR 指标上分别提升了 61.32%、

5.74%。平均在 ACC 指标、NMI 指标、PUR 指标上分别提升了 16.23%、8.02%、33.53%。这充分地说明了本文策略的可迁移性。

(2)具体而言,在指标上本文策略在 ACC 指标上提升最为显著;而对于方法而言,本文策略在不同方法上起到的增益不一。这两个方面的原因,其一是各个方法机制不同,本文策略提供的额外的信息增益效果也不同;其次是原始方法的性能值不同,留下的增益空间不同。但是总的来说,本文的策略具有一定的迁移性。

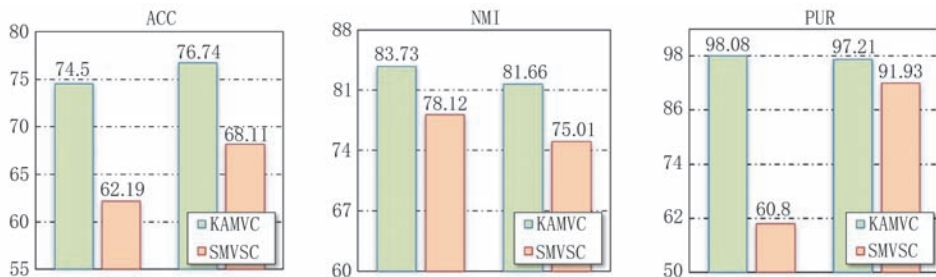


图5 迁移性实验:本文知识引导增强策略对其他方法的增益

4.5 敏感性分析

作为一种基于锚图学习的多视图聚类方法,锚点的选取和数量与方法的最终性能息息相关。观察图 6 可以发现以下结论:

(1)本文方法在不同数据集上都呈现出类似的规律,当锚点数量被定为 2 倍簇数时,性能可以达到最优点。这种现象不局限于前文广泛实用的 ACC、NMI、PUR 指标,在 F1、Precision、Recall、AR 指标上也呈现出相似的规律。

(2)但是在不同的数据集上,其曲线波动细节又有所不同。具体而言,方法在 MV-Nation 数据

上,性能先上升,但是在锚点数等于 3 倍簇数时,略有下降,后面继续提升;而在 MV-WordNet 数据集上,当锚点数大于等于 2 时,方法性能趋于平稳。

值得注意的是本文方法并未引入其他超参数,唯一的参数是锚点数量。超参数量少也是本文的优势之一。

4.6 收敛性分析

在图 7 中,本文方法 KAMVC 在三个数据集上的收敛曲线得以呈现,进而分析该图可得:

(1)方法整体可以较快收敛,在 MV-Nation、MV-WordNet 和 MV-UMLS 上收敛步数分别是

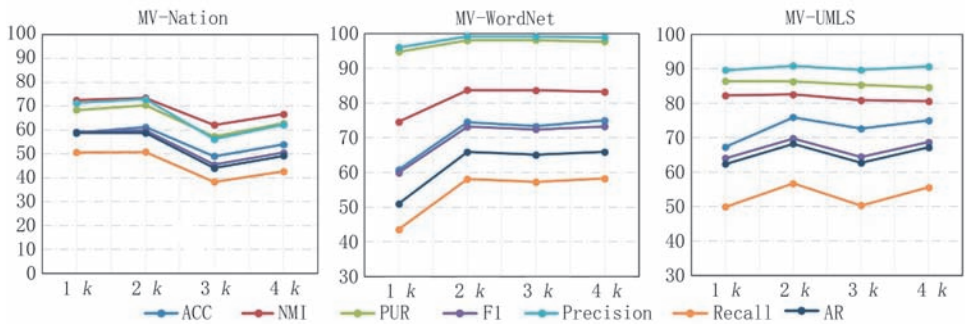


图6 敏感性实验：锚点数量对于本文方法的影响(k 表示各个数据集的类别数)

23、19、27。

(2)但是在不同的数据集上,方法收敛趋势不一。在MV-Nation上收敛较为平缓,而在MV-WordNet和MV-UMLS上收敛较为迅猛。

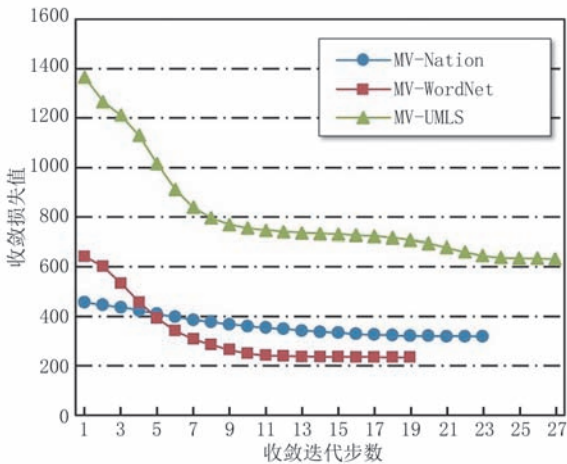


图7 本文方法KAMVC在三个数据集上的收敛曲线

5 总结与展望

本文首次提出了一种知识引导增强的基于锚图学习的多视图聚类方法。该方法除了以现有的锚图学习方法作为基线模型以外,设计了知识引导的锚图增强模块,包括三个步骤:(1)锚图特征映射、(2)结构知识预处理;(3)对齐学习。所设计的模块简单却有效地利用了结构知识中所蕴含的样本级别的相关性信息,并且便于与各类基于锚图学习的多视图聚类方法相结合,为其赋能。最后,本文还开展了大量实验,从优越性、有效性、迁移性、敏感性、收敛性五个方面验证了所提出方法的突出性能。

未来可以进一步探索数据缺失场景下、大规模场景下,外部结构化知识对基于锚点学习的多视图聚类

方法的增强策略,以进一步提升本文方法的实用性。

致 谢 感谢国家自然科学基金杰出青年科学基金项目(No. 62325604)、国家自然科学基金专项项目(No. 62441618)、国家自然科学基金面上项目(No. 62276271)的资助。

参 考 文 献

- [1] Wang S, Liu X, Liu L, et al. Late fusion multiple kernel clustering with proxy graph refinement. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2021, 34(8): 4359-4370
- [2] Liu X. Hyperparameter-free localized simple multiple kernel K-means with global optimum. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2023, 45(7): 8566-8576
- [3] Zhou S, Ou Q, Liu X, et al. Multiple kernel clustering with compressed subspace alignment. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2021, 34(1): 252-263
- [4] Ren Z, Sun Q. Simultaneous global and local graph structure-preserving for multiple kernel clustering. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2020, 32(5): 1839-1851
- [5] Liu X. Simplemkkm: Simple multiple kernel k-means. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2022, 45(4): 5174-5186
- [6] Liu J, Liu X, Wang S, et al. Hierarchical multiple kernel clustering//*Proceedings of the AAAI conference on Artificial Intelligence*. Philadelphia, Pennsylvania USA. 2021, 35(10): 8671-8679
- [7] Wei L, Chen Z, Yin J, et al. Adaptive graph convolutional subspace clustering//*Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*. Vancouver, Canada. 2023: 6262-6271
- [8] Kheirandishfard M, Zohrizadeh F, Kamangar F. Deep low-rank subspace clustering//*Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition Workshops*. Seattle, USA. 2020: 864-865
- [9] Fettel C, Labiod L, Nadif M. Scalable attributed-graph subspace clustering//*Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*

- Intelligence. Washington, USA. 2023, 37(6): 7559-7567
- [10] Gao Q, Xia W, Wan Z, et al. Tensor-SVD based graph learning for multi-view subspace clustering//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. California, USA. 2020, 34(04): 3930-3937
- [11] Jia Y, Lu G, Liu H, et al. Semi-supervised subspace clustering via tensor low-rank representation. IEEE Transactions on Circuits and Systems for Video Technology, 2023, 33(7): 3455-3461
- [12] Liu S, Liao Q, Wang S, et al. Robust and consistent anchor graph learning for multi-view clustering. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2024, 36(8): 4207-4219
- [13] Tang C, Liu X, Zhu X, et al. CGD: Multi-view clustering via cross-view graph diffusion//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. California, USA. 2020, 34(04): 5924-5931
- [14] Zhang P, Wang S, Li L, et al. Let the data choose: Flexible and diverse anchor graph fusion for scalable multi-view clustering//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. Washington, USA. 2023, 37(9): 11262-11269
- [15] Li X, Sun Y, Sun Q, et al. Cross-view graph matching guided anchor alignment for incomplete multi-view clustering. Information Fusion, 2023, 100: 101941
- [16] Li L, Wan Z, He H. Incomplete multi-view clustering with joint partition and graph learning. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2021, 35(1): 589-602
- [17] Fang S G, Huang D, Cai X S, et al. Efficient multi-view clustering via unified and discrete bipartite graph learning. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2023, 35(8): 11436-11447
- [18] Cohen M B, Lee Y T, Musco C, et al. Uniform sampling for matrix approximation//Proceedings of the 2015 Conference on Innovations in Theoretical Computer Science. New York, USA, 2015: 181-190
- [19] Kollios G, Gunopulos D, Koudas N, et al. Efficient biased sampling for approximate clustering and outlier detection in large data sets. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2003, 15(5): 1170-1187
- [20] Likas A, Vlassis N, Verbeek J J. The global k-means clustering algorithm. Pattern recognition, 2003, 36(2): 451-461
- [21] Aggarwal A, Deshpande A, Kannan R. Adaptive sampling for k-means clustering//Proceedings of the International Workshop on Approximation Algorithms for Combinatorial Optimization. Berlin, Germany: Springer, 2009: 15-28
- [22] Bejarano J, Bose K, Brannon T, et al. Sampling within k-means algorithm to cluster large datasets. Oak Ridge National Lab, Oak Ridge, TN. National Center for Computational Sciences, USA, 2011
- [23] Yang B, Zhang X, Nie F, et al. Fast multi-view clustering via nonnegative and orthogonal factorization. IEEE Transactions on Image Processing, 2020, 30: 2575-2586
- [24] Kang Z, Zhou W, Zhao Z, et al. Large-scale multi-view subspace clustering in linear time//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. California, USA. 2020, 34(04): 4412-4419
- [25] Wang S, Liu X, Liu S, et al. Align then fusion: Generalized large-scale multi-view clustering with anchor matching correspondences//Advances in Neural Information Processing Systems, Online, 2022, 35: 5882-5895
- [26] Liu S, Liu X, Wang S, et al. Fast incomplete multi-view clustering with view-independent anchors. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2022, 35(6): 7740-7751
- [27] Yu S, Liu S, Wang S, et al. Sparse low-rank multi-view subspace clustering with consensus anchors and unified bipartite graph. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2023, 36(1): 1438-1452
- [28] Shu X, Zhang X, Gao Q, et al. Self-weighted anchor graph learning for multi-view clustering. IEEE Transactions on Multimedia, 2022, 25: 5485-5499
- [29] Li L, He H. Bipartite graph based multi-view clustering. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2020, 34(7): 3111-3125
- [30] Liu S, Liang K, Dong Z, et al. Learn from view correlation: An anchor enhancement strategy for multi-view clustering//Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Seattle, USA. 2024: 26151-26161
- [31] Li Z, Tang C, Liu X, et al. Consensus graph learning for multi-view clustering. IEEE Transactions on Multimedia, 2021, 24: 2461-2472
- [32] Xia W, Gao Q, Wang Q, et al. Tensorized bipartite graph learning for multi-view clustering. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2022, 45(4): 5187-5202
- [33] Huang Z, Chen J, Zhang J, et al. Learning representation for clustering via prototype scattering and positive sampling. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2022, 45(6): 7509-7524
- [34] Liu M, Jiang X, Kot A C. A multi-prototype clustering algorithm. Pattern Recognition, 2009, 42(5): 689-698
- [35] Zhang J, Li Q, Geng Y L, et al. A zero-shot learning framework via cluster-prototype matching. Pattern Recognition, 2022, 124: 108469
- [36] Wang S, Liu X, Zhu X, et al. Fast parameter-free multi-view subspace clustering with consensus anchor guidance. IEEE Transactions on Image Processing, 2021, 31: 556-568
- [37] Yu S, Wang S, Zhang P, et al. Dvsai: Diverse view-shared anchors based incomplete multi-view clustering//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. Vancouver, Canada. 2024, 38(15): 16568-16577
- [38] Zhang C, Jia X, Li Z, et al. Learning cluster-wise anchors for multi-view clustering//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. Vancouver, Canada. 2024, 38(15): 16696-16704
- [39] Yang B, Zhang X, Li Z, et al. Efficient multi-view K-means clustering with multiple anchor graphs. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2022, 35(7): 6887-6900
- [40] Liu S, Wang S, Zhang P, et al. Efficient one-pass multi-view subspace clustering with consensus anchors//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. Online, 2022,

- 36(7): 7576-7584
- [41] Kang Z, Xie X, Li B, et al. CDC: a simple framework for complex data clustering. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2024, doi: 10.1109/TNNLS.2024.3473618
- [42] Kang Z, Lin Z, Zhu X, et al. Structured graph learning for scalable subspace clustering: From single view to multiview. *IEEE Transactions on Cybernetics*, 2021, 52(9): 8976-8986
- [43] Liu S Y, Wang S W, Tang C, et al. Multi-view clustering with weighted anchors. *Acta Automatic Sinica*, 2024, 50(6): 1160-1170
(刘溯源, 王思为, 唐厂等. 基于加权锚点的多视图聚类算法. *自动化学报*, 2024, 50(6):1160-1170)
- [44] Chen M S, Wang C D, Huang D, et al. Concept factorization based multiview clustering for large-scale data. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2024, 36(11):5784-5796
- [45] Chen M S, Ren L A, Wang C D, et al. Multi-view clustering by hybrid-order affinity: A generalized perspective. *Chinese Journal of Computers*, 2024, 47(7):1453-1468
(陈曼莹, 任骊安, 王昌栋等. 基于混合阶相似性的多视图聚类: 一个广义的视角. *计算机学报*, 2024, 47(7):1453-1468)
- [46] Zhang N, Zhang X, Sun S. Efficient multiview representation learning with correntropy and anchor graph. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2023, 36(9): 4632-4645
- [47] Chen J, Ling Y, Xu J, et al. Variational graph generator for multiviewgraph clustering. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2025, TNNLS.2024.3524205
- [48] Wu S, Zheng Y, Ren Y, et al. Self-weighted contrastive fusion for deep multi-view clustering. *IEEE Transactions on Multimedia*, 2024, 20(3):45-59
- [49] Devlin J, Chang M W, Lee K, et al. Bert: Pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding// *Proceedings of the 2019 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies*. Minneapolis, USA, 2019, 1: 4171-4186
- [50] Guo D, Yang D, Zhang H, et al. DeepSeek-r1: Incentivizing reasoning capability in llms via reinforcement learning. *arXiv preprint arXiv:2501.12948*, 2025
- [51] Dosovitskiy A, Beyer L, Kolesnikov A, et al. An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale. *arXiv preprint arXiv:2010.11929*, 2020
- [52] Liang K, Liu Y, Zhou S, et al. Knowledge graph contrastive learning based on relation-symmetrical structure. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2023, 36(1): 226-238
- [53] Zhang W, Zhu Y, Chen M, et al. Structure pretraining and prompt tuning for knowledge graph transfer//*Proceedings of the ACM Web Conference 2023*. 2023: New York, USA, 2581-2590
- [54] Yu D, Zhu C, Yang Y, et al. Jacket: Joint pre-training of knowledge graph and language understanding//*Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*. Virtual, 2022, 36(10): 11630-11638
- [55] Liang K, Meng L, Liu Y, et al. Simple yet effective: Structure guided pre-trained transformer for multi-modal knowledge graph reasoning//*Proceedings of the 32nd ACM International Conference on Multimedia*. Melbourne, Australia. 2024: 1554-1563
- [56] Steele J M. The Cauchy-Schwarz Master Class: An Introduction to The Art of Mathematical Inequalities. USA: Cambridge University Press, 2004
- [57] Kok S, Domingos P. Statistical predicate invention// *Proceedings of the 24th International Conference on Machine Learning*. 2007: New York, NY, USA, 433-440
- [58] WordNet: An electronic lexical database. Massachusetts, USA: MIT press, 1998
- [59] Bodenreider O. The unified medical language system (UMLS): Integrating biomedical terminology. *Nucleic Acids Research*, 2004, 32(suppl_1): D267-D270
- [60] He L, Zhang H. Kernel K-means sampling for Nyström approximation. *IEEE Transactions on Image Processing*, 2018, 27(5): 2108-2120
- [61] Calandriello D, Rosasco L. Statistical and computational trade-offs in kernel k-means// *Advances in Neural Information Processing Systems*, Montréal, Canada. Red Hook, USA, 2018, 9379-9389
- [62] Wang P, Wu D, Wang R, et al. Multi-view graph clustering via efficient global-local spectral embedding fusion//*Proceedings of the 31st ACM International Conference on Multimedia*. Ottawa, Canada, 2023: 3268-3276
- [63] Wang B, Hu Y, Gao J, et al. Learning adaptive neighborhood graph on Grassmann manifolds for video/image-set subspace clustering. *IEEE Transactions on Multimedia*, 2020, 23: 216-227
- [64] Liang W, Liu X, Liu Y, et al. Stability and generalization of kernel clustering: From single kernel to multiple kernel// *Advances in Neural Information Processing Systems*, New Orleans, USA. 2022, 35: 33633-33645
- [65] Li J, Gao Q, Wang Q, et al. Orthogonal non-negative tensor factorization based multi-view clustering//*Advances in Neural Information Processing Systems*, New Orleans, USA. 2022, 36: 18186-18202
- [66] Huang D, Wang C D, Lai J H. Fast multi-view clustering via ensembles: Towards scalability, superiority, and simplicity. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2023, 35(11): 11388-11402
- [67] Sun M, Zhang P, Wang S, et al. Scalable multi-view subspace clustering with unified anchors//*Proceedings of the 29th ACM International Conference on Multimedia*. Virtual, China. 2021: 3528-3536



LIANG Ke, Ph. D., lecturer. His research interests include multi-view clustering, graph machine learning, and knowledge representation.

MA Hui-Min, Ph. D. candidate. Her research interest is multi-view clustering.

LIU Su-Yuan, Ph. D. candidate. His research interest is multi-view clustering.

LIU Xin-Wang, Ph. D., professor. His research interests include multi-view clustering, kernel learning and data mining.

Background

The topic of this paper is the anchor-based multi-view clustering. Due to its great scalability, the anchor-based multi-view clustering has been widely studied these years.

However, existing anchor-based multi-view clustering (AMVC) methods describe the correlations between samples with the anchor graph, which is actually the similarity matrix. It heavily relies on the quality of the sample features and selection of the similarity function. Meanwhile, the authors observe that knowledge graphs can naturally describe the correlations between samples, which can provide more fine-grained sample-level information. However, there is no previous work noticing it. Also, no existing mechanism is designed for it.

To fill this blank, this paper proposes a novel method, named the Knowledge-guided Anchor-graph-based Multi-view Clustering (KAMVC). Specifically, besides using existing AMVC methods as backbone models, KAMVC first designs a knowledge-guided anchor-graph enhancement module, which includes three steps: (1) anchor-graph

feature projection, (2) structural knowledge encoding, and (3) alignment learning. Concretely, the anchor-graph feature projection aims to learn a feature from the similarity matrix. The structural knowledge encoding aims to get the fine-grained sample-level feature from the extra knowledge graphs. Finally, KAMVC aligns the abovementioned features together for optimization. Such a method is simple yet effective in utilizing the sample-level correlation information underlying related KGs, and it can also be easily integrated with different anchor-graph-based multi-view clustering methods to enhance their capabilities.

This research is supported by the National Natural Science Foundation of China (NOs. 62325604, 62441618, 62276271). This paper is the first work to integrate extra knowledge enhancing anchor-based multi-view clustering. It provides a plug-and-play, effective strategy to generate a fine-grained sample-level information, which is not only helpful to the expressive ability of AMVC methods, but also for enhancing its practical values.