arXiv:2512.23766v1 [cs.LG] 29 Dec 2025

基于最佳拟合舒伯特簇的粒度化格拉斯曼聚类框架

Karim Salta[a]、Michael Kirby[b]、Chris Peterson[c]

[a]科罗拉多州立大学，数学系，*Louis R. Weber* 大楼，*1874 Campus Delivery*，柯林斯堡，*80523*，科罗拉多州，美国，*kkarimov@gmail.com b*科罗拉多州立大学，数学系，*Louis R. Weber* 大楼，*1874 Campus Delivery*，柯林斯堡，*80523*，科罗拉多州，美国，*michael.kirby@colostate.edu*[c]科罗拉多州立大学，数学系，*Louis R. Weber* 大楼，*1874 Campus Delivery*，柯林斯堡，*80523*，科罗拉多州，美国，*peterson@math.colostate.edu*

摘要

在许多分类和聚类任务中，为数据集或簇计算一个几何代表元很有用，例如均值或中位数。当数据集以子空间表示时，这些代表元便成为格拉斯曼流形或旗流形上的点，其距离由相应的几何结构诱导，通常通过主角来计算。

我们提出一种子空间聚类算法，以可训练原型取代子空间均值。该原型定义为最佳拟合舒伯特簇 (SVBF)——一个子空间，它尽可能地沿至少一个固定方向与每个簇成员相交。将此原型融入 Linde–Buzo–Grey (LBG) 流程后，SVBF-LBG 方案在合成数据、图像数据、光谱数据和视频动作数据上提升了簇纯度，同时保留了后续分析所需的数学结构。

关键词：舒伯特簇，流形学习，子空间聚类，几何学习，GPU 并行

2000 年数学主题分类：68T10, 62H30, 65K10

*Linde-Buzo-Grey 聚类算法**最佳拟合舒伯特簇

1. 引言

人们一直对利用子空间流形的几何特性来分析数据集集合 [1, 2, 3, 4, 5, 5, 6] 保持浓厚兴趣。这类技术的共同关键特征是使用标准正交基对数据进行编码，并依据流形几何定义距离——例如，格拉斯曼流形方法依赖子空间之间的主角，而相关框架也应用于光照不变图像分析、子空间跟踪、图嵌入和集合识别。

矢量量化方法（如 LBG 聚类） [7] 会迭代地将样本分配给最近的聚类原型，然后根据已分配点的结构更新原型。此前将 LBG 扩展到格拉斯曼流形的方法，会将簇中心计算为子空间均值或中位数（例如旗均值 [8] 和旗中位数 [9]）。

我们的模型不采用经典质心，而是将每个聚类原型更新为 SVBF 交集优化问题[10]的解。由此得到的算法延续了现有流形聚类流程的风格与结构，同时提供了一种在几何上更灵活的聚类代表模型。

2. 相关工作

格拉斯曼流形上的现有 K 均值变体大致可分为基于核的方法和直接优化方法。最具竞争力的直接方法包括在流形本身上进行内在优化、嵌入环境欧几里得空间的外在方法，或采用混合式测地线更新。已有多项研究提出了不同的格拉斯曼均值，例如 Karcher 均值（主角度范数的 l2 最小化解） [11], 、弦距离旗均值（通过奇异值分解得到闭式解） [12], ，以及迭代式 IRLS 加权旗中位数（目前子空间 LBG 聚类的最先进方法） [9]。我们的方法同样采用直接的几何驱动优化，但不同之处在于，它构造了一个自适应原型，通过优化子空间关联条件，而非最小化经典的 Fr´echet 型均值。

3. 背景

3.1. 主角

设U 和V 是 R^n 的子空间，其正交归一基矩阵分别为A和B。若 $\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_r$ 是$A^T B$的奇异值，则

$\sigma_i = \cos\,\Theta_i$ 是主角 Θ_i 的余弦。我们记 $\Theta(U,V) = [\Theta_1,\ldots,\Theta_r]$，且 $\sin\,\Theta(U,V) = [\sin\,\Theta_1,\ldots,\sin\,\Theta_r]$。

3.2. 舒伯特簇

对于 $W \in \mathrm{Gr}(k,n)$、交阈值 c 和样本维数 l，定义

$$\Omega_{c,k,l}(W) = \{V \in \mathrm{Gr}(l,n) \mid \dim(V \cap W) \geq c\}.$$

这个 $\mathrm{Gr}(l,n)$ 的关联约束子集构成一个舒伯特簇。

格拉斯曼流形本身就是一个单步旗流形（$\mathrm{Gr}(k,n) = \mathrm{Fl}(k;n)$）。经典方法通过主角距离求解均值或中位数最小化；SVBF 则求解最大弦关联逼近。

4. 算法：SVBF–LBG

我们采用嵌套优化：外层为 LBG 样本重标记循环，内层为舒伯特簇拟合循环，用于学习一个子空间 K^*，使其最小化或最大化第一角弦关联 [10]:

$$\mathbf{K}^* = \arg\min_{[\mathbf{K}]\in\mathrm{Gr}(k,n)} \sum_{i=1}^{p} \sin^2\theta_1(\mathbf{X}_i,\mathbf{K}).$$

按照这一框架，LBG 聚类分为 4 个操作阶段：

1. 初始化：随机选择或抽样得到聚类原型 $\{K_i\}$。 2. 标记：根据 $d_{ij} = \sin^2\theta_1(K_i,\mathrm{X}j)$，将样本 $\mathrm{X}j$ 分配到 K_i。 3. 原型更新：针对每个簇分配的组求解 SVBF 问题。 4. 失真检查 / 循环：重复操作，直到失真趋于平稳或达到最大迭代次数。

5. 实验

所有实验的结果均以失真随中心数量变化的曲线图呈现。

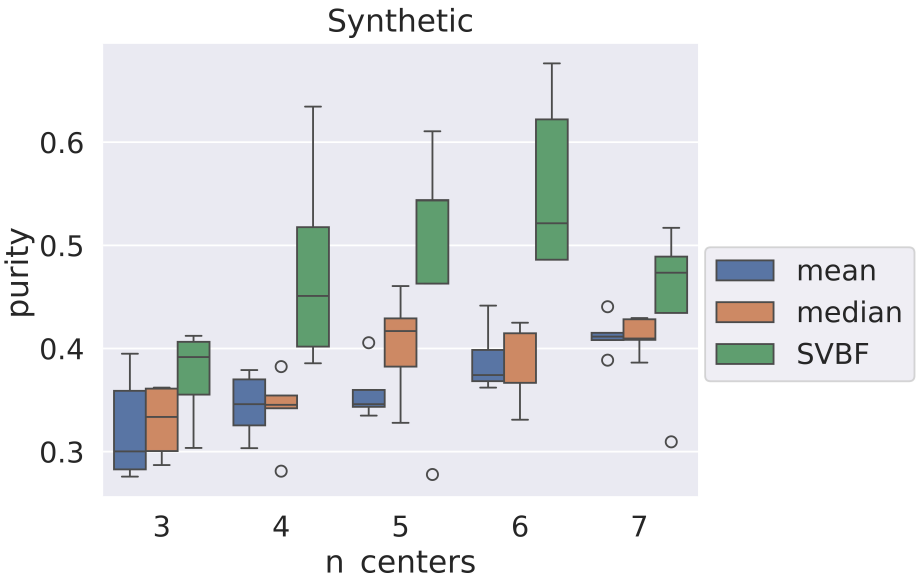

图 1：合成数据集的中位数纯度（SVBF、旗均值、旗中位数）。

5.1. 合成子空间聚类

我们构建了 50 个围绕 5 个一维原型聚类的十维子空间，然后在 5 次试验中比较使用 {3,4,5,6,7} 个中心时 LBG聚类的纯度，见图 1。

*5.2. MNIST*子集 *[13]*

数字 {0,2,4,6} 缩放后展平为 784 维向量，并分组为784×10 正交子空间样本。我们使用 7 次 LBG 迭代，在中心数量范围 2–15 内进行 5 次聚类，如图 2 所示。

5.3. Indian Pines [14]

200 个可用光谱波段，划分为 10776 个像素和最大的 4 个类别→ ，分组为 10 维正交基；针对中心集合 {4,8,12,16,20}，使用 5 次 LBG 迭代进行 5 次试验，如图 3 所示。

*5.4. UCF YouTube*动作子集 *[15]*

视频帧 $\rightarrow$ 25×18 灰度化 $\rightarrow$ 并展平为450维，分组为450×10 Grassmann样本，运行5次，迭代5次，中心基数相同，见图4。

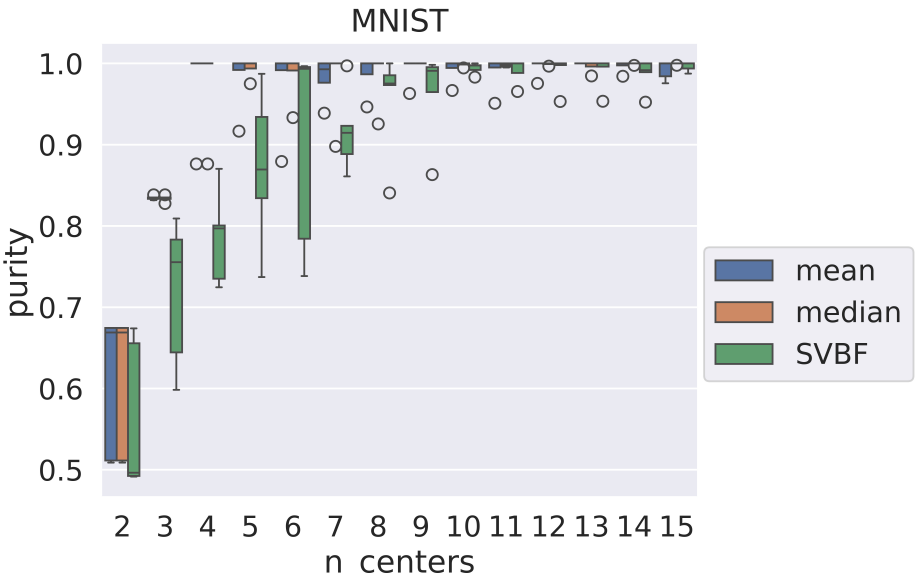

图 2：MNIST 的中位数聚类纯度（范围：2–15 个中心）。

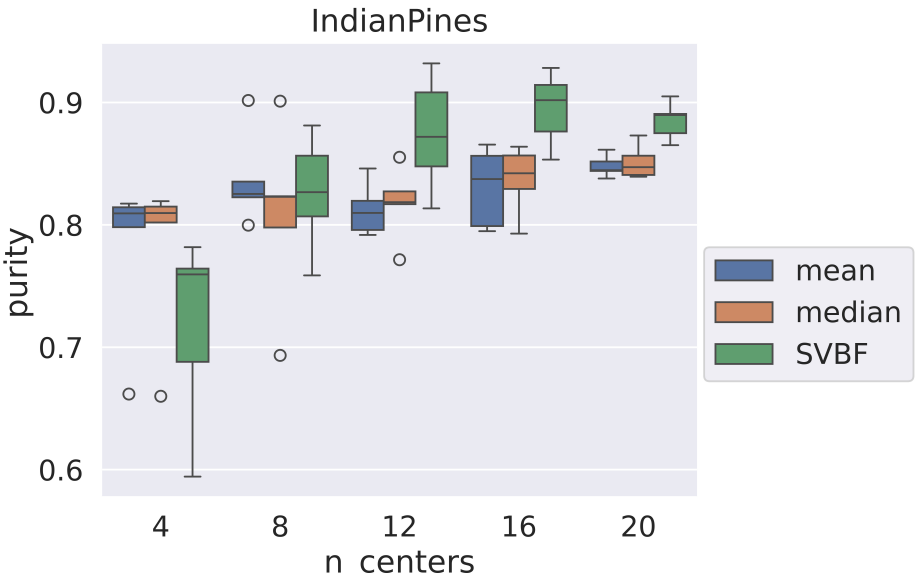

图 3：Indian Pines 的中位数聚类纯度。

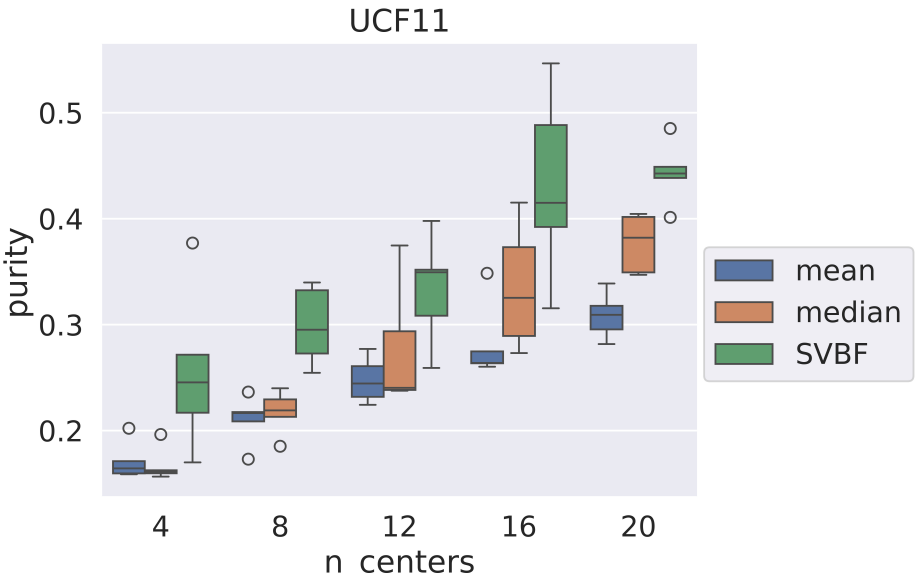

图4：UCF YouTube Action 的中位数簇纯度。

6. 结论

我们提出了 SVBF，这是一种几何上灵活、可训练的原型，并将其集成到 LBG 子空间聚类流程中。在高关联数据区域（例如合成交集和高光谱几何）中，该方法的簇纯度优于旗均值和旗中位数；在易分离数据区域（小规模 MNIST 子集）中，随着中心数量增加，所有方法都能收敛到近乎完美的解。

当前的局限包括 K 的维数固定，以及停止规则缺乏自适应性。该方法仍需要 GPU 加速，未来的工作包括学习多方向 SVBF 关联约束以及进行自动收敛分析。

代码可用性：代码将通过以下链接提供（如需现在获取访问权限，请联系我们）：https://github.com/kkarimov/SubspaceClustering 。

参考文献

[1] J. Hamm、D. D. Lee，《Grassmann判别分析：基于子空间的学习的统一视角》，载于：第25届国际机器学习会议论文集，2008年，第376–383页。

[2] J. R. Beveridge、B. A. Draper、J. M. Chang、M. Kirby、H. Kley、C. Peterson，《主角分离YDB和CMU-PIE中的主体光照空间》，IEEE模式分析与机器智能汇刊31（2）（2009）351–363。doi:10.1109/TPAMI.2008.200。[3] Z. Huang、R. Wang、S. Shan、X. Chen，《格拉斯曼流形上的投影度量学习及其在基于视频的人脸识别中的应用》，载于：IEEE计算机视觉与模式识别会议论文集，2015年，第140–149页。[4]L. S. Souza、B. B. Gatto、J.-H. Xue、K. Fukui，《结合随机时间扭曲的增强型Grassmann判别分析用于动作识别》，模式识别97（2020）107028。doi:https://doi.org/10.1016/j.patcog.2019.107028。[5] A. Srivastava、E. Klassen，《贝叶斯与几何子空间跟踪》，应用概率进展36（1）（2004）43–56。[6]D. Wei、X. Shen、Q. Sun、X. Gao、Z. Ren，《格拉斯曼流形上用于图像集分析的邻域保持嵌入》，模式识别122（2022）108335。doi:https://doi.org/10.1016/j.patcog.2021.108335。[7] Y. Linde、A. Buzo、R. Gray，《矢量量化器设计的一种算法》，IEEE通信汇刊28（1）（1980）84–95。[8] S. Stiverson、M. Kirby、C. Peterson，《格拉斯曼流形上的子空间量化》，载于：《自组织映射、学习矢量量化、聚类与数据可视化进展》，Springer International Publishing，Cham，2019年，第251–260页。[9] N. Mankovich、E. J. King、C. Peterson、M. Kirby，《旗中位数与flagirls》，载于：IEEE/CVF计算机视觉与模式识别会议论文集，2022年，第10339–10347页。

[10] K.Karimov, M.Kirby, C.Peterson，《一种计算最佳拟合施伯特簇的算法及其应用》，《人工智能前沿》6（2023）。doi:10.3389/frai.2023.1274830。

[11] H. Karcher，黎曼质心与磨光函数平滑，《纯粹与应用数学通讯》30（1977）509–541。URL https://api.semanticscholar.org/CorpusID:122720328[12] B. Draper, M. Kirby, J. Marks, T. Marrinan, C. Peterson，混合维度有限子空间集合的旗表示，《线性代数及其应用》451（2014）15–32。[13] L. Deng, 面向机器学习研究的手写数字图像 MNIST 数据库 [网络精选], 《IEEE 信号处理杂志》29（6）（2012）141–142。doi:10.1109/MSP.2012.2211477。[14] M. Baumgardner, L. Biehl, D. Landgrebe，220 波段 AVIRIS 高光谱图像数据集：1992 年 6 月 12 日印第安松测试场地 3（2015）。doi:10.4231/R7RX991C。URL https://purr.purdue.edu/publications/1947/1[15] J. Liu, J. Luo, M. Shah，从“野外”视频中识别真实动作，载于：IEEE 计算机视觉与模式识别会议，2009，页码 1996–2003。