

Spektralno particioniranje grafa

Ivančica Mirošević*

Sažetak

U ovom radu, problem klasteriranja formuliran je kao diskretni optimizacijski problem biparticioniranja grafa, čija relaksirana verzija upućuje na svojstvene vektore Laplaceove matrice grafa. Definirane su dvije varijante ciljne funkcije, razmjerni i normalizirani rez, te je pokazano da je rješenje relaksiranog problema minimiziranja ciljnih funkcija dano Fiedlerovim vektorom Laplaceove matrice i normalizirane Laplaceove matrice grafa (svojstvenim vektorom pridruženim drugoj najmanjoj svojstvenoj vrijednosti).

Ključne riječi: *Spektralno klasteriranje, particioniranje grafa, razmjerni rez, normalizirani rez, Laplaceova matrica grafa*

Spectral partitioning of graph

Abstract

In this paper, the clustering problem is formulated as a graph bipartitioning problem which is a discrete optimization problem, and the relaxed version of it leads to the eigenvectors of the corresponding Laplacian matrix. Two versions of the cost functions are defined, ratio cut and normalized cut, and it is shown that they are minimized by the Fiedler vector of the Laplacian and the normalized Laplacian of the graph.

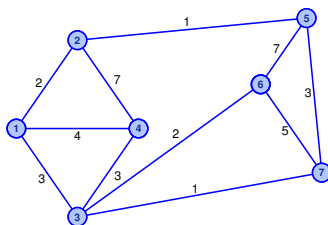
Keywords: *Spectral clustering, graph partitioning, ratio cut, normalized cut*

*Fakultet elektrotehnike, strojarstva i brodogradnje, Sveučilište u Splitu, email: ivan-cica.mirosevic@fesb.hr

Problem razvrstavanja nekog skupa podataka u skupine može se svesti na problem particioniranja skupa vrhova grafa sa zadanim uvjetom da težine bridova koji spajaju različite skupine budu što manje. Podatke koje želimo podijeliti u skupine promatrat ćemo kao vrhove neusmjerenog težinskog grafa koji nema petlji ni višestrukih bridova, a sličnosti među podacima kao težine bridova koji spajaju parove vrhova.

1 Ciljne funkcije particioniranja

Neka je zadan jednostavan konačan neusmjeren težinski graf (G, t) , gdje je $G = (V, B)$, $\emptyset \neq V = \{1, 2, 3, \dots, n\}$ je skup vrhova i B skup bridova $\{i, j\}$, $i, j \in V$, s težinama bridova $t(\{i, j\}) \in \mathbb{R}^+$ (slika 1).



Slika 1: Primjer jednostavnog konačnog neusmjerenog težinskog grafa.

Definicija 1.1. Matrica susjedstva grafa G je $n \times n$ matrica $W = [w_{ij}]$, gdje je

$$w_{ij} = \begin{cases} t(\{i, j\}), & \text{ako je } \{i, j\} \in B, \\ 0, & \text{inače} \end{cases} \quad (1.1)$$

Graf je neusmjeren, pa je W simetrična matrica čiji su članovi nenegativni realni brojevi. Budući da je graf jednostavan, što znači da nema petlji, matrica W na glavnoj dijagonali ima sve nule.

Primjer 1.1. Matrica susjedstva grafa na slici 1 je

$$W = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 3 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 7 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 3 & 0 & 2 & 1 \\ 4 & 7 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 7 & 3 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 7 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 3 & 5 & 0 \end{bmatrix}.$$

Matrica susjedstva težinskog grafa može se shvatiti kao matrica sličnosti među podacima, pri čemu sličnost podatka sa samim sobom mora biti 0. Neka je zadana particija skupa V na dva podskupa C_1 i C_2 . Stupanj različitosti između ova dva skupa može se izračunati kao ukupna težina svih bridova koji spajaju skupove C_1 i C_2 . U jeziku teorije grafova on se naziva rezom biparticije

$$\text{rez}(C_1, C_2), \quad (1.2)$$

gdje je

$$\text{rez}(A, B) = \sum_{i \in A, j \in B} w_{ij} \text{ za } A, B \subseteq V. \quad (1.3)$$

Općenito, neka je težina vrha $i \in V$ zbroj težina svih bridova incidentnih s vrhom i ,

$$t(i) = \sum_{j=1}^n w_{ij},$$

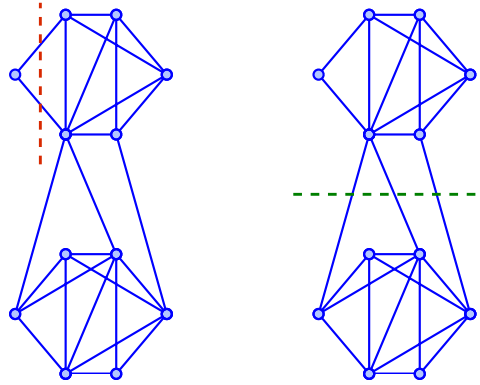
a težina skupa $C_l \subseteq V$ zbroj težina svih vrhova iz C_l ,

$$t(C_l) = \sum_{i \in C_l} t(i) = \text{rez}(C_l, V) = \sum_{i \in C_l} \sum_{j \in V} w_{ij}.$$

Najjednostavniji način particioniranja grafa je particioniranje minimiziranjem reza, i, bez obzira na broj svih mogućih particija, postoje učinkoviti algoritmi koji pronalaze onu particiju koja minimizira rez (npr. Stoer i Wagner, 1997.). Međutim, rezultati dobiveni u praksi najčešće nisu zadovoljavajući. Naime, pri ovakvom particioniranju najčešće se izdvoje skupine s malim brojem vrhova (slika 2), što nije iznenađujuće, jer se vrijednost reza povećava s brojem bridova koji spajaju različite skupine.

Da bismo izbjegli takve male skupine, trebaju nam dodatni uvjeti na particiju grafa. Pogledajmo najprije razmjerni rez

$$R(C_1, C_2) = \frac{\text{rez}(C_1, C_2)}{|C_1|} + \frac{\text{rez}(C_1, C_2)}{|C_2|}, \quad (1.4)$$



Slika 2: Primjer grafa s bridovima težine 1 čiji minimalni rez rezultira lošom particijom (lijevo). Minimiziranjem normaliziranog reza dobije se bolja particija (desno).

gdje je $|C_i|$ broj vrhova u skupini C_i , $i = 1, 2$. Minimiziranjem ovako definirane ciljne funkcije postiže se particija s najmanjim rezom, pri čemu se daje prednost jednakobrojnim skupinama.

Ako želimo skupine što više težinski izjednačiti, ciljna funkcija koju trebamo minimizirati je normalizirani rez

$$N(C_1, C_2) = \frac{\text{rez}(C_1, C_2)}{t(C_1)} + \frac{\text{rez}(C_1, C_2)}{t(C_2)}. \quad (1.5)$$

Primijetimo da vrijedi

$$t(C_i) = \text{rez}(C_1, C_2) + \text{rez}(C_i, C_i), \quad i = 1, 2, \quad (1.6)$$

gdje je $\text{rez}(C_i, C_i) = \sum_{j, k \in C_i} w_{jk}$ dvostruki zbroj težina bridova s oba kraja u skupu C_i . Iskoristimo li (1.6), normalizirani rez možemo izraziti u obliku

$$\begin{aligned} N(C_1, C_2) &= \frac{\text{rez}(C_1, C_2)}{t(C_1)} + \frac{\text{rez}(C_1, C_2)}{t(C_2)} \\ &= \frac{t(C_1) - \text{rez}(C_1, C_1)}{t(C_1)} + \frac{t(C_2) - \text{rez}(C_2, C_2)}{t(C_2)} \\ &= 2 - S(C_1, C_2), \end{aligned} \quad (1.7)$$

gdje je

$$S(C_1, C_2) = \frac{\text{rez}(C_1, C_1)}{t(C_1)} + \frac{\text{rez}(C_2, C_2)}{t(C_2)}.$$

$S(C_1, C_2)$ mjeri jačinu veza unutar skupina particije. Po tome, minimiziranjem normaliziranog reza maksimiziramo zbroj težina bridova koji leže unutar blokova.

Primjer 1.2. Za graf na slici 2 s bridovima težine 1 vrijednosti reza, razmjernog reza i normaliziranog reza lijeve i desne particije su

$$\begin{aligned} \text{rez}(C_1, C_2) &= 2, & \text{rez}(C'_1, C'_2) &= 3, \\ R(C_1, C_2) &= \frac{2}{1} + \frac{2}{11} = 2.18, & R(C'_1, C'_2) &= \frac{3}{6} + \frac{3}{6} = 1, \\ N(C_1, C_2) &= \frac{2}{2} + \frac{2}{50} = 1.04, & N(C'_1, C'_2) &= \frac{3}{27} + \frac{3}{25} = 0.23 \end{aligned}$$

Sam problem egzaktnog minimiziranja razmjernog ili normaliziranog reza spada u klasu NP -teških problema.

Prema [8], problem normaliziranog reza je NP -težak čak i u posebnom slučaju grafa na regularnoj mreži (regularna mreža je mreža u kojoj svi unutarnji vrhovi imaju jednak broj susjeda).

2 Laplaceova matrica grafa

Laplaceova matrica i normalizirana Laplaceova matrica grafa glavni su objekti u spektralnoj teoriji grafova. Mnoga svojstva grafova mogu se izraziti preko svojstvenih vrijednosti ovih matrica.

Neka je zadan težinski graf $G = (V, B)$ s pripadnom $n \times n$ matricom susjedstva W .

Definicija 2.1. Laplaceova matrica $L = L_G = [l_{ij}]$ grafa G je realna $n \times n$ matrica, s jednim retkom i stupcem za svaki vrh, takva da je

$$l_{ij} = \begin{cases} \sum_{k=1}^n w_{ik} & , i = j \\ -w_{ij} & , i \neq j, \{i, j\} \in B \\ 0 & , \text{inače} \end{cases} \quad (2.1)$$

Primjer 2.1. Laplaceova matrica grafa sa slike 1 je

$$L = \begin{bmatrix} \mathbf{9} & -2 & -3 & -4 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & \mathbf{10} & 0 & -7 & -1 & 0 & 0 \\ -3 & 0 & \mathbf{9} & -3 & 0 & -2 & -1 \\ -4 & -7 & -3 & \mathbf{14} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & \mathbf{11} & -7 & -3 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & -7 & \mathbf{14} & -5 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -3 & -5 & \mathbf{9} \end{bmatrix}.$$

Označimo s I_G $|V| \times |B|$ orijentiranu matricu incidencije grafa G u kojoj svakom vrhu grafa odgovara jedan redak, a svakom bridu jedan stupac. U stupcu koji odgovara bridu $\{i, j\}$ sve su vrijednosti 0, osim u i -tom i j -tom retku, gdje su redom $\sqrt{w_{ij}}$ i $-\sqrt{w_{ij}}$.

Teorem 2.1 govori o svojstvima Laplaceove matrice grafa.

Teorem 2.1 ([2]). *Laplaceova matrica $L = L_G$ grafa G ima sljedeća svojstva:*

- (i) $L = D - W$, gdje je W matrica susjedstva, i D dijagonalna matrica težina vrhova ($d_{ii} = \sum_{j=1}^n w_{ij}$, $i = 1, \dots, n$);
- (ii) $L = I_G I_G^T$;
- (iii) L je simetrična pozitivno semidefinitna matrica, odnosno, sve svojstvene vrijednosti od L su realne i nenegativne i L ima puni skup od n realnih ortogonalnih svojstvenih vektora;
- (iv) $L\mathbf{e} = 0$, za $\mathbf{e} = [1, \dots, 1]^T$, odnosno 0 je svojstvena vrijednost matrice L , i \mathbf{e} je odgovarajući svojstveni vektor;
- (v) Ako graf G ima c komponenti povezanosti, onda je 0 svojstvena vrijednost matrice L kratnosti c ;
- (vi) Za svaki vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ je

$$\mathbf{x}^T L \mathbf{x} = \sum_{i < j} w_{ij} (x_i - x_j)^2; \quad (2.2)$$

- (vii) Za svaki vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ i skalare $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ je

$$(\alpha \mathbf{x} + \beta \mathbf{e})^T L (\alpha \mathbf{x} + \beta \mathbf{e}) = \alpha^2 \mathbf{x}^T L \mathbf{x}. \quad (2.3)$$

Dakle, Laplaceova matrica je simetrična pozitivno semidefinitna matrica, čak i kada W nije definitna, s najmanjom svojstvenom vrijednošću 0 i odgovarajućim svojstvenim vektorom $\mathbf{e} = [1, 1, 1, \dots, 1]^T$. Pretpostavimo da je graf povezan, jer inače komponente povezanosti čine očiglednu optimalnu particiju. To znači da su sve ostale svojstvene vrijednosti Laplaceove matrice pozitivne. Neka su svojstvene vrijednosti poredane tako da je $0 = \lambda_1 < \lambda_2 \leq \lambda_3 \leq \dots \leq \lambda_n$, s pridruženim ortonormiranim svojstvenim vektorima $\mathbf{v}^{[1]}, \mathbf{v}^{[2]}, \dots, \mathbf{v}^{[n]}$, pri čemu je

$$\mathbf{v}^{[1]} = \frac{\mathbf{e}}{\sqrt{n}}. \quad (2.4)$$

Definicija 2.2. Normalizirana Laplaceova matrica $L_n = [l_{n,ij}]$ grafa G je realna $n \times n$ matrica, s jednim retkom i stupcem za svaki vrh, takva da je

$$(l_n)_{ij} = \begin{cases} 1 & , i = j \\ -\frac{w_{ij}}{\sqrt{d_{ii}}\sqrt{d_{jj}}} & , i \neq j, \{i, j\} \in B \\ 0 & , \text{inače} \end{cases}. \quad (2.5)$$

Očigledno je

$$L_n = D^{-\frac{1}{2}} L D^{-\frac{1}{2}} \quad (2.6)$$

gdje je

$$D^{-\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{d_{11}}} & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \frac{1}{\sqrt{d_{nn}}} \end{bmatrix}. \quad (2.7)$$

Budući da je $D^{-\frac{1}{2}}$ pozitivno definitna, i vrijedi

$$L_n D^{\frac{1}{2}} \mathbf{e} = D^{-\frac{1}{2}} L \mathbf{e} = 0,$$

L_n je također simetrična pozitivno semidefinitna matrica s najmanjom svojstvenom vrijednošću 0 i odgovarajućim svojstvenim vektorom $D^{\frac{1}{2}} \mathbf{e}$. Pretpostavimo da su svojstvene vrijednosti matrice L_n poredane tako da je $0 = \mu_1 < \mu_2 \leq \mu_3 \leq \dots \leq \mu_n$ s pridruženim ortonormiranim svojstvenim vektorima $\mathbf{w}^{[1]}, \mathbf{w}^{[2]}, \dots, \mathbf{w}^{[n]}$, pri čemu je

$$\mathbf{w}^{[1]} = \frac{D^{\frac{1}{2}} \mathbf{e}}{\|D^{\frac{1}{2}} \mathbf{e}\|_2}. \quad (2.8)$$

Svojtveni vektor $\mathbf{v}^{[2]}$ Laplaceove matrice L pridružen drugoj najmanjoj svojtvenoj vrijednosti ima posebnu ulogu u partitioniranju grafa, pa ima i posebno ime, Fiedlerov vektor. Vektor $D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{w}^{[2]}$, gdje je $\mathbf{w}^{[2]}$ svojtveni vektor normalizirane Laplaceove matrice L_n pridružen drugoj najmanjoj svojtvenoj vrijednosti, obično se zove normalizirani Fiedlerov vektor normalizirane Laplaceove matrice.

Primijetimo da vrijedi

$$D^{-\frac{1}{2}} \left(D^{-\frac{1}{2}} L D^{-\frac{1}{2}} \right) \mathbf{w}^{[2]} = \lambda_2 D^{-\frac{1}{2}} \mathbf{w}^{[2]},$$

odnosno

$$D^{-1} L \left(D^{-\frac{1}{2}} \mathbf{w}^{[2]} \right) = \lambda_2 \left(D^{-\frac{1}{2}} \mathbf{w}^{[2]} \right),$$

pa je $D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{w}^{[2]}$ Fiedlerov vektor matrice $D^{-1}L$.

Sljedećim teoremima dana je karakterizacija spektralnih radijusa matrica L i L_n .

Teorem 2.2 ([7]). *Najveća svojtvena vrijednost λ_n Laplaceove matrice L zadovoljava*

$$\lambda_n \leq 2 \max_{i=1, \dots, n} d_{ii},$$

$$d_{ii} = \sum_{j=1}^n w_{ij}, i = 1, \dots, n.$$

Teorem 2.3 ([7]). *Za spektar normalizirane Laplaceove matrice vrijedi*

$$\sigma(L_n) \subseteq [0, 2].$$

3 Diskretna formulacija problema biparticije

Pretpostavimo da su vrhovi skupa V podijeljeni na dva disjunktna skupa, C_1 i C_2 . U tom slučaju vektor \mathbf{y} zadan izrazom

$$y_i = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{za } i \in C_1 \\ -\frac{1}{2} & \text{za } i \in C_2 \end{cases} \quad (3.1)$$

određuje tu particiju. Vektor \mathbf{y} zove se particijski vektor.

Za početak, želimo dobiti takav partijski vektor koji rješava problem

$$\min_{y_i \in \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}} \frac{1}{2} \sum_{i,j} (y_i - y_j)^2 w_{ij}. \quad (3.2)$$

Objektna funkcija (3.2) predstavlja rez particije, odnosno ukupnu težinu bridova koji spajaju vrhove iz C_1 i C_2 . Ovakva definicija problema nije zadovoljavajuća, jer je očito da vektor $\frac{1}{2}\mathbf{e}$ (ako su svi vrhovi u istoj skupini) minimizira rez. Ako uvedemo balansni prag β , dolazimo do problema minimuma razmjernog reza

$$\min_{\substack{y_i \in \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\} \\ |\mathbf{y}^T \mathbf{e}| \leq \beta}} \frac{1}{2} \sum_{i,j} (y_i - y_j)^2 w_{ij}. \quad (3.3)$$

Izraz $2\mathbf{y}^T \mathbf{e}$ mjeri razliku između $|A|$ i $|B|$, pa uvjet $|\mathbf{y}^T \mathbf{e}| \leq \beta$ određuje najveću dopuštenu razliku. $\beta = \frac{1}{2}$ zahtijeva najveću moguću izbalansiranost. S druge strane, $\beta = \frac{n}{2}$ dopušta sve biparticije, uključujući i trivijalnu, što nas ponovo vraća na (3.2).

Druga mogućnost je

$$\min_{\substack{y_i \in \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\} \\ |\mathbf{y}^T D \mathbf{e}| \leq \beta}} \frac{1}{2} \sum_{i,j} (y_i - y_j)^2 w_{ij}, \quad (3.4)$$

problem minimuma normaliziranog reza. U ovom slučaju dodatni uvjet $|\mathbf{y}^T D \mathbf{e}| \leq \beta$ kontrolira razliku među težinama dviju skupina.

Diskretni problemi (3.3) i (3.4) su ovisni o izboru balansnog praga β . Međutim, pokazat ćemo da prirodna relaksacija problema daje rješenje koje je malo ovisno o β .

4 Relaksacija problema biparticije

Izostavljanjem uvjeta diskretnosti NP-težak diskretni problem minimiziranja ciljnih funkcija particioniranja može se svesti na problem minimiziranja u realnoj domeni, rješiv u polinomnom vremenu.

Ako oslabimo uvjet $y_i \in \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$ na $y_i \in \mathbb{R}$, rješenje problema (3.3), odnosno (3.4) više neće biti pravi partijski vektor. Međutim, pokušat ćemo komponente rješenja $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ podijeliti na dvije različite skupine, koje će određivati particiju vrhova grafa.

Pri prelasku s $y_i \in \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$ na $y_i \in \mathbb{R}$ moramo voditi računa o razmjeru (skaliranju). Ako nema dodatnih ograničenja, skaliranjem svih komponenti vektora $\mathbf{y} : y_i \rightarrow \varepsilon y_i$ mogli bismo postići proizvoljno malu vrijednost funkcije $\sum_{i,j} (y_i - y_j)^2 w_{ij}$. Zato moramo normalizirati \mathbf{y} . Originalna formulacija $y_i \in \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$ u (3.3) daje $\mathbf{y}^T \mathbf{y} = \frac{n}{4}$, pa problem glasi

$$\begin{aligned} \min_{\substack{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \\ |\mathbf{y}^T \mathbf{e}| \leq \beta \\ \mathbf{y}^T \mathbf{y} = \frac{n}{4}}} \frac{1}{2} \sum_{i,j} (y_i - y_j)^2 w_{ij} \end{aligned} \quad (4.1)$$

Druga varijanta je skaliranje svakog y_i s $\frac{2}{\sqrt{n}}$, pa je novi problem

$$\begin{aligned} \min_{\substack{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \\ |\mathbf{y}^T \mathbf{e}| \leq \frac{2\beta}{\sqrt{n}} \\ \mathbf{y}^T \mathbf{y} = 1}} \frac{1}{2} \sum_{i,j} (y_i - y_j)^2 w_{ij} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Kod alternativnog diskretnog problema (3.4) prirodno je dodati još i uvjet $\mathbf{y}^T D \mathbf{y} = \theta n$, gdje je $\theta > 0$ neka konstanta, što se može objasniti na sljedeći način: budući da minimiziramo izraz $\sum_{i,j} (y_i - y_j)^2 w_{ij}$, za očekivati je da će vrh i , koji ima veliku ukupnu težinu $t(i) = \sum_j w_{ij} = d_{ii}$, imati velik utjecaj na određivanje ostalih y_j vrijednosti. Da bismo ublažili prevelik utjecaj dva ili tri vrha s velikim težinama na rezultat, fiksiranjem $\mathbf{y}^T D \mathbf{y} = \sum d_{ii} y_i^2$ prisiljavamo y_i da bude blizu nuli kada je d_{ii} velik. Drugim riječima, vrh i ne smještamo u potpunosti ni u jednu skupinu. S druge strane, ako određeni vrh i ima neobično malu ukupnu težinu d_{ii} , problem (4.1) bi trebao imati rješenje u kojem je y_j mali za $j \neq i$, a y_i veći, tako da su vrijednosti u $\sum_{i,j} (y_i - y_j)^2 w_{ij}$ male. Nakon ponovnog skaliranja problem glasi

$$\begin{aligned} \min_{\substack{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \\ |\mathbf{y}^T D \mathbf{e}| \leq \frac{\beta}{\sqrt{\theta n}} \\ \mathbf{y}^T D \mathbf{y} = 1}} \frac{1}{2} \sum_{i,j} (y_i - y_j)^2 w_{ij}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Ovakva normalizirana verzija problema trebala bi biti manje osjetljiva na utjecaj vrhova koji imaju iznimno veliku ili malu težinu.

Prema teoremu 2.1, za proizvoljni vektor $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ vrijedi

$$\mathbf{y}^T L \mathbf{y} = \sum_{i < j} w_{ij} (y_i - y_j)^2 = \frac{1}{2} \sum_{i,j} w_{ij} (y_i - y_j)^2, \quad (4.4)$$

gdje je L Laplaceova matrica grafa G . To znači da probleme (4.2) i (4.3) možemo napisati u obliku

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n} \mathbf{y}^T L \mathbf{y}, \\ |\mathbf{y}^T \mathbf{e}| \leq \frac{2\beta}{\sqrt{n}} \\ \mathbf{y}^T \mathbf{y} = 1 \end{aligned} \quad (4.5)$$

odnosno

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n} \mathbf{y}^T L \mathbf{y}. \\ |\mathbf{y}^T D \mathbf{e}| \leq \frac{\beta}{\sqrt{\theta n}} \\ \mathbf{y}^T D \mathbf{y} = 1 \end{aligned} \quad (4.6)$$

Rayleigh-Ritzov teorem daje nam rješenja problema (4.5) i (4.6) bez balansnog praga, trivijalna rješenja koja nam nisu zanimljiva.

Međutim, teorem 4.1 koji predstavlja poopćenje Rayleigh-Ritzovog teorema daje nam rješenja problema koja zadovoljavaju balansni prag.

Teorem 4.1 ([5]). *Neka je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simetrična matrica sa svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 \leq \dots \leq \lambda_n$ i odgovarajućim ortonormiranim svojstvenim vektorima $\mathbf{v}^{[1]}, \mathbf{v}^{[2]}, \dots, \mathbf{v}^{[n]}$. Tada, za fiksni $0 \leq \alpha < 1$, problem*

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n} \mathbf{y}^T A \mathbf{y} \\ |\mathbf{y}^T \mathbf{v}^{[1]}| \leq \alpha \\ \mathbf{y}^T \mathbf{y} = 1 \end{aligned} \quad (4.7)$$

ima rješenje $\mathbf{y} = \pm \alpha \mathbf{v}^{[1]} \pm \sqrt{1 - \alpha^2} \mathbf{v}^{[2]}$.

Ako druga najmanja svojstvena vrijednost matrice nije jednostruka, vrijedi korolar

Korolar 4.1. *Neka je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simetrična matrica sa svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 < \lambda_2 = \dots = \lambda_{2+t} < \lambda_{3+t} \leq \dots \leq \lambda_n$, za neki $t \in \mathbb{N}$, i odgovarajućim ortonormiranim svojstvenim vektorima $\mathbf{v}^{[1]}, \mathbf{v}^{[2]}, \dots, \mathbf{v}^{[n]}$. Tada, za fiksni $0 \leq \alpha < 1$, problem*

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n} \mathbf{y}^T A \mathbf{y} \\ |\mathbf{y}^T \mathbf{v}^{[1]}| \leq \alpha \\ \mathbf{y}^T \mathbf{y} = 1 \end{aligned}$$

ima rješenje $\mathbf{y} = \pm \alpha \mathbf{v}^{[1]} \pm \sqrt{1 - \alpha^2} \mathbf{v}^{[2+k]}$ za svaki $k = 0, 1, \dots, t$.

Iz teorema 4.1 neposredno slijedi korolar

Korolar 4.2. Za $0 \leq \beta < \frac{n}{2}$ problem razmjernog reza grafa G

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n} \quad & \mathbf{y}^T L \mathbf{y} \\ & |\mathbf{y}^T \mathbf{e}| \leq \frac{2\beta}{\sqrt{n}} \\ & \mathbf{y}^T \mathbf{y} = 1 \end{aligned}$$

ima rješenje

$$\mathbf{y} = \pm \frac{2\beta}{n\sqrt{n}} \mathbf{e} \pm \sqrt{1 - 4\frac{\beta^2}{n^2}} \mathbf{v}^{[2]}, \quad (4.8)$$

gdje je $\mathbf{v}^{[2]}$ Fiedlerov vektor Laplaceove matrice grafa G .

Za $0 \leq \beta < \sqrt{\theta n} \left\| D^{\frac{1}{2}} \mathbf{e} \right\|_2$ problem normaliziranog reza grafa G

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n} \quad & \mathbf{y}^T L \mathbf{y} \\ & |\mathbf{y}^T D \mathbf{e}| \leq \frac{\beta}{\sqrt{\theta n}} \\ & \mathbf{y}^T D \mathbf{y} = 1 \end{aligned}$$

ima rješenje

$$\mathbf{y} = \pm \frac{\beta}{\sqrt{\theta n} \left\| D^{\frac{1}{2}} \mathbf{e} \right\|_2} \mathbf{e} \pm \sqrt{1 - \frac{\beta^2}{\theta n \left\| D^{\frac{1}{2}} \mathbf{e} \right\|_2^2}} D^{-\frac{1}{2}} \mathbf{w}^{[2]}, \quad (4.9)$$

gdje je $D^{-\frac{1}{2}} \mathbf{w}^{[2]}$ normalizirani Fiedlerov vektor normalizirane Laplaceove matrice.

Budući da je, prema teoremu 2.1,

$$(\alpha \mathbf{x} + \beta \mathbf{e})^T L (\alpha \mathbf{x} + \beta \mathbf{e}) = \alpha^2 \mathbf{x}^T L \mathbf{x},$$

za svaki vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ i skalare $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, rješenje relaksiranog problema bipartitije grafa svodi se na vektor $\mathbf{v}^{[2]}$ u nenormaliziranom, odnosno $D^{-\frac{1}{2}} \mathbf{w}^{[2]}$ u normaliziranom slučaju.

Prema korolaru 4.2, u nenormaliziranom se slučaju dobije isto rješenje razmjernog reza grafa za sve vrijednosti $0 \leq \beta < \frac{n}{2}$ balansnog praga, za razliku od originalnog diskretnog problema (3.3) kod kojeg je $\beta < \frac{n}{2}$ dopuštao sve moguće bipartitije osim trivijalne. Zaključujemo da je nakon relaksacije algoritam potpuno neosjetljiv na izbor β . Analogno se može zaključiti i za normalizirani slučaj.

Prema definiciji partijskog vektora, skupovi C_1 i C_2 su sada određeni s

$$C_1 = \{i : \mathbf{v}^{[2]}(i) < 0\}, \quad C_2 = \{i : \mathbf{v}^{[2]}(i) \geq 0\}, \quad (4.10)$$

u nenormaliziranom, odnosno s

$$C_1 = \{i : D^{-\frac{1}{2}} \mathbf{w}^{[2]}(i) < 0\}, \quad C_2 = \{i : D^{-\frac{1}{2}} \mathbf{w}^{[2]}(i) \geq 0\} \quad (4.11)$$

u normaliziranom slučaju.

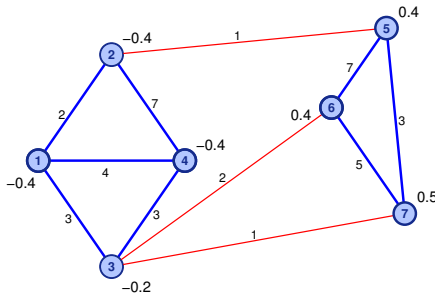
Primjer 4.1. Fiedlerov vektor Laplaceove matrice grafa sa slike 1,

$$\mathbf{v}^{[2]} = [-0.4, -0.4, -0.2, -0.4, 0.4, 0.4, 0.5]^T,$$

prva četiri vrha smješta u prvu skupinu, a preostala tri u drugu skupinu. Matrica svojstvenih vrijednosti je

$$\Lambda = \text{diag}(0, 1.9, 8.5, 12.5, 12.7, 20, 20.3),$$

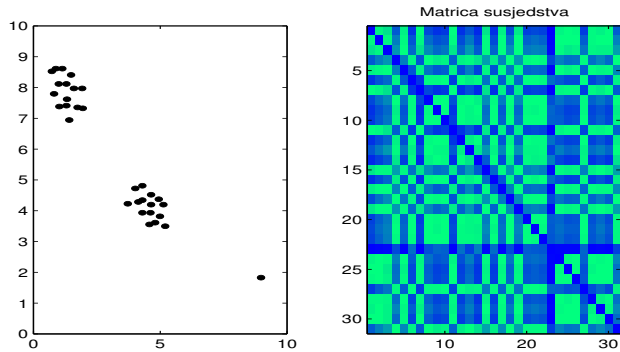
što znači da je vrijednost razmjernog reza particije ≥ 1.9 .



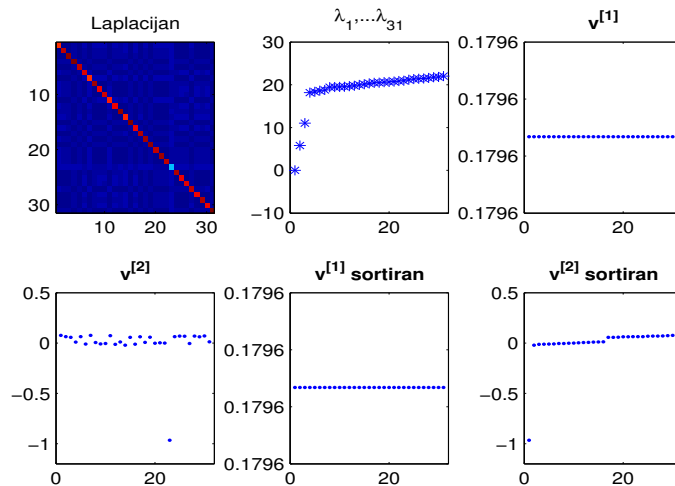
Slika 3: Komponente Fiedlerovog vektora grafa pridružene odgovarajućim vrhovima.

5 Primjeri

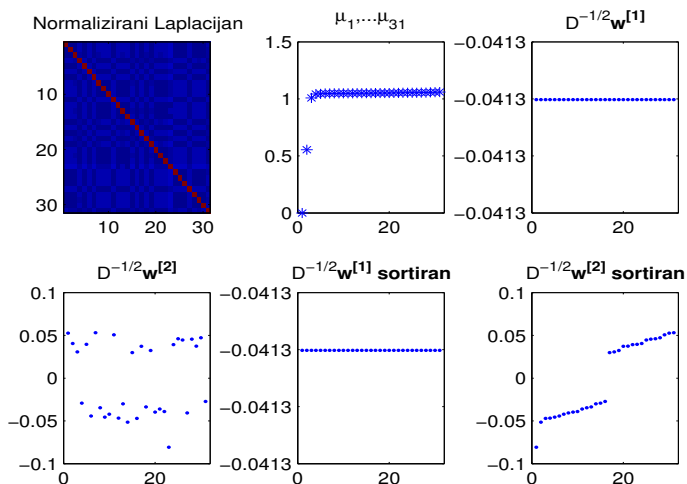
Primjer 5.1. Slika 4 prikazuje dvije skupine točaka, pri čemu se iz jedne skupine izdvaja jedna izolirana točka. Očigledno je da su komponente normaliziranog Fiedlerovog vektora normalizirane Laplaceove matrice pod manjim utjecajem izolirane točke od komponenti Fiedlerovog vektora Laplaceove matrice (slika 5 i slika 6).



Slika 4: Skup točaka koje formiraju dvije skupine, pri čemu se iz jedne skupine izdvaja jedna izolirana točka. Desno je matrica susjedstva na kojoj se ne nazire nikakva struktura, jer točke nisu poredane po skupinama.



Slika 5: Laplaceova matrica grafa sa slike 4, svojstvene vrijednosti i prva dva svojstvena vektora.

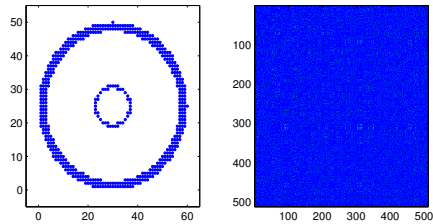


Slika 6: Normalizirana Laplaceova matrica grafa sa slike 4, svojstvene vrijednosti i prva dva normalizirana svojstvena vektora.

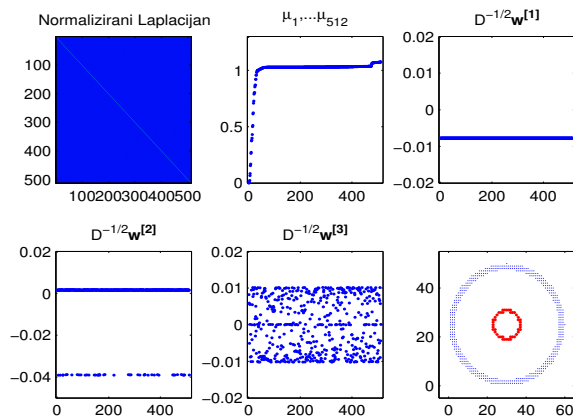
Primjer 5.2. Na slici 7 prikazana su dva koncentrična prstena i odgovarajuća matrica sličnosti. Sličnosti su izračunate pomoću Gaussove jezgre [3]

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2^2}{2\sigma^2}\right). \quad (5.1)$$

uz $\sigma = 5$. U matrici sličnosti nisu grupirane točke jednog pa drugog prstena, pa ona nema blok strukturu. Na slici 8 prikazani su odgovarajuća normalizirana Laplaceova matrica, njezine svojstvene vrijednosti i prva tri normalizirana svojstvena vektora. Na desnoj slici je prikazan rezultat biparticioniranja točaka s obzirom na predznak odgovarajućih komponenti normaliziranog Fiedlerovog vektora.



Slika 7: Dva koncentrična prstena i pridružena matrica susjedstva. Točke nisu poredane po skupinama, pa matrica nema blok strukturu.



Slika 8: Normalizirana Laplaceova matrica grafa sa slike 7, svojstvene vrijednosti i prva tri normalizirana svojstvena vektora. Na donjoj desnoj slici crvenom i plavom bojom su označene točke za koje su odgovarajuće komponente Fiedlerovog vektora negativne, odnosno nenegativne (respektivno).

Literatura

- [1] Y. Chen, J. Z. Wang i R. Krovetz, *CLUE: Cluster-based Retrieval of Images by Unsupervised Learning*, IEEE Transactions on Image Processing, vol. 14, (2005.)
- [2] I. S. Dhillon, *Co-clustering documents and words using bipartite spectral graph partitioning*, UTCS Technical Report nr. TR-01-05 (2001.)
- [3] I. Fischer i J. Poland, *New methods for Spectral Clustering*, Technical Report No. IDSIA-12-04 (2004.)
- [4] G. H. Golub i C. F. Van Loan, *Matrix computations*, The Johns Hopkins University Press (1996.)
- [5] D. J. Higham i M. Kibble, *A unified view of spectral clustering*, Mathematic Research Report 2, University of Strathclyde (2004.)
- [6] R. A. Horn i C. R. Johnson, *Matrix analysis*, Cambridge University Press (1990.)
- [7] U. Von Luxburg, *Statistical Learning with Similarity and Dissimilarity Functions*, PhD thesis, draft, available at <http://www.kyb.tuebingen.mpg.de/~ule> (2004.)
- [8] J. Shi i J. Malik, *Normalized Cuts and Image segmentation*, IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 22(8): 888-905 (2000.)