Spektralni rezovi u usmjerenim grafovima

Slapničar, Andrej

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU

PRIRODOSLOVNO–MATEMATIČKI FAKULTET

MATEMATIČKI ODSJEK

Andrej Slapničar

SPEKTRALNI REZOVI U USMJERENIM GRAFOVIMA

Diplomski rad

Voditelj rada:
prof. dr. sc. Zlatko Drmač

Zagreb, rujan, 2023.

Ovaj diplomski rad obranjen je dana ____________________ pred ispitnim povjerenstvom u sastavu:

1. ____________________________, predsjednik
2. ____________________________, član
3. ____________________________, član

Povjerenstvo je rad ocijenilo ocjenom _______________.

Potpisi članova povjerenstva:

1. ____________________________
2. ____________________________
3. ____________________________

Sadržaj

Uvod

U ovom radu razmatrat ćemo metode spektralnog klasteriranja grafova. Općenito je klasteriranje podjela podataka u grupe takva da su podaci unutar svake grupe međusobno slični, a podaci između grupa međusobno različiti, dok kod klasteriranja grafa želimo vrhove grafa podijeliti u smislene grupe. Rezovi u grafu su mjere koje opisuju koliko je dobar određeni rezultat klasteriranja grafa, intuitivno možemo zamisliti da pri klasteriranju grafa, graf prerežemo na dijelove te onda mjerimo koliko će koštati ti rezovi. Ako odaberemo particiju grafa koja ima najmanji rez onda ćemo dobiti i najbolji rezultat klasteriranja, pa onda minimizacijom reza u grafu možemo klasterirati graf. Rezovi koje ćemo mi promatrati mogu se efikasno računati koristeći spektralnu teoriju matrica pa ih zovemo spektralni rezovi. Metodu klasteriranja grafa minimizacijom spektralnog reza u grafu skraćeno nazivamo spektralno klasteriranje grafa. Spektralni rezovi se najčešće promatraju u neusmjerenim grafovima, no pokazat ćemo da se spektralni rezovi i metoda minimizacije spektralnog reza mogu generalizirati i za usmjerene grafove.

Rad je podijeljen na četiri poglavlja. U prvom poglavlju su predstavljeni osnovni pojmovi koje ćemo kasnije koristiti. Pokazat ćemo kategorizacije metoda klasteriranja te ćemo istaknuti gdje pripadaju spektralne metode klasteriranja. Također ćemo navesti definicije grafova, rezova, spektralnih rezova te raznih pojmova iz teorije matrica.

Drugo poglavlje sadrži opis metode klasteriranja minimizacijom spektralnog reza u neusmjerenom grafu. Prvo ćemo pokazati kako minimizirati spektralni normalizirani rez ako želimo podijeliti graf na dvije particije, odnosno ako promatramo spektralni normalizirani rez biparticije grafa, a onda ćemo tu metodu poopćiti kako bismo dobili metodu koja će minimizirati spektralni rez višečlane particije grafa.

Treće poglavlje sadrži generalizaciju metode minimizacije spektralnog reza u neusmjerenim grafovima za slučaj usmjerenih grafova. Spektralni normalizirani rez višečlane particije ćemo zamijeniti težinskim rezom višečlane particije, a umjesto normalizirane Laplaceove matrice koristit ćemo njezin hermitski dio.

U četvrtom poglavlju su navedeni algoritmi spektralnog klasteriranja grafa koje smo razvili u drugom i trećem poglavlju te su prikazani primjeri na kojima smo testirali te algoritme. Metode spektralnog klasteriranja grafa smo testirali na primjerima točaka u ravnini te na primjerima segmentacije slike.

Poglavlje 1

Osnovni pojmovi

1.1 Klasteriranje

U literaturi koja proučava problem klasteriranja, primjerice u [19] i [7], klasteriranje je neformalno opisano kao grupiranje podataka, odnosno smislena i/ili korisna podjela podataka u grupe koje nazivamo *klasterima*. Pojmove klasteriranja i klastera, zbog svoje općenitosti, nije jednostavno strogo formalno definirati. Kaufman i Rousseeuw u svojoj knjizi [8], koja daje uvod u problem klasteriranja, opisuju klasteriranje kao umjetnost pronalaženja grupa u podacima. Formalnija definicija koja se najčešće pojavljuje u literaturi, primjerice u [19], [1] i [16]: Klasteriranje je podjela podataka u grupe koje nazivamo klasterima takva da su podaci unutar svakog klastera međusobno slični, a podaci između klastera međusobno različiti. Što to znači da su podaci međusobno slični, odnosno različiti ovisi o samom problemu klasteriranja. Skup klastera nazivamo *klasteringom*. U nastavku prvo formalno definiramo klastering, a onda klastere kao njegove elemente.

Definicija 1.1.1. *Neka je $\mathbb{S} \neq \emptyset$ proizvoljan skup, neka je $k \in \mathbb{N}$ i neka su proizvoljni skupovi $\mathbb{S}_1, \mathbb{S}_2, \ldots, \mathbb{S}_k$ koje nazivamo* klasterima*. Kažemo da je familija skupova* $\mathcal{F}_{\mathbb{S}} := \{\mathbb{S}_i \mid i \in \{1, \ldots, k\}\}$ klastering skupa $\mathbb{S}$ *ako vrijedi:*

a) $1 \leq i \leq k \implies \mathbb{S}_i \neq \emptyset$, *(neprazni klasteri);*

b) $1 \leq i \leq k \implies \mathbb{S}_i \subseteq \mathbb{S}$ *ili* $(\exists l < i)\,(\exists j_1, \ldots, j_l < i)\;\; \mathbb{S}_i = \{\mathbb{S}_{j_1}, \ldots, \mathbb{S}_{j_l}\}$,
(klasteri su ili podskupovi od $\mathbb{S}$ ili skupovi drugih klastera). [1]

[1]Razlog zašto smo klastering definirali upravo kao u definiciji 1.1.1, pogotovo za uvjet b) u toj definiciji, je taj jer želimo da definicija bude dovoljno općenita uzimajući u obzir kategorizacije metoda klasteriranja koje se pojavljuju u nastavku.

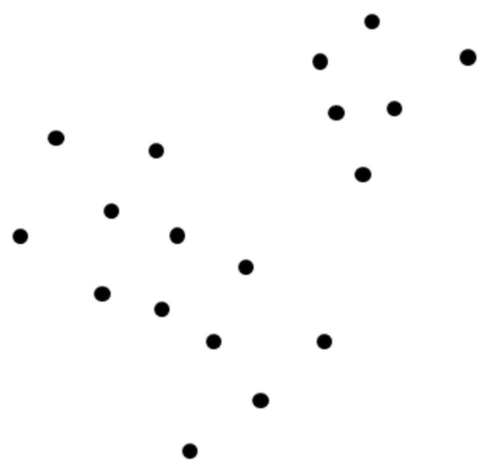
Klasteriranje možemo promatrati kao pronalaženje optimalnog klasteringa skupa podataka po nekom zadanom kriteriju u kontekstu promatranog problema.

Metode klasteriranja možemo podijeliti s obzirom na načine na koje su podaci raspoređeni u klastere. Prvotna, a i danas još uvijek najzastupljenija, kategorizacija metoda klasteriranja koju koriste i Kaufman te Rousseeuw [8] je podjela s obzirom na strategiju koju koristi algoritam klasteriranja. Kasnije su uvedeni pojmovi kao što su preklapajuće klasteriranje te meko (*fuzzy*) klasteriranje čime se razvijaju nove kategorizacije kao u [7] i [19]. Pojmovi preklapajućeg i mekog klasteriranje često se stavljaju u istu kategorizaciju, a ponekad se pogrešno čak i koriste kao sinonimi. U posljednje vrijeme su ti pojmovi ipak odvojeni u različite kategorizacije, kao na primjer u [16], pa su zato i ovdje metode klasteriranja raspodijeljene u sljedeće kategorizacije:

- Podjela s obzirom na strategiju algoritma klasteriranja:
  - *hijerarhijsko klasteriranje* je podjela skupa podataka u ugniježđene klastere tako da su elementi svakog klastera ili sami podaci ili drugi klasteri te da postoji samo jedan klaster koji nije element nekog drugog klastera, postoje dvije vrste tehnika hijerarhijskog klasteriranja: aglomerativne i divizivne metode, kod aglomerativnih metoda algoritam započinje s neugniježđenim klasterima koji sadrže isključivo podatke i zatim se u svakom koraku barem dva postojeća klastera spajaju u jedan novi klaster i tako se ponavlja sve dok ne završimo sa samo jednim klasterom, kod divizivnih metoda algoritam kreće od jednog klastera koji sadrži sve podatke i zatim se u svakom koraku jedan postojeći klaster dijeli na najmanje dva nova klastera tako da se elementi postojećeg klastera rasporede u nove klastere;
  - *particijsko klasteriranje* je podjela skupa podataka u klastere koji su neprazni podskupovi skupa podataka.
- Podjela s obzirom na maksimalni broj klastera kojemu pripada pojedini podatak:
  - *ekskluzivno klasteriranje* je podjela skupa podataka u međusobno disjunktne klastere, odnosno svaki se podatak nalazi u najviše jednom klasteru;
  - *preklapajuće klasteriranje* je podjela skupa podataka u klastere pri čemu se podaci mogu istovremeno nalaziti u više klastera.

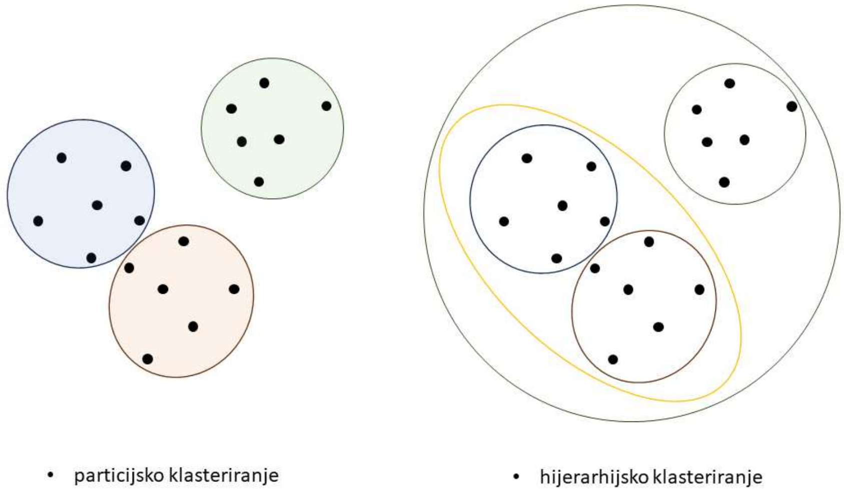
- Podjela s obzirom na vrstu pripadnosti podataka u klasterima:
  - *tvrdo klasteriranje* je podjela skupa podataka u klastere pri čemu se pojedini podatak ili nalazi ili ne nalazi u nekom klasteru;
  - *meko (fuzzy) klasteriranje* je podjela skupa podataka u klastere tako da pojedini podatak pripada nekom klasteru s određenim stupnjem članstva (koji se najčešće reprezentira brojem između 0 i 1 pri čemu 0 označava da taj podatak uopće ne pripada promatranom klasteru, a 1 označava da taj podatak u potpunosti pripada promatranom klasteru te za svaki podatak vrijedi da je zbroj stupnjeva članstva svih klastera jednak 1).
- Podjela s obzirom jesu li svi podaci raspoređeni u klastere:
  - *potpuno klasteriranje* je podjela skupa podataka u klastere pri čemu se svaki podatak nalazi u nekom klasteru;
  - *djelomično klasteriranje* je podjela skupa podataka u klastere pri čemu ne moraju nužno svi podaci biti raspoređeni u klastere.

Primjer 1.1.2. *Na skupu točaka u ravnini prikazanom na slici 1.1 pokazat ćemo primjere podjela metoda klasteriranja iz navedenih kategorizacija.*



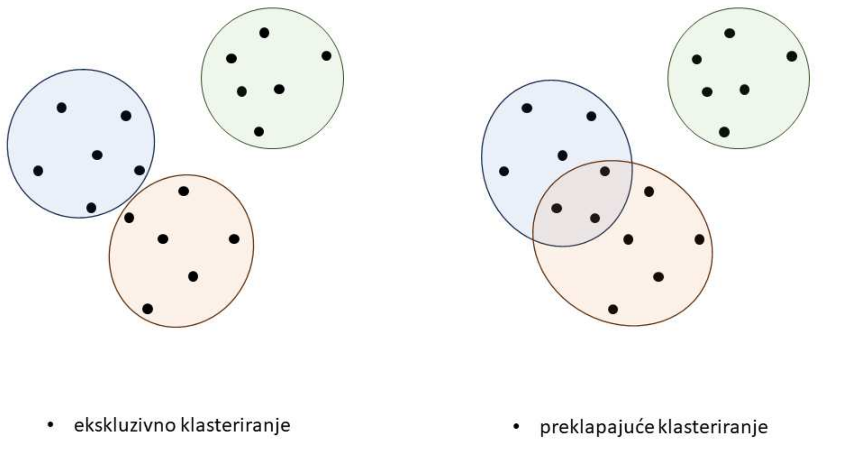
Slika 1.1: Primjer skupa točaka u ravnini

S obzirom na strategiju algoritma klasteriranja razlikujemo hijerarhijsko i particijsko klasteriranje, na slici 1.2 su prikazani konkretni primjeri tih metoda klasteriranja.



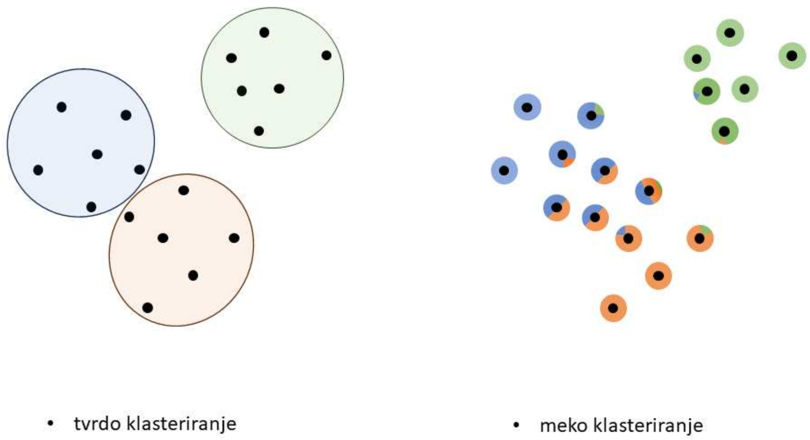
Slika 1.2: Primjer hijerarhijskog i particijskog klasteriranja

Ovisno o tome je li dozvoljeno da se podaci istovremeno nalaze u više klastera, metode klasteriranja dijelimo na ekskluzivno i preklapajuće klasteriranje čiji su konkretni primjeri prikazani na slici 1.3.



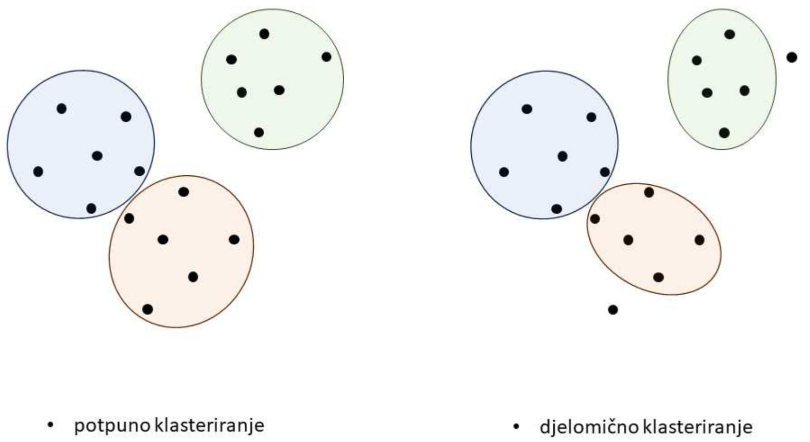
Slika 1.3: Primjer ekskluzivnog i preklapajućeg klasteriranja

U tvrdom klasteriranju svaki se podatak ili nalazi ili ne nalazi u nekom klasteru, dok kod mekog klasteriranja pojedini podatak pripada nekom klasteru s određenim stupnjem članstva. Na slici 1.4 su dani primjeri tvrdog i mekog klasteriranja pri čemu je u primjeru mekog klasteriranja stupanj članstva za određeni klaster označen udjelom odgovarajuće boje oko promatrane točke.



Slika 1.4: Primjer tvrdog i mekog klasteriranja

S obzirom na to jesu li svi podaci raspoređeni u klastere razlikujemo potpuno i djelomično klasteriranje, konkretni primjeri tih metoda klasteriranja su prikazani na slici 1.5.



Slika 1.5: Primjer potpunog i djelomičnog klasteriranja

Nadalje ćemo u ovom radu promatrati samo metode ekskluzivnog, tvrdog i potpunog klasteriranja. Spektralne metode klasteriranja mogu biti i hijerarhijske, primjerice algoritam kojeg su osmislili Shi i Malik [18], i particijske, primjerice algoritam kojeg su osmislili Yu i Shi [20]. No kako svaki hijerarhijski algoritam možemo svesti na particijski algoritam ako unaprijed znamo traženi broj klastera, a i kako nas konačno zanima particija podataka koje klasteriramo onda ćemo spektralne metode klasteriranja koje proučavamo promatrati kao particijske metode.

Definicija 1.1.3. *Neka je $\mathbb{S} \neq \emptyset$ proizvoljan skup, neka je $k \in \mathbb{N}$ i neka su proizvoljni skupovi $\mathbb{S}_1, \mathbb{S}_2, \ldots, \mathbb{S}_k$ koje nazivamo* blokovima particije. *Kažemo da je familija skupova $\mathcal{F}_{\mathbb{S}}^k := \{\mathbb{S}_i \mid i \in \{1, \ldots, k\}\}$* k-člana particija skupa $\mathbb{S}$ *ako vrijedi:*

a) $1 \leq i \leq k \implies \mathbb{S}_i \neq \emptyset$, *(neprazni blokovi particije);*

b) $1 \leq i \leq k \implies \mathbb{S}_i \subseteq \mathbb{S}$, *(blokovi particije su podskupovi od $\mathbb{S}$);*

c) $1 \leq i < j \leq k \implies \mathbb{S}_i \cap \mathbb{S}_j \neq \emptyset$, *(međusobno disjunktni blokovi particije);*

d) $\bigcup_{i=1}^{k} \mathbb{S}_i = \mathbb{S}$, *(unija blokova particije je cijeli $\mathbb{S}$).*

Primijetimo da je k-člana particija skupa podataka zapravo klastering klasteriranja koje je ekskluzivno, tvrdo, potpuno i particijsko. [2] U nastavku ćemo ovo klasteriranje skraćeno zvati samo particijsko klasteriranje, odnosno osim ako nije drukčije naglašeno smatrat ćemo da je particijsko klasteriranje ujedno ekskluzivno, tvrdo i potpuno. Kao i za općenito klasteriranje, problem particijskog klasteriranja možemo promatrati kao problem pronalaženja optimalne k-člane particije skupa podataka po nekom zadanom kriteriju u kontekstu promatranog problema.

[2] U definiciji k-člane particije 1.1.3 iz uvjeta b), c) i d) proizlazi da je k-člana particija skupa podataka upravo klastering klasteriranja koje je particijsko, ekskluzivno i potpuno. Relaksacijom, odnosno izmjenom ili izostavljanjem ovih uvjeta mogli bismo dobiti definicije klasteringa koje bi odgovarale hijerarhijskom, preklapajućem ili djelomičnom klasteriranju.

1.2 Teorija grafova

U primjeru 1.1.2 smo pokazali nekoliko primjera klasteriranja jednog skupa točaka u ravnini. Često skup podataka koji želimo klasterirati možemo prikazati kao točke u euklidskom prostoru određene dimenzije. No ponekad podaci koje klasteriramo nisu točke euklidskog prostora ili čak podaci nisu ni numerički, nego jedini podatak koji imamo o zadanom skupu podataka su njihovi međusobni odnosi, tj. za svaka dva podatka u zadanom skupu znamo koliko su slični. U tom slučaju se reprezentacija problema pomoću grafa nameće kao prirodno rješenje, pri čemu skup podataka reprezentiramo vrhovima grafa, a sličnost između podataka iskažemo pomoću bridova grafa i težinske funkcije.

Grafovi, usmjereni grafovi i težinski grafovi

Definicije pojmova iz teorije grafova koje koristimo u ovom potpoglavlju mogu se pronaći u [14], [9], [2] i [4].

U nastavku definiramo neusmjereni i usmjereni te netežinski i težinski graf. Netežinski graf ćemo definirati kao uređeni par skupa vrhova i skupa bridova.

Napomena 1.2.1. *Najčešće se skup bridova kod neusmjerenog grafa definira kao skup dvočlanih podskupova vrhova, a kod usmjerenog grafa kao skup uređenih parova vrhova. Primjer takve definicije neusmjerenog grafa je:*

Neusmjereni graf $\mathbb{G}$ *je uređeni par* $(\mathbb{V}, \mathbb{E})$*, pri čemu je* $\mathbb{V}$ *konačan skup čije elemente nazivamo* vrhovima grafa*, a* $\mathbb{E}$ *skup dvočlanih podskupova od* $\mathbb{V}$ *(odnosno vrijedi* $\mathbb{E} \subseteq \{\{u, v\} \mid u, v \in \mathbb{V}, u \neq v\}$*) čije elemente nazivamo* bridovima grafa.

Ovu definiciju nećemo koristiti, nego ćemo neusmjereni graf definirati kao poseban slučaj usmjerenog grafa kako bismo poslije mogli jednostavnije definirati rezove particija grafa.

Kod nekih problema koje reprezentiramo grafom, veze između vrhova nisu simetrične pa za vrhove grafa u i v razlikujemo brid iz vrha v u vrh u, i brid iz vrha u u vrh v, odnosno bridovi su usmjereni.

Definicija 1.2.2. Usmjereni graf ili digraf $\mathbb{G}$ *je uređeni par* $(\mathbb{V}, \mathbb{E})$*, pri čemu je* $\mathbb{V}$ *konačan skup čije elemente nazivamo* vrhovima grafa*, a* $\mathbb{E}$ *skup uređenih parova različitih vrhova grafa (odnosno vrijedi* $\mathbb{E} \subseteq \{(u, v) \mid u, v \in \mathbb{V}, u \neq v\}$*) čije elemente nazivamo* bridovima grafa. [3]

Ako usmjerenom grafu dodamo težinsku funkciju koja svakom bridu pridružuje njegovu težinu onda dobijemo težinski usmjereni graf.

[3] U definiciji usmjerenog grafa 1.2.2 skup bridova grafa je definiran kao skup uređenih parova *različitih* vrhova pa nisu dozvoljene petlje, odnosno bridovi koji spajaju vrh sa samim sobom.

Definicija 1.2.3. Težinski usmjereni graf $\mathbb{G}$ *je uređena trojka* $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$*, pri čemu je* $(\mathbb{V}, \mathbb{E})$ *usmjereni graf, a* $w\colon \mathbb{E} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ težinska funkcija. [4]

Sada definiramo neusmjereni graf kao usmjereni graf s dodatnim uvjetom na skup bridova.

Definicija 1.2.4. Neusmjereni graf $\mathbb{G}$ *je uređeni par* $(\mathbb{V}, \mathbb{E})$*, pri čemu je* $(\mathbb{V}, \mathbb{E})$ *usmjereni graf i skup bridova je simetričan (odnosno vrijedi* $(\forall u, v \in \mathbb{V})\ (u, v) \in \mathbb{E} \implies (v, u) \in \mathbb{E}$*).*

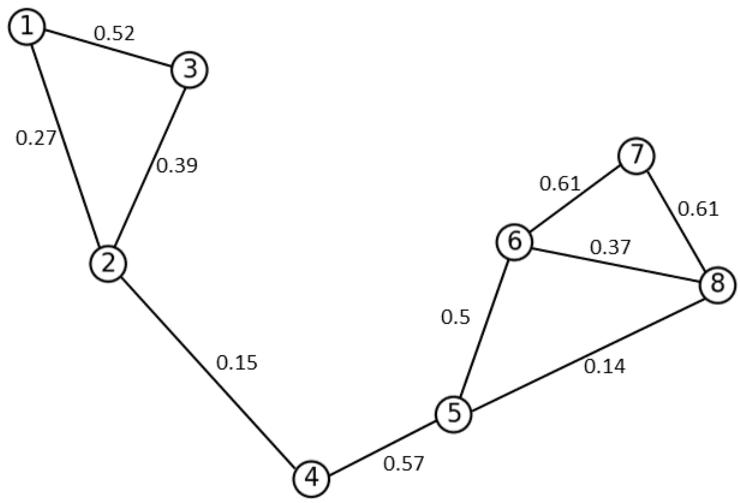
Kao i kod usmjerenog grafa tako i neusmjerenom grafu možemo dodati težinsku funkciju čime dobijemo težinski neusmjereni graf.

Definicija 1.2.5. Težinski neusmjereni graf $\mathbb{G}$ *je uređena trojka* $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$*, pri čemu je* $(\mathbb{V}, \mathbb{E})$ *neusmjereni graf, a* $w\colon \mathbb{E} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ težinska funkcija *(pri čemu vrijedi* $(\forall (u, v) \in \mathbb{E})\ w(u, v) = w(v, u)$*).* [4] [5]

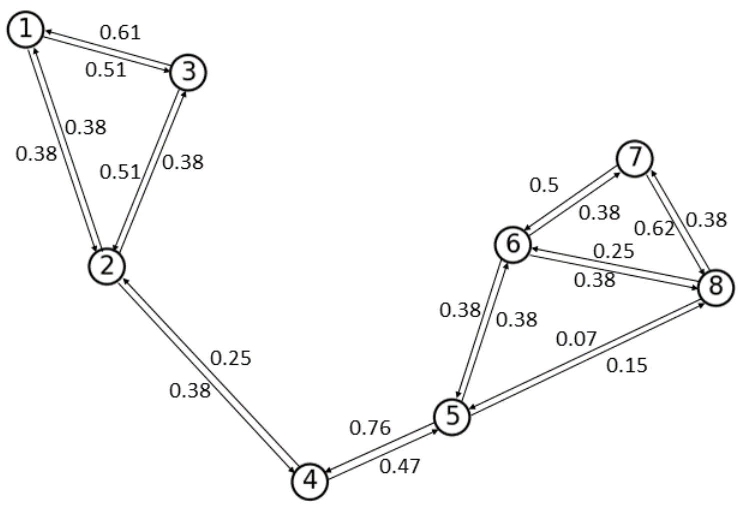
Primjer 1.2.6. *Primjeri neusmjerenog i usmjerenog težinskog grafa su prikazani na slikama 1.6 i 1.7. Iznosi težinske funkcije za pojedine bridove su označeni vrijednostima koje se nalaze pored bridova. Težinske funkcije grafova u ova dva primjera su zadane tako da bridovi čiji su vrhovi bliže otprilike imaju veći iznos težinske funkcije.*

[4] U definicijama težinskog usmjerenog grafa 1.2.3 i težinskog neusmjerenog grafa 1.2.5 za kodomenu težinske funkcije je korišten $\mathbb{R}_{\geq 0}$. Iako se najčešće težinska funkcija definira tako da može poprimati i negativne vrijednosti, ovdje smo je ovako definirali jer se u primjenama, posebno kod problema klasteriranja grafa, najčešće koriste nenegativne težinske funkcije, a i ovakva definicija pojednostavljuje daljnju analizu spektralnog klasteriranja.

[5] Težinu proizvoljnog brida (u, v) označavat ćemo skraćeno s $w(u, v)$, umjesto s $w((u, v))$.



Slika 1.6: Primjer neusmjerenog težinskog grafa



Slika 1.7: Primjer usmjerenog težinskog grafa

Rezovi

Definicije iz ovog potpoglavlja su uz manje izmjene preuzete su iz [20], [18] i [11].

Kao što smo naveli u poglavlju 1.1, spektralno klasteriranje ćemo promatrati kao particijsko klasteriranje, odnosno zanima nas kako pronaći optimalnu k-članu particiju skupa podataka u kontekstu zadanog problema. Ako skup podataka reprezentiramo grafom onda zapravo tražimo particiju grafa, odnosno preciznije particiju skupa vrhova tog grafa. Za početak uzmimo da tražimo dvočlanu particiju, odnosno biparticiju grafa. Cilj nam je pronaći onu biparticiju koja je najbolja po nekom kriteriju. Jedan jednostavan kriterij je da promatramo količinu bridova koje moramo izbaciti iz grafa da bi dobili određenu particiju. Tu ćemo mjeru u nastavku definirati kao rez particije grafa. Optimalna biparticija će biti ona koja ima najmanji rez.

Napomena 1.2.7. *Sve rezove particija grafa koje definiramo u nastavku ćemo definirati za* težinski usmjereni *graf. Kako smo* neusmjereni *graf definirali kao poseban slučaj* usmjerenog *grafa onda definicije rezova odgovaraju i za* neusmjereni *graf. Dok* netežinske *grafove možemo reprezentirati s* težinskim *grafovima tako da dodefiniramo težinsku funkciju koja svakom bridu pridružuje istu težinu.*

Napomena 1.2.8. *U težinskom usmjerenom grafu je formalno težinska funkcija definirana samo za bridove grafa. Kako ćemo u nastavku koristiti $w(u, v)$ za proizvoljne vrhova grafa u i v koji nisu nužno povezani, onda ćemo u tom slučaju smatrati da je težina jednaka nula.*

Definicija 1.2.9. *Neka je $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ težinski usmjereni graf i neka je $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ biparticija skupa vrhova $\mathbb{V}$.* Stupanj povezanosti skupa $\mathbb{A}$ sa skupom $\mathbb{B}$, *u oznaci $links(\mathbb{A}, \mathbb{B})$, je zbroj težina svih bridova koji povezuju skupove $\mathbb{A}$ i $\mathbb{B}$:*

$$links(\mathbb{A}, \mathbb{B}) = \sum_{a \in \mathbb{A}, b \in \mathbb{B}} w(a, b).$$

Naveli smo da ćemo rez particije definirati kao količinu bridova koje moramo izbaciti iz grafa da bi dobili određenu particiju, pa ćemo rez biparticije definirati kao stupanj povezanosti skupova koji čine tu biparticiju.

Definicija 1.2.10. *Neka je $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ težinski usmjereni graf i neka je $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ biparticija skupa vrhova $\mathbb{V}$.* Rez biparticije $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$, *u oznaci $cut(\mathbb{A}, \mathbb{B})$, je stupanj povezanosti skupa $\mathbb{A}$ sa skupom $\mathbb{B}$:*

$$cut(\mathbb{A}, \mathbb{B}) = links(\mathbb{A}, \mathbb{B}).$$

Rez biparticije ne uzima u obzir veličine skupova koji čine biparticiju pa će biparticije kod kojih su pripadajući skupovi podjednakih veličina imati veći rez od biparticija kod kojih su pripadajući skupovi različitih veličina, iako biparticija s podjednakim skupovima možda bolje grupira podatke u kontekstu zadanog problema. Definiramo razmjerni rez biparticije:

Definicija 1.2.11. *Neka je* $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ *težinski usmjereni graf i neka je* $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ *biparticija skupa vrhova* $\mathbb{V}$. Razmjerni rez biparticije $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$*, u oznaci* $Rcut(\mathbb{A}, \mathbb{B})$*, definiramo s:*

$$Rcut(\mathbb{A}, \mathbb{B}) = \frac{links(\mathbb{A}, \mathbb{B})}{\left|\mathbb{A}\right|} + \frac{links(\mathbb{B}, \mathbb{A})}{|\mathbb{B}|} = \frac{\left|\mathbb{A}\right| + |\mathbb{B}|}{\left|\mathbb{A}\right||\mathbb{B}|} links(\mathbb{A}, \mathbb{B}).$$

Razmjerni rez biparticije uzima u obzir kardinalitete skupova koji čine particiju, ali skupovi biparticije s istim kardinalitetom mogu biti različito povezani s cijelim grafom. Definiramo normalizirani rez biparticije tako da u obzir uzmemo stupnjeve povezanosti svakog od skupova koji čine biparticiju sa skupom svih vrhova:

Definicija 1.2.12. *Neka je* $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ *težinski usmjereni graf i neka je* $\mathbb{A} \subseteq \mathbb{V}$ *podskup skupa vrhova.* Stupanj skupa $\mathbb{A}$*, u oznaci* $deg(\mathbb{A})$*, je zbroj težina svih bridova koji povezuju skup* $\mathbb{A}$ *i skup vrhova* $\mathbb{V}$*, odnosno stupanj povezanosti skupa* $\mathbb{A}$ *sa skupom vrhova* $\mathbb{V}$*:*

$$deg(\mathbb{A}) = links(\mathbb{A}, \mathbb{V}) = \sum_{a \in \mathbb{A}, v \in \mathbb{V}} w(a, v).$$

Definicija 1.2.13. *Neka je* $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ *težinski usmjereni graf i neka je* $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ *biparticija skupa vrhova* $\mathbb{V}$. Normalizirani rez biparticije $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$*, u oznaci* $Ncut(\mathbb{A}, \mathbb{B})$*, definiramo s:*

$$Ncut(\mathbb{A}, \mathbb{B}) = \frac{links(\mathbb{A}, \mathbb{B})}{deg(\mathbb{A})} + \frac{links(\mathbb{B}, \mathbb{A})}{deg(\mathbb{B})} = \frac{deg(\mathbb{A}) + deg(\mathbb{B})}{deg(\mathbb{A})\, deg(\mathbb{B})} links(\mathbb{A}, \mathbb{B}).$$

Primijetimo da normalizirani rez biparticije $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ možemo zapisati kao

$$Ncut(\mathbb{A}, \mathbb{B}) = \frac{links(\mathbb{A}, \mathbb{B})}{deg(\mathbb{A})} + \frac{links(\mathbb{B}, \mathbb{A})}{deg(\mathbb{B})} = \frac{links(\mathbb{A}, \mathbb{V} \setminus \mathbb{A})}{deg(\mathbb{A})} + \frac{links(\mathbb{B}, \mathbb{V} \setminus \mathbb{B})}{deg(\mathbb{B})},$$

pa možemo definiciju normaliziranog reza biparticije poopćiti za k-člane particije grafa.

Definicija 1.2.14. *Neka je* $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ *težinski usmjereni graf i neka je* $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ *k-člana particija skupa vrhova* $\mathbb{V}$. Normalizirani rez k-člane particije $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$*, u oznaci* $k\text{-}Ncut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k)$*, definiramo s:*

$$k\text{-}Ncut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \frac{1}{k} \sum_{l=1}^{k} \frac{links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V} \setminus \mathbb{V}_l)}{deg(\mathbb{V}_l)}.$$

Primijetimo da stupanj skupa $\mathbb{A}$ možemo zapisati kao

$$deg(\mathbb{A}) = \sum_{a\in\mathbb{A}, v\in\mathbb{V}} w(a,v) = \sum_{a\in\mathbb{A}} \sum_{v\in\mathbb{V}} w(a,v),$$

odnosno kao

$$deg(\mathbb{A}) = \sum_{a\in\mathbb{A}} vw(a), \quad \text{gdje je } vw(a) = \sum_{v\in\mathbb{V}} w(a,v).$$

Također, normalizirani rez k-člane particije $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ možemo zapisati kao

$$\begin{aligned} k\text{-}Ncut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) &= \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} \frac{links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}\setminus\mathbb{V}_l)}{deg(\mathbb{V}_l)} = \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} \frac{links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}) - links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}_l)}{deg(\mathbb{V}_l)} = \\ &= \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} \frac{1}{deg(\mathbb{V}_l)}\Big(\sum_{l'=1}^{k} links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}_{l}') - links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}_l)\Big) = \\ &= \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} \frac{1}{deg(\mathbb{V}_l)} \sum_{l'=1, l'\neq l}^{k} links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}_{l}') = \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} \sum_{l'=1, l'\neq l}^{k} \frac{links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}_{l}')}{deg(\mathbb{V}_l)}. \end{aligned}$$

Definirat ćemo težinski rez k-člane particije grafa kao poopćenje normaliziranog reza k-člane particije grafa.

Definicija 1.2.15. *Neka je* $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ *težinski usmjereni graf i neka je* $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ *biparticija skupa vrhova* $\mathbb{V}$. Težinski stupanj povezanosti skupa $\mathbb{A}$ sa skupom $\mathbb{B}$, *u oznaci* $wlinks(\mathbb{A}, \mathbb{B})$, *definiramo s:*

$$wlinks(\mathbb{A}, \mathbb{B}) = \sum_{a\in\mathbb{A}, b\in\mathbb{B}} rw(a)\, w(a,b),$$

gdje je $rw\colon \mathbb{V} \to \mathbb{R}_{>0}$ retčana težinska funkcija.

Definicija 1.2.16. *Neka je* $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ *težinski usmjereni graf i neka je* $\mathbb{A} \subseteq \mathbb{V}$ *podskup skupa vrhova.* Volumen skupa $\mathbb{A}$, *u oznaci* $vol(\mathbb{A})$, *definiramo s:*

$$vol(\mathbb{A}) = \sum_{a\in\mathbb{A}} vw(a),$$

gdje je $vw\colon \mathbb{V} \to \mathbb{R}_{>0}$ volumna težinska funkcija.

Definicija 1.2.17. *Neka je* $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ *težinski usmjereni graf i neka je* $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ *k-člana particija skupa vrhova* $\mathbb{V}$. Težinski rez k-člane particije $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$, *u oznaci* $k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k)$, *definiramo s:*

$$k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \sum_{l=1}^{k} \sum_{l'=1, l'\neq l}^{k} \frac{wlinks(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}_{l}')}{vol(\mathbb{V}_l)}.$$

Primjer 1.2.18. *Pogledajmo koliko iznosi normalizirani rez particije $\mathcal{F}_1^3 = \{\{1,2,3\},\{4,5\},\{6,7,8\}\}$ neusmjerenog grafa iz primjera 1.2.6 prikazanog na slici 1.6 te koliko iznosi težinski rez particije $\mathcal{F}_2^3 = \{\{1,2,3\},\{4,5\},\{6,7,8\}\}$ usmjerenog grafa iz primjera 1.2.6 prikazanog na slici 1.7.*

$$\begin{aligned}
3\text{-}Ncut(\mathcal{F}_1^3) &= \frac{1}{3}\Big(\frac{links(\{1,2,3\},\{4,5\})}{deg(\{1,2,3\})} + \frac{links(\{1,2,3\},\{6,7,8\})}{deg(\{1,2,3\})} + \\
&+ \frac{links(\{4,5\},\{1,2,3\})}{deg(\{4,5\})} + \frac{links(\{4,5\},\{6,7,8\})}{deg(\{4,5\})} + \\
&+ \frac{links(\{6,7,8\},\{1,2,3\})}{deg(\{6,7,8\})} + \frac{links(\{6,7,8\},\{4,5\})}{deg(\{6,7,8\})}\Big) = \\
&= \frac{1}{3}\Big(\frac{0.15+0}{0.52+0.27+0.39+0.15} + \frac{0.15+(0.5+0.14)}{0.57+0.15+0.5+0.14} + \\
&+ \frac{0+(0.5+0.14)}{0.61+0.61+0.37+0.5+0.14}\Big) = \\
&= \frac{1}{3}\Big(\frac{0.15}{1.33} + \frac{0.79}{1.36} + \frac{0.64}{2.23}\Big) \approx 0.327
\end{aligned}$$

Pri računanju težinskog reza ćemo uzeti da je retčana težinska funkcija rw konstantna i iznosi 1 *za svaki vrh, a za volumnu težinsku funkciju ćemo uzeti da je $vw(v) = deg(\{v\})$ pa će onda vrijediti $vol(\mathbb{A}) = deg(\mathbb{A})$.*

$$\begin{aligned}
3\text{-}Wcut(\mathcal{F}_2^3) &= \frac{wlinks(\{1,2,3\},\{4,5\})}{vol(\{1,2,3\})} + \frac{wlinks(\{1,2,3\},\{6,7,8\})}{vol(\{1,2,3\})} + \\
&+ \frac{wlinks(\{4,5\},\{1,2,3\})}{vol(\{4,5\})} + \frac{wlinks(\{4,5\},\{6,7,8\})}{vol(\{4,5\})} + \\
&+ \frac{wlinks(\{6,7,8\},\{1,2,3\})}{vol(\{6,7,8\})} + \frac{wlinks(\{6,7,8\},\{4,5\})}{vol(\{6,7,8\})} = \\
&= \frac{0.38+0}{0.38+0.38+0.61+0.51+0.51+0.38+0.38} + \\
&+ \frac{0.25+(0.38+0.15)}{0.47+0.76+0.25+0.38+0.15} + \\
&+ \frac{0+(0.38+0.07)}{0.5+0.38+0.25+0.38+0.38+0.62+0.38+0.07} = \\
&= \frac{0.38}{3.15} + \frac{0.78}{2.01} + \frac{0.45}{2.96} \approx 0.661
\end{aligned}$$

1.3 Teorija matrica

Definicije pojmova iz teorije matrica, odnosno linearne algebre koje koristimo u ovom potpoglavlju mogu se pronaći u [3], [5] i [6].

Definicija 1.3.1. *Neka je $n \in \mathbb{N}$ i neka je $A = \left[a_{i,j}\right] \in \mathbb{C}^{n\times n}$ matrica. Matrica A je* dijagonalna *ako vrijedi*

$$(\forall i, j \in \{1, \ldots, n\}) \quad i \neq j \implies a_{i,j} = 0.$$

Definicija 1.3.2. *Neka su $m, n \in \mathbb{N}$ i neka je $A = \left[a_{i,j}\right] \in \mathbb{C}^{m\times n}$ matrica.* Transponiranu matricu matrice *A, u oznaci $A^T \in \mathbb{C}^{n\times m}$, definiramo s:*

$$A^T = \left[a_{j,i}\right].$$

Definicija 1.3.3. *Neka je $n \in \mathbb{N}$ i neka je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ matrica. Matrica A je* simetrična *ako vrijedi*

$$A^T = A.$$

Definicija 1.3.4. *Neka je $n \in \mathbb{N}$ i neka je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ matrica. Matrica A je* ortogonalna *ako vrijedi*

$$AA^T = A^T A = I_n.$$

Definicija 1.3.5. *Neka su $m, n \in \mathbb{N}$ i neka je $A = \left[a_{i,j}\right] \in \mathbb{C}^{m\times n}$ matrica.* Hermitski adjungiranu matricu matrice *A, u oznaci $A^* \in \mathbb{C}^{n\times m}$, definiramo s:*

$$A^* = \left[\overline{a_{j,i}}\right].$$

Definicija 1.3.6. *Neka je $n \in \mathbb{N}$ i neka je $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ matrica. Matrica A je* hermitska *ako vrijedi*

$$A^* = A.$$

Definicija 1.3.7. *Neka je $n \in \mathbb{N}$ i neka je $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ matrica. Matrica A je* normalna *ako vrijedi*

$$AA^* = A^* A.$$

Definicija 1.3.8. *Neka je $n \in \mathbb{N}$ i neka je $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ matrica. Matrica A je* unitarna *ako vrijedi*

$$AA^* = A^* A = I_n.$$

Definicija 1.3.9. *Neka je $n \in \mathbb{N}$ i neka je $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ matrica. Neka su skalar $\lambda \in \mathbb{C}$ i vektor $\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$ proizvoljni. Skalar λ je* svojstvena vrijednost *matrice A s pridruženim* svojstvenim vektorom $\mathbf{x}$ *ako vrijedi*

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}.$$

Definicija 1.3.10. *Neka je* $n \in \mathbb{N}$ *i neka je* $A = \left[a_{i,j}\right] \in \mathbb{C}^{n \times n}$ *matrica.* Trag matrice *A, u oznaci* $tr(A)$*, definiramo s:*

$$tr(A) = \sum_{i=1}^{n} a_{i,i}.$$

Definicija 1.3.11. *Neka su* $m, n \in \mathbb{N}$ *i neka je* $A = \left[a_{i,j}\right] \in \mathbb{C}^{m \times n}$ *matrica.* Frobeniusovu normu matrice *A, u oznaci* $||A||_F$*, definiramo s:*

$$||A||_F = tr(A^*A)^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} \left|a_{i,j}\right|^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Poglavlje 2

Spektralni rezovi u težinskim neusmjerenim grafovima

U ovom poglavlju ćemo predstaviti dvije metode particijskog klasteriranja u *neusmjerenim* grafovima. Prvo ćemo pronaći optimalnu biparticiju neusmjerenog grafa minimizacijom normaliziranog reza biparticije, a zatim ćemo pokazati poopćenje ove metode koje pronalazi k-članu particiju neusmjerenog grafa. U obje metode glavna ideja je pronaći biparticiju, odnosno k-članu particiju za koju je normalizirani rez najmanji. Kako je broj svih k-članih particija n-članog skupa konačan[1], onda jedna jednostavna metoda za pronalazak k-člane particije s minimalnim normaliziranim rezom je iscrpno pretraživanje svih mogućih k-članih particija zadanog grafa, za svaku particiju izračunamo njezin normalizirani rez te odaberemo onu s najmanjim rezom. Očito je iscrpno pretraživanje vrlo neefikasna metoda, no pokazuje se da je ovaj diskretan problem optimizacije normaliziranog reza NP-težak problem, odnosno problem nije rješiv determinističkim algoritmom u polinomijalnom vremenu.[2] (Dokaz da je diskretna minimizacija normaliziranog reza NP-težak problem može se pronaći u [18].) Pristup koji koriste navedene metode spektralnog particijskog klasteriranja za minimizaciju normaliziranog reza je prvo rješavanje relaksiranog problema minimizacije koji daje neprekidno rješenje, a zatim njegovom diskretizacijom dobivamo rješenja za originalni problem diskretne minimizacije normaliziranog reza. Za rješavanje relaksiranog problema neprekidne minimizacije se koriste rezultati iz područja spektralne analize pa zato govorimo o spektralnom klasteriranju, a rezovi koje minimiziramo nazivamo spektralni rezovi. Obje metode spektralnog particijskog klasteriranja koje ćemo pokazati minimiziraju normalizirani rez, odnosno spektralni normalizirani rez.

[1] Broj k-članih particija n-članog skupa je upravo definicija Stirlingovog broja druge vrste kojeg označavamo s $\left\{ {n \atop k} \right\}$.

[2] Kada kažemo da NP-težak problem nije rješiv determinističkim algoritmom u polinomijalnom vremenu, onda zapravo pretpostavljamo da je $\mathcal{P} \neq \mathcal{NP}$. Preciznije bi bilo reći da je problem NP-težak ako bi postojanje determinističkog polinomijalnog algoritma za njegovo rješavanje značilo da je $\mathcal{P} = \mathcal{NP}$.

2.1 Spektralni normalizirani rez biparticije grafa

Metodu spektralnog biparticioniranja grafa koja je opisana u ovom potpoglavlju razvili su Shi i Malik u [18].

Neka je $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ težinski neusmjereni graf te $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ biparticija skupa vrhova $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$. Normalizirani rez biparticije $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ je:

$$Ncut(\mathbb{A}, \mathbb{B}) = \frac{links(\mathbb{A}, \mathbb{B})}{deg(\mathbb{A})} + \frac{links(\mathbb{B}, \mathbb{A})}{deg(\mathbb{B})},$$

pri čemu je

$$deg(\mathbb{A}) = links(\mathbb{A}, \mathbb{V}) \qquad \text{i} \qquad links(\mathbb{A}, \mathbb{B}) = \sum_{a \in \mathbb{A}, b \in \mathbb{B}} w(a, b).$$

Cilj nam je riješiti sljedeći problem minimizacije:

$$\begin{cases} Ncut(\mathbb{A}, \mathbb{B}) \to min, \\ \{\mathbb{A}, \mathbb{B}\} \text{ je biparticija od } \mathbb{V}. \end{cases} \tag{2.1}$$

Matrični zapis

Želimo normalizirani rez biparticije, odnosno stupanj povezanosti skupova i stupanj skupa definirati matrično kako bismo mogli primijeniti rezultate iz područja spektralne analize.

Definicija 2.1.1. *Neka je* $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ *težinski usmjereni graf pri čemu je skup vrhova* $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$.
Matrica susjedstva težinskog usmjerenog grafa $\mathbb{G}$ *je matrica*

$$W = \left[w(v_i, v_j) \right]_{i,j \in \{1,\ldots,n\}}.$$

Matrica stupnjeva težinskog usmjerenog grafa $\mathbb{G}$ *je matrica*

$$D = diag(W\mathbf{1}_n) = diag\left(deg(\{v_1\}),\ deg(\{v_2\}),\ \ldots,\ deg(\{v_n\}) \right).$$

Laplaceova matrica težinskog usmjerenog grafa $\mathbb{G}$ *je matrica*

$$L = D - W.$$

Normalizirana Laplaceova matrica težinskog usmjerenog grafa $\mathbb{G}$ *je matrica*

$$L_{norm} = D^{-\frac{1}{2}} L D^{-\frac{1}{2}} = I_n - D^{-\frac{1}{2}} W D^{-\frac{1}{2}}.[3]$$

[3] Matrica D je dijagonalna, što znači da je pozitivno semidefinitna pa onda postoji njezin drugi korijen $D^{\frac{1}{2}}$ koji je također dijagonalna matrica pa onda postoji njezin inverz, odnosno matrica $D^{-\frac{1}{2}}$.

Napomena 2.1.2. *U definiciji 2.1.1 smo matricu susjedstva, matricu stupnjeva, Laplaceovu matricu i normaliziranu Laplaceovu matricu definirali za težinski* usmjereni *graf jer ćemo iste pojmove koristiti i kod spektralnog klasteriranja* usmjerenog *grafa. A kako smo* neusmjereni *graf definirali kao specijalni slučaj* usmjerenog *grafa onda ove definicije matrice susjedstva, matrice stupnjeva, Laplaceove matrice i normalizirane Laplaceove matrice možemo koristi i u slučaju težinskog* neusmjerenog *grafa.*

Napomena 2.1.3. *Primijetimo da su matrica susjedstva, matrica stupnjeva, Laplaceova matrica i normalizirana Laplaceova matrica težinskog* neusmjerenog *grafa simetrične matrice. Za težinsku funkciju težinskog* neusmjerenog *grafa w vrijedi $w(u, v) = w(v, u)$ za sve bridove neusmjerenog grafa (u, v), pa je onda matrica susjedstva težinskog* neusmjerenog *grafa W simetrična. Matrica stupnjeva težinskog* neusmjerenog *grafa je dijagonalna pa je onda i simetrična. Laplaceova matrica težinskog* neusmjerenog *grafa $L = D - W$ je razlika dvije simetrične matrice pa je onda i ona simetrična, a normalizirana Laplaceova matrica težinskog* neusmjerenog *grafa $L_{norm} = D^{-\frac{1}{2}} L D^{-\frac{1}{2}}$ je umnožak simetrične matrice s dijagonalnim matricama* [4] *pa je onda i ona simetrična.*

Definicija 2.1.4. *Neka je $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ težinski usmjereni graf pri čemu je skup vrhova $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ i neka je $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ biparticija skupa $\mathbb{V}$.* Indikatorske vektore biparticije $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$*, s oznakama $\mathbf{x}_{\mathbb{A}}$ i $\mathbf{x}_{\mathbb{B}}$, definiramo s:*

$$\mathbf{x}_{\mathbb{A}} \in \mathbb{R}^n, \qquad \mathbf{x}_{\mathbb{A}i} = \chi_{\mathbb{A}}(v_i) = \begin{cases} 1, & v_i \in \mathbb{A}, \\ 0, & inače, \end{cases} \qquad i \in \{1, \dots, n\};$$

$$\mathbf{x}_{\mathbb{B}} \in \mathbb{R}^n, \qquad \mathbf{x}_{\mathbb{B}i} = \chi_{\mathbb{B}}(v_i) = \begin{cases} 1, & v_i \in \mathbb{B}, \\ 0, & inače, \end{cases} \qquad i \in \{1, \dots, n\}.$$

Stupanj skupa $\mathbb{A}$ možemo zapisati kao

$$\begin{aligned} deg(\mathbb{A}) = links(\mathbb{A}, \mathbb{V}) &= \sum_{a \in \mathbb{A}, v \in \mathbb{V}} w(a, v) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \mathbf{x}_{\mathbb{A}i}\, w(v_i, v_j) = \\ &= \sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_{\mathbb{A}i} \sum_{j=1}^{n} w(v_i, v_j) = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_{\mathbb{A}i}\, D_{i,i} = \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}}, \end{aligned}$$

analogno dobijemo

$$deg(\mathbb{B}) = \mathbf{x}_{\mathbb{B}}^T D \mathbf{x}_{\mathbb{B}}.$$

[4] Matrica D je dijagonalna, pa je i $D^{-\frac{1}{2}}$ dijagonalna matrica.

Primijetimo da je $links(\mathbb{A},\mathbb{A}) + links(\mathbb{A},\mathbb{B}) = links(\mathbb{A},\mathbb{V}) = deg(\mathbb{A})$ pa onda vrijedi

$$\begin{aligned}
links(\mathbb{A},\mathbb{B}) = deg(\mathbb{A}) - links(\mathbb{A},\mathbb{A}) = deg(\mathbb{A}) - \sum_{a\in\mathbb{A},a'\in\mathbb{A}} w(a,a') = \\
= deg(\mathbb{A}) - \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \mathbf{x}_{\mathbb{A}i}\, w(v_i,v_j)\, \mathbf{x}_{\mathbb{A}j} = \\
= \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T W\mathbf{x}_{\mathbb{A}} = \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T (D-W)\mathbf{x}_{\mathbb{A}} = \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T L\mathbf{x}_{\mathbb{A}},
\end{aligned}$$

analogno dobijemo

$$links(\mathbb{B},\mathbb{A}) = \mathbf{x}_{\mathbb{B}}^T L\mathbf{x}_{\mathbb{B}}.$$

Normalizirani rez biparticije $\{\mathbb{A},\mathbb{B}\}$ možemo zapisati kao

$$Ncut(\mathbb{A},\mathbb{B}) = \frac{links(\mathbb{A},\mathbb{B})}{deg(\mathbb{A})} + \frac{links(\mathbb{B},\mathbb{A})}{deg(\mathbb{B})} = \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T L\mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}}} + \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{B}}^T L\mathbf{x}_{\mathbb{B}}}{\mathbf{x}_{\mathbb{B}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{B}}}.$$

Primijetimo da je

$$\begin{aligned}
\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}} + \mathbf{x}_{\mathbb{B}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{B}} &= deg(\mathbb{A}) + deg(\mathbb{B}) = links(\mathbb{A},\mathbb{V}) + links(\mathbb{B},\mathbb{V}) = \\
&= links(\mathbb{V},\mathbb{V}) = deg(\mathbb{V}) = \mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n,
\end{aligned}$$

odnosno vrijedi

$$\frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n} + \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{B}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{B}}}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n} = 1.$$

Označimo s

$$\alpha = \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n}, \tag{2.2}$$

tada vrijedi

$$1-\alpha = 1 - \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n} = \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{B}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{B}}}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n},$$

$$\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}} = \alpha \mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n, \qquad \mathbf{x}_{\mathbb{B}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{B}} = (1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n,$$

$$\begin{aligned}
Ncut(\mathbb{A},\mathbb{B}) &= \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T L\mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}}} + \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{B}}^T L\mathbf{x}_{\mathbb{B}}}{\mathbf{x}_{\mathbb{B}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{B}}} = \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T L\mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\alpha\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n} + \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{B}}^T L\mathbf{x}_{\mathbb{B}}}{(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n} = \\
&= \frac{(1-\alpha)\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T L\mathbf{x}_{\mathbb{A}} + \alpha\mathbf{x}_{\mathbb{B}}^T L\mathbf{x}_{\mathbb{B}}}{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n}.
\end{aligned}$$

Kako je $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ biparticija onda je $\chi_{\mathbb{A}}(v_i) + \chi_{\mathbb{B}}(v_i) = 1$ za svaki $i \in \{1, \dots, n\}$, odnosno vrijedi $\mathbf{x}_{\mathbb{A}} + \mathbf{x}_{\mathbb{B}} = \mathbf{1}_n$ pa normalizirani rez biparticije $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ možemo zapisati kao

$$\begin{aligned}
Ncut(\mathbb{A}, \mathbb{B}) &= \frac{(1-\alpha)\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T L \mathbf{x}_{\mathbb{A}} + \alpha \mathbf{x}_{\mathbb{B}}^T L \mathbf{x}_{\mathbb{B}}}{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} = \frac{(1-\alpha)\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T L \mathbf{x}_{\mathbb{A}} + \alpha(\mathbf{1}_n - \mathbf{x}_{\mathbb{A}})^T L (\mathbf{1}_n - \mathbf{x}_{\mathbb{A}})}{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} = \\
&= \frac{(1-\alpha)\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T L \mathbf{x}_{\mathbb{A}} + \alpha \mathbf{1}_n^T L \mathbf{1}_n - \alpha \mathbf{1}_n^T L \mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T L \mathbf{1}_n + \alpha \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T L \mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} = \\
&= \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T L \mathbf{x}_{\mathbb{A}} + \alpha \mathbf{1}_n^T L \mathbf{1}_n - \alpha \mathbf{1}_n^T L \mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T L \mathbf{1}_n}{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} = \\
&= \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T L \mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha \mathbf{1}_n^T L \mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T L \alpha \mathbf{1}_n + \alpha \mathbf{1}_n^T L \alpha \mathbf{1}_n - \alpha \mathbf{1}_n^T L \alpha \mathbf{1}_n + \alpha \mathbf{1}_n^T L \mathbf{1}_n}{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} = \\
&= \frac{(\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T - \alpha \mathbf{1}_n^T) L \mathbf{x}_{\mathbb{A}} - (\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T - \alpha \mathbf{1}_n^T) L \alpha \mathbf{1}_n + \alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T L \mathbf{1}_n}{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} = \\
&= \frac{(\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T - \alpha \mathbf{1}_n^T) L (\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha \mathbf{1}_n)}{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} + \frac{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T L \mathbf{1}_n}{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} = \\
&= \frac{(\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha \mathbf{1}_n)^T L (\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha \mathbf{1}_n)}{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} + \frac{\mathbf{1}_n^T L \mathbf{1}_n}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n}.
\end{aligned}$$

Kako je $D = diag(W\mathbf{1}_n)$ onda je

$$D\mathbf{1}_n = W\mathbf{1}_n, \tag{2.3}$$

pa je

$$\frac{\mathbf{1}_n^T L \mathbf{1}_n}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} = \frac{\mathbf{1}_n^T (D - W) \mathbf{1}_n}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} = \frac{\mathbf{1}_n^T (D\mathbf{1}_n - W\mathbf{1}_n)}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} = \frac{\mathbf{1}_n^T \mathbf{0}_n}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} = 0,$$

onda vrijedi

$$Ncut(\mathbb{A}, \mathbb{B}) = \frac{(\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha \mathbf{1}_n)^T L (\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha \mathbf{1}_n)}{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} + \frac{\mathbf{1}_n^T L \mathbf{1}_n}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} = \frac{(\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha \mathbf{1}_n)^T L (\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha \mathbf{1}_n)}{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n}. \tag{2.4}$$

Definirajmo funkciju $\xi \colon \{0, 1\}^n \to \mathbb{R}$ s

$$\xi(\mathbf{x}_{\mathbb{A}}) = \frac{(\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha \mathbf{1}_n)^T L (\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha \mathbf{1}_n)}{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n}. \tag{2.5}$$

Problem minimizacije normaliziranog reza biparticije $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ iz 2.1 ekvivalentan problemu minimizacije funkcije ξ:

$$\begin{cases} \xi(\mathbf{x}_{\mathbb{A}}) \to min, \\ \mathbf{x}_{\mathbb{A}} \in \{0,1\}^n, \\ \mathbf{x}_{\mathbb{A}} \neq \mathbf{0}_n, \\ \mathbf{x}_{\mathbb{A}} \neq \mathbf{1}_n. \end{cases}{}^{5} \tag{2.6}$$

Označimo s

$$\mathbf{y} = \mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha \mathbf{1}_n, \tag{2.7}$$

pa primijetimo da je

$$\begin{aligned} \mathbf{y}^T D\mathbf{y} &= (\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha\mathbf{1}_n)^T D(\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha\mathbf{1}_n) = (\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha\mathbf{1}_n)^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - (\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha\mathbf{1}_n)^T D\alpha\mathbf{1}_n) = \\ &= \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha\mathbf{1}_n^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha(\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{1}_n - \alpha\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n) = \\ &= \alpha\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n - \alpha\mathbf{1}_n^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha(\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{1}_n - \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n}\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n) = \\ &= \alpha\mathbf{1}_n^T D(\mathbf{1}_n - \mathbf{x}_{\mathbb{A}}) - \alpha\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D(\mathbf{1}_n - \mathbf{x}_{\mathbb{A}}) = \alpha\mathbf{1}_n^T D\mathbf{x}_{\mathbb{B}} - \alpha\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{B}} = \\ &= \alpha(\mathbf{1}_n^T - \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T)D\mathbf{x}_{\mathbb{B}} = \alpha(\mathbf{1}_n - \mathbf{x}_{\mathbb{A}})^T D\mathbf{x}_{\mathbb{B}} = \alpha\mathbf{x}_{\mathbb{B}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{B}} = \alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n. \end{aligned}$$

Time smo dobili

$$\xi(\mathbf{x}_{\mathbb{A}}) = \frac{(\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha\mathbf{1}_n)^T L(\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha\mathbf{1}_n)}{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n} = \frac{\mathbf{y}^T L\mathbf{y}}{\mathbf{y}^T D\mathbf{y}}. \tag{2.8}$$

Definirajmo funkciju $\rho\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ s

$$\rho(\mathbf{y}) = \frac{\mathbf{y}^T L\mathbf{y}}{\mathbf{y}^T D\mathbf{y}}. \tag{2.9}$$

Za sljedeći problem minimizacije funkcije ρ ćemo pokazati da je ekvivalentan problemu minimizacije funkcije ξ iz 2.6:

$$\begin{cases} \rho(\mathbf{y}) \to min, \\ \mathbf{y} \in \{-\beta, 1-\beta\}^n, \\ \mathbf{y} \neq \mathbf{0}_n, \\ \mathbf{y}^T D\mathbf{1}_n = 0, \\ \mathbf{y}^T D\mathbf{y} = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n. \end{cases} \tag{2.10}$$

[5] Uvjeti $\mathbf{x}_{\mathbb{A}} \neq \mathbf{0}_n$ i $\mathbf{x}_{\mathbb{A}} \neq \mathbf{1}_n$ u problemu minimizacije funkcije ξ iz 2.6 su ekvivalentni uvjetu da su blokovi particije neprazni, odnosno ekvivalentni su uvjetima $\mathbb{A} \neq \emptyset$ i $\mathbb{B} \neq \emptyset$.

Propozicija 2.1.5. *Problem minimizacije funkcije ξ (definirane u 2.5) iz 2.6 ekvivalentan je problemu minimizacije funkcije ρ (definirane u 2.9) iz 2.10.*

Dokaz. Primijetimo da je problem minimizacije funkcije ξ iz 2.6 ekvivalentan sljedećem problemu minimizacije funkcije ρ:

$$\begin{cases} \rho(\mathbf{y}) \to min, \\ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n, \\ (\exists \mathbf{x}_{\mathbb{A}} \in \{0,1\}^n \setminus \{\mathbf{0}_n, \mathbf{1}_n\}) \ \mathbf{y} = \mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} \mathbf{1}_n. \end{cases} \tag{2.11}$$

Preostaje pokazati da su uvjeti u problemima minimizacije funkcije ρ iz 2.10 i 2.11 ekvivalentni.

Prvo ćemo dokazati da ako $\mathbf{y}$ zadovoljava uvjete iz 2.11 onda zadovoljava i uvjete iz 2.10. Neka je $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ i neka je $\mathbf{x}_{\mathbb{A}} \in \{0,1\}^n \setminus \{\mathbf{0}_n, \mathbf{1}_n\}$ tako da vrijedi $\mathbf{y} = \mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} \mathbf{1}_n$. Iz uvjeta $\mathbf{x}_{\mathbb{A}} \notin \{\mathbf{0}_n, \mathbf{1}_n\}$ slijedi:

$$\mathbf{x}_{\mathbb{A}} \neq \mathbf{0}_n \implies \mathbf{y} \neq \mathbf{0}_n - \frac{\mathbf{0}_n^T D \mathbf{0}_n}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} \mathbf{1}_n \implies \mathbf{y} \neq \mathbf{0}_n,$$
$$\mathbf{x}_{\mathbb{A}} \neq \mathbf{1}_n \implies \mathbf{y} \neq \mathbf{1}_n - \frac{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} \mathbf{1}_n \implies \mathbf{y} \neq \mathbf{1}_n - \mathbf{1}_n \implies \mathbf{y} \neq \mathbf{0}_n.$$

Uzmimo da je $\beta = \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n}$, onda je $y = \mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \beta \mathbf{1}_n$ pa vrijedi $\mathbf{y} \in \{-\beta, 1-\beta\}^n$. Uvrštavanjem izraza za $\mathbf{y}$ u izraze $\mathbf{y}^T D \mathbf{1}_n$ i $\mathbf{y}^T D \mathbf{y}$ dobivamo

$$\begin{aligned} \mathbf{y}^T D \mathbf{1}_n &= (\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \beta \mathbf{1}_n)^T D \mathbf{1}_n = \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D \mathbf{1}_n - \beta \mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n = \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D \mathbf{1}_n - \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} \mathbf{1}_n^T D \mathbf{1} \\ &= \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D \mathbf{1}_n - \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}} = \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D (\mathbf{1}_n - \mathbf{x}_{\mathbb{A}}) = 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{y}^T D \mathbf{y} &= \mathbf{y}^T D (\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \beta \mathbf{1}_n) = \mathbf{y}^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \mathbf{y}^T D \beta \mathbf{1}_n = (\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \beta \mathbf{1}_n)^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \beta \mathbf{y}^T D \mathbf{1}_n \\ &= \mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \beta \mathbf{1}_n^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}} = \beta \mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n - \beta \mathbf{1}_n^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}} = \beta (\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n - \mathbf{1}_n^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}}) \\ &= \beta \frac{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n - \mathbf{1}_n^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n} \mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n = \beta \left(1 - \frac{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n}\right) \mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n \\ &= \beta \left(1 - \frac{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}} - (\mathbf{1}_n - \mathbf{x}_{\mathbb{A}})^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n}\right) \mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n = \beta \left(1 - \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D \mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n}\right) \mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n \\ &= \beta (1 - \beta) \mathbf{1}_n^T D \mathbf{1}_n, \end{aligned}$$

čime smo pokazali da su zadovoljeni svi uvjeti iz 2.10.

Sada ćemo dokazati suprotan smjer, odnosno da ako $\mathbf{y}$ zadovoljava uvjete iz 2.10 onda zadovoljava i uvjete iz 2.11. Neka je $\mathbf{y} \in \{-\beta, 1-\beta\}^n$ tako da vrijedi $\mathbf{y} \neq \mathbf{0}_n$, $\mathbf{y}^T D\mathbf{1}_n = 0$ i $\mathbf{y}^T D\mathbf{y} = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n$. Očito vrijedi $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$. Uzmimo da je $\mathbf{x}_{\mathbb{A}} = \mathbf{y} + \beta\mathbf{1}_n$, onda vrijedi $\mathbf{x}_{\mathbb{A}} \in \{0,1\}^n$. Iz uvjeta $\mathbf{y} \neq \mathbf{0}_n$ slijedi $\mathbf{x}_{\mathbb{A}} \neq \beta\mathbf{1}_n$ iz čega slijedi uvjet $\mathbf{x}_{\mathbb{A}} \notin \{\mathbf{0}_n, \mathbf{1}_n\}$. Uvrštavanjem izraza za $\mathbf{x}_{\mathbb{A}}$ u izraz $\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n}\mathbf{1}_n$ dobivamo

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n}\mathbf{1}_n &= \mathbf{y} + \beta\mathbf{1}_n - \frac{(\mathbf{y}+\beta\mathbf{1}_n)^T D(\mathbf{y}+\beta\mathbf{1}_n)}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n}\mathbf{1}_n \\
&= \mathbf{y} + (\beta - \frac{(\mathbf{y}+\beta\mathbf{1}_n)^T D(\mathbf{y}+\beta\mathbf{1}_n)}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n})\mathbf{1}_n \\
&= \mathbf{y} + (\beta - \frac{\mathbf{y}^T D\mathbf{y} + \mathbf{y}^T D\beta\mathbf{1}_n + \beta\mathbf{1}_n^T D\mathbf{y} + \beta\mathbf{1}_n^T D\beta\mathbf{1}_n}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n})\mathbf{1}_n \\
&= \mathbf{y} + (\beta - \frac{\mathbf{y}^T D\mathbf{y} + \beta\mathbf{y}^T D\mathbf{1}_n + \beta(\mathbf{y}^T D\mathbf{1}_n)^T + \beta^2\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n})\mathbf{1}_n \\
&= \mathbf{y} + (\beta - \frac{\mathbf{y}^T D\mathbf{y} + \beta^2\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n})\mathbf{1}_n \\
&= \mathbf{y} + (\beta - \frac{\beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n + \beta^2\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n})\mathbf{1}_n \\
&= \mathbf{y} + (\beta - \frac{\beta(1-\beta+\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n})\mathbf{1}_n = \mathbf{y} + (\beta-\beta)\mathbf{1}_n = \mathbf{y},
\end{aligned}
$$

čime smo pokazali da su zadovoljeni svi uvjeti iz 2.11. □

Označimo s

$$\mathbf{z} = D^{\frac{1}{2}}\mathbf{y}, \tag{2.12}$$

onda je

$$\mathbf{y} = D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z},$$

pa $\rho(\mathbf{y})$ možemo zapisati kao

$$\rho(\mathbf{y}) = \frac{\mathbf{y}^T L\mathbf{y}}{\mathbf{y}^T D\mathbf{y}} = \frac{(D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z})^T LD^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z}}{(D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z})^T DD^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z}} = \frac{\mathbf{z}^T D^{-\frac{1}{2}}LD^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z}}{\mathbf{z}^T D^{-\frac{1}{2}}DD^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z}} = \frac{\mathbf{z}^T D^{-\frac{1}{2}}LD^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z}}{\mathbf{z}^T\mathbf{z}} = \frac{\mathbf{z}^T L_{norm}\mathbf{z}}{\mathbf{z}^T\mathbf{z}}. \tag{2.13}$$

Definirajmo funkciju $\sigma \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ s

$$\sigma(\mathbf{z}) = \frac{\mathbf{z}^T L_{norm}\mathbf{z}}{\mathbf{z}^T\mathbf{z}}. \tag{2.14}$$

Promotrimo uvjete u problemu minimizacije funkcije ρ iz 2.10

$$\begin{cases} \mathbf{y} \in \{-\beta, 1-\beta\}^n, \\ \mathbf{y} \neq \mathbf{0}_n, \\ \mathbf{y}^T D\mathbf{1}_n = 0, \\ \mathbf{y}^T D\mathbf{y} = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n. \end{cases}$$

Kako je

$$\mathbf{y}^T D\mathbf{1}_n = (D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z})^T D\mathbf{1}_n = \mathbf{z}^T D^{-\frac{1}{2}} D\mathbf{1}_n = \mathbf{z}^T D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n,$$
$$\mathbf{y}^T D\mathbf{y} = (D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z})^T DD^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z} = \mathbf{z}^T D^{-\frac{1}{2}} DD^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z} = \mathbf{z}^T\mathbf{z},$$

onda vrijede sljedeće ekvivalencije

$$\mathbf{y} \in \{-\beta, 1-\beta\}^n \iff D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z} \in \{-\beta, 1-\beta\}^n, \tag{2.15}$$
$$\mathbf{y} \neq \mathbf{0}_n \iff D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z} \neq \mathbf{0}_n \iff \mathbf{z} \neq \mathbf{0}_n, \tag{2.16}$$
$$\mathbf{y}^T D\mathbf{1}_n = 0 \iff \mathbf{z}^T D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n = 0, \tag{2.17}$$
$$\mathbf{y}^T D\mathbf{y} = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n \iff \mathbf{z}^T\mathbf{z} = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n, \tag{2.18}$$

pa je problem minimizacije funkcije ρ iz 2.10 ekvivalentan problemu minimizacije funkcije σ:

$$\begin{cases} \sigma(\mathbf{z}) \to min, \\ D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z} \in \{-\beta, 1-\beta\}^n, \\ \mathbf{z} \neq \mathbf{0}_n, \\ \mathbf{z}^T D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n = 0, \\ \mathbf{z}^T\mathbf{z} = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n. \end{cases} \tag{2.19}$$

Minimizacija Rayleighovog kvocijenta

Pokazat ćemo da se problem minimizacije funkcije σ iz 2.19 svodi na problem minimizacije Rayleighovog kvocijenta čije rješenje će dati Rayleigh-Ritzov teorem. Definicije i tvrdnje vezane za minimizaciju Rayleighovog kvocijenta preuzete su iz [5] i [6].

Definicija 2.1.6. *Neka je vektor* $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$ *pri čemu je* $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}_n$ *i neka je* $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ *matrica.* Rayleighov kvocijent vektora $\mathbf{x}$ za matricu A *, u oznaci* $R_A(\mathbf{x})$*, definiramo s:*

$$R_A(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}^* A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^*\mathbf{x}}.$$

Primijetimo da za funkciju $\sigma\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, definiranu u 2.14, jer joj je domena $\mathbb{R}^n$, vrijedi

$$\sigma(\mathbf{z}) = \frac{\mathbf{z}^T L_{norm}\mathbf{z}}{\mathbf{z}^T\mathbf{z}} = \frac{\mathbf{z}^* L_{norm}\mathbf{z}}{\mathbf{z}^*\mathbf{z}} = R_{L_{norm}}(\mathbf{z}), \tag{2.20}$$

odnosno izraz za $\sigma(\mathbf{z})$ je u formi Rayleighovog kvocijenta za matricu L_{norm}. Promotrimo uvjete u problemu minimizacije funkcije σ iz 2.19. Uvjet $D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z} \in \{-\beta, 1-\beta\}^n$ osigurava da konačno rješenje bude diskretno, odnosno da odgovarajući vektor $\mathbf{x}_{\mathbb{A}}$ koji minimizira funkciju ξ bude indikatorski vektor. Rayleigh-Ritzov teorem daje neprekidno realno rješenje problema minimizacije Rayleighovog kvocijenta pa ćemo uvjet $D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z} \in \{-\beta, 1-\beta\}^n$ zanemariti kako bismo mogli primijeniti Rayleigh-Ritzov teorem na relaksirani problem minimizacije. Primijetimo da uvjet $\mathbf{z}^T\mathbf{z} = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n$ zapravo govori kolika treba biti norma vektora $\mathbf{z}$.

Propozicija 2.1.7. *Neka je vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$ pri čemu je $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}_n$, neka je $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ matrica i neka je $\gamma \in \mathbb{R}$. Tada vrijedi*

$$R_A(\gamma\mathbf{x}) = R_A(\mathbf{x}).$$

Dokaz.

$$R_A(\gamma\mathbf{x}) = \frac{(\gamma\mathbf{x})^* A\gamma\mathbf{x}}{(\gamma\mathbf{x})^*\gamma\mathbf{x}} = \frac{\gamma\mathbf{x}^* A\gamma\mathbf{x}}{\gamma\mathbf{x}^*\gamma\mathbf{x}} = \frac{\gamma^2\mathbf{x}^* A\mathbf{x}}{\gamma^2\mathbf{x}^*\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}^* A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^*\mathbf{x}} = R_A(\mathbf{x}).$$

□

Iz propozicije 2.1.7 slijedi da uvijek možemo odabrati normu vektora koji minimizira Rayleighov kvocijent i zadovoljiti uvjet $\mathbf{z}^T\mathbf{z} = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n$. Time dobivamo relaksirani problem minimizacije Rayleighovog kvocijenta za matricu L_{norm}:

$$\begin{cases} R_{L_{norm}}(\mathbf{z}) \to min, \\ \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}_n\}, \\ \mathbf{z}^T D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n = 0. \end{cases} \tag{2.21}$$

U dokazu Rayleigh-Ritzovog teorema koristit ćemo spektralni teorem čiju verziju za normalne matrice ovdje navodimo bez dokaza.

Teorem 2.1.8. *(Spektralni teorem za normalne matrice)*
Neka je matrica $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ normalna sa svojstvenim vrijednostima $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$. Neka je $\Lambda = diag(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$. Onda postoji unitarna matrica $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ tako da vrijedi

$$A = U\Lambda U^*.$$

Dokaz spektralnog teorema za normalne matrice se može pronaći u [6]. Hermitske matrice su specijalni slučaj normalnih matrica pa onda spektralni teorem vrijedi i za hermitske matrice pri čemu za hermitske matrice dodatno vrijedi i da imaju realne svojstvene vrijednosti.

Teorem 2.1.9. *(Spektralni teorem za hermitske matrice)*
Neka je matrica $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ hermitska sa svojstvenim vrijednostima $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$. Neka je $\Lambda = diag(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$. Tada vrijedi:

a) Postoji unitarna matrica $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ tako da vrijedi $A = U\Lambda U^*$,

b) $\lambda_1, \ldots, \lambda_n \in \mathbb{R}$.

Dokaz. Ovaj teorem je posljedica spektralnog teorema za normalne matrice 2.1.8 jer je svaka hermitska matrica ujedno i normalna. Naime, za hermitsku matricu A po definiciji vrijedi $A = A^*$ pa onda slijedi $AA^* = AA = A^*A$, odnosno matrica A je normalna. Tvrdnja a) je direktna posljedica spektralnog teorema za normalne matrice 2.1.8. Tvrdnja b) slijedi iz tvrdnje a) i činjenice da je Λ dijagonalna hermitska matrica. Naime, tvrdnja a) nam daje unitarnu dijagonalizaciju matrice $A = U\Lambda U^*$, a kako je matrica A hermitska onda vrijedi

$$A = A^* \implies U\Lambda U^* = (U\Lambda U^*)^* \implies U\Lambda U^* = U\Lambda^* U^* \implies \Lambda = \Lambda^*,$$

odnosno vrijedi da je Λ hermitska matrica. Kako je Λ dijagonalna hermitska matrica onda je $\lambda_i = \overline{\lambda_i}$ za $i \in \{1, \ldots, n\}$, odnosno vrijedi $\lambda_1, \ldots, \lambda_n \in \mathbb{R}$. □

Rayleigh-Ritzov teorem nam daje minimalnu i maksimalnu vrijednost Rayleighovog kvocijenta. Nas će zanimati minimizacija Rayleighovog kvocijenta uz neke dodatne uvjete.

Teorem 2.1.10. *(Rayleigh-Ritz)*
Neka je matrica $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ hermitska sa svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$ poredanim po veličini. Tada vrijedi:

a)
$$\min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \mathbb{C}^n} R_A(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \mathbb{C}^n} \frac{\mathbf{x}^* A \mathbf{x}}{\mathbf{x}^* \mathbf{x}} = \lambda_1, \tag{2.22}$$

b)
$$\max_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \mathbb{C}^n} R_A(\mathbf{x}) = \max_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \mathbb{C}^n} \frac{\mathbf{x}^* A \mathbf{x}}{\mathbf{x}^* \mathbf{x}} = \lambda_n. \tag{2.23}$$

Dokaz. Kako je matrica A hermitska onda iz spektralnog teorema za hermitske matrice 2.1.9 slijedi da postoji unitarna matrica $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ tako da vrijedi $A = U\Lambda U^*$ pri čemu je $\Lambda = diag(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ i $\lambda_1, \ldots, \lambda_n \in \mathbb{R}$. Primijetimo da nam upravo činjenica da su svojstvene vrijednosti matrice A realni brojevi omogućava da ih poredamo po veličini. Za svaki $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$ vrijedi

$$\mathbf{x}^* A \mathbf{x} = \mathbf{x}^* U\Lambda U^* \mathbf{x} = (U^*\mathbf{x})^* \Lambda U^* \mathbf{x} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left|(U^*\mathbf{x})_i\right|^2,$$

pa je

$$\mathbf{x}^* A\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left|(U^*\mathbf{x})_i\right|^2 \geq \sum_{i=1}^{n} \lambda_1 \left|(U^*\mathbf{x})_i\right|^2 = \lambda_1 \sum_{i=1}^{n} \left|(U^*\mathbf{x})_i\right|^2 .$$

Kako je matrica U unitarna onda vrijedi

$$\sum_{i=1}^{n} \left|(U^*\mathbf{x})_i\right|^2 = (U^*\mathbf{x})^* U^*\mathbf{x} = \mathbf{x}^* U U^* \mathbf{x} = \mathbf{x}^* I_n \mathbf{x} = \mathbf{x}^*\mathbf{x},$$

pa je

$$\mathbf{x}^* A\mathbf{x} \geq \lambda_1 \sum_{i=1}^{n} \left|(U^*\mathbf{x})_i\right|^2 = \lambda_1 \mathbf{x}^*\mathbf{x}.$$

Također vrijedi

$$\mathbf{x}^* A\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left|(U^*\mathbf{x})_i\right|^2 \leq \sum_{i=1}^{n} \lambda_n \left|(U^*\mathbf{x})_i\right|^2 = \lambda_n \sum_{i=1}^{n} \left|(U^*\mathbf{x})_i\right|^2 = \lambda_n \mathbf{x}^*\mathbf{x},$$

pa onda imamo

$$\lambda_1 \mathbf{x}^*\mathbf{x} \leq \mathbf{x}^* A\mathbf{x} \leq \lambda_n \mathbf{x}^*\mathbf{x},$$

odnosno za $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}_n$ vrijedi

$$\frac{\mathbf{x}^* A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^*\mathbf{x}} \geq \lambda_1 \quad \text{i} \quad \frac{\mathbf{x}^* A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^*\mathbf{x}} \leq \lambda_n. \tag{2.24}$$

Neka su $\mathbf{u}_1$ i $\mathbf{u}_n$ svojstveni vektori redom pridruženi svojstvenim vrijednostima λ_1 i λ_n onda je

$$\mathbf{u}_1^* A\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_1^* \lambda_1 \mathbf{u}_1 = \lambda_1 \mathbf{u}_1^* \mathbf{u}_1 \quad \text{i} \quad \mathbf{u}_n^* A\mathbf{u}_n = \mathbf{u}_n^* \lambda_n \mathbf{u}_n = \lambda_n \mathbf{u}_n^* \mathbf{u}_n,$$

odnosno vrijedi

$$\frac{\mathbf{u}_1^* A\mathbf{u}_1}{\mathbf{u}_1^*\mathbf{u}_1} = \lambda_1 \quad \text{i} \quad \frac{\mathbf{u}_n^* A\mathbf{u}_n}{\mathbf{u}_n^*\mathbf{u}_n} = \lambda_n, \tag{2.25}$$

iz čega slijedi da se jednakost u izrazima iz 2.24 postiže za svojstvene vektore pridružene svojstvenim vrijednostima λ_1 i λ_n, pa onda kombiniranjem nejednakosti iz 2.24 i jednakosti iz 2.25 dobijemo tražene tvrdnje teorema:

$$\min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \mathbb{C}^n} \frac{\mathbf{x}^* A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^*\mathbf{x}} = \lambda_1 \quad \text{i} \quad \max_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \mathbb{C}^n} \frac{\mathbf{x}^* A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^*\mathbf{x}} = \lambda_n.$$

□

Rayleigh-Ritzov teorem daje varijacijsku karakterizaciju najmanje i najveće svojstvene vrijednosti simetrične matrice, no teorem možemo generalizirati i za ostale svojstvene vrijednosti što pokazuje sljedeći korolar.

Korolar 2.1.11. *Neka je matrica $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ hermitska sa svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \le \lambda_2 \le \ldots \le \lambda_n$ poredanim po veličini. Neka su $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ svojstveni vektori matrice A redom pridruženi svojstvenim vrijednostima $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$. Tada vrijedi:*

a)

$$\min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_{i-1}\}^{\perp}} R_A(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_{i-1}\}^{\perp}} \frac{\mathbf{x}^* A \mathbf{x}}{\mathbf{x}^*\mathbf{x}} = \lambda_i, \quad \textit{za } i \in \{2, \ldots, n\}, \tag{2.26}$$

b)

$$\max_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \{\mathbf{u}_{n-1},\ldots,\mathbf{u}_{n-i+1}\}^{\perp}} R_A(\mathbf{x}) = \max_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \{\mathbf{u}_{n-1},\ldots,\mathbf{u}_{n-i+1}\}^{\perp}} \frac{\mathbf{x}^* A \mathbf{x}}{\mathbf{x}^*\mathbf{x}} = \lambda_{n-i}, \quad \textit{za } i \in \{1, \ldots, n-1\}. \tag{2.27}$$

Dokaz. Pokazat ćemo da tvrdnja a) vrijedi za $i = 2$, a analognim postupkom se dokazuju slučajevi za $i \in \{3, \ldots, n\}$. Kao i u dokazu Rayleigh-Ritzovog teorema 2.1.10 uzmemo spektralnu dijagonalizaciju matrice $A = U\Lambda U^*$ pri čemu je U unitarna, $\Lambda = diag(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ i $\lambda_1, \ldots, \lambda_n \in \mathbb{R}$. Označimo stupce matrice U sa $\widetilde{\mathbf{u}}_1, \widetilde{\mathbf{u}}_2, \ldots, \widetilde{\mathbf{u}}_n$ te primijetimo da zbog unitarnosti matrice U vrijedi

$$AU = U\Lambda U^* U = U\Lambda I_n = U\Lambda,$$

iz čega slijedi

$$A\widetilde{\mathbf{u}}_i = \lambda_i \widetilde{\mathbf{u}}_1 \quad \text{za } i \in \{1, \ldots, n\},$$

odnosno vektori $\widetilde{\mathbf{u}}_1, \widetilde{\mathbf{u}}_2, \ldots, \widetilde{\mathbf{u}}_n$ su svojstveni vektori matrice A redom pridruženi svojstvenim vrijednostima $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$, odnosno vrijedi $\widetilde{\mathbf{u}}_i = \mathbf{u}_i$ za $i \in \{1, \ldots, n\}$.

Neka je $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$ tako da vrijedi $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}_n$ i $\mathbf{x} \perp \mathbf{u}_1$. Tada vrijedi

$$\mathbf{x}^* A \mathbf{x} = \mathbf{x}^* U\Lambda U^* \mathbf{x} = (U^*\mathbf{x})^* \Lambda U^* \mathbf{x} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left|\mathbf{u}_i^* \mathbf{x}\right|^2 .$$

Kako su vektori $\mathbf{x}$ i $\mathbf{u}_1$ ortogonalni onda vrijedi $\mathbf{u}_1^T \mathbf{x} = 0$ onda vrijedi

$$\mathbf{x}^* A \mathbf{x} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left|\mathbf{u}_i^* \mathbf{x}\right|^2 = \lambda_1 \left|\mathbf{u}_1^* \mathbf{x}\right|^2 + \sum_{i=2}^{n} \lambda_i \left|\mathbf{u}_i^* \mathbf{x}\right|^2 = \sum_{i=2}^{n} \lambda_i \left|\mathbf{u}_i^* \mathbf{x}\right|^2 ,$$

pa je

$$\mathbf{x}^* A \mathbf{x} = \sum_{i=2}^{n} \lambda_i \left|\mathbf{u}_i^* \mathbf{x}\right|^2 \ge \sum_{i=2}^{n} \lambda_2 \left|\mathbf{u}_i^* \mathbf{x}\right|^2 = \lambda_2 \sum_{i=2}^{n} \left|\mathbf{u}_i^* \mathbf{x}\right|^2 =$$

$$= \lambda_2 \left|\mathbf{u}_1^* \mathbf{x}\right|^2 + \lambda_2 \sum_{i=2}^{n} \left|\mathbf{u}_i^* \mathbf{x}\right|^2 = \lambda_2 \sum_{i=1}^{n} \left|\mathbf{u}_i^* \mathbf{x}\right|^2 .$$

Kako je matrica U unitarna onda vrijedi

$$\sum_{i=1}^{n} \left|\mathbf{u}_i^* \mathbf{x}\right|^2 = (U^* \mathbf{x})^* U^* \mathbf{x} = \mathbf{x}^* U U^* \mathbf{x} = \mathbf{x}^* I_n \mathbf{x} = \mathbf{x}^* \mathbf{x},$$

pa je

$$\mathbf{x}^* A \mathbf{x} \geq \lambda_2 \sum_{i=1}^{n} \left|\mathbf{u}_i^* \mathbf{x}\right|^2 = \lambda_2 \mathbf{x}^* \mathbf{x},$$

odnosno vrijedi

$$\frac{\mathbf{x}^* A \mathbf{x}}{\mathbf{x}^* \mathbf{x}} \geq \lambda_2. \tag{2.28}$$

Primijetimo da su vektori $\mathbf{u}_2$ i $\mathbf{u}_1$ ortogonalni te vrijedi

$$\frac{\mathbf{u}_2^* A \mathbf{u}_2}{\mathbf{u}_2^* \mathbf{u}_2} = \frac{\mathbf{u}_2^* \lambda_2 \mathbf{u}_2}{\mathbf{u}_2^* \mathbf{u}_2} = \frac{\lambda_2 \mathbf{u}_2^* \mathbf{u}_2}{\mathbf{u}_2^* \mathbf{u}_2} = \lambda_2, \tag{2.29}$$

iz čega slijedi da se jednakost u izrazu iz 2.28 postiže za svojstveni vektor pridružen svojstvenoj vrijednosti λ_2, pa onda kombiniranjem nejednakosti iz 2.28 i jednakosti iz 2.29 dobijemo:

$$\min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \{\mathbf{u}_1\}^\perp} \frac{\mathbf{x}^* A \mathbf{x}}{\mathbf{x}^* \mathbf{x}} = \lambda_2,$$

što je upravo tvrdnja a) za $i = 2$.

Tvrdnja b) se dokazuje analogno kao i tvrdnja a). □

Napomena 2.1.12. *Kao što je pokazano u dokazima Rayleigh-Ritzovog teorema 2.1.10 i njegovog korolara 2.1.11, vektori za koje se postižu vrijednosti minimuma u izrazima 2.22 i 2.26 te maksimuma u izrazima 2.23 i 2.27 su svojstveni vektori pridruženi svojstvenim vrijednostima koje minimiziraju, odnosno maksimiziraju navedene izraze. Uz iste oznake za hermitsku matricu $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ sa svojstvenim vektorima $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ redom pridruženih svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$ poredanim po veličini vrijedi:*

- $\lambda_1 = \min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \mathbb{C}^n} R_A(\mathbf{x}) = R_A(\mathbf{u}_1)$,
- $\lambda_n = \max_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \mathbb{C}^n} R_A(\mathbf{x}) = R_A(\mathbf{u}_n)$,
- $\lambda_i = \min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \{\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_{i-1}\}^\perp} R_A(\mathbf{x}) = R_A(\mathbf{u}_i)$, *gdje je* $i \in \{2, \ldots, n\}$,
- $\lambda_{n-i} = \max_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \{\mathbf{u}_{n-1}, \ldots, \mathbf{u}_{n-i+1}\}^\perp} R_A(\mathbf{x}) = R_A(\mathbf{u}_{n-i})$, *gdje je* $i \in \{1, \ldots, n-1\}$.

Kako je matrica L_{norm} simetrična te u problemu minimizacije Rayleighovog kvocijenta za matricu L_{norm} iz 2.21 tražimo rješenje na realnoj domeni onda ćemo koristiti verzije Rayleigh-Ritzovog teorema i njegovog korolara za simetričnu matricu koje će davati realno rješenje problema optimizacije.

Korolar 2.1.13. *Neka je matrica $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simetrična sa svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$ poredanim po veličini. Tada vrijedi:*

a)

$$\min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} R_A(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{\mathbf{x}^T A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}} = \lambda_1, \tag{2.30}$$

b)

$$\max_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} R_A(\mathbf{x}) = \max_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \mathbb{C}^n} \frac{\mathbf{x}^T A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}} = \lambda_n. \tag{2.31}$$

Korolar 2.1.14. *Neka je matrica $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simetrična sa svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$ poredanim po veličini. Neka su $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ svojstveni vektori matrice A redom pridruženi svojstvenim vrijednostima $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$. Tada vrijedi:*

a)

$$\min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_{i-1}\}^{\perp}} R_A(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_{i-1}\}^{\perp}} \frac{\mathbf{x}^T A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}} = \lambda_i, \quad za \;\; i \in \{2, \ldots, n\}, \tag{2.32}$$

b)

$$\max_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \{\mathbf{u}_{n-1},\ldots,\mathbf{u}_{n-i+1}\}^{\perp}} R_A(\mathbf{x}) = \max_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \{\mathbf{u}_{n-1},\ldots,\mathbf{u}_{n-i+1}\}^{\perp}} \frac{\mathbf{x}^T A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}} = \lambda_{n-i}, \quad za \;\; i \in \{1, \ldots, n-1\}. \tag{2.33}$$

Korolari 2.1.13 i 2.1.14 su direktna posljedica Rayleigh-Ritzovog teorema 2.1.10 i korolara 2.1.11. Naime, simetrična matrica je zapravo realna hermitska matrica, minimumi, odnosno maksimumi na realnoj domeni su veći ili jednaki, odnosno manji ili jednaki analognim minimumima, odnosno maksimumima na kompleksnoj domeni. Kako su svojstvene vrijednosti realne onda možemo odabrati i realne svojstvene vektore za koje se postižu minimumi i maksimum u korolarima 2.1.13 i 2.1.14. Naravno vrijedi i analogon napomene 2.1.12.

Napomena 2.1.15. *Vektori za koje se postižu vrijednosti minimuma u izrazima 2.30 i 2.32 te maksimuma u izrazima 2.31 i 2.33 su svojstveni vektori pridruženi svojstvenim vrijednostima koje minimiziraju, odnosno maksimiziraju navedene izraze. Uz iste oznake za simetričnu matricu $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ sa svojstvenim vektorima $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ redom pridruženih svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$ poredanim po veličini vrijedi:*

- $\lambda_1 = \min\limits_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} R_A(\mathbf{x}) = R_A(\mathbf{u}_1)$,
- $\lambda_n = \max\limits_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} R_A(\mathbf{x}) = R_A(\mathbf{u}_n)$,
- $\lambda_i = \min\limits_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \{\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_{i-1}\}^\perp} R_A(\mathbf{x}) = R_A(\mathbf{u}_i)$, *gdje je* $i \in \{2, \ldots, n\}$,
- $\lambda_{n-i} = \max\limits_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{x} \in \{\mathbf{u}_{n-1}, \ldots, \mathbf{u}_{n-i+1}\}^\perp} R_A(\mathbf{x}) = R_A(\mathbf{u}_{n-i})$, *gdje je* $i \in \{1, \ldots, n-1\}$.

Rješenje relaksiranog problema minimizacije

Promotrit ćemo svojstvene vektore matrice L_{norm} koji minimiziraju Rayleighov kvocijent za matricu L_{norm}.

Propozicija 2.1.16. *Za Laplaceovu matricu L i normalizirana Laplaceovu matricu L_{norm} vrijedi:*

a) 0 *je svojstvena vrijednost od L s pridruženim svojstvenim vektorom $\mathbf{1}_n$,*

b) 0 *je svojstvena vrijednost od L_{norm} s pridruženim svojstvenim vektorom $D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n$.*

Dokaz. Zbog jednakost $D\mathbf{1}_n = W\mathbf{1}_n$ pokazane u 2.3 vrijedi

$$L\mathbf{1}_n = (D - W)\mathbf{1}_n = D\mathbf{1}_n - W\mathbf{1}_n = \mathbf{0}_n = 0\mathbf{1}_n,$$

što je upravo tvrdnja a), a tvrdnja b) slijedi iz

$$L_{norm}D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n = D^{-\frac{1}{2}}LD^{-\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n = D^{-\frac{1}{2}}L\mathbf{1}_n == D^{-\frac{1}{2}}0\mathbf{1}_n == 0\mathbf{1}_n.$$

□

Iz propozicije 2.1.16 slijedi da $D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n$ svojstveni vektor matrice L_{norm} pridružen svojstvenoj vrijednosti 0, pa onda kako je matrica L_{norm} simetrična iz korolara Rayleigh-Ritzovog teorema 2.1.13 i napomene 2.1.15 slijedi da je

$$0 = \min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n} R_{L_{norm}}(\mathbf{z}) = R_{L_{norm}}(D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n),$$

odnosno svojstveni vektor $D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n$ matrice L_{norm} pridružen svojstvenoj vrijednosti 0 minimizira Rayleighov kvocijent za matricu L_{norm}. No, kako je

$$(D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n)^T D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n = \mathbf{1}_n D^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n = \mathbf{1}_n D\mathbf{1}_n, \neq 0,$$

onda vektor $D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n$ ne zadovoljava uvjet $\mathbf{z}^T D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n = 0$ iz problema minimizacije Rayleighovog kvocijenta za matricu L_{norm} iz 2.21. Pokazat ćemo da je rješenje problema minimizacije iz 2.21 svojstveni vektor matrice L_{norm} pridružen drugoj po redu svojstvenoj vrijednosti λ_2.

Propozicija 2.1.17. *Neka je $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ težinski neusmjereni graf pri čemu je skup vrhova $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$. Neka je $L_{norm} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ normalizirana Laplaceova matrica grafa $\mathbb{G}$. Neka su $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ svojstveni vektori matrice L_{norm} redom pridruženi svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$ poredanim po veličini. Tada vrijedi:*

$$\lambda_2 = \min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n,\, \mathbf{z}^T D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n = 0} R_{L_{norm}}(\mathbf{z}) = R_{L_{norm}}(\mathbf{u}_2),$$

odnosno vektor $\mathbf{u}_2$ je rješenje problema minimizacije Rayleighovog kvocijenta za matricu L_{norm} iz 2.21.

Dokaz. Matrica L_{norm} je simetrična pa iz korolara Rayleigh-Ritzovog teorema 2.1.14 i napomene 2.1.15 slijedi da je

$$\lambda_2 = \min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{z} \in \{D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n\}^{\perp}} R_{L_{norm}}(\mathbf{z}) = R_{L_{norm}}(\mathbf{u}_2).$$

Kako je uvjet $\mathbf{z}^T D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n = 0$ je ekvivalentan uvjetu $\mathbf{z} \perp D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n$, odnosno uvjetu $\mathbf{z} \in \{D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n\}^{\perp}$ onda slijedi tvrdnja propozicije:

$$\lambda_2 = \min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n,\, \mathbf{z}^T D^{\frac{1}{2}}\mathbf{1}_n = 0} R_{L_{norm}}(\mathbf{z}) = R_{L_{norm}}(\mathbf{u}_2).$$

□

Zanemarivanjem uvjeta $D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z} \in \{-\beta, 1-\beta\}^n$ i uvjeta $\mathbf{z}^T\mathbf{z} = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n$ u problemu minimizacije funkcije σ iz 2.19 smo dobili relaksirani problem minimizacije Rayleighovog kvocijenta za matricu L_{norm} iz 2.21. A zanemarivanjem uvjeta $\mathbf{y} \in \{-\beta, 1-\beta\}^n$ i uvjeta $\mathbf{y}^T D\mathbf{y} = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n$ u problemu minimizacije funkcije ρ iz 2.10 dobit ćemo relaksirani problem minimizacije funkcije ρ:

$$\begin{cases} \rho(\mathbf{y}) \to min, \\ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}_n\}, \\ \mathbf{y}^T D\mathbf{1}_n = 0. \end{cases} \tag{2.34}$$

Pokazat ćemo da je rješenje relaksiranog problema minimizacije funkcije ρ iz 2.34 vektor $D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z}_2$ pri čemu smo sa $\mathbf{z}_2$ označili svojstveni vektor matrice L_{norm} pridružen drugoj po redu svojstvenoj vrijednosti λ_2.

Propozicija 2.1.18. *Neka je $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ težinski neusmjereni graf pri čemu je skup vrhova $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. Neka je $L_{norm} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ normalizirana Laplaceova matrica grafa $\mathbb{G}$. Neka su $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n$ svojstveni vektori matrice L_{norm} redom pridruženi svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ poredanim po veličini. Tada vrijedi:*

$$\lambda_2 = \min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n,\ \mathbf{y}^T D \mathbf{1}_n = 0} \rho(\mathbf{y}) = \rho(D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{u}_2),$$

odnosno vektor $D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{u}_2$ je rješenje relaksiranog problema minimizacije funkcije ρ iz 2.34.

Dokaz. Iz propozicije 2.1.17 slijedi

$$\lambda_2 = \min_{\mathbf{z}\neq\mathbf{0}_n,\ \mathbf{z}^T D^{\frac{1}{2}} \mathbf{1}_n = 0} R_{L_{norm}}(\mathbf{z}) = R_{L_{norm}}(\mathbf{u}_2).$$

Iz izraza 2.13 i 2.20 slijedi

$$\rho(\mathbf{y}) = \frac{\mathbf{y}^T L \mathbf{y}}{\mathbf{y}^T D \mathbf{y}} = \frac{\mathbf{z}^T L_{norm} \mathbf{z}}{\mathbf{z}^T \mathbf{z}} = R_{L_{norm}}(\mathbf{z}),$$

pri čemu je $\mathbf{z} = D^{\frac{1}{2}}\mathbf{y}$, odnosno $\mathbf{y} = D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z}$. Očito vrijedi $\mathbf{z} \neq \mathbf{0}_n \iff \mathbf{y} \neq \mathbf{0}_n$, a ekvivalenciju uvjeta $\mathbf{z}^T D^{\frac{1}{2}} \mathbf{1}_n = 0$ i $\mathbf{y}^T D \mathbf{1}_n = 0$ smo već pokazali u 2.17, pa onda slijedi

$$\lambda_2 = \min_{\mathbf{0}_n \neq \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n,\ \mathbf{y}^T D \mathbf{1}_n = 0} \rho(\mathbf{y}) = \rho(D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{u}_2),$$

što je upravo tvrdnja propozicije. □

Sljedeća lema o rezu biparticije 2.1.20 nam daje rješenje problema minimizacije normaliziranog reza biparticije iz 2.1, no prije leme definiramo pojam po dijelovima konstantnog vektora koji će nam biti potreban u iskazu leme.

Definicija 2.1.19. *Neka je $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ težinski usmjereni graf pri čemu je skup vrhova $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. Neka je $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k = \{\mathbb{V}_1, \mathbb{V}_2, \dots, \mathbb{V}_k\}$ k-člana particija skupa vrhova $\mathbb{V}$ i neka je $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ proizvoljan vektor. Kažemo da je vektor* $\mathbf{x}$ po dijelovima konstantan s obzirom na particiju $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ *ako vrijedi:*

$$(\forall i, j \in \{1, \dots, n\}\ \forall k \in \{1, \dots, k\}) \quad v_i, v_j \in \mathbb{V}_k \implies \mathbf{x}_i = \mathbf{x}_j,$$

odnosno ako su koordinate vektora $\mathbf{x}$ *koje odgovaraju vrhovima u istoj particiji jednake.*[6]

[6]U definiciji 2.1.19 smo po dijelovima konstantan vektor s obzirom na particiju grafa definirali za težinski *usmjereni* graf iz istog razloga kao i u napomeni 2.1.2 za definiciju 2.1.1

Lema 2.1.20. *(Lema o rezu biparticije)*
Neka je $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ težinski neusmjereni graf pri čemu je skup vrhova $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$. Neka je $L_{norm} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ normalizirana Laplaceova matrica grafa $\mathbb{G}$ i neka je $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ biparticija skupa $\mathbb{V}$. Neka su $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ svojstveni vektori matrice L_{norm} redom pridruženi svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \le \lambda_2 \le \ldots \le \lambda_n$ poredanim po veličini. Tada vrijedi:

$$\min Ncut(\mathbb{A}, \mathbb{B}) = \lambda_2,$$

te se minimum postiže ako i samo ako je vektor $D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{u}_2$ po dijelovima konstantan s obzirom na biparticiju $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$.

Dokaz. Prvo pokažimo da vrijedi $Ncut(\mathbb{A}, \mathbb{B}) \ge \lambda_2$.
Iz izraza 2.4 i 2.8 slijedi

$$Ncut(\mathbb{A}, \mathbb{B}) = \frac{(\mathbf{x}_\mathbb{A} - \alpha\mathbf{1}_n)^T L(\mathbf{x}_\mathbb{A} - \alpha\mathbf{1}_n)}{\alpha(1-\alpha)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n} = \frac{\mathbf{y}^T L\mathbf{y}}{\mathbf{y}^T D\mathbf{y}} = \rho(\mathbf{y}).$$

Problem minimizacije normaliziranog reza biparticije $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ iz 2.1 ekvivalentan problemu minimizacije funkcije ξ iz 2.6, a iz propozicije 2.1.5 slijedi da je problem minimizacije funkcije ξ iz 2.6 ekvivalentan je problemu minimizacije funkcije ρ iz 2.10 pa su onda problemi minimizacije normaliziranog reza biparticije $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ iz 2.1 i minimizacije funkcije ρ iz 2.10 ekvivalentni. Onda vrijedi:

$$\min Ncut(\mathbb{A}, \mathbb{B}) = \min_{\mathbf{y}\in\{-\beta, 1-\beta\}^n,\ \mathbf{y}\neq\mathbf{0}_n,\ \mathbf{y}^T D\mathbf{1}_n=0,\ \mathbf{y}^T D\mathbf{y}=\beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n} \rho(\mathbf{y}).$$

Iz propozicije 2.1.18 slijedi

$$\lambda_2 = \min_{\mathbf{0}_n\neq\mathbf{y}\in\mathbb{R}^n,\ \mathbf{y}^T D\mathbf{1}_n=0} \rho(\mathbf{y}) = \rho(D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{u}_2).$$

Minimum po podskupu je veći ili jednak minimumu nadskupa pa vrijedi

$$\begin{aligned}\min Ncut(\mathbb{A}, \mathbb{B}) &= \min_{\mathbf{y}\in\{-\beta, 1-\beta\}^n,\ \mathbf{y}\neq\mathbf{0}_n,\ \mathbf{y}^T D\mathbf{1}_n=0,\ \mathbf{y}^T D\mathbf{y}=\beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n} \rho(\mathbf{y}) \ge \\ &\ge \min_{\mathbf{0}_n\neq\mathbf{y}\in\mathbb{R}^n,\ \mathbf{y}^T D\mathbf{1}_n=0} \rho(\mathbf{y}) = \rho(D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{u}_2) = \lambda_2.\end{aligned}$$

U gornjem izrazu se jednakost postiže ako i samo ako vrijedi $D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{u}_2 \in \{-\beta, 1-\beta\}^n$ i $(D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{u}_2)^T D D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{u}_2 = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n$, odnosno ako vrijedi $D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{u}_2 \in \{-\beta, 1-\beta\}^n$ i $\mathbf{u}_2^T\mathbf{u}_2 = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n$. Uvjet $\mathbf{u}_2^T\mathbf{u}_2 = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n$ uvijek možemo zadovoljiti tako da odaberemo svojstveni vektor $\mathbf{u}_2$ sa zadanom normom. Preostaje primijetiti da je uvjet $D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{u}_2 \in \{-\beta, 1-\beta\}^n$ ekvivalentan uvjetu da je vektor $D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{u}_2$ po dijelovima konstantan s obzirom na biparticiju $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$.

□

Diskretizacija

Iz propozicije 2.1.17 slijedi da je neprekidno rješenje relaksiranog problema minimizacije Rayleighovog kvocijenta za matricu L_{norm} iz 2.21 dano svojstvenim vektorom matrice L_{norm} pridruženim drugoj po redu svojstvenoj vrijednosti λ_2, ako taj svojstveni vektor označimo s $\mathbf{z}_2$ onda je $\mathbf{y}_2 = D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z}_2$ rješenje relaksiranog problema minimizacije funkcije ρ iz 2.34 što smo pokazali u propoziciji 2.1.18. Po lemi o rezu biparticije 2.1.20 slijedi da ako je vektor $\mathbf{y}_2$ po dijelovima konstantan s obzirom na biparticiju $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ onda je biparticija $\{\mathbb{A}, \mathbb{B}\}$ rješenje problema minimizacije normaliziranog reza biparticije iz 2.1. Kako u praksi često nije zadovoljen uvjet da je vektor $\mathbf{y}_2$ po dijelovima konstantan onda želimo iz neprekidnog rješenja $\mathbf{z}_2$ relaksiranog problema minimizacije Rayleighovog kvocijenta za matricu L_{norm} iz 2.21, odnosno iz neprekidnog rješenja $\mathbf{y}_2$ relaksiranog problema minimizacije funkcije ρ iz 2.34 dobiti približno diskretno rješenje za problem minimizacije funkcije ξ iz 2.6, odnosno problem minimizacije normaliziranog reza biparticije iz 2.1.

U 2.7 i 2.2 smo odabrali y tako da vrijedi $\mathbf{y} = \mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \alpha\mathbf{1}_n = \mathbf{x}_{\mathbb{A}} - \frac{\mathbf{x}_{\mathbb{A}}^T D\mathbf{x}_{\mathbb{A}}}{\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n}\mathbf{1}_n$. Primijetimo da ne možemo jednostavno dobiti vektor $\mathbf{x}_{\mathbb{A}}$ iz vektora $\mathbf{y}$, no to nam nije ni potrebno jer se radi o jednostavnom pomaku u odnosu na vektor $\mathbf{x}_{\mathbb{A}}$ pa onda diskretizaciju možemo napraviti direktno na rješenju relaksiranog problema minimizacije funkcije ρ iz 2.34. Primijetimo da koordinate indikatorskog vektora $\mathbf{x}_{\mathbb{A}}$ koji minimizira funkciju ξ iz diskretnog problema optimizacije 2.6 poprimaju vrijednosti 0 i 1, pa koordinate vektora $\mathbf{y}$ koji minimizira funkciju ρ iz diskretnog problema optimizacije 2.10 poprimaju vrijednosti $-\beta$ i $1-\beta$ pri čemu je $\beta \in \langle 0, 1\rangle$. No, koordinate vektora $\mathbf{y}_2$, vektora koji minimizira funkciju ρ iz relaksiranog problema optimizacije 2.34 poprimaju neprekidne realne vrijednosti pa je potrebno odabrati graničnu vrijednost, odnosno vrijednost koja će razdvojiti koordinate vektora $\mathbf{y}_2$ na one koje su manje od granične vrijednosti i na one koje su veće od granične vrijednosti. Tako ćemo dobiti biparticiju koordinata vektora $\mathbf{y}_2$, a kako i-ta koordinata predstavlja i-ti element skupa vrhova grafa onda smo time dobili i biparticiju grafa, odnosno biparticiju vrhova težinskog neusmjerenog grafa. U relaksiranom problemu minimizacije smo zanemarili uvjet $\mathbf{z}^T\mathbf{z} = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n$, odnosno uvjet $\mathbf{y}^T D\mathbf{y} = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n$ jer po propoziciji 2.1.7 vrijedi da uvijek možemo odabrati normu vektora kako bi taj uvjet zadovoljili. Kada bismo znali koeficijent β onda bismo odabrali vektor $\widetilde{\mathbf{z}}_2 = \frac{\beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n}{\mathbf{z}_2^T\mathbf{z}_2}\mathbf{z}_2$ koji zadovoljava uvjet $\mathbf{z}^T\mathbf{z} = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n$, odnosno vektor $\widetilde{\mathbf{y}}_2 = D^{-\frac{1}{2}}\widetilde{\mathbf{z}}_2 = \frac{\beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n}{\mathbf{z}_2^T\mathbf{z}_2}D^{-\frac{1}{2}}\mathbf{z}_2 = \frac{\beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n}{\mathbf{z}_2^T\mathbf{z}_2}\mathbf{y}_2$ koji zadovoljava uvjet $\mathbf{y}^T D\mathbf{y} = \beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n$ te bismo napravili biparticiju koordinata vektora $\widetilde{\mathbf{y}}_2$ tako da bismo podijelili koordinate na one koje su bliže $-\beta$ i na one koje su bliže $1-\beta$. No, koeficijent β ne možemo izračunati prije nego što odredimo biparticiju jer on ovisi vektoru $\mathbf{x}_{\mathbb{A}}$, odnosno upravo o biparticiji koju tražimo. Ipak, primijetimo da je broj $\frac{\beta(1-\beta)\mathbf{1}_n^T D\mathbf{1}_n}{\mathbf{z}_2^T\mathbf{z}_2} > 0$ pa odgovarajuće koordinate vektora $\mathbf{y}_2$ i koordinate vektora $\widetilde{\mathbf{y}}_2$ imaju isti predznak, odnosno koordinate vektora $\mathbf{y}_2$ koje su pozitivne ostat će pozitivne i kod vektora

$\widetilde{\mathbf{y}}_2$, a koordinate koje su negativne kod vektora $\mathbf{y}_2$ bit će negativne i kod vektora $\widetilde{\mathbf{y}}_2$. Tako da je jednostavni način biparticije koordinata vektora $\mathbf{y}_2$ podjela na pozitivne i negativne koordinate, odnosno za graničnu vrijednost uzmemo 0. Ako je koeficijent β blizu 0 ili 1 onda će podjela koordinata vektora $\mathbf{y}_2$ na osnovi njihova predznaka rezultirati nesimetričnom biparticijom, odnosno biparticijom čiji su klasteri različitih veličina. Umjesto 0 za graničnu vrijednost možemo uzeti medijan koordinatnih vrijednosti vektora $\mathbf{y}_2$ pa ćemo dobiti simetričnu biparticiju. Iako ćemo tako dobiti klastere podjednake veličine, moguće je da je za određeni graf klasteriranje bolje ako su klasteri različitih veličina, odnosno da nesimetrična biparticija tog grafa ima manji normalizirani rez od simetrične biparticije tog grafa. Zato ćemo graničnu vrijednost odabrati tako da za svaku od l ravnomjerno raspoređenih mogućih graničnih vrijednosti napravimo biparticiju koordinata vektora $\mathbf{y}_2$ i pripadajuću biparticiju grafa te izračunamo normalizirani rez te biparticije i onda odaberemo onu graničnu vrijednost čija pripadajuća biparticija ima najmanji normalizirani rez. Ova metoda daje bolje rezultate klasteriranja, odnosno biparticiju s manjim normaliziranim rezom u odnosu kada za graničnu vrijednost uzmemo 0 ili medijan koordinatnih vrijednosti vektora $\mathbf{y}_2$, a za dovoljno mali l još uvijek je efikasna.

2.2 Spektralni normalizirani rez višečlane particije grafa

Problem minimizacije spektralnog normaliziranog reza biparticije grafa možemo poopćiti na višečlane particije grafa. Metode za minimizaciju spektralnog normaliziranog reza višečlane particije razvili su Yu i Shi u [20], Meila i Xu u [12] te Ng, Jordan i Weiss u [15]. Metoda spektralnog particioniranja grafa koja je opisana u ovom potpoglavlju najvećim djelom prati rezultate iz [20].

Neka je $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ težinski neusmjereni graf i neka je $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ k-člana particija skupa vrhova $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$. Normalizirani rez k-člane particije $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ je:

$$k\text{-}Ncut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} \frac{links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V} \setminus \mathbb{V}_l)}{deg(\mathbb{V}_l)},$$

pri čemu za proizvoljne $\mathbb{A}, \mathbb{B} \subseteq \mathbb{V}$ vrijedi

$$deg(\mathbb{A}) = links(\mathbb{A}, \mathbb{V}) \qquad \text{i} \qquad links(\mathbb{A}, \mathbb{B}) = \sum_{a \in \mathbb{A}, b \in \mathbb{B}} w(a, b).$$

Cilj nam je riješiti sljedeći problem minimizacije:

$$\begin{cases} k\text{-}Ncut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) \to min, \\ \mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k \text{ je } k\text{-člana particija od } \mathbb{V}. \end{cases} \tag{2.35}$$

Matrični zapis

Matricu susjedstva $W = \left[w(v_i, v_j)\right]_{i,j\in\{1,\ldots,n\}}$, matricu stupnjeva $D = diag(W\mathbf{1}_n)$, Laplaceovu matricu $L = D - W$ i normaliziranu Laplaceovu matricu $L_{norm} = D^{-\frac{1}{2}}LD^{-\frac{1}{2}}$ smo već definirali u definiciji 2.1.1.

Definicija 2.2.1. *Neka je $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ težinski usmjereni graf pri čemu je skup vrhova $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ i neka je $\mathcal{F}^k_{\mathbb{V}} = \{\mathbb{V}_1, \mathbb{V}_2, \ldots, \mathbb{V}_k\}$ k-člana particija skupa $\mathbb{V}$.* Indikatorsku matricu k-člane particije $\mathcal{F}^k_{\mathbb{V}}$, *u oznaci $X_{\mathcal{F}^k_{\mathbb{V}}}$ ili samo X ako je poznato o kojoj s particiji radi, definiramo s:*

$$X \in \{0,1\}^{n\times k}, \qquad X(i,j) = \begin{cases} 1, & v_i \in \mathbb{V}_j, \\ 0, & inače, \end{cases} \qquad i \in \{1,\ldots,n\}, j \in \{1,\ldots,k\}.$$

Želimo normalizirani rez k-člane particije, odnosno stupanj povezanosti skupova i stupanj skupa definirati matrično kako bismo mogli primijeniti rezultate iz područja spektralne analize. Neka je X indikatorska matrica k-člane particije $\mathcal{F}^k_{\mathbb{V}}$ skupa vrhova $\mathbb{V}$ te označimo stupce matrice X s $X_1, X_2, \ldots, X_k$ tako da vrijedi $X = [X_1\, X_2 \cdots X_k]$. Za $l \in \{1,\ldots,k\}$ stupanj skupa $\mathbb{V}_l$ možemo zapisati kao

$$\begin{aligned} deg(\mathbb{V}_l) = links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}) &= \sum_{v'\in\mathbb{V}_l, v\in\mathbb{V}} w(v', v) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} X_{i,l}\, w(v_i, v_j) = \\ &= \sum_{i=1}^{n} X_{i,l} \sum_{j=1}^{n} w(v_i, v_j) = \sum_{i=1}^{n} X_{i,l}\, D_{i,i} = X_l^T D X_l. \end{aligned}$$

Primijetimo da za $l \in \{1,\ldots,k\}$ vrijedi $links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}_l) + links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V} \setminus \mathbb{V}_l) = links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}) = deg(\mathbb{V}_l)$ pa je

$$\begin{aligned} links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}\setminus\mathbb{V}_l) = deg(\mathbb{V}_l) - links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}_l) &= deg(\mathbb{V}_l) - \sum_{v\in\mathbb{V}_l, v'\in\mathbb{V}_l} w(v, v') = \\ &= deg(\mathbb{V}_l) - \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} X_{i,l}\, w(v_i, v_j)\, X_{j,l} = \\ &= X_l^T D X_l - X_l^T W X_l = X_l^T (D - W) X_l = X_l^T L X_l. \end{aligned}$$

Normalizirani rez k-člane particije $\mathcal{F}^k_{\mathbb{V}}$ možemo zapisati kao

$$k\text{-}Ncut(\mathcal{F}^k_{\mathbb{V}}) = \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} \frac{links(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}\setminus\mathbb{V}_l)}{deg(\mathbb{V}_l)} = \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} \frac{X_l^T L X_l}{X_l^T D X_l}. \tag{2.36}$$

Definirajmo funkciju $\xi \colon \{0,1\}^{n\times k} \to \mathbb{R}$ s

$$\xi(X) = \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} \frac{X_l^T L X_l}{X_l^T D X_l}. \tag{2.37}$$

Kako svaki vrh pripada samo jednom klasteru onda je

$$(\forall i \in \{1,\ldots,n\}\ \forall l, l' \in \{1,\ldots,k\}) \quad l \neq l' => X_{i,l} = 0 \ \text{ ili } \ X_{i,l'} = 0,$$

pa zbog $X_l^T X_{l'} = \sum_{i=1}^{n} X_{i,l} X_{i,l'}$ vrijedi

$$(\forall l, l' \in \{1,\ldots,k\}) \quad l \neq l' => X_l^T X_{l'} = 0,$$

odnosno stupci indikatorske matrice X međusobno okomiti. Također vrijedi da ako matrica $\widetilde{X} \in \{0,1\}^{n\times k}$ ima međusobno ortogonalne stupce onda je $\widetilde{X}$ indikatorska matrica. Uvjet da matrica $\widetilde{X}$ ima okomite stupce možemo zapisati kao $X\mathbf{1}_k = \mathbf{1}_n$. Zato je problem minimizacije normaliziranog reza višečlane particije iz 2.35 ekvivalentan problemu minimizacije funkcije ξ:

$$\begin{cases} \xi(X) \to min, \\ X \in \{0,1\}^{n\times k}, \\ X\mathbf{1}_k = \mathbf{1}_n. \end{cases} \tag{2.38}$$

Za $l \in \{1,\ldots,k\}$ označimo s

$$Y_l = D^{\frac{1}{2}} X_l, \tag{2.39}$$

onda je

$$X_l = D^{-\frac{1}{2}} Y_l,$$

pa $\xi(X)$ možemo zapisati kao

$$\begin{aligned} \xi(X) &= \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} \frac{X_l^T L X_l}{X_l^T D X_l} = \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} \frac{(D^{-\frac{1}{2}} Y_l)^T L D^{-\frac{1}{2}} Y_l}{(D^{-\frac{1}{2}} Y_l)^T D D^{-\frac{1}{2}} Y_l} = \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} \frac{Y_l^T D^{-\frac{1}{2}} L D^{-\frac{1}{2}} Y_l}{Y_l^T D^{-\frac{1}{2}} D D^{-\frac{1}{2}} Y_l} = \\ &= \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} \frac{Y_l^T D^{-\frac{1}{2}} L D^{-\frac{1}{2}} Y_l}{Y_l^T Y_l} = \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} \frac{Y_l^T L_{norm} Y_l}{Y_l^T Y_l}. \end{aligned} \tag{2.40}$$

Neka je $Y = [Y_1\ Y_2 \cdots\ Y_k]$ matrica koja ima stupce $Y_1, Y_2, \ldots, Y_k$, onda vrijedi

$$Y = [Y_1\ Y_2 \cdots\ Y_k] = \left[D^{\frac{1}{2}} X_1\ D^{\frac{1}{2}} X_2 \cdots\ D^{\frac{1}{2}} X_k\right] = D^{\frac{1}{2}}\,[X_1\ X_2 \cdots\ X_k] = D^{\frac{1}{2}} X. \tag{2.41}$$

Za $l \in \{1, \ldots, k\}$ označimo s

$$Z_l = Y_l (Y_l^T Y_l)^{-\frac{1}{2}}, \tag{2.42}$$

onda je

$$\begin{aligned} Z_l^T L_{norm} Z_l &= (Y_l (Y_l^T Y_l)^{-\frac{1}{2}})^T L_{norm} Y_l (Y_l^T Y_l)^{-\frac{1}{2}} = (Y_l^T Y_l)^{-\frac{1}{2}} Y_l^T L_{norm} Y_l (Y_l^T Y_l)^{-\frac{1}{2}} = \\ &= (Y_l^T Y_l)^{-1} Y_l^T L_{norm} Y_l = \frac{Y_l^T L_{norm} Y_l}{Y_l^T Y_l}, \end{aligned}$$

pa $\xi(X)$ možemo zapisati kao

$$\xi(X) = \frac{1}{k} \sum_{l=1}^{k} \frac{Y_l^T L_{norm} Y_l}{Y_l^T Y_l} = \frac{1}{k} \sum_{l=1}^{k} Z_l^T L_{norm} Z_l. \tag{2.43}$$

Primijetimo da je

$$Z_l = Y_l (Y_l^T Y_l)^{-\frac{1}{2}} = D^{\frac{1}{2}} X_l ((D^{\frac{1}{2}} X_l)^T D^{\frac{1}{2}} X_l)^{-\frac{1}{2}} = D^{\frac{1}{2}} X_l (X_l^T D^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} X_l)^{-\frac{1}{2}} = D^{\frac{1}{2}} X_l (X_l^T D X_l)^{-\frac{1}{2}}.$$

Neka je $Z = [Z_1 \, Z_2 \cdots Z_k]$ matrica koja ima stupce $Z_1, Z_2, \ldots, Z_k$. Definirajmo funkciju $\sigma : \mathbb{R}^{n \times k} \to \mathbb{R}$ s

$$\sigma(Z) = \frac{1}{k} tr(Z^T L_{norm} Z) = \frac{1}{k} \sum_{l=1}^{k} Z_l^T L_{norm} Z_l. \tag{2.44}$$

Pokazat ćemo da iz uvjeta $X_l^T D X_{l'} = 0$ za $l \neq l'$ za matricu X dobijemo uvjet $Z^T Z = I_k$ za matricu Z, odnosno pokazat ćemo da je problem minimizacije funkcije ξ iz 2.38 ekvivalentan sljedećem problemu minimizacije funkcije σ:

$$\begin{cases} \sigma(Z) \to min, \\ D^{-\frac{1}{2}} Z \, diag(\beta_1, \ldots, \beta_k) \in \{0, 1\}^{n \times k}, \\ Z^T Z = I_k. \end{cases} \tag{2.45}$$

Propozicija 2.2.2. *Problem minimizacije funkcije ξ (definirane u 2.37) iz 2.38 ekvivalentan je problemu minimizacije funkcije σ (definirane u 2.44) iz 2.45.*

Dokaz. Primijetimo da je problem minimizacije funkcije ξ iz 2.38 ekvivalentan sljedećem problemu minimizacije funkcije ξ:

$$\begin{cases} \xi(X) \to min, \\ X \in \{0, 1\}^{n \times k}, \\ (\forall l, l' \in \{1, \ldots, k\}) \quad l \neq l' => X_l^T D X_{l'} = 0. \end{cases} \tag{2.46}$$

Naime, za $X \in \{0,1\}^{n\times k}$ uvjet $X\mathbf{1}_k = \mathbf{1}_n$ u problemu minimizacije funkcije ξ iz 2.38, odnosno uvjet da su stupci matrice X međusobno ortogonalni

$$(\forall l, l' \in \{1,\ldots,k\}) \quad l \neq l' \Rightarrow X_l^T X_{l'} = 0,$$

je ekvivalentan uvjetu

$$(\forall l, l' \in \{1,\ldots,k\}) \quad l \neq l' \Rightarrow X_l^T D X_{l'} = 0.$$

Iz izraza 2.43 slijedi $\xi(X) = \sigma(Z)$ pa preostaje pokazati da su uvjeti u problemima minimizacije funkcije ρ iz 2.46 i 2.45 ekvivalentni.

Prvo ćemo dokazati da ako matrica X zadovoljava uvjete iz 2.46 onda matrica Z uvjete iz 2.45 pri čemu je $Z_l = D^{\frac{1}{2}} X_l (X_l^T D X_l)^{-\frac{1}{2}}$ za $l \in \{1,\ldots,k\}$. Neka je $X \in \{0,1\}^{n\times k}$ tako da vrijedi

$$(\forall l, l' \in \{1,\ldots,k\}) \quad l \neq l' \Rightarrow X_l^T D X_{l'} = 0,$$

onda za matricu $Y = D^{\frac{1}{2}} X$ vrijedi

$$Y_l^T Y_{l'} = (D^{\frac{1}{2}} X_l)^T D^{\frac{1}{2}} X_{l'} = X_l^T D^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} X_{l'} = X_l^T D X_{l'},$$

pa slijedi

$$(\forall l, l' \in \{1,\ldots,k\}) \quad l \neq l' \Rightarrow Y_l^T Y_{l'} = 0,$$

odnosno stupci matrice Y su međusobno ortogonalni. Zbog ortogonalnosti stupaca matrice Y vrijedi

$$\begin{aligned} Y^T Y &= [Y_1\ Y_2 \cdots Y_k]^T\,[Y_1\ Y_2 \cdots Y_k] = \left[Y_l^T Y_{l'}\right]_{l,l'\in\{1,\ldots,k\}} = \\ &= diag(Y_1^T Y_1, Y_2^T Y_2, \ldots, Y_k^T Y_k). \end{aligned} \tag{2.47}$$

Kako je matrica $Y^T Y$ dijagonalna onda vrijedi

$$(Y^T Y)^{-\frac{1}{2}} = diag((Y_1^T Y_1)^{-\frac{1}{2}}, (Y_2^T Y_2)^{-\frac{1}{2}}, \ldots, (Y_k^T Y_k)^{-\frac{1}{2}}),$$

pa slijedi

$$\begin{aligned} Z &= [Z_1\ Z_2 \cdots Z_k] = \left[Y_1(Y_1^T Y_1)^{-\frac{1}{2}}\ \ Y_2(Y_2^T Y_2)^{-\frac{1}{2}}\ \cdots\ Y_k(Y_k^T Y_k)^{-\frac{1}{2}}\right] = \\ &= [Y_1\ Y_2 \cdots Y_k]\,diag((Y_1^T Y_1)^{-\frac{1}{2}}, (Y_2^T Y_2)^{-\frac{1}{2}}, \ldots, (Y_k^T Y_k)^{-\frac{1}{2}}) = Y(Y^T Y)^{-\frac{1}{2}}, \end{aligned} \tag{2.48}$$

te je onda

$$Z^T Z = (Y(Y^T Y)^{-\frac{1}{2}})^T Y (Y^T Y)^{-\frac{1}{2}} = (Y^T Y)^{-\frac{1}{2}} Y^T Y (Y^T Y)^{-\frac{1}{2}} = I_k.$$

Za $l \in \{1, \ldots, k\}$ vrijedi $Z_l = D^{\frac{1}{2}} X_l (X_l^T D X_l)^{-\frac{1}{2}}$, odnosno $(X_l^T D X_l)^{\frac{1}{2}} D^{-\frac{1}{2}} Z_l = X_l$, pa ako označimo s $\beta_l = (X_l^T D X_l)^{\frac{1}{2}}$, onda je $X_l = \beta_l D^{-\frac{1}{2}} Z_l$ iz čega slijedi

$$\begin{aligned}
X = [X_1\ X_2 \cdots X_k] &= \left[\beta_1 D^{-\frac{1}{2}} Z_1\ \ \beta_2 D^{-\frac{1}{2}} Z_2\ \ \cdots\ \ \beta_k D^{-\frac{1}{2}} Z_k\right] = \\
&= D^{-\frac{1}{2}} [\beta_1 Z_1\ \ \beta_2 Z_2\ \ \cdots\ \ \beta_k Z_k] = D^{-\frac{1}{2}} [Z_1\ Z_2 \cdots Z_k]\, diag(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_k) = \\
&= D^{-\frac{1}{2}} Z\, diag(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_k),
\end{aligned}$$

pa je uvjet $X \in \{0,1\}^{n \times k}$ ekvivalentan uvjetu $D^{-\frac{1}{2}} Z\, diag(\beta_1, \ldots, \beta_k) \in \{0,1\}^{n \times k}$, čime smo pokazali da su zadovoljeni svi uvjeti iz 2.45.

Sada ćemo dokazati suprotan smjer, odnosno da ako matrica Z zadovoljava uvjete iz 2.45 onda matrica X zadovoljava uvjete iz 2.46 pri čemu je $X_l = \beta_l D^{-\frac{1}{2}} Z_l\ l \in \{1, \ldots, k\}$. Neka je $Z \in \mathbb{R}^{n \times k}$ tako da vrijedi

$$D^{-\frac{1}{2}} Z\, diag(\beta_1, \ldots, \beta_k) \in \{0,1\}^{n \times k} \quad \text{i} \quad Z^T Z = I_k.$$

Neka je $l \in \{1, \ldots, k\}$ proizvoljan, onda vrijedi $Z_l^T Z_l = 1$ pa je

$$X_l^T D X_l = (\beta_l D^{-\frac{1}{2}} Z_l)^T D \beta_l D^{-\frac{1}{2}} Z_l = \beta_l Z_l^T D^{-\frac{1}{2}} \beta_l D^{-\frac{1}{2}} Z_l = \beta_l^2 Z_l^T Z_l = \beta_l^2,$$

odnosno vrijedi $\beta_l = (X_l^T D X_l)^{-\frac{1}{2}}$ pa je zadovoljena jednakost $Z_l = D^{\frac{1}{2}} X_l (X_l^T D X_l)^{-\frac{1}{2}}$. Iz $X_l = \beta_l D^{-\frac{1}{2}} Z_l$ dobijemo da je $Z_l = \frac{1}{\beta_l} D^{\frac{1}{2}} X_l$ pa je

$$\begin{aligned}
Z = [Z_1\ Z_2 \cdots Z_k] &= \left[\frac{1}{\beta_1} D^{\frac{1}{2}} X_1\ \ \frac{1}{\beta_2} D^{\frac{1}{2}} X_2\ \ \cdots\ \ \frac{1}{\beta_k} D^{\frac{1}{2}} X_k\right] = \\
&= D^{\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{\beta_1} X_1\ \ \frac{1}{\beta_2} X_2\ \ \cdots\ \ \frac{1}{\beta_k} X_k\right] = D^{\frac{1}{2}} [X_1\ X_2 \cdots X_k]\, diag(\frac{1}{\beta_1}, \frac{1}{\beta_2}, \ldots, \frac{1}{\beta_k}) = \\
&= D^{\frac{1}{2}} X\, diag(\frac{1}{\beta_1}, \frac{1}{\beta_2}, \ldots, \frac{1}{\beta_k}),
\end{aligned}$$

onda je

$$D^{-\frac{1}{2}} Z\, diag(\beta_1, \ldots, \beta_k) = D^{-\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} X\, diag(\frac{1}{\beta_1}, \ldots, \frac{1}{\beta_k})\, diag(\beta_1, \ldots, \beta_k) = I_n X I_k = X,$$

pa je uvjet $D^{-\frac{1}{2}} Z\, diag(\beta_1, \ldots, \beta_k) \in \{0,1\}^{n \times k}$ ekvivalentan uvjetu $X \in \{0,1\}^{n \times k}$. Kako je $Z^T Z = I_k$ onda vrijedi

$$(\forall l, l' \in \{1, \ldots, k\}) \quad l \neq l' \Rightarrow Z_l^T Z_{l'} = 0.$$

Za $l, l' \in \{1, \dots, k\}$ vrijedi

$$X_l^T D X_{l'} = (\beta_l D^{-\frac{1}{2}} Z_l)^T D \beta_{l'} D^{-\frac{1}{2}} Z_{l'} = \beta_l Z_l^T D^{-\frac{1}{2}} \beta_{l'} D^{-\frac{1}{2}} Z_{l'} = \beta_l \beta_{l'} Z_l^T Z_{l'},$$

pa iz $X_l^T D X_{l'} = \beta_l \beta_{l'} Z_l^T Z_{l'}$ slijedi

$$(\forall l, l' \in \{1, \dots, k\}) \quad l \neq l' \Rightarrow X_l^T D X_{l'} = 0,$$

čime smo pokazali da su zadovoljeni svi uvjeti iz 2.46. □

Funkciju σ iz problema minimizacije iz 2.45 smo definirali s:

$$\sigma(Z) = \frac{1}{k} tr(Z^T L_{norm} Z) = \frac{1}{k} \sum_{l=1}^{k} Z_l^T L_{norm} Z_l.$$

Uvjeti problema minimizacije iz 2.45 su uvjet $D^{-\frac{1}{2}} Z\ diag(\beta_1, \dots, \beta_k) \in \{0, 1\}^{n \times k}$ koji osigurava da rješenje bude diskretno te uvjet $Z^T Z = I_k$. Zanemarivanjem uvjeta $D^{-\frac{1}{2}} Z\ diag(\beta_1, \dots, \beta_k) \in \{0, 1\}^{n \times k}$ u problemu minimizacije funkcije σ iz 2.45 dobivamo relaksirani problem minimizacije funkcije σ:

$$\begin{cases} \sigma(Z) \to min, \\ Z \in \mathbb{R}^{n \times k}, \\ Z^T Z = I_k. \end{cases} \tag{2.49}$$

Minimizacija sume Rayleighovih kvocijenta

Problem minimizacije funkcije σ iz 2.49 se svodi na problem minimizacije sume Rayleighovih kvocijenta čije rješenje će dati korolar Rayleigh-Ritzovog teorema.

Primijetimo da ako vrijedi uvjet $Z^T Z = I_k$ onda za $l \in \{1, \dots, k\}$ vrijedi $Z_l^T Z_l = 1$, pa je

$$R_{L_{norm}}(Z_l) = \frac{Z_l^* L_{norm} Z_l}{Z_l^* Z_l} = \frac{Z_l^T L_{norm} Z_l}{Z_l^T Z_l} = \frac{Z_l^T L_{norm} Z_l}{1} = Z_l^T L_{norm} Z_l,$$

onda vrijedi

$$\sigma(Z) = \frac{1}{k} \sum_{l=1}^{k} Z_l^T L_{norm} Z_l = \frac{1}{k} \sum_{l=1}^{k} R_{L_{norm}}(Z_l). \tag{2.50}$$

Rješenje problema minimizacije sume Rayleighovih kvocijenta daje sljedeći korolar.

Korolar 2.2.3. *Neka je matrica $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ hermitska sa svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$ poredanim po veličini. Neka je $r \in \{1, \ldots, n\}$ proizvoljan i neka je $X = [X_1\ X_2 \cdots X_r] \in \mathbb{C}^{n\times r}$ matrica sa stupcima $X_1, X_2, \ldots, X_r$. Tada vrijedi:*

a)

$$\min_{X\in\mathbb{C}^{n\times r},\, X^*X=I_r} \sum_{l=1}^{r} R_A(X_l) = \min_{X\in\mathbb{C}^{n\times r},\, X^*X=I_r} \sum_{l=1}^{r} X_l^* A X_l = \sum_{l=1}^{r} \lambda_l, \tag{2.51}$$

b)

$$\max_{X\in\mathbb{C}^{n\times r},\, X^*X=I_r} \sum_{l=1}^{r} R_A(X_l) = \max_{X\in\mathbb{C}^{n\times r},\, X^*X=I_r} \sum_{l=1}^{r} X_l^* A X_l = \sum_{l=n-r+1}^{n} \lambda_l. \tag{2.52}$$

Dokaz. Neka su $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ ortonormirani svojstveni vektori matrice A redom pridruženi svojstvenim vrijednostima $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$. Iz Rayleigh-Ritzovog teorema 2.1.10 i napomene 2.1.12 slijedi

$$\lambda_1 = \min_{\mathbf{0}_n\neq X_1\in\mathbb{C}^n} R_A(X_1) = \min_{\mathbf{0}_n\neq X_1\in\mathbb{C}^n} \frac{X_1^* A X_1}{X_1^* X_1} = R_A(\mathbf{u}_1),$$

onda je

$$\lambda_1 = \min_{\mathbf{0}_n\neq X_1\in\mathbb{C}^n} \frac{X_1^* A X_1}{X_1^* X_1} = \min_{\mathbf{0}_n\neq X_1\in\mathbb{C}^n,\, X_1^*X_1=1} X_1^* A X_1 = \min_{X_1\in\mathbb{C}^n,\, X_1^*X_1=1} X_1^* A X_1.$$

Iz korolara Rayleigh-Ritzovog teorema 2.1.11 i napomene 2.1.12 slijedi da za $l \in \{2, \ldots, r\}$ vrijedi

$$\lambda_l = \min_{\mathbf{0}_n\neq X_l\in\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_{l-1}\}^\perp} R_A(X_l) = \min_{\mathbf{0}_n\neq X_l\in\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_{l-1}\}^\perp} \frac{X_l^* A X_l}{X_l^* X_l} = R_A(\mathbf{u}_l),$$

onda je

$$\lambda_l = \min_{\mathbf{0}_n\neq X_l\in\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_{l-1}\}^\perp} \frac{X_l^* A X_l}{X_l^* X_l} = \min_{\mathbf{0}_n\neq X_l\in\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_{l-1}\}^\perp,\, X_l^*X_l=1} X_l^* A X_l = \min_{X_l\in\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_{l-1}\}^\perp,\, X_l^*X_l=1} X_l^* A X_l.$$

Slijedi da je

$$\begin{aligned}
\sum_{l=1}^{r} \lambda_l &= \min_{X_1\in\mathbb{C}^n,\, X_1^*X_1=1} X_1^* A X_1 + \min_{X_2\in\{\mathbf{u}_1\}^\perp,\, X_2^*X_2=1} X_2^* A X_2 + \cdots + \\
&\quad + \min_{X_r\in\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_{r-1}\}^\perp,\, X_r^*X_r=1} X_r^* A X_r = \\
&= \min_{X_1\in\mathbb{C}^n,\, X_2\in\{\mathbf{u}_1\}^\perp,\cdots,\, X_r\in\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_{r-1}\}^\perp,\; X_1^*X_1=1,\, X_2^*X_2=1,\cdots,\, X_r^*X_r=1} \sum_{l=1}^{r} X_l^* A X_l \leq \\
&\leq \min_{X\in\mathbb{C}^{n\times r},\, X^*X=I_r} \sum_{l=1}^{r} X_l^* A X_l.
\end{aligned} \tag{2.53}$$

Neka je $U = [\mathbf{u}_1\ \mathbf{u}_2 \cdots \mathbf{u}_r]$ matrica čiju su stupci svojstveni vektori $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_r$. Onda vrijedi $U^*U = I_r$ te je:

$$\sum_{l=1}^{r} \mathbf{u}_l^* A \mathbf{u}_l = \sum_{l=1}^{r} \frac{\mathbf{u}_l^* A \mathbf{u}_l}{\mathbf{u}_l^* \mathbf{u}_l} = \sum_{l=1}^{r} R_A(\mathbf{u}_l) = \sum_{l=1}^{r} \lambda_l,$$

odnosno u nejednakost iz 2.53 se postiže za matricu U pa vrijedi

$$\min_{X \in \mathbb{C}^{n\times r},\, X^*X = I_r} \sum_{l=1}^{r} X_l^* A X_l = \sum_{l=1}^{r} \lambda_l.$$

Tvrdnja b) se dokazuje analogno kao i tvrdnja a). □

Napomena 2.2.4. *Kao što je pokazano u dokazu korolara 2.2.3, matrice za koje se postižu vrijednosti minimuma u izrazu 2.51 te maksimuma u izrazu 2.52 su matrice koje za stupce imaju ortonormirane svojstvene vektore pridružene svojstvenim vrijednostima čije sume minimiziraju, odnosno maksimiziraju navedene izraze. Uz iste oznake za hermitsku matricu $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ s ortonormiranim svojstvenim vektorima $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ redom pridruženih svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$ poredanim po veličini, $r \in \{1, \ldots, n\}$ te matricu $X = [X_1\ X_2 \cdots X_r] \in \mathbb{C}^{n\times r}$ vrijedi:*

a) $$\sum_{l=1}^{r} \lambda_l = \min_{X \in \mathbb{C}^{n\times r},\, X^*X = I_r} \sum_{l=1}^{r} R_A(X_l) = \sum_{l=1}^{r} R_A(\mathbf{u}_l),$$

b) $$\sum_{l=n-r+1}^{n} \lambda_l = \max_{X \in \mathbb{C}^{n\times r},\, X^*X = I_r} \sum_{l=1}^{r} R_A(X_l) = \sum_{l=1}^{r} R_A(\mathbf{u}_{n-l+1}).$$

Kao što smo pokazali da vrijede verzije Rayleigh-Ritzovog teorema, njegovog korolara i napomene za simetričnu matricu koje daju realno rješenje problema optimizacije Rayleighovog kvocijenta tako vrijede i verzije korolara i napomene koje daju realno rješenje problema optimizacije sume Rayleighovih kvocijenta za simetričnu matricu.

Korolar 2.2.5. *Neka je matrica $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simetrična sa svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$ poredanim po veličini. Neka je $r \in \{1, \ldots, n\}$ proizvoljan i neka je $X = [X_1\ X_2 \cdots X_r] \in \mathbb{R}^{n\times r}$ matrica sa stupcima $X_1, X_2, \ldots, X_r$. Tada vrijedi:*

a)

$$\min_{X \in \mathbb{R}^{n\times r},\, X^TX = I_r} \sum_{l=1}^{r} R_A(X_l) = \min_{X \in \mathbb{R}^{n\times r},\, X^TX = I_r} \sum_{l=1}^{r} X_l^T A X_l = \sum_{l=1}^{r} \lambda_l, \tag{2.54}$$

b)

$$\max_{X \in \mathbb{R}^{n\times r},\, X^TX = I_r} \sum_{l=1}^{r} R_A(X_l) = \max_{X \in \mathbb{R}^{n\times r},\, X^TX = I_r} \sum_{l=1}^{r} X_l^T A X_l = \sum_{l=n-r+1}^{n} \lambda_l. \tag{2.55}$$

Napomena 2.2.6. *Matrice za koje se postižu vrijednosti minimuma u izrazu 2.54 te maksimuma u izrazu 2.55 su matrice koje za stupce imaju ortonormirane svojstvene vektore pridružene svojstvenim vrijednostima čije sume minimiziraju, odnosno maksimiziraju navedene izraze. Uz iste oznake za simetričnu matricu* $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *s ortonormiranim svojstvenim vektorima* $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ *redom pridruženih svojstvenim vrijednostima* $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$ *poredanim po veličini,* $r \in \{1, \ldots, n\}$ *te matricu* $X = [X_1\ X_2 \cdots X_r] \in \mathbb{R}^{n\times r}$ *vrijedi:*

a) $$\sum_{l=1}^{r} \lambda_l = \min_{X\in\mathbb{R}^{n\times r},\, X^TX=I_r} \sum_{l=1}^{r} R_A(X_l) = \sum_{l=1}^{r} R_A(\mathbf{u}_l),$$

b) $$\sum_{l=n-r+1}^{n} \lambda_l = \max_{X\in\mathbb{R}^{n\times r},\, X^TX=I_r} \sum_{l=1}^{r} R_A(X_l) = \sum_{l=1}^{r} R_A(\mathbf{u}_{n-l+1}).$$

Rješenje relaksiranog problema minimizacije

Direktnom primjenom korolara 2.2.5 dobijemo rješenje problema minimizacije funkcije σ iz 2.49. Pokazat ćemo da je rješenje problema minimizacije iz 2.49 matrica čiji su stupci svojstveni vektori matrice L_{norm} redom pridruženi prvim k svojstvenim vrijednostima.

Propozicija 2.2.7. *Neka je* $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ *težinski neusmjereni graf pri čemu je skup vrhova* $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$*. Neka je* $L_{norm} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *normalizirana Laplaceova matrica grafa* $\mathbb{G}$*. Neka su* $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ *ortonormirani svojstveni vektori matrice* L_{norm} *redom pridruženi svojstvenim vrijednostima* $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$ *poredanim po veličini. Neka je* $U = [\mathbf{u}_1\ \mathbf{u}_2 \cdots \mathbf{u}_k] \in \mathbb{R}^{n\times k}$ *matrica čiju su stupci svojstveni vektori* $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_k$*. Tada vrijedi:*

$$\frac{1}{k} \sum_{l=1}^{k} \lambda_l = \min_{Z\in\mathbb{R}^{n\times k},\, Z^TZ=I_k} \sigma(Z) = \sigma(U),$$

odnosno matrica U je rješenje relaksiranog problema minimizacije funkcije σ *iz 2.49.*

Dokaz. Matrica L_{norm} je simetrična pa iz korolara 2.2.5 i napomene 2.2.6 slijedi da je

$$\sum_{l=1}^{k} \lambda_l = \min_{Z\in\mathbb{R}^{n\times k},\, Z^TZ=I_k} \sum_{l=1}^{k} R_{L_{norm}}(Z_l) = \sum_{l=1}^{k} R_{L_{norm}}(\mathbf{u}_l),$$

pa vrijedi

$$\frac{1}{k} \sum_{l=1}^{k} \lambda_l = \min_{Z\in\mathbb{R}^{n\times k},\, Z^TZ=I_k} \frac{1}{k} \sum_{l=1}^{k} R_{L_{norm}}(Z_l) = \frac{1}{k} \sum_{l=1}^{k} R_{L_{norm}}(\mathbf{u}_l).$$

Već smo u izrazu 2.50 pokazali da ako vrijedi uvjet $Z^TZ = I_k$ onda je

$$\sigma(Z) = \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} R_{L_{norm}}(Z_l),$$

pa slijedi

$$\frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k}\lambda_l = \min_{Z\in\mathbb{R}^{n\times k},\, Z^TZ=I_k} \sigma(Z) = \sigma(U),$$

što je upravo tvrdnja propozicije. □

Sljedeća lema o rezu višečlane particije 2.2.8 nam daje rješenje problema minimizacije normaliziranog reza višečlane particije iz 2.35.

Lema 2.2.8. *(Lema o rezu višečlane particije)*
Neka je $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ težinski neusmjereni graf pri čemu je skup vrhova $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$. Neka je $L_{norm} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ normalizirana Laplaceova matrica grafa $\mathbb{G}$ i neka je $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ k-člana particija skupa $\mathbb{V}$. Neka su $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ ortonormirani svojstveni vektori matrice L_{norm} redom pridruženi svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \le \lambda_2 \le \ldots \le \lambda_n$ poredanim po veličini. Neka je $U = [\mathbf{u}_1\ \mathbf{u}_2 \cdots \mathbf{u}_k] \in \mathbb{R}^{n\times k}$ matrica čiju su stupci svojstveni vektori $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_k$. Tada vrijedi:

$$\min k\text{-}Ncut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k}\lambda_l,$$

te se minimum postiže ako i samo ako matrica $D^{-\frac{1}{2}}U$ ima po dijelovima konstantne stupce s obzirom na particiju $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$.

Dokaz. Prvo pokažimo da vrijedi $\min k\text{-}Ncut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) \ge \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k}\lambda_l$.
Iz izraza 2.36 i 2.43 slijedi

$$k\text{-}Ncut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k}\frac{X_l^TLX_l}{X_l^TDX_l} = \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k} Z_l^TL_{norm}Z_l = \frac{1}{k}tr(Z^TL_{norm}Z) = \sigma(Z).$$

Problem minimizacije normaliziranog reza višečlane particije iz 2.35 ekvivalentan je problemu minimizacije funkcije ξ iz 2.38, a iz propozicije 2.2.2 slijedi da je problem minimizacije funkcije ξ iz 2.38 ekvivalentan problemu minimizacije funkcije σ iz 2.45 pa su onda problemi minimizacije normaliziranog reza višečlane particije iz 2.35 i minimizacije funkcije σ iz 2.45 ekvivalentni. Onda vrijedi:

$$\min k\text{-}Ncut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \min_{D^{-\frac{1}{2}}Z\, diag(\beta_1,\ldots,\beta_k)\in\{0,1\}^{n\times k},\, Z^TZ=I_k} \sigma(Z).$$

Iz propozicije 2.2.7 slijedi

$$\frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k}\lambda_l = \min_{Z\in\mathbb{R}^{n\times k},\, Z^TZ=I_k}\sigma(Z) = \sigma(U).$$

Minimum po podskupu je veći ili jednak minimumu nadskupa pa vrijedi

$$\begin{aligned}\min k\text{-}Ncut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) &= \min_{D^{-\frac{1}{2}}Z\,diag(\beta_1,\ldots,\beta_k)\in\{0,1\}^{n\times k},\, Z^TZ=I_k}\sigma(Z) \geq \\ &\geq \min_{Z\in\mathbb{R}^{n\times k},\, Z^TZ=I_k}\sigma(Z) = \sigma(U) = \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k}\lambda_l.\end{aligned}$$

U gornjem izrazu se jednakost postiže ako i samo ako vrijedi $D^{-\frac{1}{2}}U\ \ diag(\beta_1,\ldots,\beta_k) \in \{0,1\}^{n\times k}$. Primijetimo da je uvjet $D^{-\frac{1}{2}}U\ diag(\beta_1,\ldots,\beta_k) \in \{0,1\}^{n\times k}$ ekvivalentan uvjetu da matrica $D^{-\frac{1}{2}}U$ ima po dijelovima konstantne stupce s obzirom na particiju $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$.

□

Diskretizacija

U propoziciji 2.2.7 smo pokazali da je neprekidno rješenje relaksiranog problema minimizacije funkcije σ iz 2.49 dano matricom U čiji su stupci svojstveni vektori matrice L_{norm} redom pridruženi prvim k svojstvenim vrijednostima. Po lemi o rezu višečlane particije 2.2.8 slijedi da ako matrica $D^{-\frac{1}{2}}U$ ima po dijelovima konstantne stupce s obzirom na particiju $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ onda je particija $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ rješenje problema minimizacije normaliziranog reza višečlane particije iz 2.35. Kako u praksi često nije zadovoljen uvjet da matrica $D^{-\frac{1}{2}}U$ ima po dijelovima konstantne stupce onda želimo iz neprekidnog rješenja relaksiranog problema minimizacije, odnosno iz matrice $D^{-\frac{1}{2}}U$, dobiti približno diskretno rješenje za problem minimizacije normaliziranog reza višečlane particije iz 2.35.

Iz izraza 2.41 slijedi $Y = D^{\frac{1}{2}}X$, a iz izraza 2.48 slijedi $Z = Y(Y^TY)^{-\frac{1}{2}}$ pa je

$$Z = Y(Y^TY)^{-\frac{1}{2}} = D^{\frac{1}{2}}X((D^{\frac{1}{2}}X)^TD^{\frac{1}{2}}X)^{-\frac{1}{2}} = D^{\frac{1}{2}}X(X^TD^{\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}X)^{-\frac{1}{2}} = D^{\frac{1}{2}}X(X^TDX)^{-\frac{1}{2}}.$$

Neka je $f\colon \{0,1\}^{n\times k} \to \mathbb{R}^{n\times k}$ funkcija koja preslikava matricu X u matricu Z,

$$Z = f(X) = D^{\frac{1}{2}}X(X^TDX)^{-\frac{1}{2}}.$$

Sljedeća propozicija nam daje inverz funkcije f.

Propozicija 2.2.9. *Neka je funkcija $f^{-1}\colon \{0,1\}^{n\times k} \to \mathbb{R}^{n\times k}$ definirana s*

$$f^{-1}(Z) = diag(Diag(D^{-\frac{1}{2}}ZZ^T D^{-\frac{1}{2}}))^{-\frac{1}{2}}\ D^{-\frac{1}{2}}Z,$$

pri čemu je Diag operator koji kvadratnoj matrici pridružuje vektor koji sadrži njezine dijagonalne elemente. Tada je

$$f^{-1}(Z) = X.$$

Dokaz. U izrazu 2.47 smo pokazali da je Y^TY dijagonalna matrica pa je i X^TDX dijagonalna matrica, a onda je $(X^TDX)^{-\frac{1}{2}}$ dijagonalna matrica te vrijedi

$$(X^TDX)^{-\frac{1}{2}} = diag((X_1^TDX_1)^{-\frac{1}{2}}, (X_2^TDX_2)^{-\frac{1}{2}}, (X_k^TDX_k)^{-\frac{1}{2}}).$$

Označimo sa $Q = D^{-\frac{1}{2}}Z$ pa onda vrijedi $Q = X(X^TDX)^{-\frac{1}{2}}$. Označimo sa $Q_1, Q_2, \ldots, Q_k$ stupce matrice Q tako da vrijedi $Q = [Q_1\ Q_2 \cdots Q_k]$. Kako je matrica $(X^TDX)^{-\frac{1}{2}}$ dijagonalna onda matrica Q sadrži iste stupce kao i matrica X, ali skalirane s inverzom korijena stupnjeva klastera, odnosno vrijedi $Q_l = (X_l^TDX_l)^{-\frac{1}{2}}X_l$. Primijetimo da je

$$QQ^T = X(X^TDX)^{-\frac{1}{2}}(X(X^TDX)^{-\frac{1}{2}})^T = X(X^TDX)^{-\frac{1}{2}}(X^TDX)^{-\frac{1}{2}}X^T = X(X^TDX)^{-1}X^T,$$

Kako je $(X^TDX)^{-1}$ dijagonalna matrica onda vrijedi

$$\begin{aligned} QQ^T &= X(X^TDX)^{-1}X^T = \\ &= \left[(X_1^TDX_1)^{-1}X_1\ \ (X_2^TDX_2)^{-1}X_2\ \cdots\ (X_k^TDX_k)^{-1}X_k\right][X_1\ X_2 \cdots X_k]^T. \end{aligned}$$

Primijetimo da svaki redak matrice X sadrži na točno jednom mjestu vrijednost 1, a sve ostale vrijednosti u retku su 0. Isto vrijedi i za stupce matrice X^T, a redci matrice $X(X^TDX)^{-1}$ sadrže točno jednu netrivijalnu vrijednost. Označimo za $i \in \{1,\ldots,n\}$ s $p(i)$ poziciju netrivijalne vrijednosti u i-tom retku matrice X. Onda vrijedi:

$$\begin{aligned} Diag(QQ^T) &= Diag(\left[(X_1^TDX_1)^{-1}X_1\ \cdots\ (X_k^TDX_k)^{-1}X_k\right][X_1 \cdots X_k]^T) = \\ &= ((X_{p(1)}^TDX_{p(1)})^{-1}X_{p(1)}X_{p(1)}^T, \ldots, (X_{p(n)}^TDX_{p(n)})^{-1}X_{p(n)}X_{p(n)}^T) = \\ &= ((X_{p(1)}^TDX_{p(1)})^{-1}, \ldots, (X_{p(n)}^TDX_{p(n)})^{-1}), \end{aligned}$$

pa je

$$\begin{aligned} diag(Diag(QQ^T))^{-\frac{1}{2}} &= diag((X_{p(1)}^TDX_{p(1)})^{-1}, \ldots, (X_{p(n)}^TDX_{p(n)})^{-1})^{-\frac{1}{2}} = \\ &= diag((X_{p(1)}^TDX_{p(1)})^{\frac{1}{2}}, \ldots, (X_{p(n)}^TDX_{p(n)})^{\frac{1}{2}}) = \\ &= diag((X_{p(1)}^TDX_{p(1)}), \ldots, (X_{p(n)}^TDX_{p(n)}))^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Primijetimo da je

$$
\begin{aligned}
diag(Diag(QQ^T))^{-\frac{1}{2}}Q &= diag((X_{p(1)}^T DX_{p(1)}), \ldots, (X_{p(n)}^T DX_{p(n)}))^{\frac{1}{2}}\, X\, (X^T DX)^{-\frac{1}{2}} = \\
&= diag((X_{p(1)}^T DX_{p(1)})^{\frac{1}{2}}, \ldots, (X_{p(n)}^T DX_{p(n)})^{\frac{1}{2}}) \left[(X_1^T DX_1)^{-\frac{1}{2}}X_1 \;\cdots\; (X_k^T DX_k)^{-\frac{1}{2}}X_k\right] = \\
&= \left[(X_1^T DX_1)^{\frac{1}{2}}(X_1^T DX_1)^{-\frac{1}{2}}X_1 \;\cdots\; (X_k^T DX_k)^{\frac{1}{2}}(X_k^T DX_k)^{-\frac{1}{2}}X_k\right] = \\
&= [X_1\, X_2 \cdots X_k] = X,
\end{aligned}
$$

pa zbog

$$
\begin{aligned}
diag(Diag(QQ^T))^{-\frac{1}{2}}Q &= diag(Diag(D^{-\frac{1}{2}}Z(D^{-\frac{1}{2}}Z)^T))^{-\frac{1}{2}}D^{-\frac{1}{2}}Z = \\
&= diag(Diag(D^{-\frac{1}{2}}ZZ^T D^{-\frac{1}{2}}))^{-\frac{1}{2}}\; D^{-\frac{1}{2}}Z,
\end{aligned}
$$

vrijedi

$$
f^{-1}(Z) = diag(Diag(D^{-\frac{1}{2}}ZZ^T D^{-\frac{1}{2}}))^{-\frac{1}{2}}\; D^{-\frac{1}{2}}Z = X.
$$

□

Za matricu U koja je rješenje relaksiranog problema minimizacije funkcije σ iz 2.49 vrijedi da je $\hat{X} = f^{-1}(U)$ rješenje relaksirane verzije problema minimizacije funkcije ξ iz 2.38. Kako bi dobili približno diskretno rješenje problema minimizacije iz 2.38 potrebno je napraviti diskretizaciju matrice $\hat{X}$. Jednostavan način za diskretizaciju matrice $\hat{X}$ je da u svakom retku matrice $\hat{X}$ postavimo vrijednost 1 na poziciju na kojoj se nalazi najveća vrijednost u retku, a ostale vrijednosti retka postavimo na 0, odnosno za rješenje uzmemo matricu $\widetilde{X} \in \mathbb{R}^{n\times k}$ definiranu s:

$$
\widetilde{X}(i, j) = \begin{cases} 1, & j = \arg\max_{l\in\{1,\ldots,k\}} \hat{X}(i, l), \\ 0, & \text{inače.} \end{cases}
$$

Yu i Shi u [20] su koristili iterativnu metodu kako bi pronašli diskretno rješenje koje je najbliže neprekidnom rješenju. Naime, problem minimizacije funkcije σ iz 2.49 ima svojstvo ortonormirane invarijantnosti.

Propozicija 2.2.10. *Neka je $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ težinski neusmjereni graf pri čemu je skup vrhova $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$. Neka je $L_{norm} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ normalizirana Laplaceova matrica grafa $\mathbb{G}$. Neka je matrica $Z \in \mathbb{R}^{n\times k}$ rješenje problema minimizacije funkcije σ iz 2.49. Tada je $\{ZR \mid R \in \mathbb{R}^{n\times k}, R^T R = I_k\}$ skup rješenja za problem minimizacije funkcije σ iz 2.49 te vrijedi $\sigma(ZR) = \sigma(Z)$.*

Dokaz. Neka je $R \in \mathbb{R}^{n\times k}$ ortogonalna matrica, odnosno vrijedi $R^T R = I_k$ pa je [7]

$$\begin{aligned}\sigma(ZR) &= \frac{1}{k}tr((ZR)^T L_{norm} ZR) = \frac{1}{k}tr(R^T Z^T L_{norm} ZR) = \frac{1}{k}tr(Z^T L_{norm} ZRR^T) = \\ &= \frac{1}{k}tr(Z^T L_{norm} Z I_k) = \frac{1}{k}tr(Z^T L_{norm} Z) = \sigma(Z).\end{aligned} \tag{2.56}$$

Preostaje provjeriti da ako matrica Z zadovoljava uvjet $Z^T Z = I_k$ onda matrica ZR zadovoljava uvjet $(ZR)^T(ZR) = I_k$. Neka vrijedi uvjet $Z^T Z = I_k$ za matricu Z onda je

$$(ZR)^T(ZR) = R^T Z^T ZR = R^T I_k R = R^T R = I_k,$$

čime smo pokazali da je matrica ZR rješenje problema minimizacije funkcije σ iz 2.49. □

Za $\hat{X}$, rješenje relaksirane verzije problema minimizacije funkcije ξ iz 2.38, diskretno rješenje problema minimizacije funkcije ξ iz 2.38 možemo dobiti kao rješenje sljedećeg problema optimizacije:

$$\begin{cases} \phi(X,R) = \left\|X - \hat{X}R\right\|_F^2 \to min, \\ X \in \{0,1\}^{n\times k}, \\ X\mathbf{1}_k = \mathbf{1}_n, \\ R^T R = I_k. \end{cases} \tag{2.57}$$

Yu i Shi ([20]) su pokazali da se za problem minimizacije iz 2.57 može pronaći približno rješenje, odnosno lokalni optimum koristeći iterativni postupak ponavljanjem alternirajućih koraka:

- za fiksni R minimiziramo $\phi(X,R)$ u odnosu na X, odnosno tražimo rješenje problema minimizacije:

$$\begin{cases} \phi(X) = \left\|X - \hat{X}R\right\|_F^2 \to min, \\ X \in \{0,1\}^{n\times k}, \\ X\mathbf{1}_k = \mathbf{1}_n; \end{cases} \tag{2.58}$$

- za fiksni X minimiziramo $\phi(X,R)$ u odnosu na R, odnosno tražimo rješenje problema minimizacije:

$$\begin{cases} \phi(R) = \left\|X - \hat{X}R\right\|_F^2 \to min, \\ R^T R = I_k. \end{cases} \tag{2.59}$$

[7] U trećoj jednakosti u izrazu 2.56 koristimo svojstvo traga da za umnožak matrica $A \in \mathbb{R}^{n\times m}, B \in \mathbb{R}^{m\times n}$ vrijedi $tr(AB) = tr(BA)$.

Diskretizaciju neprekidnog rješenja relaksiranog problema minimizacije su Ng, Jordan i Weiss u [15] napravili tako da su redove matrice koja se dobije iz matrice U normaliziranjem njezinih redaka klasterirali kao točke u $\mathbb{R}^k$, a zatim su napravili particiju skupa vrhova tako da za svaki $i, j \in \{1, \ldots, k\}$ vrijedi da se vrhovi v_i i v_j nalaze u istom klasteru ako i samo ako se i-ti i j-ti redak matrice U s normaliziranim recima nalaze u istom klasteru. Za klasteriranje redaka su koristili algoritam k - sredina. Kako ćemo za diskretizaciju neprekidnog rješenja kod spektralnog klasteriranja usmjerenog grafa koristiti metodu klasteriranja redova matrice neprekidnog rješenja pomoću algoritma k - sredina, onda ćemo tu metodu primijeniti i ovdje za diskretizaciju matrice $D^{-\frac{1}{2}}U$, odnosno neprekidnog rješenja kod spektralnog klasteriranja neusmjerenog grafa.

Poglavlje 3

Spektralni rezovi u težinskim usmjerenim grafovima

Spektralno particioniranje neusmjerenog grafa ćemo generalizirati na spektralno particioniranje usmjerenog grafa. Za početak promotrimo koja je razlika između klasteriranja usmjerenog i neusmjerenog grafa te zašto metodu minimizacije spektralnog normaliziranog reza particije neusmjerenog grafa ne možemo primijeniti na usmjereni graf. Težinski neusmjereni graf ima simetričan skup bridova pa postoji dodatan uvjet na težinsku funkciju u odnosu na težinski usmjereni graf. Za težinski neusmjereni graf $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ vrijedi

$$(\forall (u, v) \in \mathbb{E}) \;\; w(u, v) = w(v, u),$$

pa je njegova matrica susjedstva W simetrična iz čega slijedi da su Laplaceova matrica L i normalizirana Laplaceova matrica L_{norm} težinskog neusmjerenog grafa simetrične. Upravo simetričnost normalizirane Laplaceove matrice nam je omogućila da problem minimizacije normaliziranog reza riješimo primjenom Rayleigh-Ritzovog teorema 2.1.10 i njegovih korolara 2.1.11 i 2.2.3 koji zahtijevaju da matrica čije Rayleighove kvocijente minimiziramo bude simetrična. U Rayleigh-Ritzovom teoremu 2.1.10 je pak uvjet da matrica bude simetrična, odnosno hermitska potreban kako bismo mogli primijeniti spektralni teorem za hermitske matrice 2.1.9. Za usmjereni graf, matrica susjedstva W nije simetrična pa onda nisu simetrične ni Laplaceova matrica L niti normalizirana Laplaceova matrica L_{norm}. Zato za normaliziranu Laplaceovu matricu ne možemo primijeniti Rayleigh-Ritzov teorem 2.1.10.

Kako je nam je uvjet da matrica susjedstva W bude simetrična potreban za minimizaciju normaliziranog reza onda se nameće ideja da matricu susjedstva W za usmjereni graf simetriziramo i primijenimo metodu minimizacije normaliziranog reza particije za tu simetriziranu matricu. Tako ćemo umjesto direktnog klasteriranja usmjerenog grafa, klasterirati neusmjereni graf koji dobijemo simetrizacijom usmjerenog grafa. Najčešće se koriste sljedeće transformacije matrice susjedstva W kako bi se dobila simetrična matrica susjedstva $\widetilde{W}$:

- $\widetilde{W} = W + W^T$,
- $\widetilde{W} = W^T W$,
- $\widetilde{W} = \begin{bmatrix} 0 & W \\ W^T & 0 \end{bmatrix}$.

Simetrizacija matrice susjedstva na jednostavan način omogućava primjenu metode minimizacije normaliziranog reza particije neusmjerenog grafa i u slučaju kada je graf usmjeren. Ali, korištenje metoda simetrizacije ima manu da klastering koji je prisutan kod originalne asimetrične matrice susjedstva W može postati nevidljiv nakon simetrizacije, što navode i demonstriraju Meila i Pentney u [11].

3.1 Spektralni težinski rez particije usmjerenog grafa

Metodu spektralnog particioniranja minimizacijom težinskog reza particije usmjerenog grafa koja je opisana u ovom potpoglavlju razvili su Meila i Pentney u [11]. Ova metoda koristi isti pristup kao i metode spektralnog particioniranja neusmjerenog grafa minimizacijom normaliziranog reza, prvo rješavamo relaksirani problem minimizacije koji daje neprekidno rješenje, a zatim njegovom diskretizacijom dobivamo rješenja za originalni problem diskretne minimizacije težinskog reza. Kako je problem minimizacije normaliziranog reza particije neusmjerenog grafa NP-težak problem onda je i njegova generalizacija, problem minimizacije težinskog reza particije usmjerenog grafa također NP-težak problem.

Neka je $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ težinski usmjereni graf i neka je $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ k-člana particija skupa vrhova $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$. Težinski rez k-člane particije $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ je:

$$k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \sum_{l=1}^{k} \sum_{l'=1, l' \neq l}^{k} \frac{wlinks(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}_{l}')}{vol(\mathbb{V}_l)},$$

pri čemu za proizvoljne $\mathbb{A}, \mathbb{B} \subseteq \mathbb{V}$ vrijedi

$$vol(\mathbb{A}) = \sum_{a \in \mathbb{A}} vw(a) \qquad \text{i} \qquad wlinks(\mathbb{A}, \mathbb{B}) = \sum_{a \in \mathbb{A}, b \in \mathbb{B}} rw(a)\, w(a, b),$$

gdje su rw i vw retčana i volumna težinska funkcija. Cilj nam je riješiti sljedeći problem minimizacije:

$$\begin{cases} k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) \to min, \\ \mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k \text{ je } k\text{-člana particija od } \mathbb{V}. \end{cases} \tag{3.1}$$

Matrični zapis

Matricu susjedstva $W = \left[w(v_i, v_j)\right]_{i,j\in\{1,\ldots,n\}}$, matricu stupnjeva $D = diag(W\mathbf{1}_n)$, Laplaceovu matricu $L = D - W$ smo definirali u definiciji 2.1.1, a indikatorsku matricu k-člane particije $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ smo definirali u definiciji 2.2.1. Neka je X indikatorska matrica k-člane particije $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ skupa vrhova $\mathbb{V}$ te označimo stupce matrice X s $X_1, X_2, \ldots, X_k$ tako da vrijedi $X = [X_1\ X_2 \cdots\ X_k]$.

Definicija 3.1.1. *Neka je $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ težinski usmjereni graf pri čemu je skup vrhova $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$. Neka je $rw\colon \mathbb{V} \to \mathbb{R}_{>0}$ retčana težinska funkcija, a $vw\colon \mathbb{V} \to \mathbb{R}_{>0}$ volumna težinska funkcija.*
Matrica retčanih težina težinskog usmjerenog grafa $\mathbb{G}$ *je matrica*

$$T_r = diag(rw(v_1), rw(v_2), \ldots, rw(v_n).$$

Matrica volumnih težina težinskog usmjerenog grafa $\mathbb{G}$ *je matrica*

$$T_v = diag(vw(v_1), vw(v_2), \ldots, vw(v_n)).$$

Želimo težinski rez k-člane particije, odnosno težinski stupanj povezanosti skupova i volumen skupa definirati matrično kako bismo mogli primijeniti rezultate iz područja spektralne analize. Za $l \in \{1, \ldots, k\}$ volumen skupa $\mathbb{V}_l$ možemo zapisati kao

$$vol(\mathbb{V}_l) = \sum_{v\in\mathbb{V}_l} vw(v) = \sum_{i=1}^{n} X_{i,l}\,(T_v)_{i,i} = X_l^T T_v X_l.$$

Primijetimo da za $l \in \{1, \ldots, k\}$ vrijedi

$$
\begin{aligned}
\sum_{l'=1, l'\neq l}^{k} wlinks(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}'_l) &= \sum_{l'=1}^{k} wlinks(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}'_l) - wlinks(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}_l) = \\
&= \sum_{l'=1}^{k} \sum_{a\in\mathbb{V}_l} \sum_{b\in\mathbb{V}'_l} rw(a)\, w(a,b) - \sum_{a\in\mathbb{V}_l, b\in\mathbb{V}_l} rw(a)\, w(a,b) = \\
&= \sum_{a\in\mathbb{V}_l} \sum_{b\in\mathbb{V}} rw(a)\, w(a,b) - \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} X_{i,l} (T_r)_{i,i} w(v_i, v_j) X_{j,l} = \\
&= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} X_{i,l} (T_r)_{i,i}\, w(v_i, v_j) - X_l^T T_r W X_l = \\
&= \sum_{i=1}^{n} X_{i,l} (T_r)_{i,i} \sum_{j=1}^{n} w(v_i, v_j) - X_l^T T_r W X_l = \\
&= \sum_{i=1}^{n} X_{i,l} (T_r)_{i,i} D_{i,i} - X_l^T T_r W X_l = \\
&= X_l T_r D X_l - X_l T_r W X_l = X_l^T (T_r D - T_r W) X_l,
\end{aligned}
$$

pa je

$$
\begin{aligned}
k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) &= \sum_{l=1}^{k} \sum_{l'=1, l'\neq l}^{k} \frac{wlinks(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}'_l)}{vol(\mathbb{V}_l)} = \sum_{l=1}^{k} \frac{1}{vol(\mathbb{V}_l)} \sum_{l'=1, l'\neq l}^{k} wlinks(\mathbb{V}_l, \mathbb{V}'_l) = \\
&= \sum_{l=1}^{k} \frac{1}{X_l^T T_v X_l} X_l^T (T_r D - T_r W) X_l = \\
&= \sum_{l=1}^{k} \frac{X_l^T (T_r D - T_r W) X_l}{X_l^T T_v X_l}.
\end{aligned}
$$

Primijetimo da bez smanjenja općenitosti možemo pretpostaviti da je $T_r = I_k$ jer inače možemo uzeti $T_r D$ umjesto D i $T_r W$ umjesto W. U nastavku pretpostavljamo da je $T_r = I_k$, pa onda dobijemo

$$
k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \sum_{l=1}^{k} \frac{X_l^T (D - W) X_l}{X_l^T T_v X_l} = \sum_{l=1}^{k} \frac{X_l^T L X_l}{X_l^T T_v X_l}.
$$

Slično kao i za spektralni normalizirani rez neusmjerenog grafa za $l \in \{1, \ldots, k\}$ označimo s

$$Z_l = T_v^{\frac{1}{2}} X_l (X_l^T T_v X_l)^{-\frac{1}{2}}, \tag{3.2}$$

onda vrijedi

$$\begin{aligned}\sum_{l=1}^{k} Z_l^T T_v^{-\frac{1}{2}} L T_v^{-\frac{1}{2}} Z_l &= \sum_{l=1}^{k} (T_v^{\frac{1}{2}} X_l (X_l^T T_v X_l)^{-\frac{1}{2}})^T T_v^{-\frac{1}{2}} L T_v^{-\frac{1}{2}} T_v^{\frac{1}{2}} X_l (X_l^T T_v X_l)^{-\frac{1}{2}} = \\ &= \sum_{l=1}^{k} (X_l^T T_v X_l)^{-\frac{1}{2}} X_l^T T_v^{\frac{1}{2}} T_v^{-\frac{1}{2}} L T_v^{-\frac{1}{2}} T_v^{\frac{1}{2}} X_l (X_l^T T_v X_l)^{-\frac{1}{2}} = \\ &= \sum_{l=1}^{k} (X_l^T T_v X_l)^{-\frac{1}{2}} X_l^T L X_l (X_l^T T_v X_l)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{l=1}^{k} \frac{X_l^T L X_l}{X_l^T T_v X_l},\end{aligned}$$

iz čega slijedi

$$k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \sum_{l=1}^{k} \frac{X_l^T L X_l}{X_l^T T_v X_l} = \sum_{l=1}^{k} Z_l^T T_v^{-\frac{1}{2}} L T_v^{-\frac{1}{2}} Z_l.$$

Označimo s

$$B = T_v^{-\frac{1}{2}} L T_v^{-\frac{1}{2}},$$

onda vrijedi

$$k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \sum_{l=1}^{k} Z_l^T T_v^{-\frac{1}{2}} L T_v^{-\frac{1}{2}} Z_l = \sum_{l=1}^{k} Z_l^T B Z_l. \tag{3.3}$$

Definicija 3.1.2. *Neka je kvadratna matrica $A \in R^{n\times n}$ proizvoljna.* Hermitski dio matrice A*, u oznaci $H(A)$, definiramo s*

$$H(A) = \frac{1}{2}\left(A + A^T\right).$$

Propozicija 3.1.3. *Neka je $A \in R^{n\times n}$ kvadratna matrica. Tada vrijedi:*

- *H(A) je simetrična matrica,*
- *H(A) ima nenegativne elemente ako A ima nenegativne elemente.*

Dokaz. Primijetimo da je

$$H(A)^T = \frac{1}{2}\left(A + A^T\right)^T = \frac{1}{2}\left((A^T)^T + A^T\right) = \frac{1}{2}\left(A + A^T\right) = H(A),$$

odnosno H(A) je simetrična matrica. Neka matrica A ima nenegativne elemente, onda matrica A^T ima nenegativne elemente iz čega slijedi da matrica $A + A^T$ ima nenegativne elementa, odnosno matrica H(A) ima nenegativne elemente. □

Primijetimo da je

$$X^T T_v X = [X_1 \cdots X_k]^T \, T_v \, [X_1 \cdots X_k] == \left[X_l^T T_v X_{l'}\right]_{l,l' \in \{1,\ldots,k\}} = \\ = diag(X_1^T T_v X_1, \ldots, X_k^T T_v X_k).$$

Kako je matrica $X^T T_v X$ dijagonalna onda vrijedi

$$(X^T T_v X)^{-\frac{1}{2}} = diag(X_1^T T_v X_1, X_2^T T_v X_2, \ldots, X_k^T T_v X_k)^{-\frac{1}{2}} = \\ = diag((X_1^T T_v X_1)^{-\frac{1}{2}}, (X_2^T T_v X_2)^{-\frac{1}{2}}, \ldots, (X_k^T T_v X_k)^{-\frac{1}{2}}),$$

pa slijedi

$$\begin{aligned} Z = [Z_1 \, Z_2 \cdots Z_k] &= \left[T_v^{\frac{1}{2}} X_1 (X_1^T T_v X_1)^{-\frac{1}{2}} \ \cdots \ T_v^{\frac{1}{2}} X_k (X_k^T T_v X_k)^{-\frac{1}{2}}\right] = \\ &= \left[T_v^{\frac{1}{2}} X_1 \ \cdots \ T_v^{\frac{1}{2}} X_k\right] diag((X_1^T T_v X_1)^{-\frac{1}{2}}, \ldots, (X_k^T T_v X_k)^{-\frac{1}{2}}) = \\ &= T_v^{\frac{1}{2}} \, [X_1 \cdots X_k] \, diag((X_1^T T_v X_1)^{-\frac{1}{2}}, \ldots, (X_k^T T_v X_k)^{-\frac{1}{2}}) == T_v^{\frac{1}{2}} X (X^T T_v X)^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Primijetimo da je

$$\begin{aligned} Z^T Z &= (T_v^{\frac{1}{2}} X (X^T T_v X)^{-\frac{1}{2}})^T T_v^{\frac{1}{2}} X (X^T T_v X)^{-\frac{1}{2}} == (X^T T_v X)^{-\frac{1}{2}} X^T T_v^{\frac{1}{2}} T_v^{\frac{1}{2}} X (X^T T_v X)^{-\frac{1}{2}} \\ &= (X^T T_v X)^{-\frac{1}{2}} X^T T_v X (X^T T_v X)^{-\frac{1}{2}} = I_k, \end{aligned} \tag{3.5}$$

odnosno matrica Z ima ortonormirane stupce.

Rješenje relaksiranog problema minimizacije

Sljedeća lema o usmjerenom rezu višečlane particije 3.1.5 nam daje rješenje problema minimizacije težinskog reza višečlane particije iz 3.1, no prije leme dokazujemo propoziciju koju ćemo koristiti u dokazu leme.

Propozicija 3.1.4. *Neka je $Y = [Y_1 \, Y_2 \cdots Y_k] \in \mathbb{C}^{n \times k}$ matrica sa stupcima $Y_1, Y_2, \ldots, Y_k$. Tada za svaki $l \in \{1, \ldots, k\}$ vrijedi*

$$\mathrm{Re}\left(Y_l^* B Y_l\right) = Y_l^* H(B) Y_l.$$

Dokaz. Zbog $Y_l = \mathrm{Re}(Y_l) + i\,\mathrm{Im}(Y_l)$ vrijedi

$$\begin{aligned} Y_l^* B Y_l &= (\mathrm{Re}(Y_l) + i\,\mathrm{Im}(Y_l))^* \ B \ \mathrm{Re}(Y_l) + i\,\mathrm{Im}(Y_l) = \\ &= (\mathrm{Re}(Y_l) - i\,\mathrm{Im}(Y_l))^T \ B \ \mathrm{Re}(Y_l) + i\,\mathrm{Im}(Y_l) = \\ &= \mathrm{Re}(Y_l)^T \ B \ \mathrm{Re}(Y_l) + i\,\mathrm{Re}(Y_l)^T \ B \ \mathrm{Im}(Y_l) - i\,\mathrm{Im}(Y_l)^T \ B \ \mathrm{Re}(Y_l) - i^2\,\mathrm{Im}(Y_l)^T \ B \ \mathrm{Im}(Y_l) = \\ &= \left(\mathrm{Re}(Y_l)^T \ B \ \mathrm{Re}(Y_l) + \mathrm{Im}(Y_l)^T \ B \ \mathrm{Im}(Y_l)\right) + i\left(\mathrm{Re}(Y_l)^T \ B \ \mathrm{Im}(Y_l) - \mathrm{Im}(Y_l)^T \ B \ \mathrm{Re}(Y_l)\right), \end{aligned}$$

pa je

$$\mathrm{Re}\left(Y_l^* B Y_l\right) = \mathrm{Re}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Re}(Y_l) + \mathrm{Im}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Im}(Y_l). \tag{3.6}$$

Promotrimo sljedeći izraz

$$\begin{aligned}
Y_l^* H(B) Y_l = Y_l^* H(B) Y_l = &\\
&= (\mathrm{Re}(Y_l) + i\,\mathrm{Im}(Y_l))^*\, H(B)\, \mathrm{Re}(Y_l) + i\,\mathrm{Im}(Y_l) = \\
&= \mathrm{Re}(Y_l)^T\, H(B)\, \mathrm{Re}(Y_l) + i\,\mathrm{Re}(Y_l)^T\, H(B)\, \mathrm{Im}(Y_l) - \\
&\quad - i\,\mathrm{Im}(Y_l)^T\, H(B)\, \mathrm{Re}(Y_l) - i^2\,\mathrm{Im}(Y_l)^T\, H(B)\, \mathrm{Im}(Y_l) = \\
&= \left(\mathrm{Re}(Y_l)^T\, H(B)\, \mathrm{Re}(Y_l) + \mathrm{Im}(Y_l)^T\, H(B)\, \mathrm{Im}(Y_l)\right) + \\
&\quad + i\left(\mathrm{Re}(Y_l)^T\, H(B)\, \mathrm{Im}(Y_l) - \mathrm{Im}(Y_l)^T\, H(B)\, \mathrm{Re}(Y_l)\right) = \\
&= \frac{1}{2}\left(\mathrm{Re}(Y_l)^T\,(B + B^T)\,\mathrm{Re}(Y_l) + \mathrm{Im}(Y_l)^T\,(B + B^T)\,\mathrm{Im}(Y_l)\right) + \\
&\quad + \frac{i}{2}\left(\mathrm{Re}(Y_l)^T\,(B + B^T)\,\mathrm{Im}(Y_l) - \mathrm{Im}(Y_l)^T\,(B + B^T)\,\mathrm{Re}(Y_l)\right).
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Primijetimo da vrijedi

$$\begin{aligned}
\mathrm{Re}(Y_l)^T\,(B + B^T)\,\mathrm{Re}(Y_l) + \mathrm{Im}(Y_l)^T\,(B + B^T)\,\mathrm{Im}(Y_l) = &\\
&= \mathrm{Re}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Re}(Y_l) + \mathrm{Re}(Y_l)^T\, B^T\, \mathrm{Re}(Y_l) + \\
&\quad + \mathrm{Im}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Im}(Y_l) + \mathrm{Im}(Y_l)^T\, B^T\, \mathrm{Im}(Y_l) = \\
&= \mathrm{Re}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Re}(Y_l) + \left(\mathrm{Re}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Re}(Y_l)\right)^T + \\
&\quad + \mathrm{Im}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Im}(Y_l) + \left(\mathrm{Im}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Im}(Y_l)\right)^T = \\
&= \mathrm{Re}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Re}(Y_l) + \mathrm{Re}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Re}(Y_l) + \\
&\quad + \mathrm{Im}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Im}(Y_l) + \mathrm{Im}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Im}(Y_l) = \\
&= 2\,\mathrm{Re}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Re}(Y_l) + 2\,\mathrm{Im}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Im}(Y_l),
\end{aligned} \tag{3.8}$$

te vrijedi

$$\begin{aligned}
\mathrm{Re}(Y_l)^T\,(B + B^T)\,\mathrm{Im}(Y_l) - \mathrm{Im}(Y_l)^T\,(B + B^T)\,\mathrm{Re}(Y_l) = &\\
&= \mathrm{Re}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Im}(Y_l) + \mathrm{Re}(Y_l)^T\, B^T\, \mathrm{Im}(Y_l) - \\
&\quad - \mathrm{Im}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Re}(Y_l) - \mathrm{Im}(Y_l)^T\, B^T\, \mathrm{Re}(Y_l) = \\
&= \mathrm{Re}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Im}(Y_l) + \left(\mathrm{Im}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Re}(Y_l)\right)^T - \\
&\quad - \mathrm{Im}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Re}(Y_l) - \left(\mathrm{Re}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Im}(Y_l)\right)^T = \\
&= \mathrm{Re}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Im}(Y_l) + \mathrm{Im}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Re}(Y_l) - \\
&\quad - \mathrm{Im}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Re}(Y_l) - \mathrm{Re}(Y_l)^T\, B\, \mathrm{Im}(Y_l) = 0.
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Iz 3.7, 3.8 i 3.9 slijedi

$$
\begin{aligned}
Y_l^* H(B) Y_l &= \frac{1}{2}\Big(\mathrm{Re}(Y_l)^T\,(B+B^T)\,\mathrm{Re}(Y_l) + \mathrm{Im}(Y_l)^T\,(B+B^T)\,\mathrm{Im}(Y_l)\Big) + \\
&\quad + \frac{i}{2}\Big(\mathrm{Re}(Y_l)^T\,(B+B^T)\,\mathrm{Im}(Y_l) - \mathrm{Im}(Y_l)^T\,(B+B^T)\,\mathrm{Re}(Y_l)\Big) = \\
&= \frac{1}{2}\Big(2\,\mathrm{Re}(Y_l)^T\,B\,\mathrm{Re}(Y_l) + 2\,\mathrm{Im}(Y_l)^T\,B\,\mathrm{Im}(Y_l)\Big) + \frac{i}{2}\cdot 0 = \\
&= \mathrm{Re}(Y_l)^T\,B\,\mathrm{Re}(Y_l) + \mathrm{Im}(Y_l)^T\,B\,\mathrm{Im}(Y_l).
\end{aligned} \tag{3.10}
$$

Onda iz 3.6 i 3.10 slijedi da je

$$
\mathrm{Re}\left(Y_l^* B Y_l\right) = \mathrm{Re}(Y_l)^T\,B\,\mathrm{Re}(Y_l) + \mathrm{Im}(Y_l)^T\,B\,\mathrm{Im}(Y_l) = Y_l^* H(B) Y_l,
$$

čime je dokazana tvrdnja propozicije. □

Lema 3.1.5. *(Lema o usmjerenom rezu višečlane particije)*
Neka je $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, w)$ težinski usmjereni graf pri čemu je skup vrhova $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$. Neka je $L \in \mathbb{R}^{n\times n}$ Laplaceova matrica i neka je $T_v \in \mathbb{R}^{n\times n}$ matrica volumnih težina grafa $\mathbb{G}$. Neka je $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ k-člana particija skupa $\mathbb{V}$. Neka su $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ ortonormirani svojstveni vektori matrice $H(T_v^{-\frac{1}{2}} L T_v^{-\frac{1}{2}})$ redom pridruženi svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$ poredanim po veličini. Neka je $U = [\mathbf{u}_1\ \mathbf{u}_2 \cdots \mathbf{u}_k] \in \mathbb{R}^{n\times k}$ matrica čiju su stupci svojstveni vektori $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_k$. Tada vrijedi:

$$
k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \sum_{l=1}^{k} \lambda_l,
$$

te se minimum postiže ako i samo ako matrica $T_v^{-\frac{1}{2}} U$ ima po dijelovima konstantne stupce s obzirom na particiju $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$.

Dokaz. Prvo pokažimo da vrijedi $k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) \geq \sum_{l=1}^{k} \lambda_l$. Za $Z_l = T_v^{\frac{1}{2}} X_l (X_l^T T_v X_l)^{-\frac{1}{2}}$ i $B = T_v^{-\frac{1}{2}} L T_v^{-\frac{1}{2}}$ smo u 3.3 pokazali da vrijedi

$$
k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \sum_{l=1}^{k} Z_l^T B Z_l.
$$

Primijetimo da je

$$\begin{aligned}
k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) &= \sum_{l=1}^{k} Z_l^T B Z_l \geq \min_{Y=\left[Y_1\ Y_2\cdots\ Y_k\right]\in\mathbb{R}^{n\times k}, Y^T Y = I_k} \sum_{l=1}^{k} Y_l^T B Y_l \geq \\
&\geq \min_{Y=\left[Y_1\ Y_2\cdots\ Y_k\right]\in\mathbb{C}^{n\times k}, Y^* Y = I_k} \operatorname{Re}\left(\sum_{l=1}^{k} Y_l^* B Y_l\right) = \\
&= \min_{Y=\left[Y_1\ Y_2\cdots\ Y_k\right]\in\mathbb{C}^{n\times k}, Y^* Y = I_k} \sum_{l=1}^{k} \operatorname{Re}\left(Y_l^* B Y_l\right).
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Iz propozicije 3.1.4 slijedi da vrijedi $\operatorname{Re}\left(Y_l^* B Y_l\right) = Y_l^* H(B) Y_l$ za svaki $l \in \{1, \ldots, k\}$ pa vrijedi

$$\begin{aligned}
k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) &\geq \min_{Y=\left[Y_1\ Y_2\cdots\ Y_k\right]\in\mathbb{C}^{n\times k}, Y^* Y = I_k} \sum_{l=1}^{k} \operatorname{Re}\left(Y_l^* B Y_l\right) = \\
&= \min_{Y=\left[Y_1\ Y_2\cdots\ Y_k\right]\in\mathbb{C}^{n\times k}, Y^* Y = I_k} \sum_{l=1}^{k} Y_l^* H(B) Y_l.
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Po propoziciji 3.1.3 je matrica $H(B)$ simetrična pa onda iz korolara Rayleigh-Ritzovog teorema 2.2.3 slijedi da je

$$\min_{Y=\left[Y_1\ Y_2\cdots\ Y_k\right]\in\mathbb{C}^{n\times k}, Y^* Y = I_k} \sum_{l=1}^{k} R_{H(B)}(Y_l) = \min_{Y=\left[Y_1\ Y_2\cdots\ Y_k\right]\in\mathbb{C}^{n\times k}, Y^* Y = I_k} \sum_{l=1}^{k} Y_l^* H(B) Y_l = \sum_{l=1}^{k} \lambda_l,$$

pa vrijedi

$$k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) \geq \min_{Y=\left[Y_1\ Y_2\cdots\ Y_k\right]\in\mathbb{C}^{n\times k}, Y^* Y = I_k} \sum_{l=1}^{k} Y_l^* H(B) Y_l = \sum_{l=1}^{k} \lambda_l. \tag{3.13}$$

Preostaje pokazati da se minimum u 3.13 postiže ako i samo ako matrica $T_v^{-\frac{1}{2}} U$ ima po dijelovima konstantne stupce. Iz izraza 3.11, 3.12 i 3.13 slijedi

$$k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \sum_{l=1}^{k} Z_l^T B Z_l \geq \min_{Y=\left[Y_1\ Y_2\cdots\ Y_k\right]\in\mathbb{R}^{n\times k}, Y^T Y = I_k} \sum_{l=1}^{k} Y_l^T B Y_l \geq \tag{3.14}$$

$$\geq \min_{Y=\left[Y_1\ Y_2\cdots\ Y_k\right]\in\mathbb{C}^{n\times k}, Y^* Y = I_k} \operatorname{Re}\left(\sum_{l=1}^{k} Y_l^* B Y_l\right) = \tag{3.15}$$

$$= \min_{Y=\left[Y_1\ Y_2\cdots\ Y_k\right]\in\mathbb{C}^{n\times k}, Y^* Y = I_k} \sum_{l=1}^{k} Y_l^* H(B) Y_l = \sum_{l=1}^{k} \lambda_l. \tag{3.16}$$

Iz napomene 2.2.4 slijedi da se minimum u 3.16 postiže za $Y = U$, pa se onda i u 3.15 minimum postiže za $Y = U$. Kako su svojstvene vrijednosti $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ realne (što je pokazano u dokazu Rayleigh-Ritzov teorema 2.1.10, odnosno njegovog korolara 2.1.11), onda su ortonormirani svojstveni vektori $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ isto realni pa je nejednakost između 3.14 i 3.15 zapravo jednakost. Još treba pokazati da se prva nejednakost u 3.14 postiže ako i samo ako matrica $T_v^{-\frac{1}{2}} U$ ima po dijelovima konstantne stupce.

Neka je $\widetilde{\mathcal{F}}_{\mathbb{V}}^k$ k-člana particija skupa $\mathbb{V}$ za koju se postiže nejednakost $k\text{-}Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) \geq \sum_{l=1}^k \lambda_l$ i neka je $\widetilde{X} \in \{0,1\}^{n \times k}$ indikatorska matrica particije $\widetilde{\mathcal{F}}_{\mathbb{V}}^k$. Kao i do sada označimo s $\widetilde{Z} = T_v^{\frac{1}{2}} \widetilde{X}(\widetilde{X}^T T_v \widetilde{X})^{-\frac{1}{2}}$. U izrazu 3.5 smo pokazali da je $\widetilde{Z}$ ortogonalna matrica te kako se u 3.14 postiže jednakost onda slijedi da stupci matrice $\widetilde{Z}$ leže u prostoru razapetim s matricom U, odnosno svojstvenim vektorima $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$. Onda postoji unitarna matrica $R \in \mathbb{R}^{k \times k}$ tako da vrijedi $\widetilde{Z} = UR$, pa je

$$T_v^{\frac{1}{2}} \widetilde{X}(\widetilde{X}^T T_v \widetilde{X})^{-\frac{1}{2}} = UR,$$

odnosno vrijedi

$$\widetilde{X}(\widetilde{X}^T T_v \widetilde{X})^{-\frac{1}{2}} R^* = T_v^{-\frac{1}{2}} U.$$

Matrica $\widetilde{X}$ ima po dijelovima konstantne stupce, a kako množenje s desna čuva to svojstvo onda i matrica $T_v^{-\frac{1}{2}} U$ ima po dijelovima konstantne stupce.

Kako bismo dokazali suprotan smjer, pretpostavimo da matrica $T_v^{-\frac{1}{2}} U$ ima po dijelovima konstantne stupce s obzirom na particiju $\widetilde{\mathcal{F}}_{\mathbb{V}}^k$. Neka je $\widetilde{X} \in \{0,1\}^{n \times k}$ indikatorska matrica particije $\widetilde{\mathcal{F}}_{\mathbb{V}}^k$. Kako matrica $T_v^{-\frac{1}{2}} U$ ima po dijelovima konstantne stupce s obzirom na particiju $\widetilde{\mathcal{F}}_{\mathbb{V}}^k$, onda postoji matrica $R \in \mathbb{R}^{k \times k}$ tako da vrijedi $T_v^{-\frac{1}{2}} U = \widetilde{X} R$, matrica R sadrži različite retke od matrice $T_v^{-\frac{1}{2}} U$, onda je $T_v^{\frac{1}{2}} \widetilde{X} R = U$. Primijetimo da je matrica $R^{-1}(\widetilde{X}^T T_v \widetilde{X})^{-\frac{1}{2}} = \left((\widetilde{X}^T T_v \widetilde{X})^{\frac{1}{2}} R\right)^{-1}$ unitarna jer je matrica $(\widetilde{X}^T T_v \widetilde{X})^{\frac{1}{2}} R$ unitarna:

$$\begin{aligned}
((\widetilde{X}^T T_v \widetilde{X})^{\frac{1}{2}} R)^T \, (\widetilde{X}^T T_v \widetilde{X})^{\frac{1}{2}} R &= R^T (\widetilde{X}^T T_v \widetilde{X})^{\frac{1}{2}} (\widetilde{X}^T T_v \widetilde{X})^{\frac{1}{2}} R = R^T \widetilde{X}^T T_v \widetilde{X} R = \\
&= (\widetilde{X} R)^T T_v \widetilde{X} R = (T_v^{-\frac{1}{2}} U)^T T_v T_v^{-\frac{1}{2}} U = \\
&= U^T T_v^{-\frac{1}{2}} T_v T_v^{-\frac{1}{2}} U = U^T U = I_k.
\end{aligned}$$

Slijedi

$$T_v^{\frac{1}{2}}\widetilde{X}RR^{-1}(\widetilde{X}^T T_v\widetilde{X})^{-\frac{1}{2}} = UR^{-1}(\widetilde{X}^T T_v\widetilde{X})^{-\frac{1}{2}},$$

pa je

$$T_v^{\frac{1}{2}}\widetilde{X}(\widetilde{X}^T T_v\widetilde{X})^{-\frac{1}{2}} = UR^{-1}(\widetilde{X}^T T_v\widetilde{X})^{-\frac{1}{2}},$$

odnosno vrijedi

$$Z = UR^{-1}(\widetilde{X}^T T_v\widetilde{X})^{-\frac{1}{2}}.$$

Kako je matrica $R^{-1}(\widetilde{X}^T T_v\widetilde{X})^{-\frac{1}{2}}$ unitarna onda stupci matrice Z leže u prostoru razapetim matricom U, odnosno svojstvenim vektorima $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n$, pa se u 3.14 postiže jednakost.

□

Diskretizacija

Po lemi o usmjerenom rezu višečlane particije 3.1.5 slijedi da ako matrica $T_v^{-\frac{1}{2}}U$ ima po dijelovima konstantne stupce s obzirom na particiju $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ onda je particija $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ rješenje problema minimizacije težinskog reza višečlane particije iz 3.1. Kako u praksi često nije zadovoljen uvjet da matrica $T_v^{-\frac{1}{2}}U$ ima po dijelovima konstantne stupce onda želimo iz neprekidnog rješenja relaksiranog problema minimizacije, odnosno iz matrice $T_v^{-\frac{1}{2}}U$, dobiti približno diskretno rješenje za problem minimizacije težinskog reza višečlane particije iz 3.1.

Kao što smo već naveli, za diskretizaciju neprekidnog rješenja $T_v^{-\frac{1}{2}}U$ ćemo koristiti metodu klasteriranja redova matrice $T_v^{-\frac{1}{2}}U$ kao točaka u $\mathbb{R}^k$, odnosno particiju vrhova usmjerenog grafa ćemo dobiti tako da vrhove stavimo u isti klaster ako i samo ako se i-ti i j-ti redak matrice $T_v^{-\frac{1}{2}}U$ nalaze u istom klasteru. Za klasteriranje redova matrice $T_v^{-\frac{1}{2}}U$ ćemo koristiti algoritam k - sredina.

Poglavlje 4

Algoritmi i testiranje

4.1 Algoritmi

U prethodnim poglavljima smo pokazali metode spektralnog biparticioniranja neusmjerenog grafa, spektralnog particioniranja neusmjerenog grafa te spektralnog particioniranja usmjerenog grafa. Metode spektralnog biparticioniranja i particioniranja neusmjerenog grafa minimiziraju normalizirani rez particije neusmjerenog grafa, a metoda spektralnog particioniranja usmjerenog grafa minimizira težinski rez usmjerenog grafa. U ovom potpoglavlju ćemo predstaviti algoritme za ove metode.

Implementacija algoritama

Algoritmi su implementirani u programskom jeziku Python pri čemu su korišteni sljedeći Python-ovi paketi (biblioteke): NumPy, SciPy, scikit-learn i Matplotlib. NumPy je paket koji omogućuje rad s tenzorima u Python-u, SciPy je paket koji sadrži algoritme iz područja znanstvenog računanja, Matplotlib služi za crtanje i vizualizaciju podataka, a scikit-learn se nadograđuje na prethodno navedene pakete te sadrži mnoštvo alata za obradu podataka i strojno učenje. Od implementacijskih detalja ističemo dvije funkcije koje su korištene, metoda `scipy.linalg.eigh` iz paketa SciPy je korištena za računanje svojstvenih vektora, a metoda `sklearn.cluster.KMeans` iz paketa scikit-learn je korištena za klasteriranje algoritmom k-sredina.

Algoritmi sve tri metode spektralnog particioniranja za ulazne podatke uzimaju težinski neusmjereni, odnosno usmjereni graf, a algoritmi k-particioniranja neusmjerenog i usmjerenog grafa kao argument uzimaju i broj elemenata particije k. U implementaciji algoritama ovih metoda spektralnog particioniranja težinski neusmjereni, odnosno usmjereni graf reprezentirat ćemo matricom susjedstva neusmjerenog, odnosno usmjerenog grafa.

Spektralno biparticioniranje neusmjerenog grafa

Zbog postupka diskretizacije kojeg smo opisali u potpoglavlju 2.1, algoritam 1 spektralnog biparticioniranja neusmjerenog grafa kao ulazni parametar dodatno uzima broj l, odnosno broj graničnih vrijednosti za biparticioniranje koordinata svojstvenog vektora koje ćemo ispitati.

Algoritam 1 Spektralno biparticioniranje neusmjerenog grafa minimizacijom normaliziranog reza biparticije

---

Ulaz: težinski neusmjereni graf $(\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}, \mathbb{E}, w)$, broj graničnih vrijednosti l

1: $W \leftarrow \left[w(v_i, v_j)\right]_{i,j\in\{1,\ldots,n\}}$.

2: $D \leftarrow diag(W\mathbf{1}_n)$, $L \leftarrow D - W$, $L_{norm} \leftarrow D^{-\frac{1}{2}} L D^{-\frac{1}{2}}$.

3: Izračunaj svojstveni vektor $\mathbf{u} = (u_1, \ldots, u_n)$ matrice L_{norm} pridružen drugoj najmanjoj svojstvenoj vrijednosti.

4: Izračunaj granične vrijednosti,

$$\mathbb{U} \leftarrow \{u_1, \ldots, u_n\}, \;\; a \leftarrow \min \mathbb{U}, \;\; b \leftarrow \max \mathbb{U},$$
$$g_i \leftarrow a + \frac{b-a}{l+1} i \quad \text{za} \quad i \in \{1, \ldots, l\}.$$

5: Za svaku graničnu vrijednost g_i napravi biparticiju koordinata vektora $\mathbf{u}$,

$$\mathbb{A}_i \leftarrow \{u_j \in \mathbb{U} \mid u_j \leq g_i\} \quad \text{za} \quad i \in \{1, \ldots, l\},$$
$$\mathbb{B}_i \leftarrow \{u_j \in \mathbb{U} \mid u_j > g_i\} \quad \text{za} \quad i \in \{1, \ldots, l\},$$
$$\mathcal{F}^2_{\mathbb{U}i} \leftarrow \{\mathbb{A}_i, \mathbb{B}_i\} \quad \text{za} \quad i \in \{1, \ldots, l\},$$

te odaberi onu biparticiju koja ima najmanji normalizirani rez,

$$m \leftarrow \operatorname*{arg\,min}_{i\in\{1,\ldots,l\}} Ncut(\mathcal{F}^2_{\mathbb{U}i}).$$

6: Odredi biparticiju vrhova težinskog neusmjerenog grafa,

$$\mathbb{C}_1 \leftarrow \{v_j \mid j \in \{1, \ldots, n\}, \; u_j \in \mathbb{A}_m\},$$
$$\mathbb{C}_2 \leftarrow \{v_j \mid j \in \{1, \ldots, n\}, \; u_j \in \mathbb{B}_m\},$$
$$\mathcal{F}^2_{\mathbb{V}} \leftarrow \{\mathbb{C}_1, \mathbb{C}_2\}.$$

Izlaz: biparticija $\mathcal{F}^2_{\mathbb{V}}$

Spektralno particioniranje neusmjerenog grafa

Algoritam 2 Spektralno particioniranje neusmjerenog grafa minimizacijom normaliziranog reza particije

---

Ulaz: težinski neusmjereni graf ($\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}, \mathbb{E}, w$), broj klastera k

1: $W \leftarrow \left[w(v_i, v_j)\right]_{i,j\in\{1,\ldots,n\}}$.

2: $D \leftarrow diag(W\mathbf{1}_n)$, $L \leftarrow D - W$, $L_{norm} \leftarrow D^{-\frac{1}{2}} L D^{-\frac{1}{2}}$.

3: Izračunaj svojstvene vektore $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_k$ matrice L_{norm} redom pridružene svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_k$ poredanim po veličini,

$$U \leftarrow [\mathbf{u}_1\ \mathbf{u}_2 \cdots \mathbf{u}_k] \in \mathbb{R}^{n\times k}.$$

4: Neka je $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^k$ vektor koji odgovara i-tom retku matrice $D^{-\frac{1}{2}}U$ za svaki $i \in \{1, \ldots, n\}$,

$$\mathbb{X} \leftarrow \{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\}.$$

5: Klasteriraj skup $\mathbb{X}$ u k-particiju s blokovima particije $\mathbb{S}_1, \ldots, \mathbb{S}_k$ koristeći algoritam k - sredina,

$$\mathcal{F}^k_{\mathbb{X}} \leftarrow \{\mathbb{S}_1, \ldots, \mathbb{S}_k\}.$$

6: Odredi k-particiju vrhova težinskog neusmjerenog grafa,

$$\mathbb{C}_l \leftarrow \{v_i \mid i \in \{1, \ldots, n\},\ \mathbf{x}_i \in \mathbb{S}_l\} \quad \text{za} \quad l \in \{1, \ldots, k\},$$
$$\mathcal{F}^k_{\mathbb{V}} \leftarrow \{\mathbb{C}_1, \ldots, \mathbb{C}_k\}.$$

Izlaz: k-particija $\mathcal{F}^k_{\mathbb{V}}$

Spektralno particioniranje usmjerenog grafa

Algoritam spektralnog particioniranja usmjerenog grafa minimizira težinski rez pa dodatno kao ulazne podatke uzima i retčanu težinsku funkciju te volumnu težinsku funkciju.

Algoritam 3 Spektralno particioniranje usmjerenog grafa minimizacijom težinskog reza particije

---

Ulaz: težinski usmjereni graf $(\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}, \mathbb{E}, w)$, retčana težinska funkcija $rw\colon \mathbb{V} \to \mathbb{R}_{>0}$, volumna težinska funkcija $vw\colon \mathbb{V} \to \mathbb{R}_{>0}$, broj klastera k

1: $W \leftarrow \left[w(v_i, v_j)\right]_{i,j\in\{1,\ldots,n\}}$,
$T_r \leftarrow diag(rw(v_1), rw(v_2), \ldots, rw(v_n))$,
$T_v \leftarrow diag(vw(v_1), vw(v_2), \ldots, vw(v_n))$.

2: $D \leftarrow diag(W\mathbf{1}_n)$.

3: Ako je $T_r \neq I_k$ onda $W \leftarrow T_r W$ i $D \leftarrow T_r D$.

4: $L \leftarrow D - W$.

5: $L_H \leftarrow H(T_v^{-\frac{1}{2}} L T_v^{-\frac{1}{2}})$, gdje je $H(A) = \frac{1}{2}\left(A + A^T\right)$ hermitski dio matrice A.

6: Izračunaj svojstvene vektore $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_k$ matrice L_H redom pridružene svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_k$ poredanim po veličini,

$$U \leftarrow [\mathbf{u}_1\ \mathbf{u}_2 \cdots \mathbf{u}_k] \in \mathbb{R}^{n\times k}.$$

7: Neka je $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^k$ vektor koji odgovara i-tom retku matrice $T_v^{-\frac{1}{2}} U$ za svaki $i \in \{1, \ldots, n\}$,

$$\mathbb{X} \leftarrow \{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\}.$$

8: Klasteriraj skup $\mathbb{X}$ u k-particiju s blokovima particije $\mathbb{S}_1, \ldots, \mathbb{S}_k$ koristeći algoritam k - sredina,

$$\mathcal{F}_{\mathbb{X}}^k \leftarrow \{\mathbb{S}_1, \ldots, \mathbb{S}_k\}.$$

9: Odredi k-particiju vrhova težinskog neusmjerenog grafa,

$$\mathbb{C}_l \leftarrow \{v_i \mid i \in \{1, \ldots, n\},\ \mathbf{x}_i \in \mathbb{S}_l\} \quad \text{za} \quad l \in \{1, \ldots, k\},$$
$$\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k \leftarrow \{\mathbb{C}_1, \ldots, \mathbb{C}_k\}.$$

Izlaz: k-particija $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$

4.2 Testiranje

Algoritme spektralnog particioniranja usmjerenog i neusmjerenog grafa smo testirali na sintetičkim primjerima i za segmentaciju slika.

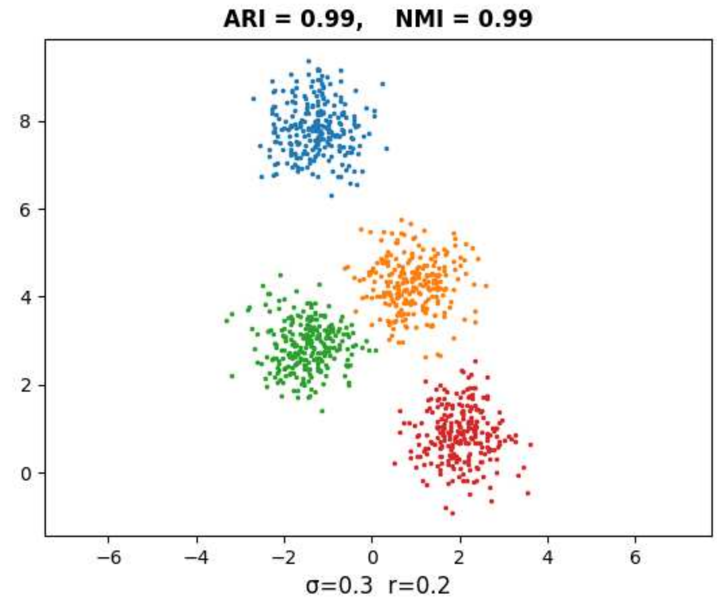
Sintetički primjeri

U ovom potpoglavlju ćemo pokazati primjere spektralnog particioniranja točaka u ravnini. Kako bismo mogli primijeniti algoritme spektralnog particioniranja usmjerenog i neusmjerenog težinskog grafa, prvo moramo točke u ravnini prikazati kao težinski graf, odnosno moramo konstruirati matricu susjedstva. Za segmentaciju slika je također potrebno pretvoriti sliku, odnosno njezine piksele u težinski graf. Za konstrukciju matrice susjedstva u problemu segmentacije slika su Shi i Malik [18] koristili Gaussovu funkciju kao mjeru sličnosti između piksela, pa ćemo je mi koristiti i za konstrukciju matrice susjedstva za točke u ravnini. Za skup točaka u ravnini $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\} \in \mathbb{R}^2$ definirat ćemo simetričnu matricu susjedstva s:

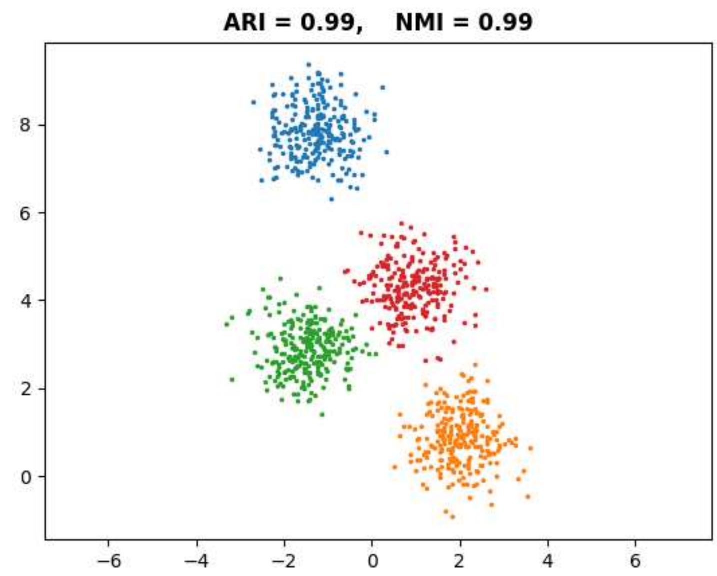
$$W_{sym} = \left[\begin{cases} exp\Big(-\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{2\sigma^2} \Big), & \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| < r \\ 0, & \text{inače} \end{cases} \right]_{i,j \in \{1,\ldots,n\}}, \tag{4.1}$$

pri čemu se parametri σ i r određuju ovisno o samom primjeru. Prvo promotrimo jedan jednostavan primjer u kojem su točke raspoređene u ovalne klastere koji su generirani s normalnom razdiobom. Na slici 4.1 vidimo da algoritam spektralnog particioniranja neusmjerenog grafa izvrsno grupira prikazane podatke, a iznad slike nalaze se i vrijednosti mjera *adjusted Rand index* (ARI) te *normalized mutual information* (NMI) koje pokazuje koliko je dobivena particija blizu stvarnoj, odnosno generiranoj particiji. Meila i Pentney u [11] su u svojem radu koristili mjeru *variation in information* (VI) koja je slična mjeri NMI, ali nije normalizirana. Ovdje smo odabrali mjere ARI i NMI jer su one među najčešće korištenim mjerama za testiranje algoritama spektralnog particioniranja (npr. u [17]), a ujedno su i normalizirane. Mjera NMI poprima vrijednosti između 0 i 1, a mjera ARI poprima vrijednosti između -1 i 1, za obje mjere veća vrijednost znači da dobivena particija bolje odgovara stvarnoj particiji te ako mjera ima vrijednost 1 onda su dobivena i stvarna particija identične. U primjeru na slici 4.1 ARI iznosi 0.99 te NMI iznosi 0.99, što znači da particija dobivena spektralnim klasteriranjem neusmjerenog grafa skoro pa jednaka stvarnoj particiji. [1] Na slici 4.2 vidimo da na ovom primjeru particioniranje metodom k - sredina isto daje izvrstan rezultat.

[1] Iznosi parametara σ i r koji se nalaze na dnu slika 4.1, 4.4, 4.5 i 4.7 ne odgovaraju u potpunosti parametrima σ i r iz 4.1, nego su izraženi kao postotak od $\max_{i,j\in\{1,\ldots,n\}} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|$.



Slika 4.1: Spektralno particioniranje neusmjerenog grafa reprezentiranog matricom W_{sym}



Slika 4.2: Particioniranje metodom *k* - sredina

Promotrimo sada složeniji primjer u kojem su točke raspoređene u koncentrične klastere i klastere u obliku polumjeseca. Prvo pogledajmo rezultat particioniranja metodom k-sredina na slici 4.3 koji nije zadovoljavajući, ali na slici 4.4 vidimo da algoritam spektralnog particioniranja neusmjerenog grafa savršeno grupira prikazane podatke.

Postoje i primjeri na kojima algoritam spektralnog particioniranja neusmjerenog grafa neće dati dobre rezultate. Sljedeći primjer je preuzet iz rada [13] u kojem Nadler i Galun razmatraju ograničenja spektralnog particioniranja neusmjerenog grafa. Na slici je 4.5 je primjer s dva klastera koji su generirani s različitim razdiobama te su vrlo blizu jedan drugoga, primjećujemo da je rezultat koji daje algoritam spektralnog particioniranja neusmjerenog grafa na ovom primjeru nije zadovoljavajući.

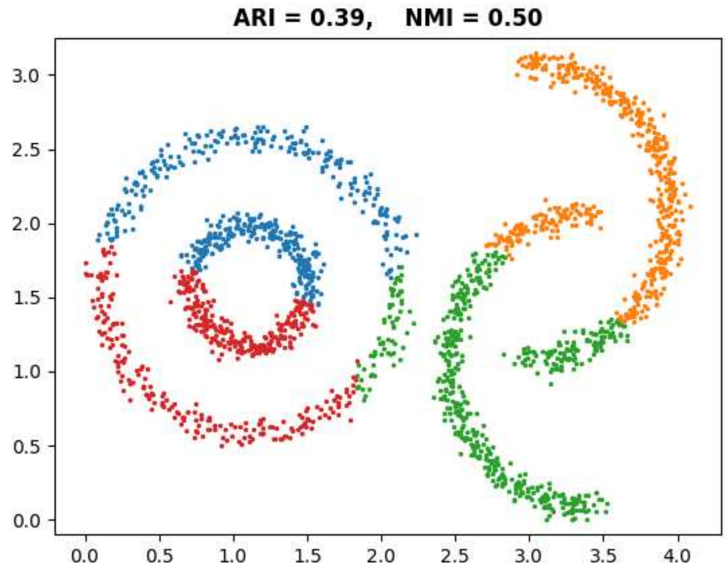
Kyrgyzov et al. [10] predlažu kako popraviti rezultate spektralnog particioniranja na primjerima s nejednakim i preklapajućim klasterima. Njihova ideja je umjesto simetrične mjere sličnosti između podataka iz koje proizlazi i simetrična matrica susjedstva, koristiti asimetričnu mjeru sličnosti koja će dati asimetričnu matricu susjedstva. Također su koristili Gaussovu funkciju, ali parametar σ više nije konstantan, nego ovisi o podacima. Za skup točaka u ravnini $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\} \in \mathbb{R}^2$ definirat ćemo asimetričnu matricu susjedstva s:

$$W_{asym} = \left[\begin{cases} exp\Big(- \frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{2\sigma_j^2} \Big), & \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| < r \\ 0, & \text{inače} \end{cases} \right]_{i,j \in \{1,\ldots,n\}}, \tag{4.2}$$

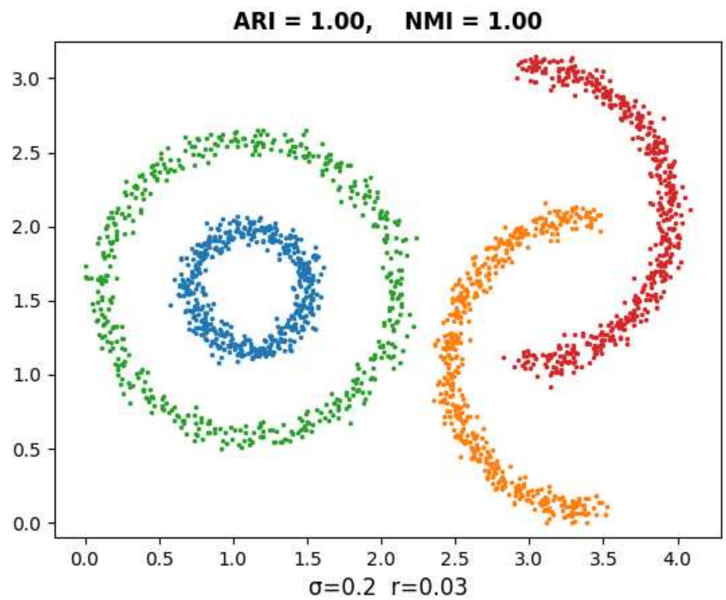
gdje je $\sigma_j = \sigma d_j$, d_j je jednak udaljenosti između $\mathbf{x}_j$ i njegovog m-tog najbližeg susjeda, a $m = f\sqrt{n}$, pri čemu se parametri σ, r i f određuju ovisno o samom primjeru. [2] Kako je matrica W_{asym} asimetrična onda ne možemo koristiti algoritam spektralnog particioniranja neusmjerenog grafa, ali možemo primijeniti algoritam spektralnog particioniranja usmjerenog grafa. Na slici 4.6 vidimo da algoritam spektralnog particioniranja neusmjerenog grafa poprilično dobro klasterira zadane podatke.

Promotrimo još jedan primjer preuzet iz [10] koji sadrži dva klastera različite gustoće koji se međusobno preklapaju. I na ovom primjeru je algoritam spektralnog particioniranja neusmjerenog grafa neuspješan, ali algoritam spektralnog particioniranja usmjerenog grafa daje vrlo dobre rezultate, što možemo vidjeti na slikama 4.7 i 4.8.

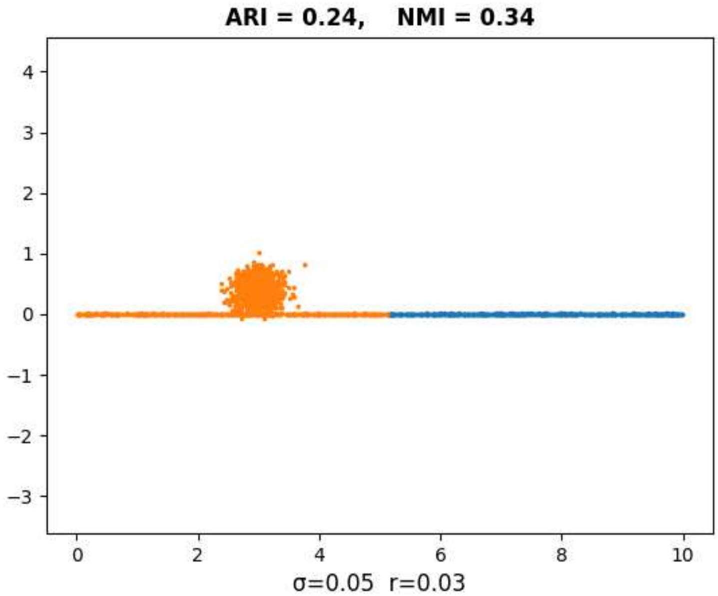
[2] Iznosi parametara σ i r koji se nalaze na dnu slika 4.6 i 4.8 ne odgovaraju u potpunosti parametrima σ i r iz 4.2, nego su izraženi kao postotak od $\max_{i,j\in\{1,\ldots,n\}}\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|$.



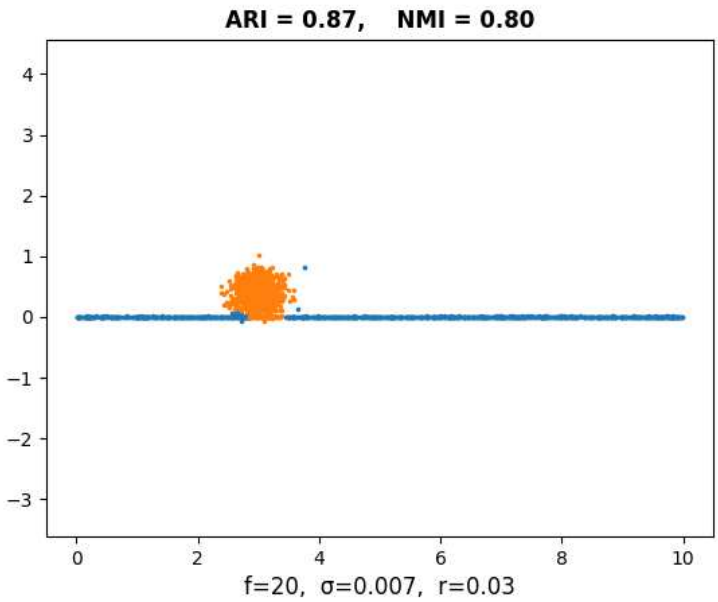
Slika 4.3: Particioniranje metodom *k* - sredina



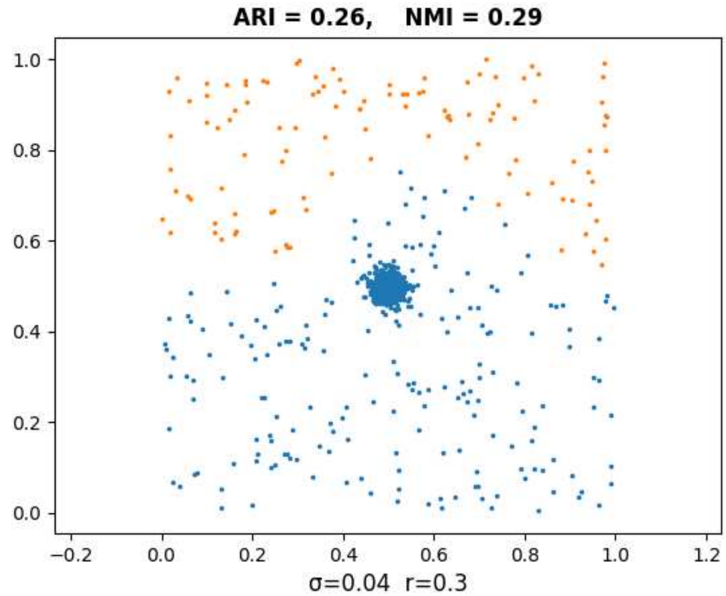
Slika 4.4: Spektralno particioniranje neusmjerenog grafa reprezentiranog matricom W_{sym}



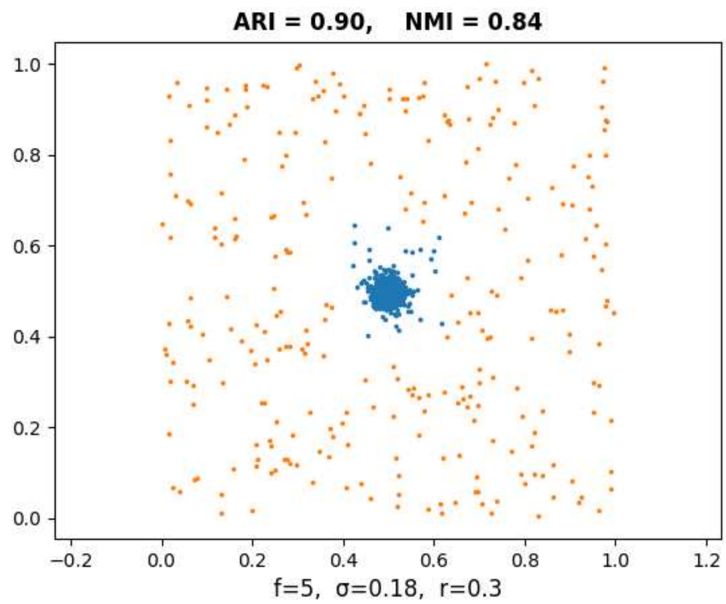
Slika 4.5: Spektralno particioniranje neusmjerenog grafa reprezentiranog matricom W_{sym}



Slika 4.6: Spektralno particioniranje usmjerenog grafa reprezentiranog matricom W_{asym}



Slika 4.7: Spektralno particioniranje neusmjerenog grafa reprezentiranog matricom W_{sym}



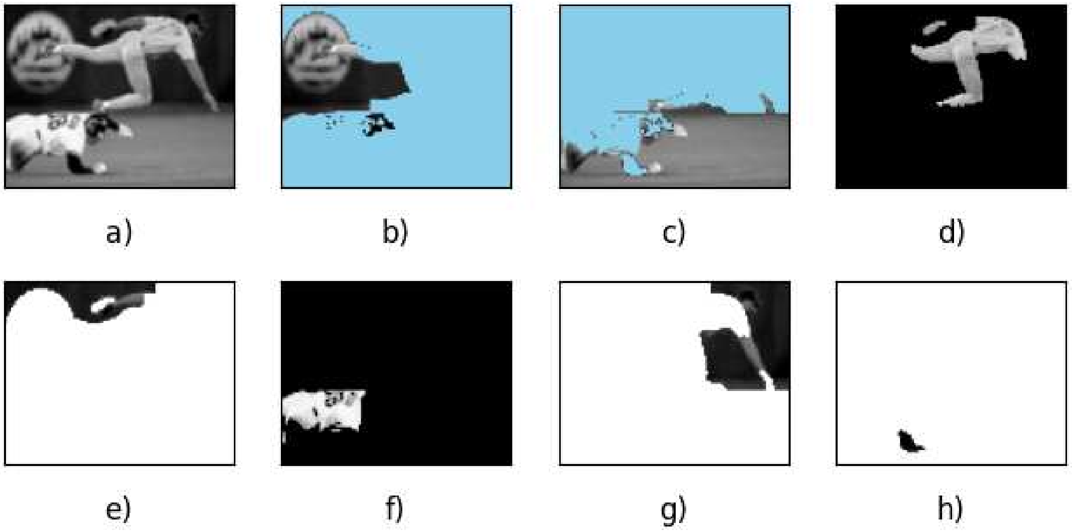
Slika 4.8: Spektralno particioniranje usmjerenog grafa reprezentiranog matricom W_{asym}

Segmentacija slike

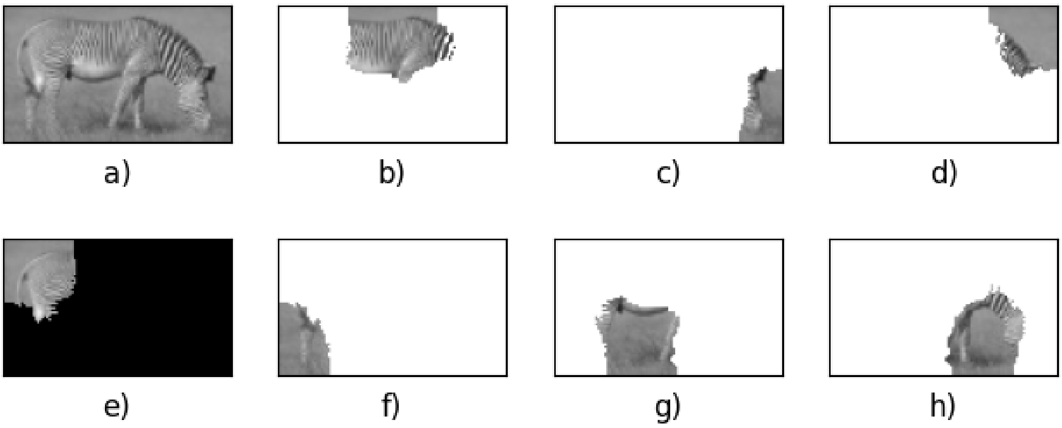
U ovom potpoglavlju ćemo pokazati primjere segmentacija slika pomoću spektralnog particioniranja piksela. Kao i kod primjera točaka u ravnini i ovdje moramo piksele slike prikazati kao težinski graf, odnosno moramo konstruirati matricu susjedstva. Kao što smo već naveli, način konstrukcije matrice susjedstva pomoću Gaussove funkcije sličnosti preuzeli smo iz [18]. Sliku ćemo promatrati kao skup piksela $\{p_1, \dots, p_n\}$ te ćemo definirati simetričnu matricu susjedstva s:

$$W_{sym} = \left[exp\Big(-\frac{\|I(p_i)-I(p_j)\|^2}{2\sigma_I^2}\Big) \cdot \begin{cases} exp\Big(-\frac{\|X(p_i)-X(p_j)\|^2}{2\sigma_X^2}\Big), & \|X(p_i) - X(p_j)\| < r \\ 0, & \text{inače} \end{cases} \right]_{i,j\in\{1,\dots,n\}}, \quad (4.3)$$

gdje je $I(p_i)$ intenzitet (svjetlina) piksela p_i, a $X(p_i)$ pozicija piksela p_i, pri čemu se parametri σ_I, σ_X i r određuju ovisno o samom primjeru. Sljedeća dva primjera su preuzeta iz [18]. Na slici 4.9 vidimo primjer segmentacije slike trenutka u baseball utakmici, a na slici 4.10 vidimo primjer segmentacije slike na kojoj se nalazi zebra.

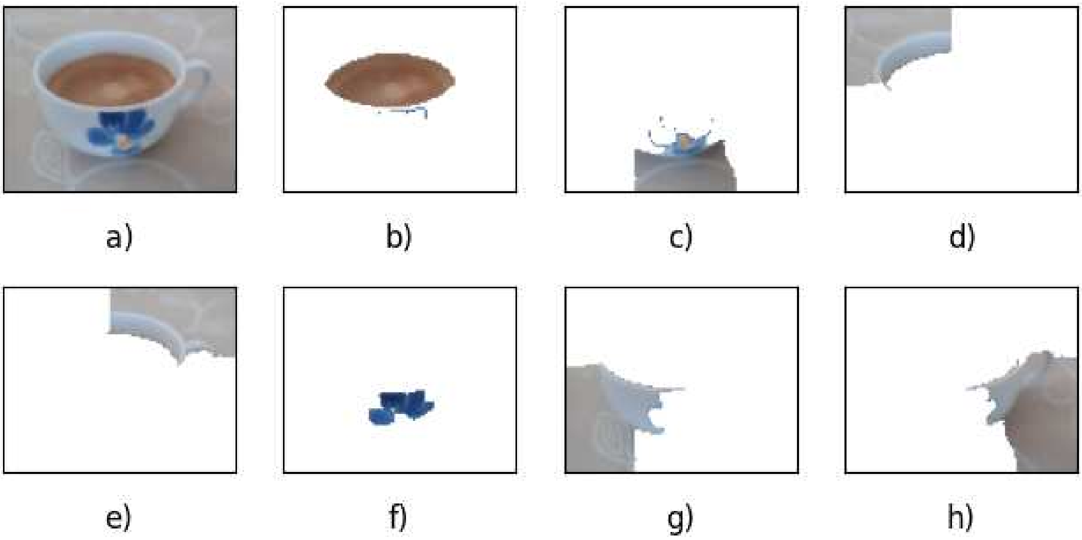


Slika 4.9: Segmentacija slike pomoću algoritma spektralnog particioniranja neusmjerenog grafa. Na a) je prikazana originalna slika dimenzije 100×80, a b) - h) pokazuje komponente dobivene particije.



Slika 4.10: Segmentacija slike pomoću algoritma spektralnog particioniranja neusmjerenog grafa. Na a) je prikazana originalna slika dimenzije 100×60, a b) - h) pokazuje komponente dobivene particije.

Primjer segmentacije slike na kojoj je prikazana šalica možemo vidjeti na slici 4.11.



Slika 4.11: Segmentacija slike pomoću algoritma spektralnog particioniranja neusmjerenog grafa. Na a) je prikazana originalna slika dimenzije 100×80, a b) - h) pokazuje komponente dobivene particije.

Za segmentaciju slika u ovim primjerima koristili smo vrijednosti parametara $\sigma_I = 0.08$, $\sigma_X = 0.03$ i $r = 0.1$. [3]

[3] Vrijednosti parametara $\sigma_I = 0.08$, $\sigma_X = 0.03$ i $r = 0.1$ koje smo koristili pri segmentaciji slika ne odgovaraju u potpunosti parametrima σ_I, σ_X i r iz 4.3, nego su izraženi kao postotak od $\max_{i,j\in\{1,\dots,n\}}\left\|I(p_i) - I(p_j)\right\|$ i $\max_{i,j\in\{1,\dots,n\}}\left\|X(p_i) - X(p_j)\right\|$.

Bibliografija

[1] C. C. Aggarwal i C. K. Reddy, *Data Clustering: Algorithms and Applications*, Chapman and Hall/CRC, New York, 2014, https://people.cs.vt.edu/~reddy/papers/DCBOOK.pdf.

[2] I. Anderson, *A First Course in Discrete Mathematics*, Springer, 2002.

[3] D. Bakić, *Linearna algebra*, Školska knjiga, Zagreb, 2008.

[4] T. Harju, *Lecture Notes on Graph Theory*, Department of Mathematics, University of Turku, 2012, https://users.utu.fi/harju/graphtheory/graphtheory.pdf.

[5] R. A. Horn i C. R. Johnson, *Matrix analysis*, Cambridge University Press, 1990.

[6] ———, *Matrix analysis*, Cambridge University Press, 2013.

[7] A. K. Jain i R. C. Dubes, *Algorithms for Clustering Data*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1988, https://homepages.inf.ed.ac.uk/rbf/BOOKS/JAIN/Clustering_Jain_Dubes.pdf.

[8] L. Kaufman i P. J. Rousseeuw, *Finding Groups in Data: An Introduction to Cluster Analysis*, Wiley-Interscience, 2005, https://www.researchgate.net/publication/220695963_Finding_Groups_in_Data_An_Introduction_To_Cluster_Analysis.

[9] V. Krčadinac, *Kombinatorika*, Sveučilište u Zagrebu, 2023, https://web.math.pmf.unizg.hr/~krcko/nastava/komb/komb-skripta.pdf.

[10] O. O. Kyrgyzov, I. Bloch, Y. Yang, J. Wiart i A. Souloumiac, *Data Ranking and Clustering via Normalized Graph Cut Based on Asymmetric Affinity*, (2013), https://www.semanticscholar.org/paper/Data-Ranking-and-Clustering-via-Normalized-Graph-on-Kyrgyzov-Bloch/edd469906766d1af4a68fd5d04a9d417b85d6632.

[11] M. Meila i W. R. Pentney, *Clustering by weighted cuts in directed graphs*, (2007), https://www.semanticscholar.org/paper/Clustering-by-weighted-cuts-in-directed-graphs-Meila-Pentney/648db861a80c258d2043481adc0fa23a6535f28f.

[12] M. Meila i L. Xu, *Multiway cuts and spectral clustering*, (2003), https://www.semanticscholar.org/paper/Multiway-cuts-and-spec-tral-clustering-Meila-Xu/61b3c1f26c9b642d613216a2be15132341c6ebc9.

[13] B. Nadler i M. Galun, *Fundamental Limitations of Spectral Clustering*, (2006), https://www.semanticscholar.org/paper/Fundamental-Limitations-of-Spectral-Clustering-Nadler-Galun/54062eaa3ee6e3fb790528c1a40891d94dcc6519.

[14] I. Nakić, *Diskretna matematika*, Sveučilište u Zagrebu, 2012, https://web.math.pmf.unizg.hr/nastava/komb/predavanja/predavanja.pdf.

[15] A. Y. Ng, M. I. Jordan i Y. Weiss, *On Spectral Clustering: Analysis and an algorithm*, (2001), https://www.semanticscholar.org/paper/On-Spectral-Clustering%3A-Analysis-and-an-algorithm-Ng-Jordan/c02dfd94b11933093c797c362e2f8f6a3b9b8012.

[16] G.J. Oyewole i G.A. Thopil, *Data clustering: application and trends*, Artificial Intelligence Review **56** (2023), 6439—-6475, https://link.springer.com/article/10.1007/s10462-022-10325-y.

[17] H. Sevi, M. Jonckheere i A. Kalogeratos, *Generalized Spectral Clustering for Directed and Undirected Graphs*, (2022), https://arxiv.org/abs/2203.03221.

[18] J. Shi i J. Malik, *Normalized cuts and image segmentation*, IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence **22** (2000), br. 8, 888–905, https://people.eecs.berkeley.edu/~malik/papers/SM-ncut.pdf.

[19] P. N. Tan, M. Steinbach, A. Karpatne i V. Kumar, *Introduction to Data Mining*, Pearson, 2018, https://www-users.cse.umn.edu/~kumar001/dmbook/ch7_clustering.pdf.

[20] S. X. Yu i J. Shi, *Multiclass spectral clustering*, Proceedings Ninth IEEE International Conference on computer Vision (2003), 313–319 vol.1, https://www.semanticscholar.org/paper/Multiclass-spectral-clustering-Yu-Shi/d08824dd86424f7a81f3e8f463f68a817b43aabe.

Sažetak

U ovom radu opisane su metode spektralnog klasteriranja podataka koji su reprezentirani težinskim grafom. Metode spektralnog klasteriranja traže particiju koja ima najmanji spektralni rez koji mjeri koliko su dobro podaci podijeljeni u grupe za neku particiju. Predstavljene su tri metode spektralnog klasteriranja koje su dobivene postepenom generalizacijom, metoda minimizacije spektralnog normaliziranog reza biparticije u neusmjerenom grafu, metoda minimizacije spektralnog normaliziranog reza višečlane particije u neusmjerenom grafu i metoda minimizacije spektralnog težinskog reza višečlane particije u usmjerenom grafu. Sve tri metode minimizacije spektralnih rezova su izvedene na sličan način. Prvo problem minimizacije spektralnog reza zapisujemo matrično te relaksiramo diskretni problem minimizacije kako bismo ga sveli na problem minimizacije Rayleighovih kvocijenata čime dobijemo rješenje relaksiranog kontinuiranog problema minimizacije spektralnog reza. Zatim pronalazimo približno rješenje početnog diskretnog problema minimizacije tako da klasteriramo redove u matrici relaksiranog rješenja kao točke u $\mathbb{R}^k$ koristeći algoritam k-sredina. U zadnjem poglavlju je navedena implementacija algoritama za ove metode te su dani primjeri na kojima su ti algoritmi testirani.

Summary

In this paper, we give a description of spectral clustering methods where data is represented by a weighted graph. In spectral clustering, the goal is to find the partition that has the smallest spectral cut, which is a measurement of how well the data are divided into groups for some partition. Three spectral clustering methods obtained by gradual generalization are presented, the method of minimizing the spectral normalized cut of a bipartition in an undirected graph, the method of minimizing the spectral normalized cut of a partition in an undirected graph, and the method of minimizing the spectral weighted cut of a partition in a directed graph. All three methods of minimizing spectral cuts are derived similarly. First, we represent the minimization problem of a spectral cut in matrix form and relax that discrete minimization problem in order to reduce it to the problem of Rayleigh quotients minimization, which gives us the solution to the relaxed continuous minimization problem of a spectral cut. We then find an approximate solution to the initial discrete minimization problem by clustering the rows in the relaxed solution matrix as points in $\mathbb{R}^k$ using the k-means algorithm. In the last chapter, the implementation of algorithms for these methods is given, and examples are shown on which these algorithms were tested.

Životopis

Andrej Slapničar rođen je 20. studenog 1998. godine u Zagrebu. Školovanje je započeo u Osnovnoj školi Jure Kaštelana nakon koje upisuje XV. gimnaziju. Tijekom školovanja su ga najviše zanimali matematika i informatika te je sudjelovao na brojnim natjecanjima iz tih predmeta. Nakon završetka gimnazije, 2017. godine upisuje preddiplomski sveučilišni studij Matematika na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu u Zagrebu. Nakon tri godine završava preddiplomski studij čime stječe akademski naziv sveučilišnog prvostupnika matematike. Na istom fakultetu 2020. godine upisuje diplomski sveučilišni studij Računarstvo i matematika.