

Spektralni normalizirani rezovi u težinskim grafovima

Palajsa, Franjo

Master's thesis / Diplomski rad

2017

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:351592>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2025-03-21**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO–MATEMATIČKI FAKULTET
MATEMATIČKI ODSJEK

Franjo Palajsa

**SPEKTRALNI NORMALIZIRANI
REZOVI U TEŽINSKIM GRAFOVIMA**

Diplomski rad

Voditelj rada:
Prof. dr. sc. Zlatko Drmač

Zagreb, studeni 2017.

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. _____

Eliji

Sadržaj

Sadržaj	iv
Uvod	2
1 Terminologija i dosadašnje istraživanje	3
1.1 Klasteriranje	3
1.2 Težinski grafovi i rezovi	5
1.3 Pregled dosadašnjeg istraživanja	9
2 Normalizirani rezovi u težinskim grafovima	11
2.1 Matrični zapis problema	11
2.2 Relaksirani problem	15
2.3 Dekompozicija realne simetrične matrice	18
2.4 Rješenje relaksiranog problema	24
2.5 Diskretizacija	31
3 Implementacija i testiranje	41
3.1 Algoritam	41
3.2 Implementacija	43
3.3 Testiranje	43
A Važniji pojmovi i rezultati iz teorije matrica	49
Bibliografija	53

Uvod

Klasteriranje je važan problem nenadziranog učenja s mnogobrojnim primjenama u područjima poput biologije, sociologije, statistike, strojnog učenja i pretraživanja informacija (engl. *information retrieval*). Tijekom godina razvijen je širok spektar metoda koje se koriste za njegovo uspješno rješavanje. Jedan pristup baziran je na ideji da se problem diskretnog klasteriranja modelira kao problem particioniranja težinskog grafa prema nekom unaprijed zadanom kriteriju. U okviru teorije spektralnog klasteriranja posebno se ističe kriterij *spektralnog normaliziranog reza* koji je predmet proučavanja ovog rada, kako s teorijskog stajališta, tako i na praktičnoj razini. Spektralni normalizirani rez ima prednost nad ostalim kriterijima jer predstavlja prirodnu realizaciju zahtjeva na dobro particioniranje: snažna povezanost unutar pojedinog elementa particije ostvaruje se paralelno sa slabom povezanosti između različitih elemenata particije.

Atribut *spektralni* ponekad pridružujemo *normaliziranom rezu* jer je kriterij usko vezan za spektralnu teoriju matrica, čiji su rezultati od centralne važnosti za uspješno i efikasno rješavanje problema particioniranja. Imajući to na umu, radi jednostavnosti ćemo ga u nastavku obično izostavljati.

Općenito, spektralne metode za particioniranje često su distriminativne prirode, oslanjaju se na lokalne informacije u grafu te ne stvaraju pretpostavke o globalnoj strukturi podataka. Iako je odluka o granicama unutar particije globalna, ona je odraz sličnosti susjednih vrhova u grafu, odnosno sklonosti da susjedni vrhovi pripadaju istom elementu particije.

Metoda koju ćemo u nastavku razviti može se ugrubo podijeliti u dva koraka. Prvi korak odnosi se na rješavanje tzv. relaksiranog optimizacijskog problema koji je formuliran u skladu s kriterijem particioniranja. Riječ je o tipu problema koji proizlazi iz diskretnog problema oslabljivanjem diskretnih uvjeta. Kako ćemo kasnije pokazati, rješenja tog problema dana su ortogonalnim transformacijama prvih nekoliko svojstvenih vektora dobivenih ortogonalnom dekompozicijom simetrične matrice.

U drugom koraku nastojimo pronaći rješenje originalnog diskretnog problema koje je najbliže dobivenom skupu rješenja iz prethodnog koraka. U tu svrhu koristimo iterativni postupak u kojem naizmjenično primjenjujemo dvije procedure: metodom potiskivanja ne-maksimuma (engl. *non-maximum suppression*) pronalazimo diskretno rješenje najbliže

kontinuiranom, dok određivanjem odgovarajuće ortogonalne transformacije pronalazimo kontinuirano rješenje koje je dobra aproksimacija diskretnog. Neprekidnost ciljne funkcije garantira nam da je tako dobiveno rješenje skoro globalno-optimalno.

Rad je podijeljen u tri poglavlja. Prvo poglavlje posvećeno je upoznavanju s terminologijom gdje ćemo formalno uvesti osnovne pojmove koji su nam od interesa. Napraviti ćemo kratku kategorizaciju važnijih metoda za klasteriranje i pritom istaknuti položaj onih koje se temelje na spektralnoj teoriji matrica. Također, nakratko ćemo se dotaknuti povijesnih crtica vezanih uz particioniranje normaliziranim rezom.

Drugo poglavlje bavi se teorijskim razvojem metode za particioniranje grafa normaliziranim rezom na način koji smo maloprije objasnili. Razvoj metode oslanja se na poznate rezultate iz spektralne teorije matrica poput ortogonalne dekompozicije simetrične matrice i dekompozicije singularnih vrijednosti (engl. *singular value decomposition*).

Metodu koju smo razvili implementirat ćemo u trećem poglavlju. Na nizu primjera, kako umjetno konstruiranih, tako i onih iz stvarnog života, sustavno ćemo testirati i evaluirati naš algoritam. Za kraj, ilustrirat ćemo poteškoće koje nastanu kada želimo klasterirati podatke koji sadrže strukture s istaknutim razlikama u veličini i gustoći.

Poglavlje 1

Terminologija i dosadašnje istraživanje

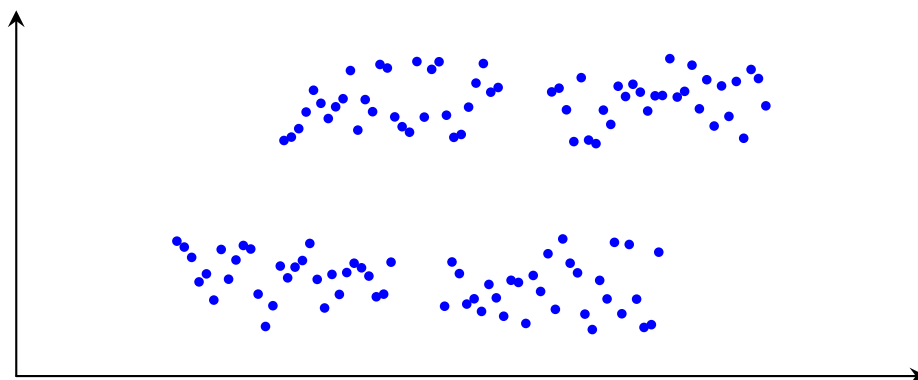
1.1 Klasteriranje

Klasteriranje možemo ugrubo opisati kao problem grupiranja podataka u smislene cjeline, tzv. klasterne. Pritom očekujemo da klasteri odražavaju prirodnu strukturu podataka, odnosno da nam daju neke korisne informacije o podacima. Iako klasteriranje možemo promatrati samo za sebe, ono je često ukomponirano u složeniju analizu podataka. Što su analize veće i složenije, to se na sam proces klasteriranja postavlja više ograničenja i očekivanja jer na raspolaganju imamo više saznanja o problemu. To se posebno odnosi na dio koji se tiče evaluacije dobivenih rezultata. Iz tog razloga ne postoje univerzalni algoritmi i kriteriji koji osiguravaju kvalitetno klasteriranje pa je ono stalni predmet proučavanja u mnogim područjima.

Uz pojam klasteriranje usko se vežu pojmovi *particioniranje*, *segmentacija* i *klasifikacija*. Riječ je o sličnim pojmovima, ali svejedno ne bismo trebali doći u iskušenje da ih bezuvjetno naizmjenično koristimo. Particioniranje je postupak stvaranja particije nekog skupa (vidi definiciju 1.2.3). Primjerice, mi ćemo se baviti pronalaženjem optimalnih particija nekog težinskog grafa. Segmentacija se odnosi na odvajanje podataka u dijelove (segmente) poznavajući granice među njima. Za razliku od toga, klasteriranje se više odnosi na traženje tih granica između klastera. Mi ćemo u ovom radu pojam segmentacije vezati uz particioniranje digitalne slike, ali je pojam još prisutan i u ekonomiji (segmentacija tržišta) i računarstvu (segmentacija memorije). Klasifikacija se bavi identifikacijom grupe (kategorije) kojoj pripada novi podatak. U kontekstu strojnog učenja, klasifikacija je oblik nadziranog, a klasteriranje oblik nenadziranog učenja.

Sada ćemo istaknuti neke karakteristike i probleme klasteriranja. Spomenuli smo malo prije da ne postoji univerzalna metoda za uspješno klasteriranje. Nadalje, mnoge metode se oslanjaju na ljudsku intervenciju koja ograničava mogućnost njihove automatizacije. Gdje je moguće, htjeli bismo reducirati ljudsko sudjelovanje u izvršavanju algoritma. Također,

iako su ljudi vješti u grupiranju objekata, njihove odluke su podložne individualnim preferencijama, pogotovo kada je riječ o odabiru između podjednako dobrih rješenja. Tako se, primjerice, možemo pitati koliko klastera je određeno točkama sa slike 1.1. Naizgled nema objektivnog razloga da preferiramo podjelu na dva klastera spram podjele na četiri klastera.



Slika 1.1: Slučajno generirane točke u ravnini. Udaljenost gornjih i donjih klastera znatno je veća od udaljenosti lijevih i desnih klastera.

Od dobrog algoritma za klasteriranje očekujemo da bude skalabilan, odnosno da je u stanju dati dobre rezultate i onda kada povećamo količinu ulaznih podataka ili dimenziionalnost problema. To je važnije sada više nego ikada jer smo u stanju prikupiti veliku količinu korisnih podataka u kratkom vremenu. Nadalje, dobar algoritam imao bi svojstvo robusnosti pa bi bio otporan na šum u podacima i eventualne greške u mjerenjima pomoću kojih su podaci prikupljeni. I skalabilnost i robusnost se u praksi obično ostvaruju indirektno, tzv. predobradom podataka (engl. *data preprocessing*).

Postoji više vrsta klasteriranja s obzirom na koje možemo kategorizirati različite algoritme za klasteriranje. Primjerice, metoda koju ćemo mi obrađivati pripadat će klasi algoritama za ekskluzivno klasteriranje. Time hoćemo reći da će svaki podatak pripadati točno jednom klasteru. Za razliku od takvih metoda, postoje metode koje podatke klasteriraju hijerarhijski, metode koje dopuštaju preklapanje klastera te one koje podacima pridružuju vjerojatnost pripadanja nekom klasteru (tzv. fuzzy metode). Nadalje, nekada je od interesa da se postupak klasteriranja provede samo djelomično. To može biti korisno onda kada naslućujemo da dio podataka nema neka lijepa svojstva ili nam ne daje vrijedne informacije. Unatoč tome, u praksi se često daje prednost potpunom klasteriranju.

Jedna od prednosti nadziranog učenja je ta što lako dobijemo povratnu informaciju o uspješnosti naše metode jer unaprijed znamo koje rezultate želimo dobiti. Nasuprot tome, klasteriranje nema pristup vanjskim evaluacijskim kriterijima, već iz samih podataka mora pronaći odgovor na sljedeća važna pitanja:

- (a) Koja je sklonost podataka prema klasteriranju?
- (b) Koji je idealni broj klastera?
- (c) U kojoj mjeri rezultati odražavaju stvarnu strukturu podataka?

Ovim i sličnim pitanjima posvećeno je dosta vremena i literature. Dobro polazište za daljnje čitanje o osnovama klasteriranja je knjiga [11] (poglavlje 8).

U ovom radu baviti ćemo se gotovo isključivo spektralnim klasteriranjem. Riječ je o načinu klasteriranja koji je baziran na rezultatima iz spektralne teorije matrica. Preciznije, formira se tzv. matrica sličnosti W koja mjeri koliko su parovi podataka međusobno slični, dok se samo klasteriranje vrši prema određenim svojstvenim vektorima modificirane matrice sličnosti. Ako klasteriranje vršimo prema normaliziranom rezu, onda ćemo pripadnu matricu sličnosti dvostruko normalizirati da bismo dobili matricu $D^{-\frac{1}{2}}WD^{-\frac{1}{2}}$.

Spektralne metode imaju mnoge prednosti nad tradicionalnijim metodama (poput metode k -sredina) te ih je lako implementirati. U sljedećem odjeljku uvest ćemo osnovnu terminologiju vezanu za težinske grafove i rezove. Nakon toga ćemo dati kratak pregled važnijih postignuća iz područja spektralnog klasteriranja.

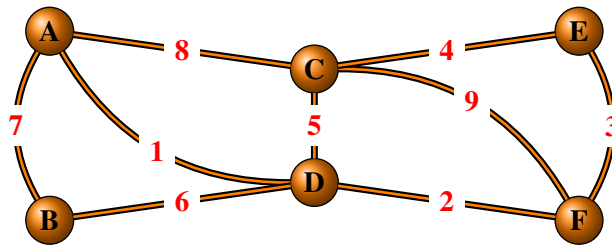
1.2 Težinski grafovi i rezovi

Mnogi problemi se mogu zgodno opisati težinskim grafovima. Posebno, problemi koji se svode na otkrivanje strukture u podacima mogu se oblikovati kao problem particioniranja težinskog grafa. Stoga pojmove *težinski graf* i *particija* u nastavku precizno definiramo.

Definicija 1.2.1. *Težinski graf \mathbb{G} je uređena trojka $(\mathbb{V}, \mathbb{E}, W)$, pri čemu je \mathbb{V} konačan skup čije elemente nazivamo vrhovi, a $\mathbb{E} \subseteq \mathbb{V} \times \mathbb{V}$ simetrična relacija čije elemente nazivamo bridovi. Ako je $|\mathbb{V}| = n$, onda je $W = (w_{ij}) \in M_n(\mathbb{R})$ nenegativna simetrična matrica koju nazivamo matrica težina.*

Napomena 1.2.2. *Spomenimo neke tehničke informacije vezane uz prethodnu definiciju:*

- (a) *Smatramo da je skup vrhova \mathbb{V} totalno uređen. Stoga ćemo ponekad iz praktičnih razloga skup vrhova \mathbb{V} poistovjetiti sa skupom $\{1, 2, \dots, n\}$.*
- (b) *Matrica težina W ima samo nule na dijagonali.*
- (c) *U nastavku ćemo pojmove graf i težinski graf koristiti naizmjenično.*
- (d) *Budući da je skup bridova \mathbb{E} jedna simetrična relacija, za graf \mathbb{G} ćemo ponekad reći da je neusmjeren.*



Slika 1.2: Graf sa 6 vrhova i 9 bridova s naznačenim težinama. Po dogovoru smatramo da neucrtani bridovi imaju težinu 0.

Jedan jednostavan graf dan je grafičkim prikazom na slici 1.2. Ovakvi grafički prikazi su nepraktični za iole veće grafove pa se grafovi često zadaju matrično. Primjerice, sukladno prethodnoj napomeni, graf s n vrhova mogli bismo reprezentirati matricom $A \in M_n$ koja bi bila definirana s

$$A(i, j) = \begin{cases} 1, & (v_i, v_j) \in \mathbb{E}, \\ 0, & \text{inače.} \end{cases}$$

U literaturi je takva matrica poznata pod nazivom *matrica susjedstva*. No, i ona nam je nepotrebna ako već raspoložemo matricom težina W . Naime, tada bismo jednostavno mogli implicitno podrazumijevati da je

$$(v_i, v_j) \in \mathbb{E} \Leftrightarrow w_{ij} > 0.$$

Definicija 1.2.3. Neka je S proizvoljan neprazan skup i $k \in \mathbb{N}$. Kažemo da je familija skupova $\mathcal{F}_S^k = \{S_1, S_2, \dots, S_k\}$ k -člana particija skupa S ako vrijedi:

- (a) $S_i \neq \emptyset$, $i = 1, 2, \dots, k$,
- (b) $S_i \cap S_j = \emptyset$, za $i \neq j$,
- (c) $\bigcup_{i=1}^k S_i = S$.

k -članu particiju grafa $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, W)$ asociirat ćemo s k -članom particijom vrhova \mathbb{V} . Da bismo kvantificirali pojam *dobre* particije, uvodimo kriterije za particioniranje. Naravno, trebamo biti svjesni činjenice da fiksiranjem određenog kriterija uvodimo implicitna ograničenja na dostupne alate za rješavanje problema particioniranja, kao i na kvalitetu dobivenih rezultata. U nastavku ćemo precizno definirati nekoliko važnijih kriterija te određeno vrijeme posvetiti jednom istaknutom kriteriju — normaliziranom rezu.

Definicija 1.2.4. Neka je $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, W)$ graf i $A, B \subseteq \mathbb{V}$. Stupanj povezanosti skupa A sa skupom B , u oznaci $\text{links}(A, B)$, definira se kao suma težina svih bridova čiji je jedan vrh

u skupu A , a drugi u skupu B :

$$\text{links}(A, B) = \sum_{i \in A, j \in B} W(i, j).$$

Kako je riječ o neusmjerenom grafu, zaključujemo da vrijedi $\text{links}(A, B) = \text{links}(B, A)$.

Definicija 1.2.5. Neka je $G = (V, E, W)$ graf i $A \subseteq V$. Stupanj skupa A , u oznaci $\text{deg}(A)$, definira se kao suma težina svih bridova čiji je jedan vrh u skupu A :

$$\text{deg}(A) = \sum_{i \in A, j \in V} W(i, j).$$

Definicija 1.2.6. Neka je $G = (V, E, W)$ graf i $A, B \subseteq V$. Relativna povezanost skupa A sa skupom B , u oznaci $\text{linkratio}(A, B)$, definira se kao omjer stupnja povezanosti skupa A sa skupom B i stupnja od A :

$$\text{linkratio}(A, B) = \frac{\text{links}(A, B)}{\text{deg}(A)}.$$

Primijetimo da $\text{linkratio}(A, A)$ mjeri udio težina bridova koji ostaju u A . Za razliku od toga, $\text{linkratio}(A, V \setminus A)$ mjeri udio težina bridova koji pobjegnu iz A . Intuitivno, od interesa su nam particije grafa koje istovremeno imaju snažnu povezanost unutar pojedinog elementa particije te slabu povezanost između različitih elemenata particije. Da bismo to preciznije opisali, definiramo pojmove normaliziranog reza i normalizirane asocijacije.

Definicija 1.2.7 (normalizirani rez i asocijacija). Neka je $G = (V, E, W)$ graf i $\mathcal{F}_V^k = \{V_1, V_2, \dots, V_k\}$ proizvoljna k -člana particija grafa G . Normalizirani rez u odnosu na particiju \mathcal{F}_V^k , u oznaci $Ncut(\mathcal{F}_V^k)$, definiran je s

$$Ncut(\mathcal{F}_V^k) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=1}^k \text{linkratio}(V_\ell, V \setminus V_\ell).$$

Normalizirana asocijacija u odnosu na particiju \mathcal{F}_V^k , u oznaci $Nassoc(\mathcal{F}_V^k)$, definirana je s

$$Nassoc(\mathcal{F}_V^k) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=1}^k \text{linkratio}(V_\ell, V_\ell).$$

Primijetimo da su vrijednosti od $Ncut(\mathcal{F}_V^k)$ i $Nassoc(\mathcal{F}_V^k)$ zapravo realni brojevi između 0 i 1. Ako kao kriterij particioniranja promatramo normalizirani rez, onda želimo pronaći one particije za koje će vrijednost normaliziranog reza biti što bliža nuli. Analogno, ako particioniramo prema normaliziranoj asocijaciji, onda želimo pronaći one particije za koje

će vrijednost normalizirane asocijacije biti što bliža vrijednosti jedan. Po dogovoru, optimalnom particijom ćemo smatrati svaku particiju koja minimizira normalizirani rez ili maksimizira normaliziranu asocijaciju.

Iz činjenice da vrijedi $deg(\mathbb{V}_\ell) = links(\mathbb{V}_\ell, \mathbb{V}_\ell) + links(\mathbb{V}_\ell, \mathbb{V} \setminus \mathbb{V}_\ell)$ dobivamo sljedeći identitet:

$$Ncut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) + Nassoc(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = 1.$$

To znači da je neka particija optimalna u smislu normaliziranog reza ako i samo ako je optimalna u smislu normalizirane asocijacije. Zbog ekvivalentnosti kriterija, u nastavku ćemo uglavnom promatrati normaliziranu asocijaciju.

Nešto manje popularni kriteriji za particioniranje su razmjerni rez i asocijacija:

Definicija 1.2.8 (razmjerni rez i asocijacija). *Neka je $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, W)$ težinski graf i $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k = \{\mathbb{V}_1, \mathbb{V}_2, \dots, \mathbb{V}_k\}$ proizvoljna k -člana particija grafa \mathbb{G} . Razmjerni rez u odnosu na particiju $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$, u oznaci $Rcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k)$, definiran je s*

$$Rcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=1}^k \frac{links(\mathbb{V}_\ell, \mathbb{V} \setminus \mathbb{V}_\ell)}{|\mathbb{V}_\ell|}.$$

Razmjerna asocijacija u odnosu na particiju $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$, u oznaci $Rassoc(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k)$, definirana je s

$$Rassoc(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=1}^k \frac{links(\mathbb{V}_\ell, \mathbb{V}_\ell)}{|\mathbb{V}_\ell|}.$$

Za razliku od normaliziranog reza i asocijacije, $Rcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k)$ i $Rassoc(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k)$ mogu poprimiti proizvoljne pozitivne realne vrijednosti. Nadalje, suma

$$Rcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) + Rassoc(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k)$$

nam ne daje nikakve korisne informacije o odnosu razmjernog reza i asocijacije. Posebno, nemamo garanciju o egzistenciji particija koje istovremeno minimiziraju razmjerni rez i maksimiziraju razmjernu asocijaciju.

Možemo ići korak dalje i dosadašnje kriterije generalizirati na cijelu klasu kriterija. Elemente te klase nazivat ćemo generaliziranim rezovima i asocijacijama.

Definicija 1.2.9 (generalizirani rez i asocijacija). *Neka je $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, W)$ graf i $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k = \{\mathbb{V}_1, \mathbb{V}_2, \dots, \mathbb{V}_k\}$ proizvoljna k -člana particija grafa \mathbb{G} . Nadalje, neka je skupu \mathbb{V} pridružen nenegativni vektor težina $w \in R^n$. Označimo s $\omega : \mathcal{P}(\mathbb{V}) \rightarrow \mathbb{R}$ preslikavanje definirano s $\omega(\mathbb{A}) = \sum_{i \in \mathbb{A}} w_i$. Generalizirani rez u odnosu na particiju $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ i težinsku funkciju ω , u oznaci $Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k)$, definiran je s*

$$Wcut(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=1}^k \frac{links(\mathbb{V}_\ell, \mathbb{V} \setminus \mathbb{V}_\ell)}{\omega(\mathbb{V}_\ell)}.$$

Generalizirana asocijacija u odnosu na particiju $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ i težinsku funkciju ω , u oznaci $Wassoc(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k)$, definirana je s

$$Wassoc(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=1}^k \frac{\text{links}(\mathbb{V}_{\ell}, \mathbb{V}_{\ell})}{\omega(\mathbb{V}_{\ell})}.$$

Doista, ako vektor težina w definiramo kao vektor jedinica $\mathbf{1}_n$, onda je $\omega(\mathbb{A}) = |\mathbb{A}|$ te generalizirani rez i asocijacija postaju razmjerni rez i asocijacija. Analogno, ako definiramo $w_i = \sum_{j \in \mathbb{V}} W(i, j)$, za $i = 1, \dots, n$, onda je $\omega(\mathbb{A}) = \text{deg}(\mathbb{A})$ pa generalizirani rez i asocijacija postaju normalizirani rez i asocijacija.

1.3 Pregled dosadašnjeg istraživanja

Pojam normalizirani rez formirali su Shi i Malik u svom radu [9] (2000) te pomoću njega osmislili algoritam za segmentaciju digitalne slike. Njihov pristup bazirao se na uzastopnoj biparticiji grafa pomoću svojstvenog vektora koji pripada drugoj najmanjoj svojstvenoj vrijednosti matrice $D^{-\frac{1}{2}}(D - W)D^{-\frac{1}{2}}$, pri čemu je $(D - W)$ tzv. Laplaceova matrica grafa. Zaključili su da particioniranje normaliziranim rezom daje superiornije rezultate od particioniranja sličnim kriterijima kao što su razmjerni rez i asocijacija.

Ng *et al.* su u [5] (2002) dali skoro ekvivalentan algoritam zasnovan na normaliziranoj asocijaciji, ali su preferirali istovremeno particioniranje grafa na k dijela pomoću k najvećih svojstvenih vektora matrice $D^{-\frac{1}{2}}WD^{-\frac{1}{2}}$. U svojoj analizi algoritma dali su uvjete pod kojima se očekuje da particioniranje bude dobro. Također, zastupali su ideju da se završni dio algoritma — klasteriranje u k dimenzija — provede pomoću algoritma k -sredina. Yu i Shi su 2003. godine napravili izmjene u njihovom algoritmu i ovaj rad se najviše oslanja na metodu koju su oni razvili u [14]. Yu *et al.* su kasnije modificirali metodu kako bi ubrzali segmentaciju slika s visokom rezolucijom ([15], 2014).

Kannan *et al.* su se u svom radu [3] (2004) bavili pitanjem kvalitete rezultata dobivenih spektralnim klasteriranjem. Posebno, dali su rigoroznu analizu uspješnosti dotadašnjih spektralnih algoritama u najgorem slučaju (eng. *worst-case guarantees*), kao i dokaz tvrdnje da će takvi algoritmi dati dobro aproksimativno rješenje ako postoje naznake da su podaci grupirani u klasterne (teorem 5, str. 16).

Ograničenja spektralnog klasteriranja među prvima su istražili Nadler i Galun ([4], 2007). Posebno, pokazali su poteškoće spektralnog klasteriranja podataka s istaknutim strukturalnim razlikama u veličini i gustoći. Rad na spektralnom klasteriranju neuravnoteženih skupova podataka nastavili su Qian i Saligrama koji su u [7] (2014) potvrdili neprikladnost razmjernog i normaliziranog reza za takav tip podataka te su predložili alternative.

Problem ukomponiranja prijašnjeg znanja (engl. *prior knowledge*) u postupak klasteriranja riješili su Xu *et al.* ([13], 2009). Oni su prijašnje znanje zapisali pomoću linearnih ograničenja na traženo rješenje problema klasteriranja te su razvili brz i efikasan algoritam i dokazali njegovu konvergenciju.

Dhillon *et al.* su 2005. godine u svom radu [1] uspostavili vezu između spektralnog klasteriranja i algoritma k -sredina s jezgrom. Preciznije, dokazali su matematičku ekvivalenciju kriterija za particioniranje težinskog grafa i ciljnih funkcija algoritma k -sredina s jezgrom i težinama (engl. *weighted kernel k-means*). Posebni slučajevi kriterija uključuju normalizirani rez te razmjerni rez i asocijaciju. Time su pokazali da postoje efikasne nespektralne metode za particioniranje grafa koje daju jednako dobre rezultate kao i spektralne.

Spektralno klasteriranje ima široki krug primjena. Pentney i Meila su u [6] (2005) upotrijebili spektralne metode za klasteriranje bioloških sljedova, dok su Grote *et al.* u [2] (2007) koristili segmentaciju normaliziranim rezom da bi identificirali prometnice na zračnim snimkama predgrađa. Heuvel *et al.* su u [12] (2008) primijenili normalizirani rez na klasteriranje podataka u svrhu analize moždane aktivnosti za vrijeme mirovanja. Za kraj, Ren *et al.* proučavali su otpornost složene mreže na unutarnje greške i vanjske napade ([8], 2017). Razvili su jednostavnu i efikasnu strategiju za uklanjanje bridova u složenim mrežama koja je bazirana na normaliziranom rezu.

Poglavlje 2

Normalizirani rezovi u težinskim grafovima

2.1 Matrični zapis problema

Svakako trebamo opravdati namjeru da problem particioniranja zapišemo matrično. Naime, matrična formulacija problema prirodno nas navodi na korištenje rezultata iz spektralne teorije, a diskretizacija tako dobivenih kontinuiranih rješenja (kako ćemo kasnije vidjeti) garantira nam samo da su konačna rješenja skoro globalno-optimalna. Stoga se nameće pitanje jesu li takva rješenja zadovoljavajuća.

Jedan jednostavan argument za uvođenje matričnog zapisa problema je taj što se sami grafovi pogodno reprezentiraju matricama. Od ostalih argumenata možemo istaknuti jednostavnost i intuitivnost metoda iz spektralne teorije matrica te dostupnost i efikasnost programskih paketa u kojima su one implementirane. Nepraktičnost traženja globalno-optimalnih rješenja ilustrirat ćemo na sljedeći način:

Neka su $k, n \in \mathbb{N}$ takvi da vrijedi $k \leq n$. Sa $S(n, k)$ ćemo označiti broj k -članih particija proizvoljnog n -članog skupa. Lako se vidi da takvi brojevi zadovoljavaju sljedeću rekurziju:

$$S(n, k) = S(n - 1, k - 1) + kS(n - 1, k), \text{ za } 1 < k < n,$$

$$S(n, 1) = S(n, n) = 1, \forall n \in \mathbb{N}.$$

Naime, ako fiksiramo proizvoljan element x iz n -članog skupa S , onda sve particije od S možemo podijeliti u dvije skupine: one za koje je $\{x\}$ element particije i one za koje nije. Jasno je da je broj particija iz prve skupine jednak $S(n - 1, k - 1)$ jer je to broj $(k - 1)$ -članih particija skupa $S \setminus \{x\}$. Ako $\{x\}$ nije član particije, onda uzimanjem proizvoljne k -člane particije za skup $S \setminus \{x\}$ i dodavanjem elementa x nekom od članova particije dobivamo upravo neku particiju iz druge skupine. Vrijedi i obrat, tj. svaka particija iz druge skupine

se može dobiti na prethodno opisani način. Zaključujemo da je broj particija iz druge skupine jednak $kS(n-1, k)$.

Iz prethodne rekurzije slijedi da za $k < n$ vrijedi $S(n, k) \geq kS(n-1, k)$. Ako nastavimo induktivno, dobivamo sljedeću nejednakost:

$$S(n, k) \geq k^{n-k}, \text{ za } k \leq n.$$

To znači da za fiksni k preslikavanje $n \mapsto S(n, k)$ raste barem eksponencijalno. Iz toga slijedi da su metode bazirane na iscrpnom pretraživanju neupotrebljive za pronalaženje k -člane particije koja je optimalna po nekom netrivialnom kriteriju za iole veće n i k .

U prethodnom poglavlju spomenuli smo neke važne probleme koji se mogu svesti na problem particioniranja grafa. Primjerice, digitalnu sliku rezolucije 100×100 piksela možemo opisati grafom s $n = 10^4$ vrhova. Kako bi broj tročlanih particija tog grafa bio ogroman, jasno je da moramo odustati od ovog pristupa. Stoga ćemo u nastavku tražiti rješenja koja su blizu globalno-optimalnih.

Sada ćemo problem nalaženja optimalne particije zapisati matrično. Neka je $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, W)$ graf i $\mathbb{V} = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. Zadanoj particiji $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^k$ pridružiti ćemo matricu particije $X \in M_{nk}$ definiranu s

$$X(i, j) = \begin{cases} 1, & v_i \in \mathbb{V}_j, \\ 0, & \text{inače.} \end{cases}$$

Lako se vidi da svaki redak matrice particije sadrži točno jednu jedinicu. Označimo li s $\mathbf{1}_m \in \mathbb{R}^m$ vektor jedinica za $m \in \mathbb{N}$, prethodno svojstvo možemo kompaktnije zapisati kao

$$X(i, j) \in \{0, 1\}, \forall i, j,$$

$$X\mathbf{1}_k = \mathbf{1}_n.$$

Uzimajući u obzir gornje uvjete i činjenicu da među stupcima od X nema nul-vektora zaključujemo da je $r(X) = k$. S $D \in M_n$ označit ćemo dijagonalnu matricu na čijoj su dijagonali zapisane sume težina svih bridova koji su incidentni s pojedinim vrhom u grafu. Preciznije,

$$D(i, j) = \begin{cases} [W\mathbf{1}_n]_i, & i = j, \\ 0, & \text{inače.} \end{cases}$$

To se kraće može zapisati kao

$$D = \text{Diag}(W\mathbf{1}_n).$$

Također, razumno je pretpostaviti da D ne sadrži nulu na dijagonali. Naime, nule na dijagonali upućivale bi na izolirane vrhove u grafu koje bi odmah na početku mogli proglasiti zasebnim elementima particije.

Ako s X_ℓ označimo ℓ -ti stupac matrice X , onda izraze $\text{links}(\mathbb{V}_\ell, \mathbb{V}_\ell)$ i $\text{deg}(\mathbb{V}_\ell)$ možemo zapisati kao

$$\begin{aligned}\text{links}(\mathbb{V}_\ell, \mathbb{V}_\ell) &= X_\ell^T W X_\ell, \\ \text{deg}(\mathbb{V}_\ell) &= X_\ell^T D X_\ell.\end{aligned}$$

Definicija 2.1.1. Neka su $k, n \in \mathbb{N}$ takvi da je $k \leq n$ i

$$\mathcal{X} := \{X \in M_{nk} \mid X(i, j) \in \{0, 1\}, X\mathbf{1}_k = \mathbf{1}_n, r(X) = k\}$$

skup matrica particije. Funkcija $\varepsilon : \mathcal{X} \rightarrow [0, 1]$ definirana je sljedećom formulom:

$$\varepsilon(X) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=1}^k \frac{X_\ell^T W X_\ell}{X_\ell^T D X_\ell}. \quad (2.1)$$

Primijetimo da korendencija između particije $\mathcal{F}_\mathbb{V}^k$ i matrice particije X povlači

$$N_{\text{assoc}}(\mathcal{F}_\mathbb{V}^k) = \varepsilon(X).$$

Problem pronalaženja optimalne particije sveli smo na problem maksimizacije funkcije ε na konačnoj domeni \mathcal{X} . Maloprije smo pokazali da problem nikako ne možemo riješiti metodom iscrpnog pretraživanja. Štoviše, ispostavlja se da je naš problem NP -potpun, što za posljedicu ima da ne postoji efikasan algoritam koji ga egzaktno rješava. Više o tome može se pronaći u [9].

Na sljedećem primjeru ilustrirat ćemo neke od novouvedenih pojmova iz prošlog poglavlja. Kasnije ćemo se vratiti istome kako bismo na njemu demonstrirali metodu koju želimo razviti.

Primjer 2.1.2. Neka je $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E}, W)$ graf zadan grafičkim prikazom sa slike 2.1. Sa slike čitamo sljedeće podatke o grafu:

$$\mathbb{V} = \{A, B, C, D, E, F, G, H, I\},$$

$$\begin{aligned}\mathbb{E} = \{ & (A, B), (A, C), (A, I), (B, A), (B, C), (C, A), (C, B), (C, D), \\ & (D, C), (D, E), (D, F), (E, D), (E, F), (F, D), (F, E), (F, G), \\ & (G, F), (G, H), (G, I), (H, G), (H, I), (I, G), (I, H), (I, A) \},\end{aligned}$$

$$W = \begin{bmatrix} 0 & 8 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 8 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 7 & 8 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & 17 & 7 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 17 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 7 & 8 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 8 & 16 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 8 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 16 & 8 & 0 \end{bmatrix}.$$

Pritom smo na \mathbb{V} fiksirali leksikografski totalni uređaj kako bi u skladu s njim matrica W bila jedinstveno određena. Pripadna matrica D dana je s

$$D = \text{Diag}\left(\begin{bmatrix} 16 & 16 & 16 & 25 & 25 & 16 & 25 & 16 & 25 \end{bmatrix}^T\right).$$

Particiji $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^3 = \{ \{A, B, C\}, \{D, E, F\}, \{G, H, I\} \}$ sa slike pridružujemo matricu particije $X \in M_{9,3}$ koja glasi:

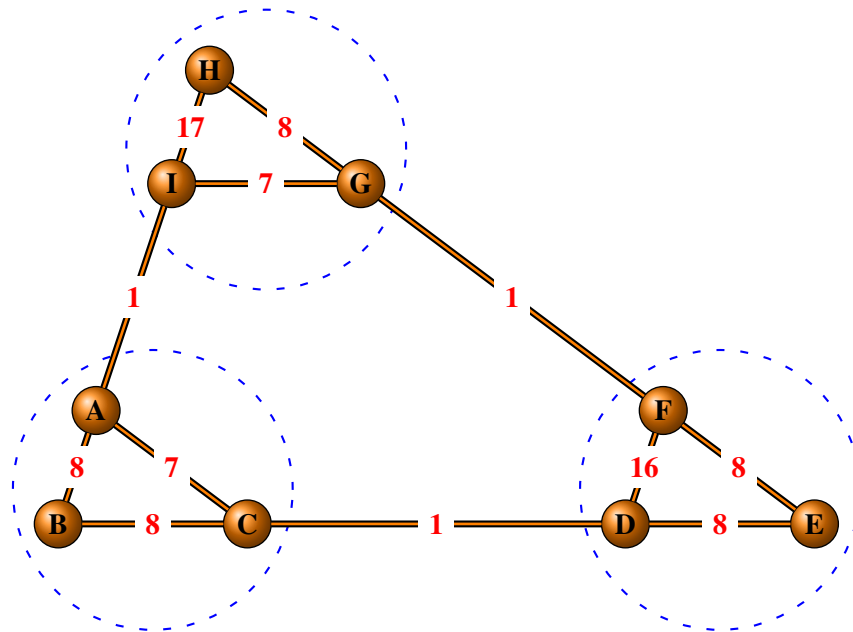
$$X = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Da bismo odredili vrijednost pripadne normalizirane asocijacije, prvo ćemo izračunati vrijednosti $\text{linkratio}(\mathbb{V}_i)$ za $i = 1, 2, 3$.

$$\begin{aligned} \text{linkratio}(\mathbb{V}_1) &= \frac{\text{links}(\mathbb{V}_1, \mathbb{V}_1)}{\text{deg}(\mathbb{V}_1)} \\ &= \frac{\sum_{i \in \mathbb{V}_1, j \in \mathbb{V}_1} W(i, j)}{\sum_{i \in \mathbb{V}_1, j \in \mathbb{V}} W(i, j)} \\ &= \frac{(0 + 8 + 7) + (8 + 0 + 8) + (7 + 8 + 0)}{16 + 16 + 16} \\ &= \frac{46}{48} \end{aligned}$$

Analogno dobivamo ostale dvije vrijednosti:

$$\text{linkratio}(\mathbb{V}_2) = \text{linkratio}(\mathbb{V}_3) = \frac{64}{66}.$$



Slika 2.1: Težinski graf s 9 vrhova i 12 bridova. Plave kružnice određuju tročlanu particiju koja minimizira vrijednost normaliziranog reza.

Tada vrijednost normalizirane asocijacije iznosi

$$N_{\text{assoc}}(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^3) = \frac{1}{3} \left(\frac{46}{48} + \frac{64}{66} + \frac{64}{66} \right) = \frac{85}{88},$$

a normaliziranog reza

$$N_{\text{cut}}(\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^3) = 1 - \frac{85}{88} = \frac{3}{88}.$$

Iako lako dolazimo do zaključka da spomenuta particija $\mathcal{F}_{\mathbb{V}}^3$ maksimizira funkciju ε , tu ćemo činjenicu kasnije dokazati formalnim metodama.

U nastavku ovog poglavlja bavit ćemo se razvojem metoda za pronalaženje približnog optimalnog rješenja korištenjem spektralne teorije matrica. Kratak pregled važnijih pojmova i rezultata vezanih uz matrice koje ćemo koristiti mogu se pronaći u dodatku.

2.2 Relaksirani problem

Vratimo se malo na definiciju funkcije ε . Fiksirajmo $k, n \in \mathbb{N}$ takve da je $k \leq n$. Brojevi $X_{\ell}^T D X_{\ell}$ u nazivniku su pozitivni pa ih možemo prikazati kao produkt drugih korijena te ih

prebaciti u brojnik. Time dobivamo:

$$\varepsilon(X) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=1}^k (X_{\ell}^T D X_{\ell})^{-\frac{1}{2}} X_{\ell}^T W X_{\ell} (X_{\ell}^T D X_{\ell})^{-\frac{1}{2}}.$$

Uvedemo li oznake $Z_{\ell} := X_{\ell} (X_{\ell}^T D X_{\ell})^{-\frac{1}{2}}$ za $\ell = 1, \dots, k$, prethodni izraz možemo pojednostaviti na

$$\varepsilon(X) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=1}^k Z_{\ell}^T W Z_{\ell}.$$

Neka je $Z := [Z_1 \ Z_2 \ \dots \ Z_k]$ matrica dobivena slaganjem vektora Z_{ℓ} , $\ell = 1, \dots, k$ u stupce. Tada pomoću jednakosti $[Z^T W Z]_{\ell\ell} = Z_{\ell}^T W Z_{\ell}$ dobivamo

$$\varepsilon(X) = \frac{1}{k} \text{tr}(Z^T W Z). \quad (2.2)$$

Također, primijetimo da se matrica Z može faktorizirati na sljedeći način:

$$\begin{aligned} Z &= X \cdot \begin{bmatrix} (X_1^T D X_1)^{-\frac{1}{2}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & (X_2^T D X_2)^{-\frac{1}{2}} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & (X_k^T D X_k)^{-\frac{1}{2}} \end{bmatrix} \\ &= X \cdot \begin{bmatrix} X_1^T D X_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & X_2^T D X_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & X_k^T D X_k \end{bmatrix}^{-\frac{1}{2}} \\ &= X \cdot (X^T D X)^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Pomoću prethodno dobivene jednakosti dobivamo sljedeći uvjet na matricu Z :

$$Z^T D Z = (X^T D X)^{-\frac{1}{2}} X^T D X (X^T D X)^{-\frac{1}{2}} = I_k,$$

pri čemu je $I_k \in M_k$ jedinična matrica.

Neka je $\Phi : \mathcal{X} \rightarrow M_{nk}$ preslikavanje definirano s $\Phi(X) = X(X^T D X)^{-\frac{1}{2}}$. Budući da je $X^T D X$ dijagonalna matrica, stupci matrice $\Phi(X)$ su identični stupcima matrice X do na faktor skaliranja. Na prostoru $\Phi(\mathcal{X})$ možemo promatrati inverz Φ^{-1} definiran formulom

$$\Phi^{-1}(Z) = \text{Diag}(\text{diag}^{-\frac{1}{2}}(Z Z^T)) Z,$$

pri čemu je diag operator koji vraća dijagonalu kvadratne matrice u obliku vektora. Doista, $\text{diag}^{-\frac{1}{2}}(Z Z^T)$ sadrži faktore za normaliziranje redaka, a kako svaki redak od Z ima

točno jedan netrivialni element, djelovanjem dijagonalne matrice $Diag(diag^{-\frac{1}{2}}(ZZ^T))$ na Z dobivamo 1 na odgovarajućem mjestu.

Vidjeli smo da je problem maksimizacije funkcije ε iz (2.1) diskretne prirode. Relaksacija diskretnog problema svodi se na oslabljivanje uvjeta pomoću kojih je problem zadan. Za probleme opisane slabijim uvjetima imamo više alata dostupnih za njihovo rješavanje. Što se tiče našeg problema, domena \mathcal{X} funkcije ε zadana je pomoću tri netrivialna uvjeta:

$$(a) X(i, j) \in \{0, 1\}, \forall i, j,$$

$$(b) X\mathbf{1}_k = \mathbf{1}_n,$$

$$(c) r(X) = k.$$

Sva tri uvjeta ćemo za sada zanemariti, a funkciju ε ćemo promatrati na novoj domeni

$$\mathcal{Z} := \{Z \in M_{nk} \mid Z^T D Z = I_k\}.$$

Jednom kada pronađemo rješenje problema Z^* na domeni \mathcal{Z} , htjet ćemo pomoću njega odrediti odgovarajuću matricu particije X^* . Mogli bismo naivno pomisliti da je dovoljno proširiti funkciju Φ^{-1} na domenu \mathcal{Z} , ali ispostavlja se da je to problematično iz sljedeća dva razloga:

$$(a) \text{ inverz } \Phi^{-1} \text{ nije definiran za sve } Z \in \mathcal{Z},$$

$$(b) \text{ za one } Z \text{ za koje je definirano } \Phi^{-1}(Z) \text{ nemamo garanciju da se radi o matrici particije.}$$

Prvi problem odnosi se samo na matrice Z koje imaju nul-retke, a udio takvih matrica u skupu \mathcal{Z} je zanemariv. Ako je pak inverz definiran, onda je $\Phi^{-1}(Z)$ matrica s jediničnim retcima. Kako pomoću te matrice doći do matrice particije je u potpunosti netrivialno i tom postupku ćemo kasnije posvetiti dosta vremena u odjeljku 2.5.

Za sada ćemo se koncentrirati na rješavanje relaksiranog problema, tj. na maksimizaciju funkcije ε na domeni \mathcal{Z} . Problem možemo zgodno reformulirati korištenjem Stiefelove mnogostrukosti koju u nastavku definiramo:

Definicija 2.2.1. *Neka su n i k prirodni brojevi takvi da je $k \leq n$. Stiefelova mnogostrukost, u oznaci $V(n, k)$, definira se kao skup svih realnih $n \times k$ matrica s ortonormiranim stupcima, odnosno*

$$V(n, k) := \{R \in M_{nk}(\mathbb{R}) \mid R^T R = I_k\}.$$

Budući da za $Z \in \mathcal{Z}$ vrijedi $Z^T D Z = I_k$, odnosno $(D^{\frac{1}{2}} Z)^T (D^{\frac{1}{2}} Z) = I_k$, zaključujemo da je $D^{\frac{1}{2}} Z \in V(n, k)$. Štoviše, vrijedi sljedeća skupovna jednakost:

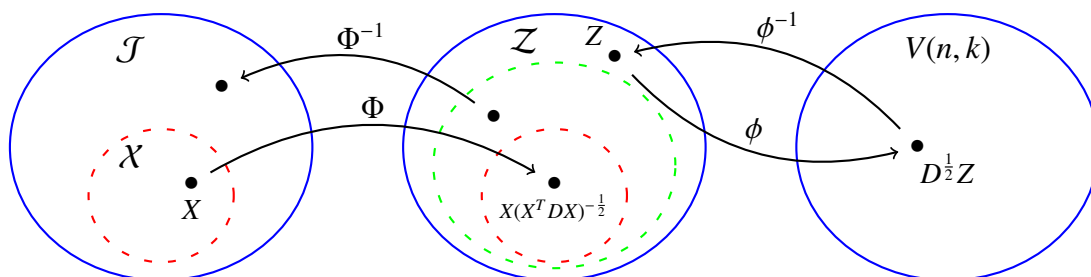
$$\mathcal{Z} = D^{-\frac{1}{2}}V(n, k),$$

pri čemu desnu stranu interpretiramo kao skup matrica nastalih množenjem matrica $R \in V(n, k)$ slijeva matricom $D^{-\frac{1}{2}}$.

Neka je $\mathcal{E} : V(n, k) \rightarrow [0, k]$ funkcija definirana formulom

$$\mathcal{E}(R) := k\varepsilon(D^{-\frac{1}{2}}R) = \text{tr}(R^T D^{-\frac{1}{2}} W D^{-\frac{1}{2}} R).$$

Tada funkcije ε i \mathcal{E} imaju identične slike do na konstantni faktor k pa umjesto maksimizacije funkcije ε na domeni \mathcal{Z} možemo promatrati maksimizaciju funkcije \mathcal{E} na domeni $V(n, k)$. Da bismo maksimizirali \mathcal{E} na $V(n, k)$, prvo ćemo izgraditi spektralnu teoriju realne simetrične matrice kojoj je posvećen sljedeći odjeljak. Ovaj odjeljak zaključujemo shematskim prikazom transformacija koje smo do sada spomenuli:



Slika 2.2: Odnos skupova \mathcal{X} , \mathcal{J} , \mathcal{Z} i $V(n, k)$. \mathcal{J} je skup svih $n \times k$ matrica s jediničnim retcima. Skup matrica $Z \in \mathcal{Z}$ za koje je definiran inverz Φ^{-1} označen je zelenom bojom.

2.3 Dekompozicija realne simetrične matrice

Slijedi jednostavna definicija koja je od centralne važnosti za teoriju koju želimo izgraditi.

Definicija 2.3.1. *Neka su $A, B \in M_n(\mathbb{F})$. Kažemo da je matrica B slična matrici A , u oznaci $B \sim A$, ako postoji regularna matrica $S \in M_n(\mathbb{F})$ takva da je $B = S^{-1}AS$.*

Matricu S ćemo ponekad nazivati matricom prijelaza. Lako se vidi da je relacija *biti sličan* jedna relacija ekvivalencije na skupu kvadratnih matrica reda n . Doista, refleksivnost trivijalno slijedi uzmemo li za S identitetu I , dok je simetričnost posljedica sljedeće implikacije:

$$B = S^{-1}AS \implies A = SBS^{-1}.$$

Stoga ćemo u nastavku češće govoriti da su matrice A i B međusobno slične, izostavljajući poredak iz definicije. Pretpostavimo sada da su matrice A , B i C takve da je $A \sim B$ i $B \sim C$. Tada postoje regularne matrice S i T takve da je $A = S^{-1}BS$ i $B = T^{-1}CT$. Slijedi da je $A = S^{-1}(T^{-1}AT)S = (TS)^{-1}A(TS)$ pa je $A \sim C$, čime smo dokazali tranzitivnost.

Sljedeća propozicija opravdava važnost prethodne definicije.

Propozicija 2.3.2. *Neka su $A, B \in M_n(\mathbb{F})$ dvije međusobno slične matrice. Tada vrijedi:*

(a) *A je regularna ako i samo ako je B regularna,*

(b) *$\det(A) = \det(B)$,*

(c) *$r(A) = r(B)$,*

(d) *$\text{tr}(A) = \text{tr}(B)$.*

Tvrđnje se lako dokažu primjenom rezultata spomenutih u dodatku. Propozicija nam govori da slične matrice imaju ista osnovna svojstva. To znači da pronalaskom jednostavne matrice A možemo lako opisati sve matrice iz klase određene tom matricom. Prirodno pitanje koje se sada nameće je: *Za danu matricu A , koliko jednostavnu matricu B možemo pronaći takvu da je $A \sim B$?*

Svakako ćemo se složiti da je dijagonalna matrica primjer jednostavne matrice. Dosta, determinanta (trag) dijagonalne matrice je jednostavno produkt (suma) elemenata na dijagonali, rang je broj dijagonalnih elemenata različitih od nule, dok je inverz definiran ako i samo ako se na dijagonali ne pojavljuje nula. Za matrice koje su slične nekoj dijagonalnoj matrici reći ćemo da su dijagonalizabilne ili da se mogu dijagonalizirati. Nisu sve kvadratne matrice dijagonalizabilne. Primjerice, promotrimo matricu

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Vrijedi da je $\det(A) = \text{tr}(A) = 0$ pa bi prema prošloj propoziciji njoj slična dijagonalna matrica trebala biti nul-matrica. S druge strane, nul-matrica nije slična niti jednoj matrici osim samoj sebi.

Ponekad nam nije dovoljno znati samo da su dvije matrice slične, nego želimo znati i rastav $A = S^{-1}BS$, tj. želimo informaciju o matrici S . Primjerice, takav rastav se može iskoristiti za efikasnije potenciranje matrice A jer za $n \in \mathbb{N}$ vrijedi:

$$A^n = \underbrace{(S^{-1}BS)(S^{-1}BS) \cdots (S^{-1}BS)}_{n \text{ puta}} = S^{-1}B^nS,$$

a desnu stranu je lako izračunati ukoliko je matricu B lako potencirati. Nadalje, ovakav zapis potenciranja možemo iskoristiti za evaluaciju polinoma $p(x) = \sum_{k=0}^n a_k x^k$ u točki A :

$$\begin{aligned} p(A) &= \sum_{k=0}^n a_k A^k \\ &= \sum_{k=0}^n a_k (S^{-1} B^k S) \\ &= S^{-1} \left(\sum_{k=0}^n a_k B^k \right) S. \end{aligned}$$

Primijetimo da matrica S nije jedinstvena jer svaka matrica oblika cS , gdje je $c \neq 0$ proizvoljan skalar, daje valjani rastav iz definicije sličnosti. Stoga se opet nameće pitanje odabira što jednostavnije matrice prijelaza. U ovom slučaju zanimat će nas ortogonalne matrice, tj. realne regularne matrice S koje zadovoljavaju uvjet

$$S^{-1} = S^T.$$

Definicija 2.3.3. *Kažemo da je $A \in M_n(\mathbb{F})$ ortogonalno dijagonalizabilna ili da se može ortogonalno dijagonalizirati ako postoje ortogonalna matrica S i dijagonalna matrica D takve da vrijedi $A = SDS^T$.*

Uočimo da je svaka ortogonalno dijagonalizabilna matrica simetrična jer vrijedi:

$$A^T = (SDS^T)^T = (S^T)^T D^T S^T = SDS^T = A.$$

Cilj ovog odjeljka je pokazati svojevrsni obrat gornje tvrdnje, tj. da se svaka realna simetrična matrica može ortogonalno dijagonalizirati. Započinjemo sljedećom definicijom:

Definicija 2.3.4. *Neka je $A \in M_n(\mathbb{F})$. Kažemo da je $\lambda \in \mathbb{F}$ svojstvena vrijednost matrice A ako postoji vektor $x \in \mathbb{F}^n$, $x \neq 0$, takav da je $Ax = \lambda x$. Skup svih svojstvenih vrijednosti matrice A nazivamo spektrom matrice A i označavamo sa σ_A .*

Vektor x iz prethodne definicije naziva se svojstveni vektor pridružen svojstvenoj vrijednosti λ . Skup svih svojstvenih vektora pridruženih λ zajedno s nul-vektorom naziva se svojstveni potprostor pridružen svojstvenoj vrijednosti λ i označuje s $V_A(\lambda)$. Primijetimo da vrijedi $V_A(\lambda) = \text{Ker}(A - \lambda I)$. Da bismo dokazali egzistenciju i broj svojstvenih vrijednosti za proizvoljnu matricu A uvodimo pojam svojstvenog polinoma matrice A .

Definicija 2.3.5. *Neka je $A \in M_n(\mathbb{F})$. Preslikavanje $\lambda \mapsto \det(A - \lambda I)$ definirano na \mathbb{F} naziva se svojstveni polinom matrice A i označava s $k_A(\lambda)$.*

Svakako treba opravdati da je $k_A(\lambda)$ zaista polinom u varijabli λ . Naime, determinanta matrice je konačna suma čiji je svaki sumand do na predznak produkt n elemenata te matrice. Budući da je svaki sumand polinom u varijabli λ , onda je i njihova suma opet polinom u varijabli λ . Nadalje, kako je svaki sumand polinom stupnja najviše n , onda je i $k_A(\lambda)$ stupnja najviše n . Daljnim proučavanjem se lako zaključuje da je $k_A(\lambda)$ stupnja točno n i da mu je vodeći koeficijent jednak $(-1)^n$.

Sljedeća propozicija nam govori da slične matrice imaju isti svojstveni polinom:

Propozicija 2.3.6. *Neka su $A, B \in M_n(\mathbb{F})$ dvije međusobno slične matrice. Tada vrijedi*

$$k_A(\lambda) = k_B(\lambda).$$

Dokaz. Neka je S regularna matrica takva da vrijedi $A = S^{-1}BS$. Primjenom Binet-Cauchyjevog teorema dobivamo:

$$\begin{aligned} k_A(\lambda) &= \det(A - \lambda I) \\ &= \det(S^{-1}BS - \lambda I) \\ &= \det(S^{-1}(B - \lambda I)S) \\ &= \det(S^{-1})\det(B - \lambda I)\det S \\ &= k_B(\lambda)\det(S^{-1}S) \\ &= k_B(\lambda). \end{aligned}$$

□

Vidjeli smo da je λ svojstvena vrijednost matrice A ako i samo ako je prostor $V_A(\lambda)$ netrivialan. Iz teorema A.14 i prethodne definicije slijedi da je λ svojstvena vrijednost ako i samo ako je $k_A(\lambda) = 0$. Ako promatramo $k_A(\lambda)$ nad $\mathbb{F} = \mathbb{C}$, onda primjenom fundamentalnog teorema algebre slijedi da $k_A(\lambda)$ ima točno n (ne nužno različitih) kompleksnih nultočaka. To znači da matrica A reda n ima najviše n različitih svojstvenih vrijednosti.

Opišimo sada idejno kako bismo dijagonalizirali matricu $A \in M_n(\mathbb{C})$. Za početak, pronašli bismo sve svojstvene vrijednosti $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ i njima odgovarajuće svojstvene vektore x_1, x_2, \dots, x_n . Oni bi zadovoljavali sljedeće jednakosti:

$$\begin{aligned} Ax_1 &= \lambda_1 x_1, \\ Ax_2 &= \lambda_2 x_2, \\ &\vdots \\ Ax_n &= \lambda_n x_n. \end{aligned}$$

Neka je $S \in M_n$ matrica čiji je j -ti stupac vektor x_j , za $j = 1, 2, \dots, n$ i $D \in M_n$ dijagonalna matrica takva da vrijedi $[D]_{ii} = \lambda_i$, za $i = 1, 2, \dots, n$. Tada se prethodne jednakosti mogu kompaktnije zapisati kao:

$$AS = SD.$$

Kada bi S bila regularna, onda bismo množenjem zdesna sa S^{-1} dobili traženi rastav:

$$A = SDS^{-1}.$$

Vrijeme je da kažemo nešto detaljnije o dijagonalizaciji realne simetrične matrice. Neka je $A \in M_n(\mathbb{R})$ realna simetrična matrica. Primjenom propozicije A.17 dobivamo da je $\langle Ax, y \rangle = \langle x, Ay \rangle$. Nadalje, neka je λ proizvoljna (kompleksna) svojstvena vrijednost od A i x pripadni svojstveni vektor. Vrijedi:

$$\begin{aligned} \lambda \langle x, x \rangle &= \langle \lambda x, x \rangle = \langle Ax, x \rangle \\ &= \langle x, Ax \rangle = \langle x, \lambda x \rangle \\ &= \overline{\langle \lambda x, x \rangle} = \overline{\lambda \langle x, x \rangle} \\ &= \bar{\lambda} \langle x, x \rangle. \end{aligned}$$

Kako je $\langle x, x \rangle > 0$, zaključujemo da je $\lambda = \bar{\lambda}$. Dakle, svojstvene vrijednosti realne simetrične matrice su realni brojevi. Također, kako su svojstveni vektori pridruženi λ netrivialna rješenja jednadžbe $(A - \lambda I)x = 0$, a matrica $A - \lambda I$ realna, možemo pronaći realni svojstveni vektor pridružen λ . Priču o ortogonalnoj dijagonalizaciji zaključujemo sljedećim teoremom:

Teorem 2.3.7. *Svaka realna simetrična matrica $A \in M_n(\mathbb{R})$ može se ortogonalno dijagonalizirati.*

Dokaz. Teorem dokazujemo indukcijom po $n \in \mathbb{N}$.

Neka je $A = [a]$ matrica reda 1. Tada je $A = [1][a][1]$ traženi rastav.

Pretpostavimo da tvrdnja vrijedi za sve realne simetrične matrice reda $n - 1$, za neki fiksni $n \geq 2$. Neka je A neka realna simetrična matrica reda n . Prema prethodnoj diskusiji znamo da A ima realnu svojstvenu vrijednost λ_1 kojoj možemo pridružiti realni svojstveni vektor v_1 . Bez smanjenja općenitosti možemo pretpostaviti da je vektor v_1 jediničan. Primjenom korolara A.20, skup $\{v_1\}$ možemo nadopuniti do ortonormirane baze $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ za \mathbb{R}^n . Neka je $P = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n]$ ortogonalna matrica čiji su stupci vektori ortonormirane baze. Promotrimo sada matricu $\tilde{A} = P^T A P$. Za početak, radi se o simetričnoj matrici:

$$\tilde{A}^T = (P^T A P)^T = P^T A^T (P^T)^T = P^T A P = \tilde{A}.$$

Nadalje, označimo s $e_1 = [1 \ 0 \ \dots \ 0]^T$ prvi vektor kanonske baze za \mathbb{R}^n . Tada vrijedi:

$$\begin{aligned}\tilde{A}e_1 &= (P^TAP)e_1 = P^TAv_1 \\ &= \lambda_1P^Tv_1 = \lambda_1P^Pe_1 \\ &= \lambda_1e_1.\end{aligned}$$

To znači da je prvi stupac matrice \tilde{A} upravo $[\lambda_1 \ 0 \ \dots \ 0]^T$. Iz svega navedenog slijedi da \tilde{A} možemo zapisati kao blok matricu na sljedeći način:

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & B \end{bmatrix},$$

pri čemu je B realna simetrična matrica reda $n-1$, a $\mathbf{0}$ vektor od $n-1$ nula. Po pretpostavci, B se može ortogonalno dijagonalizirati. Neka je $Q \in M_{n-1}$ ortogonalna matrica i $\tilde{D} \in M_{n-1}$ dijagonalna matrica takve da je $B = Q\tilde{D}Q^T$.

Označimo $R := \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & Q \end{bmatrix}$. Riječ je o ortogonalnoj matrici jer je

$$\begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & Q \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & Q^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & I_{n-1} \end{bmatrix}.$$

Nadalje, definirajmo S kao produkt matrica P i R . S je ponovno ortogonalna kao umnožak ortogonalnih matrica. Računamo:

$$\begin{aligned}S^TAS &= (R^TP^T)A(PR) = R^T(P^TAP)R = R^T\tilde{A}R \\ &= \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & Q^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & Q \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & Q^TB \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & Q \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & Q^TBQ \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & \tilde{D} \end{bmatrix}.\end{aligned}$$

Označimo $D := \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & \tilde{D} \end{bmatrix}$. Tada vrijedi da je $S^TAS = D$, odnosno $A = SDS^T$. Po principu matematičke indukcije tvrdnja teorema vrijedi za sve realne simetrične matrice. \square

Da bi matrica D iz dokaza prethodnog teorema bila jedinstvena zahtijevat ćemo da su svojstvene vrijednosti na dijagonali poredane u nerastućem poretku. Za kraj, spomenimo samo da je izloženi teorijski pristup ortogonalnoj dekompoziciji neprikladan za primjene u praksi iz više razloga. Stoga se za izračunavanje svojstvenih vrijednosti i vektora u praksi koriste složenije metode.

2.4 Rješenje relaksiranog problema

Prisjetimo se da smo relaksirani problem definirali kao maksimizaciju kontinuirane funkcije $\mathcal{E}(R)$ na domeni $V(n, k)$. Da bismo riješili taj optimizacijski problem treba nam sljedeći tehnički rezultat:

Lema 2.4.1. *Neka su zadani $n, k \in \mathbb{N}$ takvi da je $k \leq n$. Neka je $R \in V(n, k)$ i $u, v \in \mathbb{R}^n$ jedinični vektori. Tada vrijedi*

$$\langle R^T u, R^T v \rangle \leq 1.$$

Dokaz. U nastavku se pozivamo na svojstva skalarnog produkta te na Cauchy-Schwarzovu nejednakost. Uvjerimo se prvo da vrijedi nejednakost $\|RR^T v\| \leq \|v\|$. Naime,

$$\begin{aligned} \|RR^T v\|^2 &= \langle RR^T v, RR^T v \rangle \\ &= \langle v, (RR^T)^T RR^T v \rangle \\ &= \langle v, RR^T v \rangle \\ &\leq \|v\| \|RR^T v\| \end{aligned}$$

pa dijeljenjem s $\|RR^T v\| > 0$ dobivamo traženu nejednakost. Konačno,

$$\begin{aligned} \langle R^T u, R^T v \rangle &= \langle u, RR^T v \rangle \\ &\leq \|u\| \|RR^T v\| \\ &= \|RR^T v\| \\ &\leq \|v\| \\ &= 1. \end{aligned}$$

□

Sljedeći teorem daje sva rješenja gotovo svih relaksiranih problema:

Teorem 2.4.2. *Neka su zadani $n, k \in \mathbb{N}$ takvi da je $k \leq n$. Neka je relaksirani problem zadan funkcijom*

$$\mathcal{E}(R) = \text{tr}(R^T D^{-\frac{1}{2}} W D^{-\frac{1}{2}} R)$$

na domeni

$$V(n, k) = \{R \in M_{nk}(\mathbb{R}) \mid R^T R = I_k\}.$$

Nadalje, neka je (V, S) ortogonalna dekompozicija simetrične matrice $D^{-\frac{1}{2}} W D^{-\frac{1}{2}}$, pri čemu je $V = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n]$ ortogonalna matrica, a S dijagonalna matrica sa svojstvenim vrijednostima $s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_k > s_{k+1} \geq \dots \geq s_n$ na dijagonali.

Tada su sve točke maksimuma funkcije \mathcal{E} dane skupom

$$\mathcal{R} := \{V^* Q \mid V^* := [v_1 \ v_2 \ \cdots \ v_k], Q \in M_k(\mathbb{R}), Q^T Q = I_k\}, \quad (2.3)$$

a traženi maksimum iznosi

$$\sum_{\ell=1}^k s_{\ell}.$$

Dokaz. Kako je (V, S) ortogonalna dekompozicija matrice $D^{-\frac{1}{2}} W D^{-\frac{1}{2}}$, slijedi da je

$$D^{-\frac{1}{2}} W D^{-\frac{1}{2}} = V S V^T$$

pa je

$$\mathcal{E}(R) = \text{tr}(R^T V S V^T R).$$

Neka je $R = [r_1 \ r_2 \ \cdots \ r_k]$, gdje smo r_j označili j -ti stupac matrice R za $j = 1, \dots, k$. Označimo $T := R^T V \in M_{kn}(\mathbb{R})$. Neka je $t_{ij} := \langle r_i, v_j \rangle$ vrijednost matrice T na poziciji (i, j) za $i = 1, \dots, k, j = 1, \dots, n$. j -ti stupac matrice T ćemo kraće označavati s $R^T v_j$. Sada ćemo zapisati $\mathcal{E}(R)$ u terminima s_j i $R^T v_j$:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(R) &= \text{tr} \left(\left[\begin{array}{c|c|c|c} | & | & | & | \\ R^T v_1 & R^T v_2 & \cdots & R^T v_n \\ | & | & | & | \end{array} \right] \begin{bmatrix} s_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & s_n \end{bmatrix} \left[\begin{array}{c|c|c} \text{---} & R^T v_1 & \text{---} \\ \text{---} & R^T v_2 & \text{---} \\ \text{---} & \vdots & \text{---} \\ \text{---} & R^T v_n & \text{---} \end{array} \right] \right) \\ &= \text{tr} \left(\left[\begin{array}{c|c|c|c} | & | & | & | \\ R^T v_1 & R^T v_2 & \cdots & R^T v_n \\ | & | & | & | \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c|c} \text{---} & s_1 R^T v_1 & \text{---} \\ \text{---} & s_2 R^T v_2 & \text{---} \\ \text{---} & \vdots & \text{---} \\ \text{---} & s_n R^T v_n & \text{---} \end{array} \right] \right) \\ &= \text{tr} \left(\left[\begin{array}{c|c|c} \text{---} & s_1 R^T v_1 & \text{---} \\ \text{---} & s_2 R^T v_2 & \text{---} \\ \text{---} & \vdots & \text{---} \\ \text{---} & s_n R^T v_n & \text{---} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c|c|c} | & | & | & | \\ R^T v_1 & R^T v_2 & \cdots & R^T v_n \\ | & | & | & | \end{array} \right] \right) \\ &= \text{tr} \left(\begin{bmatrix} s_1 \langle R^T v_1, R^T v_1 \rangle & * & \cdots & * \\ * & s_2 \langle R^T v_2, R^T v_2 \rangle & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ * & * & \cdots & s_n \langle R^T v_n, R^T v_n \rangle \end{bmatrix} \right) \\ &= \sum_{j=1}^n s_j \langle R^T v_j, R^T v_j \rangle. \end{aligned}$$

Tvrdimo da je $\mathcal{E}(R) \leq \sum_{\ell=1}^k s_\ell$. Za početak, uočimo da je

$$\begin{aligned}
 \sum_{j=1}^n \langle R^T v_j, R^T v_j \rangle &= \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^k \langle r_i, v_j \rangle^2 = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^n \langle v_j, r_i \rangle^2 \\
 &= \sum_{i=1}^k \langle V^T r_i, V^T r_i \rangle = \sum_{i=1}^k (V^T r_i)^T (V^T r_i) \\
 &= \sum_{i=1}^k r_i^T (V V^T) r_i = \sum_{i=1}^k r_i^T r_i \\
 &= \sum_{i=1}^k 1 = k.
 \end{aligned}$$

Tražena tvrnja slijedi iz prethodne opservacije i leme 2.4.1:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}(R) &= \sum_{j=1}^n s_j \langle R^T v_j, R^T v_j \rangle \\
 &\leq \sum_{j=1}^k s_j \langle R^T v_j, R^T v_j \rangle + s_k \sum_{j=k+1}^n \langle R^T v_j, R^T v_j \rangle
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{j=1}^k s_j \langle R^T v_j, R^T v_j \rangle + s_k \sum_{j=1}^k (1 - \langle R^T v_j, R^T v_j \rangle) \\
 &\leq \sum_{j=1}^k s_j \langle R^T v_j, R^T v_j \rangle + \sum_{j=1}^k s_j (1 - \langle R^T v_j, R^T v_j \rangle)
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

$$= \sum_{j=1}^k s_j.$$

Umjesto prve nejednakosti možemo pisati jednakost ako i samo ako je

$$\langle R^T v_j, R^T v_j \rangle = 0, \text{ za } j = k + 1, \dots, n,$$

odnosno ako i samo ako je

$$R^T v_j = 0, \text{ za } j = k + 1, \dots, n.$$

Također, lako se vidi da ovaj uvjet pretvara i drugu nejednakost u jednakost. Preostaje odrediti točke u kojima se postiže maksimum.

R je točka maksimuma ako i samo ako je $T = R^T V$ oblika

$$\left[Q \mid \mathbf{0} \right]$$

za neku matricu $Q \in M_k(\mathbb{R})$ i $k \times (n - k)$ nul-matricu $\mathbf{0}$. Nadalje,

$$\begin{aligned} QQ^T &= \left[Q \mid \mathbf{0} \right] \cdot \left[\begin{array}{c} Q^T \\ \mathbf{0}^T \end{array} \right] = TT^T \\ &= (R^T V)(R^T V)^T \\ &= R^T (VV^T)R \\ &= R^T R \\ &= I_k \end{aligned}$$

pa je Q ortogonalna matrica. Definirajmo $V^* := [v_1 \cdots v_k]$. Tada vrijedi

$$\begin{aligned} R &= VT^T \\ &= V \left[\begin{array}{c} Q^T \\ \mathbf{0}^T \end{array} \right] \\ &= [v_1 \cdots v_k] Q^T \\ &= V^* Q^T. \end{aligned}$$

Supstitucijom $Q^T \mapsto Q$ dokazali smo tvrdnju teorema. □

Napomena 2.4.3. Pažljiviji čitatelj lako će uočiti rubni slučaj koji smo izostavili iz iskaza prethodnog teorema. Riječ je o svojstvenim vrijednostima s_k i s_{k+1} od kojih smo zahtijevali da zadovoljavaju nejednakost $s_k \geq s_{k+1}$. Iako je slučaj $s_k = s_{k+1}$ vrlo rijedak, i stoga zanemariv u praksi, ukratko ćemo komentirati kako bismo mogli modificirati dokaz teorema tako da pokrijemo i taj slučaj.

Dio dokaza koji se odnosi na zapis $\mathcal{E}(R)$ u terminima s_j i $R^T v_j$ ostao bi nepromijenjen, kao i vrijednost maksimuma $\sum_{j=1}^k s_j$ te ocjene odozgo u (2.4) i (2.5). Elementi skupa \mathcal{R} u (2.3) i dalje bi predstavljali rješenja zadanog optimizacijskog problema. Jedina razlika bi bila ta što \mathcal{R} ne bi sadržavao sva rješenja.

To možemo zaključiti analizirajući uvjete pod kojima nejednakosti u (2.4) i (2.5) postaju jednakosti. Neka su svojstvene vrijednosti zadane na sljedeći način:

$$s_1 \geq \dots \geq s_{p-1} > s_p = \dots = s_k = s_{k+1} = \dots = s_r > s_{r+1} \geq \dots \geq s_n,$$

pri čemu vrijedi

$$1 \leq p \leq k < r \leq n.$$

Jednakost u (2.4) postiže se ako i samo ako je $R^T v_j = 0$ za $j = r + 1, \dots, n$. Slično zaključujemo da se jednakost u (2.5) postiže ako i samo ako je vektor $R^T v_j$ ortonormiran za $j = 1, \dots, p - 1$. Stoga bi matrice $R \in V(n, k)$ koje zadovoljavaju ove uvjete također trebali pridodati skupu rješenja.

Sljedeći korolar tiče se gornje granice za maksimum funkcije ε , kao i monotonosti maksimuma funkcije ε po varijabli k .

Korolar 2.4.4. Neka su n i k prirodni brojevi takvi da vrijedi $k < n$. Vrijede sljedeće nejednakosti:

$$\max_{X \in \mathcal{X}} \varepsilon(X) \leq \frac{1}{k} \max_{R \in V(n, k)} \mathcal{E}(R) = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k s_j, \quad (2.6)$$

$$\max_{Z \in \mathcal{Z}_{n, k+1}} \varepsilon(Z) \leq \max_{Z \in \mathcal{Z}_{n, k}} \varepsilon(Z), \quad (2.7)$$

pri čemu smo domene \mathcal{Z} indeksirali kako bismo ih mogli razlikovati.

Dokaz. U skladu s dijagramom sa slike 2.2 i definicijama funkcija ε i \mathcal{E} , prva nejednakost posljedica je sljedećih skupovnih relacija:

$$\varepsilon(\mathcal{X}) = \varepsilon(\Phi(\mathcal{X})) \subseteq \varepsilon(\mathcal{Z}) = \frac{1}{k} \mathcal{E}(V(n, k))$$

i činjenice da je maksimum podskupa manji od maksimuma nadskupa.

Drugu nejednakost možemo dobiti na ovaj način:

$$\begin{aligned} \max_{Z \in \mathcal{Z}_{n, k}} \varepsilon(Z) - \max_{Z \in \mathcal{Z}_{n, k+1}} \varepsilon(Z) &= \frac{1}{k} \max_{R \in V(n, k)} \mathcal{E}(R) - \frac{1}{k+1} \max_{R \in V(n, k+1)} \mathcal{E}(R) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k s_j - \frac{1}{k+1} \sum_{j=1}^{k+1} s_j \\ &= \frac{1}{k(k+1)} \left((k+1) \sum_{j=1}^k s_j - k \sum_{j=1}^{k+1} s_j \right) \\ &= \frac{1}{k(k+1)} \sum_{j=1}^k \underbrace{(s_j - s_{k+1})}_{\geq 0} \\ &\geq 0. \end{aligned}$$

□

Tvrdimo da su svojstvene vrijednosti s_i matrice $D^{-\frac{1}{2}}WD^{-\frac{1}{2}}$ elementi intervala $[-1, 1]$. Primijetimo prvo da matrice $D^{-\frac{1}{2}}WD^{-\frac{1}{2}}$ i $A := D^{-1}W$ imaju iste svojstvene vrijednosti jer vrijedi:

$$D^{-\frac{1}{2}}WD^{-\frac{1}{2}}x = \lambda x \Leftrightarrow D^{-1}W(D^{-\frac{1}{2}}x) = \lambda(D^{-\frac{1}{2}}x).$$

Matrica $A = (a_{ij})$ je stohastička (vidi definiciju A.9) pa je suma svih elemenata u pojedinom retku jednaka 1. Neka je λ svojstvena vrijednost matrice A i x pripadni svojstveni vektor. Neka je ℓ takav da vrijedi

$$\ell = \arg \max_{1 \leq j \leq n} |x_j|.$$

Tada iz $Ax = \lambda x$ slijedi da je

$$|\lambda x_\ell| = \left| \sum_{j=1}^n a_{\ell j} x_j \right| \leq \sum_{j=1}^n |a_{\ell j} x_j| \leq \sum_{j=1}^n a_{\ell j} |x_\ell| = |x_\ell| \sum_{j=1}^n a_{\ell j} = |x_\ell|$$

pa dijeljenjem s $|x_\ell| > 0$ dobivamo da je $|\lambda| \leq 1$.

Nadalje, kako je A stohastička matrica, ima svojstvenu vrijednost 1 s pripadnim svojstvenim vektorom $\mathbf{1}_n$. Iz činjenice da slične matrice imaju isti trag i $\text{tr}(A) = \text{tr}(W) = 0$, zaključujemo da je suma svih svojstvenih vrijednosti od $D^{-\frac{1}{2}}WD^{-\frac{1}{2}}$ jednaka 0. Općenito očekujemo da $D^{-\frac{1}{2}}WD^{-\frac{1}{2}}$ ima puno više negativnih nego pozitivnih svojstvenih vrijednosti. U nekim slučajevima se zna dogoditi da postoji velika razlika između nekih susjednih svojstvenih vrijednosti. Ta informacija nam može poslužiti pri izboru pogodne vrijednosti za broj elemenata particije. Primjerice, ako je $s_k \gg s_{k+1}$, onda očekujemo da će particioniranje grafa na k dijelova biti dobro. S druge strane, pomoću te informacije ne možemo donijeti zaključak o kvaliteti particioniranja za vrijednosti manje od k .

Sada ćemo rješenja relaksiranog optimizacijskog problema na prostoru $V(n, k)$ transformirati u rješenja na prostoru \mathcal{J} kako bismo kasnije lakše došli do diskretnih rješenja $X \in \mathcal{X}$. Neka je $R = V^*Q \in \mathcal{R}$ proizvoljan. Korištenjem transformacija ϕ^{-1} i Φ^{-1} dolazimo do rješenja

$$Z = D^{-\frac{1}{2}}R$$

na prostoru \mathcal{Z} , a potom do rješenja

$$X = \text{Diag}(\text{diag}^{-\frac{1}{2}}(ZZ^T))Z$$

na prostoru \mathcal{J} . Prethodni izraz možemo raspisati na sljedeći način:

$$\begin{aligned} X &= \text{Diag}(\text{diag}^{-\frac{1}{2}}(ZZ^T))Z \\ &= \text{Diag}(\text{diag}^{-\frac{1}{2}}((D^{-\frac{1}{2}}R)(D^{-\frac{1}{2}}R)^T))D^{-\frac{1}{2}}R \\ &= \text{Diag}(\text{diag}^{-\frac{1}{2}}((D^{-\frac{1}{2}}V^*Q)(D^{-\frac{1}{2}}V^*Q)^T))D^{-\frac{1}{2}}V^*Q \\ &= \text{Diag}(\text{diag}^{-\frac{1}{2}}(D^{-\frac{1}{2}}V^* \underbrace{(QQ^T)}_{I_k} (V^*)^T D^{-\frac{1}{2}}))D^{-\frac{1}{2}}V^*Q \end{aligned}$$

$$= \text{Diag}(\text{diag}^{-\frac{1}{2}}(V^*(V^*)^T D^{-1})) D^{-\frac{1}{2}} V^* Q \quad (2.8)$$

$$= \text{Diag}(\text{diag}^{-\frac{1}{2}}(V^*(V^*)^T)) \text{Diag}(\text{diag}^{-\frac{1}{2}}(D^{-1})) D^{-\frac{1}{2}} V^* Q \quad (2.9)$$

$$= \text{Diag}(\text{diag}^{-\frac{1}{2}}(V^*(V^*)^T)) D^{\frac{1}{2}} D^{-\frac{1}{2}} V^* Q$$

$$= \text{Diag}(\text{diag}^{-\frac{1}{2}}(V^*(V^*)^T)) V^* Q.$$

Jednakost u (2.8) vrijedi jer matrice $D^{-\frac{1}{2}} V^*(V^*)^T D^{-\frac{1}{2}}$ i $V^*(V^*)^T D^{-1}$ imaju identične elemente na svojim dijagonalama. Multiplikativnost operatora Diag te multiplikativnost operatora diag u slučaju kada je jedna matrica dijagonalna daju jednakost u (2.9). Ako definiramo matricu $\tilde{X}^* \in \mathcal{J}$ s

$$\tilde{X}^* := \text{Diag}(\text{diag}^{-\frac{1}{2}}(V^*(V^*)^T)) V^*,$$

onda je

$$\mathcal{S} := \{\tilde{X}^* Q \mid Q \in M_k(\mathbb{R}), Q^T Q = I_k\} \quad (2.10)$$

skup svih rješenja relaksiranog problema na prostoru \mathcal{J} .

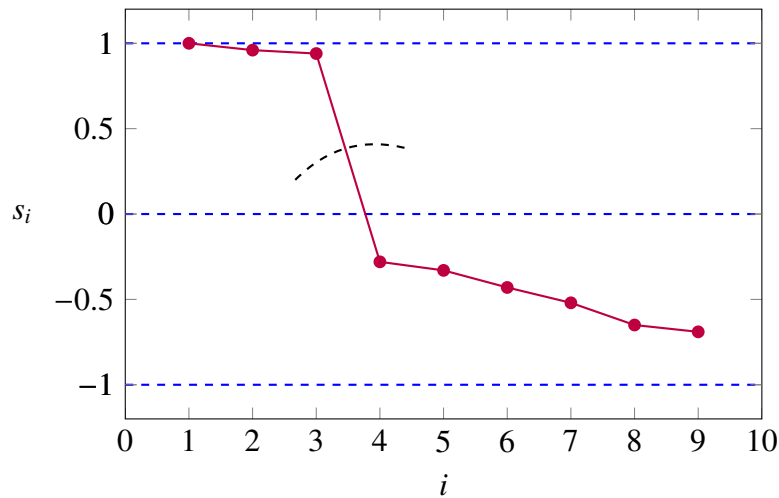
Za kraj ćemo novodobivene rezultate iz ovog poglavlja ilustrirati na problemu iz primjera 2.1.2. Iako ćemo za izračun svojstvenih vrijednosti i vektora u primjeru koristiti računalo, za sada ćemo izostaviti informacije o korištenim programskim paketima, naredbama i sličnim tehničkim detaljima jer ćemo se toj temi posvetiti u sljedećem poglavlju.

Primjer 2.4.5. *Neka su matrice W i D zadane kao u primjeru 2.1.2. Tada spektar simetrične matrice $D^{-\frac{1}{2}} W D^{-\frac{1}{2}}$ glasi*

$$\sigma = \{1, 0.96, 0.94, -0.28, -0.33, -0.43, -0.52, -0.65, -0.69\}.$$

Jasno uočavamo da od svih parova susjednih svojstvenih vrijednosti, s_3 i s_4 imaju daleko najveću razliku, što upućuje na to da je graf sa slike 2.1 najprirodnije podijeliti na 3 dijela. Svojstveni vektori pridruženi trima najvećim svojstvenim vrijednostima dani su s

$$V^* = \begin{bmatrix} -0.298 & 0.011 & -0.485 \\ -0.298 & -0.005 & -0.513 \\ -0.298 & -0.020 & -0.485 \\ -0.373 & -0.437 & 0.215 \\ -0.373 & -0.446 & 0.236 \\ -0.298 & -0.324 & 0.192 \\ -0.373 & 0.427 & 0.228 \\ -0.298 & 0.362 & 0.184 \\ -0.373 & 0.438 & 0.206 \end{bmatrix},$$



Slika 2.3: Svojstvene vrijednosti pridružene matrici $D^{-\frac{1}{2}}WD^{-\frac{1}{2}}$. Naznačeni rez sugerira prirodni odabir za vrijednost k .

pomoću kojih dobivamo

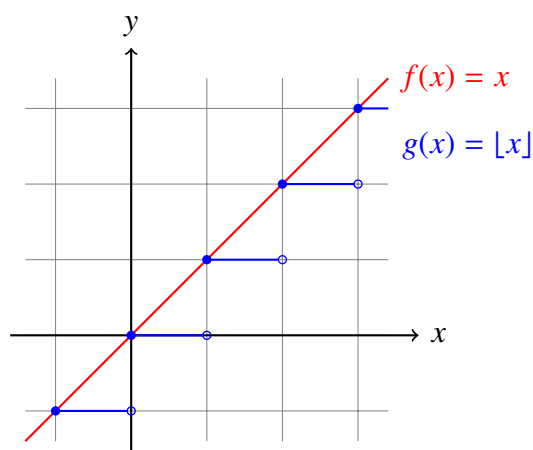
$$\tilde{X}^* = \begin{bmatrix} -0.524 & 0.019 & -0.852 \\ -0.503 & -0.008 & -0.865 \\ -0.524 & -0.036 & -0.851 \\ -0.608 & -0.712 & 0.351 \\ -0.594 & -0.711 & 0.376 \\ -0.621 & -0.675 & 0.399 \\ -0.610 & 0.699 & 0.373 \\ -0.592 & 0.718 & 0.365 \\ -0.610 & 0.716 & 0.338 \end{bmatrix}. \quad (2.11)$$

Možemo primijetiti kako su retci r_1, r_2 i r_3 matrice \tilde{X}^* relativno blizu jedan drugome s obzirom na standardnu euklidsku normu, kao i retci r_4, r_5 i r_6 te r_7, r_8 i r_9 . Istu opservaciju očekujemo i kod ostalih rješenja \tilde{X}^*Q jer množenje zdesna konstantnom matricom čuva neprekidnost. Stoga u ovako jednostavnom primjeru možemo već iz \tilde{X}^* zaključiti koja bi bila tražena optimalna particija.

2.5 Diskretizacija

Diskretizaciju možemo opisati kao postupak u kojem kontinuiranim matematičkim objektima pridružujemo diskretne analogone. Pritom implicitno podrazumijevamo da su dis-

kretni objekti u nekom smislu dobre aproksimacije kontinuiranih. Primjerice, cjelobrojnu mrežu $\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}$ možemo promatrati kao diskretizaciju dvodimenzionalnog prostora \mathbb{R}^2 . Kao konkretniji primjer možemo navesti funkciju pod (engl. *floor*) ili najveće cijelo čiji graf je prikazan na slici 2.4.



Slika 2.4: Graf funkcije pod koja realnom broju x pridružuje najveći cijeli broj koji nije veći od x . Funkcija pod je dobra diskretna aproksimacija identitete.

Jedan specijalan slučaj diskretizacije je tzv. dihotomizacija. Riječ je o vrsti diskretizacije u kojoj diskretne varijable mogu poprimiti samo dvije različite vrijednosti. Kao primjer dihotomizacije možemo istaknuti skup matrica particije \mathcal{X} na prostoru matrica s jediničnim retcima $\mathcal{J} \subset M_{nk}$. Upravo je to relevantno za naš problem jer bismo htjeli rješenja relaksiranog problema iz (2.10) koja žive u \mathcal{J} aproksimirati matricama iz \mathcal{X} . Točnije, htjeli bismo pronaći matricu particije X^* koja je dovoljno blizu skupa rješenja \mathcal{S} , u skladu s metrikom induciranom Frobeniusovom normom (vidi definiciju A.8). Naravno, odmah se nameće sljedeće važno pitanje: *Hoće li tako dobivena matrica X^* doista biti zadovoljavajuće diskretno rješenje koje će maksimizirati funkciju ε definiranu s (2.1)?*

Iako je odgovor na prethodno pitanje negativan, možemo garantirati da je naše rješenje skoro globalno-optimalno, u smislu da je vrijednost funkcije ε u točki X^* blizu maksimuma na domeni \mathcal{X} . U tu svrhu se pozivamo na neprekidnost funkcije ε . Da bismo se uvjerali u neprekidnost, prisjetimo se prvo zapisa od ε iz (2.2):

$$\varepsilon(X) = \frac{1}{k} \text{tr}(Z^T W Z),$$

gdje je $Z = X \cdot (X^T D X)^{-\frac{1}{2}}$. Budući da produkt, inverz i korijen čuvaju neprekidnost, onda je i preslikavanje $X \mapsto Z$ neprekidno. Nadalje, ε je neprekidna jer trag i kompozicija čuvaju neprekidnost.

Dakle, ako je X^* blizu \tilde{X}^*Q , onda očekujemo da je $\varepsilon(X^*)$ blizu $\varepsilon(\tilde{X}^*Q) = \max_{X \in \mathcal{F}} \varepsilon(X)$.

Kako je

$$\varepsilon(X^*) \leq \max_{X \in \mathcal{X}} \varepsilon(X) \leq \max_{X \in \mathcal{F}} \varepsilon(X),$$

zaključujemo da je tada $\varepsilon(X^*)$ blizu $\max_{X \in \mathcal{X}} \varepsilon(X)$.

Formalno, problem koji bismo htjeli riješiti je odrediti par matrica $(X^*, Q^*) \in \mathcal{X} \times V(k, k)$ koji minimizira funkciju

$$\psi(X, Q) = \|X - \tilde{X}^*Q\|_F^2. \quad (2.12)$$

U stvarnosti, budući da je ovaj problem teško riješiti egzaktno, odlučujemo se na traženje aproksimativnog rješenja u obliku lokalnog minimuma. Izraz iz (2.12) možemo raspisati na sljedeći način:

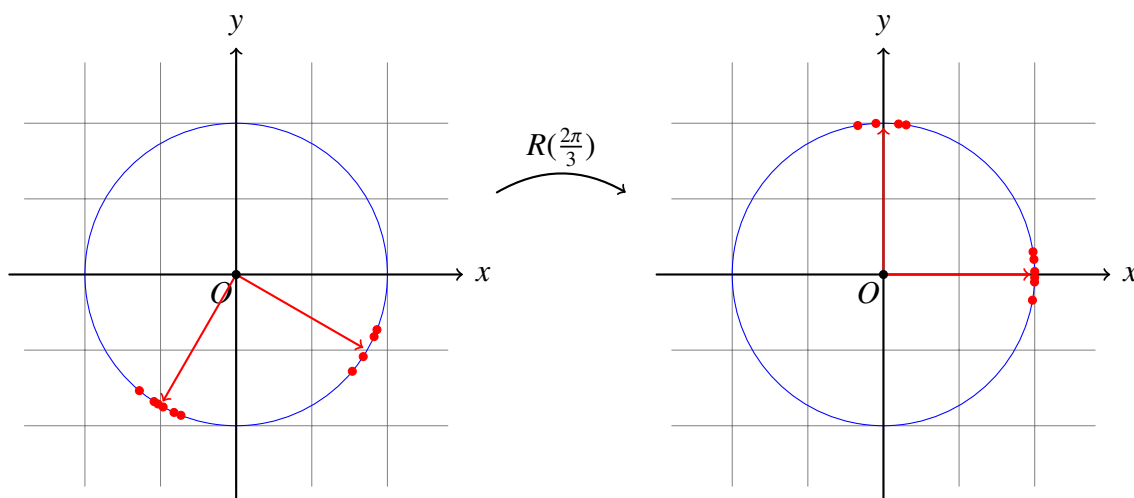
Označimo s x_1^T, \dots, x_n^T retke matrice X te s $\tilde{x}_1^T, \dots, \tilde{x}_n^T$ retke matrice \tilde{X}^* . Tada iz svojstva Frobeniusove norme slijedi

$$\begin{aligned} \psi(X, Q) &= \sum_{i=1}^n \|x_i^T - \tilde{x}_i^T Q\|_F^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \|x_i - Q^T \tilde{x}_i\|^2. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Znamo da točke $\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n$ leže na jediničnoj sferi u \mathbb{R}^k , dok točke x_1, \dots, x_n pripadaju skupu sjecišta jedinične sfere i pozitivnih dijelova koordinatnih osi. Jednakost u (2.13) sugerira da tražimo ortogonalnu transformaciju Q koja će točke \tilde{x}_i poravnati s koordinatnim osima. Našu intuiciju ilustrirat ćemo na primjerima koji slijede.

Primjer 2.5.1. *Neka je \mathbb{G} neki graf s 10 vrhova kojem želimo odrediti biparticiju u skladu s normaliziranim rezom. Pretpostavimo da je $\mathcal{S} = \{\tilde{X}^*Q \mid Q \in M_2(\mathbb{R}), Q^T Q = I_2\}$ skup rješenja pripadnog relaksiranog problema. Točke određene retcima matrice \tilde{X}^* plotirane su na slici 2.5 (lijevo). Ortogonalne transformacije u \mathbb{R}^2 su kompozicije rotacija oko ishodišta i zrcaljenja s obzirom na koordinatne osi. U našem slučaju, zrcaljenja bi samo zamijenila poredak elemenata unutar particije (prva klasa postala bi druga i obratno) pa ih možemo slobodno ignorirati. Rotacija oko ishodišta određena je kutom $\theta \in [0, 2\pi)$. Dakle, problem određivanja diskretnog rješenja svodi se na traženje kuta za koji će se zrotirane točke na kružnici u najvećoj mjeri poravnati s koordinatnim osima. Djelovanje rotacije za $\frac{2\pi}{3}$ radijana prikazano je na slici 2.5 (desno).*

Primjer 2.5.2. *Vratimo se na problem particioniranja grafa iz primjera 2.1.2. U primjeru 2.4.5 iz prošlog odjeljka odredili smo rješenja relaksiranog problema. Osnovno rješenje dano je matricom \tilde{X}^* iz (2.11), čiji retci su plotirani na slici 2.6 (lijevo). Kao i u slučaju dvije dimenzije, ortogonalne transformacije u \mathbb{R}^3 mogu se opisati kao kompozicije rotacija*



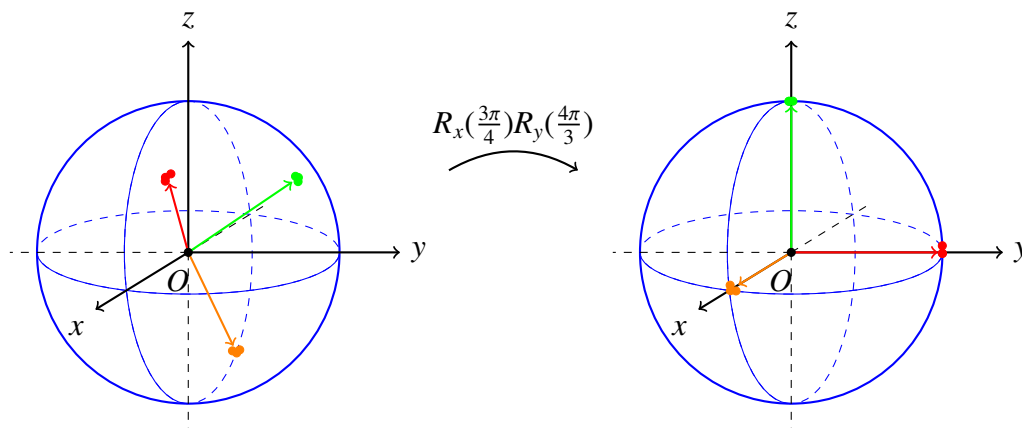
Slika 2.5: (Lijevo) Točke određene retcima matrice \tilde{X}^* vidljivo se grupiraju oko dviju odvojenih točaka. (Desno) Nakon rotacije točke se grupiraju oko koordinatnih osi.

i zrcaljenja. Slika 2.6 (desno) prikazuje kako primjenom rotacija možemo postići da se točke grupiraju oko koordinatnih osi. Prvo rotacijom za kut $\frac{4\pi}{3}$ oko y -osi postizemo da se točke označene narančastom bojom grupiraju oko točke $(1, 0, 0)$. Paralelno ostvarujemo da se preostale točke približe yz -ravnini. Zatim djelujemo rotacijom za kut $\frac{3\pi}{4}$ oko x -osi kako bismo točke označene crvenom i zelenom bojom grupirali oko točaka $(0, 1, 0)$ i $(0, 0, 1)$, respektivno.

Sada smo spremni formalno riješiti minimizacijski problem. Plan nam je osmisлити iterativni algoritam koji će postepeno reducirati grešku u (2.12) te koji će kasnije biti lako pretvoriti u efikasnu implementaciju. Naivan pristup bio bi da istovremeno tražimo (ažuriramo) i matricu particije X i ortogonalnu matricu Q . Umjesto toga, naš pristup će se bazirati na naizmjeničnom ažuriranju: prvo ćemo uz fiksiranu matricu Q pronaći matricu $X^* \in \mathcal{X}$ najbližu matrici \tilde{X}^*Q . Potom ćemo fiksirati novodobivenu matricu X^* i pronaći ortogonalnu matricu Q^* koja minimizira izraz u (2.12). Postupak ćemo ponavljati dokle god se greška bude značajno smanjivala. Budući da je funkcija ψ ograničena odozdo, očekujemo da će naše rješenje težiti prema nekom lokalnom minimumu.

Ilustracije radi, ovaj postupak možemo usporediti s kretanjem u gradu s pravokutnim rasporedom ulica. Osoba koja želi doći iz sjeveroistočnog dijela grada u jugozapadni mogla bi usvojiti strategiju naizmjeničnog kretanja u smjeru sjever-jug i istok-zapad.

Usredotočimo se za sada na problem određivanja matrice X^* ako je poznata matrica Q . Pretpostavimo prvo da retke matrice X^* možemo birati neovisno. Iz jednakosti (2.13) slijedi da svaki član sume možemo minimizirati odvojeno. Neka je $i = 1, \dots, n$ proizvoljan,



Slika 2.6: (Lijevo) Točke određene retcima matrice \tilde{X}^* vidljivo se grupiraju oko triju odvojenih točaka koje induciraju međusobno okomite vektore. (Desno) Nakon djelovanja rotacija transformirani vektori dobro aproksimiraju vektore kanonske baze.

ali fiksna. Uvedimo pokratu $x = Q^T \tilde{x}_i$. Nadalje, označimo s $e_\ell \in \mathbb{R}^k$ jedinični vektor koji ima 1 na ℓ -tom mjestu. Htjeli bismo odrediti indeks ℓ^* za koji vrijedi

$$\ell^* = \arg \min_{1 \leq \ell \leq k} \|e_\ell - x\|^2.$$

Raspisivanjem gornjeg izraza dobivamo

$$\begin{aligned} \ell^* &= \arg \min_{1 \leq \ell \leq k} \|e_\ell\|^2 - 2\langle e_\ell, x \rangle + \|x\|^2 \\ &= \arg \min_{1 \leq \ell \leq k} 2 - 2x_\ell \\ &= \arg \max_{1 \leq \ell \leq k} x_\ell. \end{aligned}$$

Po dogovoru smatramo da $\arg \min$ i $\arg \max$ vraćaju samo jedan indeks. Ako postoji više maksimalnih vrijednosti, onda je svejedno koji se od pripadnih indeksa odabere. Sada matricu X^* možemo definirati na sljedeći način:

$$X^*(i, j) = \begin{cases} 1, & j = \arg \max_{1 \leq \ell \leq k} [\tilde{x}_i^T Q]_\ell, \\ 0, & \text{inače.} \end{cases}$$

Ovako definirana matrica X^* nije nužno matrica particije jer može sadržavati stupac koji je nul-vektor. Takav stupac odgovarao bi praznom elementu particije. Primijetimo da ako je $n \gg k$, onda je ovakav scenarij malo vjerojatan. Unatoč tome, nije na odmet razmisliti o rješenju ovog problema. Jedna mogućnost koja se odmah nameće je da korigiramo

odabrane retke postojeće matrice X^* . Pretpostavimo da je s -ti stupac problematičan. Tada možemo korigirati one retke i za koje je $[\tilde{x}_i^T Q]_s$ blizu maksimuma $\max_{1 \leq \ell \leq k} [\tilde{x}_i^T Q]_\ell$, na način da premjestimo 1 na poziciju (i, s) . Ovaj postupak možemo ponoviti više puta da bismo došli do matrice particije. Za kraj, uočimo da tako dobivena korigirana matrica ne minimizira nužno izraz u (2.12), ali je dovoljno blizu globalno-optimalnog rješenja.

Fiksirajmo sada matricu X^* . Želimo odrediti ortogonalnu matricu Q koja minimizira izraz u (2.12). Ovaj problem je već dosta istražen i u literaturi je poznat pod nazivom ortogonalni Prokrustov¹ problem. U nastavku dajemo formalnu definiciju problema, a nešto kasnije i njegovo rješenje.

Neka su $m, n \in \mathbb{N}$ i $A, B \in M_{mn}(\mathbb{R})$ proizvoljne matrice. Treba pronaći ortogonalnu matricu Q^* za koju vrijedi

$$Q^* = \arg \min_{Q \in V(n,n)} \|A - BQ\|_F^2.$$

Problem možemo reformulirati na sljedeći način:

$$\begin{aligned} Q^* &= \arg \min_{Q \in V(n,n)} \|A - BQ\|_F^2 \\ &= \arg \min_{Q \in V(n,n)} \text{tr}((A - BQ)^T (A - BQ)) \\ &= \arg \min_{Q \in V(n,n)} \text{tr}(A^T A - A^T BQ - (BQ)^T A + (BQ)^T (BQ)) \\ &= \arg \min_{Q \in V(n,n)} \underbrace{\text{tr}(A^T A)}_{\text{ne ovisi o } Q} - \text{tr}(A^T BQ) - \text{tr}((BQ)^T A) + \text{tr}((Q^T B^T B)Q) \\ &= \arg \min_{Q \in V(n,n)} -2\text{tr}(A^T BQ) + \text{tr}(Q(Q^T B^T B)) \\ &= \arg \min_{Q \in V(n,n)} -2\text{tr}(A^T BQ) + \underbrace{\text{tr}(B^T B)}_{\text{ne ovisi o } Q} \\ &= \arg \min_{Q \in V(n,n)} -2\text{tr}(A^T BQ) \\ &= \arg \max_{Q \in V(n,n)} \text{tr}(A^T BQ). \end{aligned} \tag{2.14}$$

Problem u (2.14) može se jednostavno riješiti korištenjem dekompozicije singularnih vrijednosti matrice $A^T B$. Riječ je o jakom alatu koji poopćuje ortogonalnu dekompoziciju iz odjeljka 2.3.

Definicija 2.5.3. Neka je $M \in M_{mn}(\mathbb{F})$ proizvoljna matrica. Dekompozicija singularnih vrijednosti, ili kraće SVD, matrice M je uređena trojka (U, Σ, V) , gdje su $U \in M_m(\mathbb{F})$ i

¹Prokrust je bio razbojnik iz grčke mitologije koji je namamljenim putnicima na postelji istezao ili odsjecao dijelove tijela kako bi ih prilagodio svom ležaju. Ubio ga je junak Tezej odsjekavši mu glavu u vlastitoj postelji.

$V \in M_n(\mathbb{F})$ unitarne matrice, a $\Sigma \in M_{mn}(\mathbb{F})$ nenegativna dijagonalna matrica koje zadovoljavaju jednakost

$$M = U\Sigma V^*.$$

Ako se ograničimo na realne matrice M , onda će matrice U i V biti ortogonalne, a rastav će glasiti $M = U\Sigma V^T$. Egzistenciju ovakvog rastava za proizvoljnu matricu M možemo pokazati pozivajući se na ortogonalnu dekompoziciju. Sljedeća lema važna je za dokaz teorema koji slijedi.

Lema 2.5.4. *Neka je $M \in M_{mn}(\mathbb{R})$ proizvoljna. Tada su svojstvene vrijednosti simetrične matrice $M^T M$ nenegativne.*

Dokaz. Neka je $x \in \mathbb{R}^n$ svojstveni vektor pridružen svojstvenoj vrijednosti λ matrice $M^T M$. Tada vrijedi

$$\lambda = \frac{\lambda \langle x, x \rangle}{\langle x, x \rangle} = \frac{\langle M^T M x, x \rangle}{\langle x, x \rangle} = \frac{\langle M x, M x \rangle}{\langle x, x \rangle} \geq 0.$$

□

Teorem 2.5.5 (SVD). *Neka su $m, n \in \mathbb{N}$ i $M \in M_{mn}$ proizvoljna realna matrica. Tada postoji dekompozicija singularnih vrijednosti matrice M .*

Dokaz. Označimo s r rang matrice M . Iz propozicije A.12 slijedi da je $r(M^T M) = r$. Neka je (V, S) ortogonalna dekompozicija simetrične matrice $M^T M$. Tada prema prethodnoj lemi postoji dijagonalna matrica $D \in M_r$ s pozitivnim elementima na dijagonali takva da vrijedi

$$S = \begin{bmatrix} D & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}.$$

Ako je $r = n$, onda je $S = D$. Matricu V možemo particionirati na sljedeći način:

$$V = \left[\begin{array}{c|c} V_1 & V_2 \end{array} \right],$$

gdje je V_1 dimenzija $n \times r$, a V_2 dimenzija $n \times (n-r)$. Naravno, ako je $r = n$, onda jednostavno definiramo $V_1 := V$, a V_2 ignoriramo. Dekompoziciju možemo raspisati ovako:

$$\begin{aligned} M^T M &= V S V^T \\ &= \left[\begin{array}{c|c} V_1 & V_2 \end{array} \right] \begin{bmatrix} D & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1^T \\ V_2^T \end{bmatrix} \\ &= V_1 D V_1^T \\ &= (V_1 D^{\frac{1}{2}})(V_1 D^{\frac{1}{2}})^T. \end{aligned}$$

Odgovarajućim matičnim množenjima dobivamo

$$(MV_1D^{-\frac{1}{2}})^T(MV_1D^{-\frac{1}{2}}) = I_r$$

pa je matrica $MV_1D^{-\frac{1}{2}} \in V(m, r)$. To nas motivira da definiramo $U_1 := MV_1D^{-\frac{1}{2}}$. Stupci matrice U_1 čine ortonormirani skup koji prema korolaru A.20 možemo nadopuniti do ortonormirane baze za R^m . Stoga možemo pronaći $U_2 \in V(m, m - r)$ takvu da je

$$U := [U_1 \mid U_2]$$

ortogonalna matrica. Dijagonalnu matricu $\Sigma \in M_{mn}$ možemo definirati ovako:

$$\Sigma(i, j) = \begin{cases} \sqrt{D_{ii}}, & i = j \leq r, \\ 0, & \text{inače.} \end{cases}$$

Preostaje provjeriti da je (U, Σ, V) traženi rastav:

$$\begin{aligned} U\Sigma V^T &= [U_1 \mid U_2] \begin{bmatrix} D^{\frac{1}{2}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1^T \\ V_2^T \end{bmatrix} \\ &= U_1 D^{\frac{1}{2}} V_1^T \\ &= (MV_1 D^{-\frac{1}{2}}) (D^{\frac{1}{2}} V_1^T) \\ &= M. \end{aligned}$$

□

Napomena 2.5.6. Neka je (U, Σ, V) SVD matrice M .

- (a) Dijagonalni elementi matrice Σ nazivaju se singularne vrijednosti matrice M .
- (b) Kako je $r(M) = r(\Sigma)$, rang matrice M je jednostavno broj pozitivnih singularnih vrijednosti od M .
- (c) $(U, \Sigma\Sigma^T)$ i $(V, \Sigma^T\Sigma)$ su ortogonalne dekompozicije matrica MM^T i $M^T M$, respektivno:

$$MM^T = (U\Sigma V^T)(U\Sigma V^T)^T = U\Sigma\Sigma^T U^T, \quad (2.15)$$

$$M^T M = (U\Sigma V^T)^T(U\Sigma V^T) = V\Sigma^T\Sigma V^T. \quad (2.16)$$

Vratimo se sada Prokrustovom problemu i njegovoj formulaciji iz (2.14):

$$Q^* = \arg \max_{Q \in V(n, n)} \text{tr}(A^T B Q).$$

Neka je (U, Σ, V) SVD matrice $A^T B \in M_n$. Neka je $\Sigma = \text{Diag}([\sigma_1 \ \sigma_2 \ \cdots \ \sigma_n]^T)$. Raspisivanjem izraza iz (2.14) dobivamo

$$\begin{aligned} Q^* &= \arg \max_{Q \in V(n,n)} \text{tr}(A^T B Q) \\ &= \arg \max_{Q \in V(n,n)} \text{tr}(U \Sigma V^T Q) \\ &= \arg \max_{Q \in V(n,n)} \text{tr}(\Sigma V^T Q U) \\ &= \arg \max_{Q \in V(n,n)} \sum_{i=1}^n \sigma_i [V^T Q U]_{ii}. \end{aligned}$$

Matrica $V^T Q U$ je ortogonalna kao produkt ortogonalnih matrica pa je

$$[V^T Q U]_{ii} \leq 1, \text{ za } i = 1, \dots, n.$$

Stoga je

$$\max_{Q \in V(n,n)} \sum_{i=1}^n \sigma_i [V^T Q U]_{ii} \leq \sum_{i=1}^n \sigma_i.$$

Ako je $r(A^T B) = n$, odnosno $\sigma_i > 0$ za $i = 1, \dots, n$, onda postoji jedinstveno rješenje Q određeno s jednakosti $V^T Q U = I_n$. U tom slučaju je

$$Q^* = V U^T. \quad (2.17)$$

Ako je $r(A^T B) < n$, onda postoji više rješenja. Za $r(A^T B) = n - 1$ postoje 2 rješenja, a za $r(A^T B) < n - 1$ postoji beskonačno mnogo rješenja.

Rješenje Prokrustovog problema iz (2.17) možemo direktno primijeniti na naš problem diskretizacije iz (2.12) kada fiksiramo matricu particije $X^* \in \mathcal{X}$. Ulogu matrica A i B imat će matrice $X^* \in \mathcal{X}$ i $\tilde{X}^* \in \mathcal{J}$ na prostoru M_{nk} . Ostaje pitanje jedinstvenosti takvog rješenja. Iako matrice X^* i \tilde{X}^* imaju puni rang, općenito ne mora vrijediti da $(X^*)^T \tilde{X}^*$ ima puni rang. Unatoč tome, iskoristit ćemo ovu priliku da *idejno* opišemo neke dovoljne uvjete koji će osigurati puni rang. Pretpostavimo da se početni graf \mathbb{G} može prirodno particionirati na k dijela. Tada će retci matrice \tilde{X}^* biti skloni grupirati se oko k nezavisnih međusobno okomitih vektora. Neka matrica particije X^* odražava to grupiranje, tj. neka se retci r_i i r_j matrice \tilde{X}^* nalaze u istom elementu particije ako i samo ako su blizu jedan drugome u prostornom smislu. Tada očekujemo da retci matrice $(X^*)^T \tilde{X}^*$ i dalje budu međusobno okomiti pa će matrica imati puni rang.

Time smo zaključili priču o koracima iteracije. Preostaje reći pokoju riječ o inicijalizaciji. Inicijalizacija je važna jer utječe na brzinu konvergencije iterativne metode. Također, o njoj ovisi i prema kojem (lokalnom) optimumu će metoda konvergirati. Stoga moramo biti

spremni na to da različite inicijalizacije vode prema različitim rješenjima. Mi ćemo usvojiti pristup koji je spomenut u radovima [5] i [14]. Ideja pristupa je da se odabere k redataka matrice \tilde{X}^* koji su što je više moguće međusobno okomiti. Potom se od tih redaka sastavi inicijalna matrica Q^* . Primijetimo da se ne radi nužno o ortogonalnoj matrici. Tražene retke možemo odrediti pohlepnim algoritmom. Krenuvši od nasumično odabranog retka, u svakom idućem koraku iz skupa preostalih redaka biramo onaj koji je u najvećoj mjeri okomit na već odabrane retke.

Poglavlje 3

Implementacija i testiranje

3.1 Algoritam

Na sljedećoj strani dan je algoritam za k -particioniranje grafa pomoću normaliziranog reza. Algoritam kao ulazne podatke prima matricu težina W i broj elemenata particije k . Ako nismo sigurni koji k unaprijed odabrati, možemo lako algoritam modificirati tako da particionira graf za različite vrijednosti k (primjerice, u nekom intervalu). Također, neki put ćemo matricu W predobraditi tako što ćemo retke i stupce matrice W permutirati nasumičnom permutacijom. Time nećemo promijeniti krajnji rezultat, ali možemo utjecati na vrijeme izvršavanja algoritma.

S $V_{[k]} \in V(n, k)$ označili smo matricu koja sadrži svojstvene vektore pridružene k najvećim svojstvenim vrijednostima koje se nalaze na dijagonali matrice $S_{[k]} \in M_k$. Linija 6 odnosi se na normaliziranje redaka matrice $V_{[k]}$ pa taj dio možemo i efikasnije implementirati. Linije 7-17 tiču se inicijalizacije matrice Q kako je opisano na kraju prošlog poglavlja. Metoda $abs(x)$ vraća vektor apsolutnih vrijednosti od x . Skup *Indices* sadrži indekse redaka matrice \tilde{X} koji su nam u zadanom trenutku na raspolaganju. To smanjuje mogućnost odabira istih redaka pa se time povećava vjerojatnost da kasnije matrica particije X^* ima puni rang. U nekim slučajevima je to nepoželjno (primjerice, kada inzistiramo na klasteriranju na prevelik broj klastera) pa takvu kontrolu odabira indeksa možemo ignorirati. Parametri e_1 i e_2 služe za praćenje konvergencije iterativne metode. Smatramo da je metoda konvergirala ako u uzastopnim koracima iteracije nema značajnije razlike u rezultatu. U tu svrhu promatramo trag dijagonalne matrice Σ . U liniji 24 vršimo korekciju matrice X^* da bismo osigurali puni rang.

Sada ćemo reći ponešto o vremenskoj složenosti našeg algoritma. Odmah trebamo napomenuti da složenost značajno ovisi o implementaciji, posebno implementaciji gotovih metoda koje ćemo koristiti. Složenost ćemo izraziti u terminima n i k . Najviše vremena potroši se na dobivanje matrice $V_{[k]}$ pomoću parcijalne ortogonalne dekompozicije. Uz

Algoritam 3.1: k-particioniranje grafa pomoću normaliziranog reza

ulaz : Matrica težina W
 Broj elemenata particije k
izlaz: Matrica particije X^*

```

1  $D \leftarrow \text{Diag}(W\mathbf{1}_n)$ ;
2 if  $D$  ima nule na dijagonali then
3   | ispiši poruku o grešci i prekini izvršavanje;
4 end
5  $(V_{[k]}, S_{[k]}) \leftarrow \text{PartialOrthogonalDecomposition}(D^{-\frac{1}{2}}WD^{-\frac{1}{2}})$ ;
6  $\tilde{X} \leftarrow \text{Diag}(\text{diag}^{-\frac{1}{2}}(V_{[k]}V_{[k]}^T))V_{[k]}$ ;
7  $\text{Indices} \leftarrow \{1, 2, \dots, n\}$ ;
8  $i \leftarrow \text{Random}(\text{Indices})$ ;
9  $\text{Indices.remove}(i)$ ;
10  $Q_{*,1} \leftarrow \tilde{X}_{i,*}^T$ ;
11  $c \leftarrow \mathbf{0}_n$ ;
12 for  $j \leftarrow 2$  to  $k$  do
13   |  $c \leftarrow c + \text{abs}(\tilde{X}Q_{*,j-1})$ ;
14   |  $i \leftarrow \arg \min_{\ell \in \text{Indices}} c\ell$ ;
15   |  $\text{Indices.remove}(i)$ ;
16   |  $Q_{*,j} \leftarrow \tilde{X}_{i,*}^T$ ;
17 end
18  $e_1 \leftarrow 0$ ;
19  $e_2 \leftarrow 1$ ;
20 while  $\text{abs}(e_1 - e_2) > \text{strojna preciznost}$  do
21   |  $X_{\text{mp}} \leftarrow \tilde{X}Q$ ;
22   |  $X^*(i, j) = \langle j = \arg \max_{1 \leq \ell \leq k} X_{\text{mp}}(i, \ell) \rangle$ ;
23   | if  $X^*$  ima nul-stupce then
24     |  $\text{Correct}(X^*, X_{\text{mp}})$ ;
25   | end
26   |  $(U, \Sigma, V) \leftarrow \text{svd}((X^*)^T \tilde{X})$ ;
27   |  $e_1 \leftarrow e_2$ ;
28   |  $e_2 \leftarrow \text{Trace}(\Sigma)$ ;
29   |  $Q \leftarrow VU^T$ ;
30 end

```

dobru implementaciju, to možemo postići u vremenu $O(kn^2)$. Dekompozicija singularnih vrijednosti matrice $(X^*)^T \tilde{X}$ može se dobiti u vremenu $O(k^3)$. Matrice $D^{-\frac{1}{2}}WD^{-\frac{1}{2}}$, X_{mp} i

$(X^*)^T \tilde{X}$ mogu se izračunati s vremenskim složenostima $O(n^2)$, $O(k^2n)$ i $O(k^2n)$, respektivno. Inicijalizacija matrice Q može se dobiti u vremenu $O(k^2n)$. Rekurzivna metoda `Correct` rijetko se koristi, a njezinu složenost možemo procijeniti s $O(kn)$. Broj koraka iterativne metode ne uključujemo u analizu složenosti jer očekujemo da će metoda brzo konvergirati. Naš zaključak je da cjelokupna metoda ima vremensku složenost $O(kn(k+n))$.

3.2 Implementacija

Naš algoritam implementirali smo u programskom okruženju MATLAB. MATLAB ima na raspolaganju mnoštvo gotovih metoda koje možemo koristiti u našoj implementaciji. Također, MATLAB nam pruža mogućnost da dio algoritma paraleliziramo na grafičkoj kartici koristeći njegov *Parallel Computing Toolbox*. Naš algoritam testirali smo na grafičkoj kartici arhitekture *Pascal* (Nvidia) s 4GB memorije.

U nastavku ističemo neke važnije implementacijske detalje. Za početak, matricu D nikada ne konstruiramo eksplicitno jer je dovoljno pamtiti samo dijagonalu. Parcijalnu ortogonalnu dekompoziciju matrice možemo napraviti korištenjem metode `eigs` sa sljedećim argumentima:

- matrica $D^{-\frac{1}{2}}WD^{-\frac{1}{2}}$,
- broj svojstvenih vrijednosti k ,
- oznaka `'LA'`, koja govori metodi da vrati k najvećih svojstvenih vrijednosti.

Ova metoda je posebno efikasna ako je primjenjujemo na rijetke (engl. *sparse*) matrice. Normaliziranje redaka postizemo metodom `normr` koja je efikasna realizacija pripadne operacije iz algoritma (linija 6). Metodu `Correct` implementiramo kao rekurzivnu korekciju redaka kako smo opisali u odjeljku 2.5. Dakle, za unaprijed definirani fiksni parametar α korigirali bismo problematični stupac ℓ tako što bismo 1 s pozicije (i, j) premjestili na poziciju (i, ℓ) ako je razlika u odgovarajućim elementima matrice X_{mp} manja od α . U našoj implementaciji uzimamo $\alpha = k^{-2}$. Za dekompoziciju singularnih vrijednosti koristimo metodu `svd`. Pozivanjem funkcije `rand` bez argumenata dobivamo slučajan broj iz intervala $(0, 1)$. Slučajnu permutaciju n -članog skupa dobivamo pozivanjem funkcije `randperm` s argumentom n .

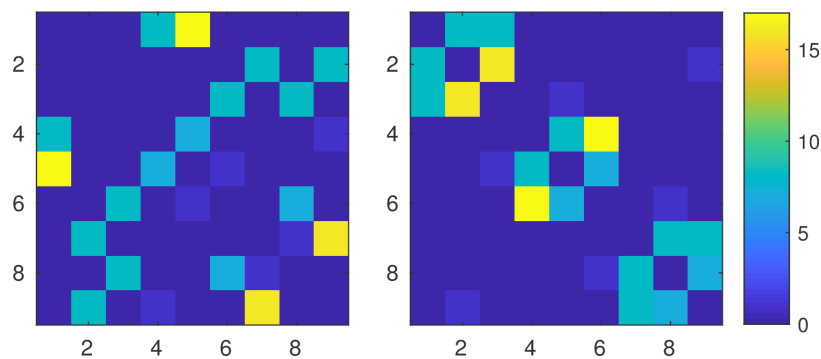
3.3 Testiranje

Naš algoritam prvo smo testirali na grafu iz primjera 2.1.2 kako bismo opravdali rezultate koje smo naveli u primjeru 2.4.5. Istaknimo da metoda konvergira nakon samo 2 iterativna

koraka diskretizacije. Dobiveno rješenje glasi:

$$X^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T.$$

Naravno, ovo je samo jedno od 6 mogućih globalno-optimalnih rješenja jer više matrica particije X^* odgovara istoj particiji. Višestrukim testiranjem uočavamo da različite inicijalizacije vode prema različitim rješenjima. Zgodna vizualizacija učinka klasteriranja dana je slikom 3.1. Na lijevoj strani vizualizirana je matrica težina W nakon primjene nasumične permutacije redaka i stupaca. Desna slika dobivena je permutacijom redaka i stupaca prethodne matrice u skladu s rezultatima klasteriranja. Primjećujemo da su dominantne vrijednosti grupirane u 3 bloka na dijagonali.

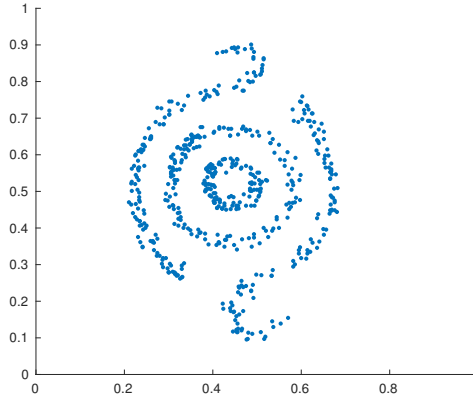


Slika 3.1: Učinak klasteriranja na matricu težina W .

Cilj nam je testirati algoritam na složenijim problemima. Krećemo s klasteriranjem točaka u ravnini. Skup točaka koji želimo klasterirati prikazan je na slici 3.2. Da bismo mogli primijeniti naš algoritam, prvo problem trebamo reformulirati kao problem particioniranja težinskog grafa. Intuitivno je jasno što trebamo napraviti: svakoj točki trebamo pridružiti vrh u grafu, (neke) vrhove trebamo spojiti bridovima, dok bridovima trebamo pridijeliti težine koje mjere koliko su odgovarajuće točke međusobno blizu. Radi jednostavnosti, smatrat ćemo da je graf potpuno povezan, odnosno da između svaka dva vrha postoji brid. Težine možemo definirati na sljedeći način:

$$w_{ij} := e^{-\frac{d(x_i, x_j)}{\sigma^2}}, \quad (3.1)$$

gdje je d funkcija koja mjeri udaljenost odgovarajućih točaka x_i i x_j , a σ parametar pomoću kojeg možemo varirati utjecaj udaljenosti. Mi ćemo d definirati kao kvadrat euklidske

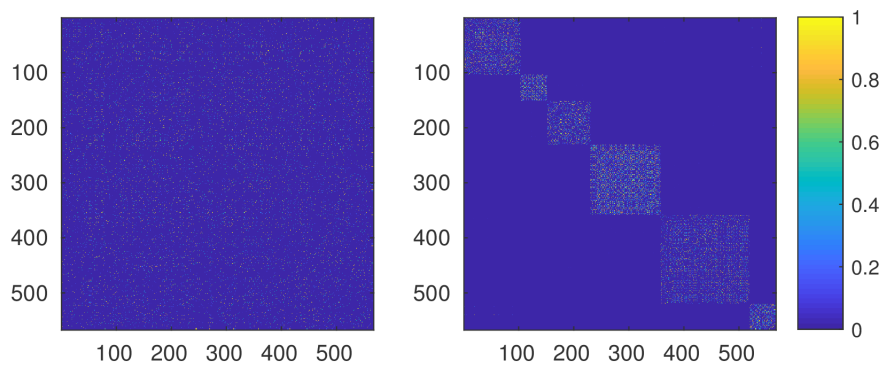


Slika 3.2: Umjetno zadane točke u ravnini.

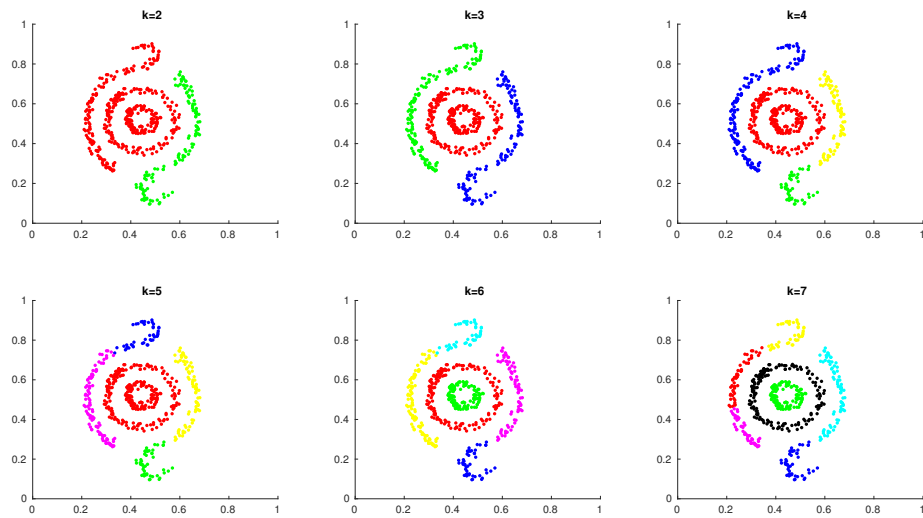
udaljenosti, odnosno

$$d(x, y) := \|x - y\|^2.$$

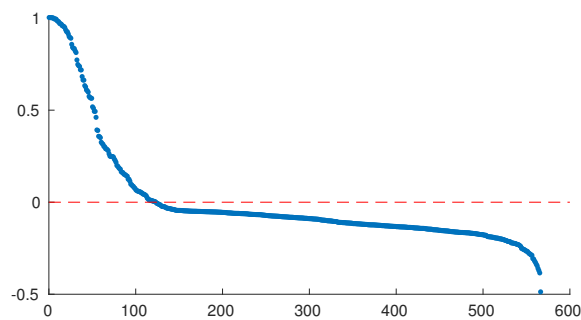
Shi i Malik su u [9] (str. 897) sugerirali da se σ postavi na vrijednost koja je 10 do 20 posto maksimalne udaljenosti između točaka u skupu podataka. U našem slučaju ta vrijednost iznosila bi oko 0.06. Testiranjem različitih vrijednosti zaključujemo da je bolje izabrati nižu vrijednost pa definiramo $\sigma = 0.03$. Mali σ nam osigurava da velike udaljenosti između točaka neće imati puno utjecaja na klasteriranje. Slika 3.3 prikazuje matricu težina W prije i poslije klasteriranja u slučaju $k = 6$. Matrica je skoro pa jednobojna jer svaka

Slika 3.3: Učinak klasteriranja na matricu težina W .

točka ima mali broj relevantnih susjeda (koji su označeni svjetlijim bojama). Na sortiranoj matrici možemo uočiti 6 blokova na dijagonali koji sadrže gotovo sve točke koje nisu obojene najtamnijom bojom. Rezultati klasteriranja za $k = 2, \dots, 7$ prikazani su na slici 3.4. U svakom od slučajeva metoda konvergira nakon nekoliko koraka iteracije. Slika 3.5 prikazuje svojstvene vrijednosti u padajućem poretku. Primijetimo da pozitivne svojstvene vrijednosti brže opadaju od negativnih.



Slika 3.4: Rezultati klasteriranja s obzirom na broj klastera.

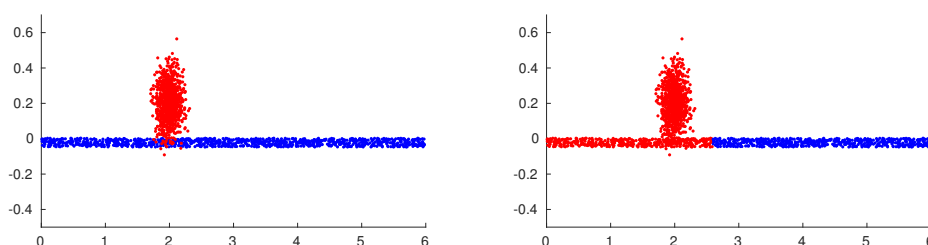


Slika 3.5: Svojstvene vrijednosti matrice $D^{-\frac{1}{2}} W D^{-\frac{1}{2}}$.

Sada ćemo konstruirati skup točaka koji nećemo moći uspješno klasterirati našim algoritmom. Traženi skup bit će unija n -članih skupova \mathbb{A} i \mathbb{B} , gdje je \mathbb{A} slučajan uzorak iz normalne distribucije s očekivanjem $(2, 0.2)$ i kovarijacijskom matricom

$$\begin{bmatrix} 0.1^2 & 0 \\ 0 & 0.1^2 \end{bmatrix},$$

a \mathbb{B} slučajan uzorak iz uniformne distribucije na skupu $[0, 6] \times [-0.05, 0]$. U našem primjeru uzet ćemo $n = 1000$. Skupovi su prikazani na slici 3.6 (lijevo). Sličnost između točaka mjerimo s (3.1) uz $\sigma = 0.06$. Rezultate klasteriranja možemo vidjeti na slici 3.6 (desno). Možemo primijetiti da naš algoritam ne može uspješno rastaviti ova dva skupa. Intuitivno, to je posljedica toga što je presjek tih skupova veći od širine vrpce. Strogi matematički dokaz može se pronaći u [4] (str. 3).



Slika 3.6: (Lijevo) Dva skupa podataka s različitim strukturalnim gustoćama. (Desno) Podaci grupirani u dva klastera prema našem algoritmu.

Za kraj, naš algoritam ćemo iskoristiti za segmentaciju digitalnih slika. Matricu težina formirat ćemo na sljedeći način:

$$w_{ij} := \begin{cases} e^{-\frac{d_1(P_i, P_j)}{\sigma_1^2} - \frac{d_2(P_i, P_j)}{\sigma_2^2}}, & d_2(P_i, P_j) < r^2, \\ 0 & \text{inače,} \end{cases}$$

gdje je d_1 funkcija koja mjeri sličnost piksela prema boji, d_2 prostorna udaljenost piksela, a σ_1 , σ_2 i r parametri koji reguliraju sličnost između piksela. Piksela P možemo definirati kao uređenu petorku (x, y, h, s, v) , gdje je (x, y) pozicija piksela u slici, a h , s i v vrijednosti u HSV prostoru boja. Neka je F preslikavanje koje pikselu P pridružuje uređenu trojku

$$(v, v \cdot s \cdot \sin(h), v \cdot s \cdot \cos(h)).$$

Tada d_1 i d_2 možemo definirati s

$$\begin{aligned} d_1(P_i, P_j) &:= \|F(P_i) - F(P_j)\|^2, \\ d_2(P_i, P_j) &:= \|(x, y)_i - (x, y)_j\|^2. \end{aligned}$$

Naše slike bit će dimenzija 100×200 piksela pa ćemo stoga definirati $r = 10$. Rezultati segmentacije uz $\sigma_1 = 0.1$ i $\sigma_2 = 3.4$ mogu se vidjeti na slici 3.7. Broj klastera k birali smo ručno.



Slika 3.7: Segmentirane slike. Slike u prvom redu segmentirane su na desetak dijelova, a ostale slike na dvadesetak i tridesetak dijelova.

Dodatak A

Važniji pojmovi i rezultati iz teorije matrica

Prvo ćemo navesti definicije osnovnih pojmova koje vežemo uz matrice. Nakon toga ćemo izreći najvažnije rezultate koji se tiču tih pojmova te priložiti pokoji dokaz. Detaljnije informacije o osnovama matrica kao i dokazi teorema koje ćemo spomenuti mogu se pronaći u [10]. Iako ćemo uglavnom promatrati matrice nad \mathbb{R} , svi rezultati i definicije se lako poopće za matrice nad proizvoljnim poljem \mathbb{F} .

U sljedećim definicijama i iskazima, s m i n označavat ćemo proizvoljne prirodne brojeve.

Definicija A.1. Kažemo da je matrica $A \in M_n$ regularna ako postoji matrica $B \in M_n$ takva da vrijedi $AB = BA = I_n$. U tom slučaju ćemo matricu B zvati inverzom od A i označavati s A^{-1} . U suprotnom kažemo da je matrica A singularna.

Definicija A.2. Neka je $A = (a_{ij}) \in M_n$. Determinanta matrice A , u oznaci $\det(A)$, definira se s

$$\det(A) = \sum_{p \in S_n} (-1)^{I(p)} \prod_{i=1}^n a_{ip(i)},$$

gdje je S_n skup svih permutacija od n elemenata, a $I(p)$ broj inverzija u permutaciji p .

Definicija A.3. Neka je $A \in M_{mn}$. Rang matrice A , u oznaci $r(A)$, definira se kao najveći broj stupaca od A koji tvore linearno nezavisan skup. Posebno, ako je $r(A) = \min\{m, n\}$, onda kažemo da A ima puni rang.

Definicija A.4. Neka je $A \in M_{mn}$. Jezgra matrice A , u oznaci $\text{Ker}(A)$, definirana je s

$$\text{Ker}(A) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = 0\}.$$

Defekt matrice A , u oznaci $d(A)$, definira se kao dimenzija jezgre od A .

Definicija A.5. Neka je $A = (a_{ij}) \in M_n$. Trag matrice A , u oznaci $\text{tr}(A)$, definiran je s

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

Definicija A.6. Standardni skalarni produkt na \mathbb{F}^n je preslikavanje $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathbb{F}^n \times \mathbb{F}^n \rightarrow \mathbb{F}$ definirano formulom $\langle x, y \rangle = y^* x$. Euklidska norma na \mathbb{F}^n je preslikavanje $\|\cdot\| : \mathbb{F}^n \rightarrow \mathbb{F}$ definirano formulom $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$.

Definicija A.7. Kažemo da je skup $\{x_1, x_2, \dots, x_k\} \subset \mathbb{F}^n$ ortonormiran ako $\forall i, j$ vrijedi

$$\langle x_i, x_j \rangle = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & \text{inače.} \end{cases}$$

Definicija A.8. Neka je $A = (a_{ij}) \in M_{mn}(\mathbb{F})$. Frobeniusova norma matrice A , u oznaci $\|A\|_F$, definirana je s

$$\|A\|_F := \sqrt{\text{tr}(A^*A)} = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2}.$$

Definicija A.9. Neka je $A = (a_{ij}) \in M_n$. Kažemo da je matrica A stohastička ako vrijedi

- (a) $a_{ij} \geq 0, \forall i, j$,
- (b) $A\mathbf{1}_n = \mathbf{1}_n$.

Slijede važniji teoremi i propozicije.

Teorem A.10 (Binet-Cauchy). Neka su $A, B \in M_n$. Tada vrijedi

$$\det(AB) = \det(A) \cdot \det(B).$$

Teorem A.11 (Teorem o rangui i defektui). Neka je $A \in M_{mn}$. Tada vrijedi

$$r(A) + d(A) = n.$$

Propozicija A.12. Neka su $A \in M_n$ i $B \in M_{mn}$ proizvoljne. Tada vrijedi

- (a) $\det(A^T) = \det(A)$,
- (b) $r(B^T B) = r(B^T) = r(B)$.

Propozicija A.13. Neka su $A, B \in M_n$. Ako je B regularna, onda vrijedi

$$r(AB) = r(BA) = r(A).$$

Teorem A.14. *Neka je $A \in M_n$. Sljedeće tvrdnje međusobno su ekvivalentne:*

- (a) A je regularna,
- (b) $\det(A) \neq 0$,
- (c) $r(A) = n$,
- (d) $d(A) = 0$.

Propozicija A.15. *Neka su $A, B \in M_n$. Tada vrijedi*

$$\operatorname{tr}(AB) = \operatorname{tr}(BA).$$

Propozicija A.16. *Skalarni produkt na \mathbb{F}^n ima sljedeća svojstva:*

- (a) $\langle x, x \rangle \geq 0, \forall x \in \mathbb{F}^n$,
- (b) $\langle x, x \rangle = 0 \Leftrightarrow x = 0$,
- (c) $\langle x + y, z \rangle = \langle x, z \rangle + \langle y, z \rangle, \forall x, y, z \in \mathbb{F}^n$,
- (d) $\langle \alpha x, y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle, \forall x, y \in \mathbb{F}^n$ i $\forall \alpha \in \mathbb{F}$,
- (e) $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}, \forall x, y \in \mathbb{F}^n$.

Propozicija A.17. *Neka je $A \in M_{mn}(\mathbb{F})$ proizvoljna. Tada vrijedi*

$$\langle Ax, y \rangle = \langle x, A^*y \rangle, \forall x \in \mathbb{F}^n, \forall y \in \mathbb{F}^m.$$

Dokaz. Neka su $x \in \mathbb{F}^n$ i $y \in \mathbb{F}^m$ proizvoljni. Slijedi:

$$\begin{aligned} \langle Ax, y \rangle &= y^*(Ax) = \sum_{i=1}^m \bar{y}_i \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j = \sum_{j=1}^n x_j \sum_{i=1}^m a_{ij} \bar{y}_i \\ &= \sum_{j=1}^n x_j \sum_{i=1}^m \overline{a_{ij} y_i} = (A^*y)^* x = \langle x, A^*y \rangle. \end{aligned}$$

□

Teorem A.18 (Cauchy-Schwarzova nejednakost). *Neka su $x, y \in \mathbb{F}^n$ proizvoljni. Tada vrijedi*

$$|\langle x, y \rangle| \leq \|x\| \|y\|.$$

Jednakost se postiže ako i samo ako su x i y linearno zavisni.

Teorem A.19 (Gram-Schmidtov postupak ortogonalizacije). *Neka je $\{x_1, x_2, \dots, x_k\} \subset \mathbb{F}^n$ linearno nezavisan skup. Tada postoji ortonormiran skup $\{e_1, e_2, \dots, e_k\} \subset \mathbb{F}^n$ takav da je $[[e_1, \dots, e_j]] = [[x_1, \dots, x_j]]$, $\forall j = 1, \dots, k$.*

Dokaz. Teorem dokazujemo indukcijom po $j \in \{1, \dots, k\}$. Za slučaj $j = 1$ definiramo $e_1 := \frac{x_1}{\|x_1\|}$. Vektor e_1 je dobro definiran jer je $x_1 \neq 0$ kao element linearno nezavisnog skupa. Očito je skup $\{e_1\}$ ortonormiran te vrijedi $[[e_1]] = [[x_1]]$.

Pretpostavimo da tvrdnja vrijedi za neki $j < k$. Tada postoji ortonormiran skup $\{e_1, \dots, e_j\}$ takav da je $[[e_1, \dots, e_j]] = [[x_1, \dots, x_j]]$. Vektor e_{j+1} definiramo na sljedeći način:

$$e_{j+1} := \frac{x_{j+1} - \sum_{i=1}^j \langle x_{j+1}, e_i \rangle e_i}{\|x_{j+1} - \sum_{i=1}^j \langle x_{j+1}, e_i \rangle e_i\|}.$$

Primijetimo prvo da je e_{j+1} dobro definiran. Naime, kada bi nazivnik bio 0, onda bi vrijedilo $x_{j+1} \in [[e_1, \dots, e_j]] = [[x_1, \dots, x_j]]$, što je u kontradikciji s pretpostavkom o nezavisnosti skupa $\{x_1, x_2, \dots, x_k\}$. Također, jasno je da vrijedi $\|e_{j+1}\| = 1$. Pokažimo sada da vrijedi $\langle e_{j+1}, e_\ell \rangle = 0$, za $\ell = 1, \dots, j$:

$$\begin{aligned} \langle e_{j+1}, e_\ell \rangle &= \left\langle \frac{x_{j+1} - \sum_{i=1}^j \langle x_{j+1}, e_i \rangle e_i}{\|x_{j+1} - \sum_{i=1}^j \langle x_{j+1}, e_i \rangle e_i\|}, e_\ell \right\rangle \\ &= \frac{\langle x_{j+1}, e_\ell \rangle - \sum_{i=1}^j \langle x_{j+1}, e_i \rangle \langle e_i, e_\ell \rangle}{\|x_{j+1} - \sum_{i=1}^j \langle x_{j+1}, e_i \rangle e_i\|} \\ &= \frac{\langle x_{j+1}, e_\ell \rangle - \langle x_{j+1}, e_\ell \rangle}{\|x_{j+1} - \sum_{i=1}^j \langle x_{j+1}, e_i \rangle e_i\|} \\ &= 0. \end{aligned}$$

Preostaje pokazati da je $[[e_1, \dots, e_{j+1}]] = [[x_1, \dots, x_{j+1}]]$. Pretpostavili smo da vrijedi $[[e_1, \dots, e_j]] = [[x_1, \dots, x_j]]$ pa je dovoljno pokazati da je $e_{j+1} \in [[x_1, \dots, x_{j+1}]]$ te $x_{j+1} \in [[e_1, \dots, e_{j+1}]]$. Iz definicije od e_{j+1} slijedi da je $e_{j+1} \in [[e_1, \dots, e_j, x_{j+1}]]$, iz čega pak slijedi da je $e_{j+1} \in [[x_1, \dots, x_j, x_{j+1}]]$. Također, zbog

$$x_{j+1} = \sum_{i=1}^j \langle x_{j+1}, e_i \rangle e_i + \|x_{j+1} - \sum_{i=1}^j \langle x_{j+1}, e_i \rangle e_i\| e_{j+1}$$

vrijedi da je $x_{j+1} \in [[e_1, \dots, e_{j+1}]]$. Po principu matematičke indukcije tvrdnja teorema vrijedi za sve $j = 1, \dots, k$. \square

Korolar A.20. *Neka je $\{x_1, x_2, \dots, x_k\} \subset \mathbb{F}^n$ ortonormiran skup. Tada postoji ortonormirana baza $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ za \mathbb{F}^n takva da je $e_i = x_i$ za $i = 1, 2, \dots, k$.*

Bibliografija

- [1] I. Dhillon, Y. Guan i B. Kulis, *A Unified View of Kernel k-means, Spectral Clustering and Graph Cuts*, (2005), <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.75.1701&rep=rep1&type=pdf>.
- [2] A. Grote, M. Butenuth, M. Gerke i C. Heipke, *Segmentation Based on Normalized Cuts for the Detection of Suburban Roads in Aerial Imagery*, Urban remote sensing joint event 2007 (2007), <http://ieeexplore.ieee.org/document/4234416/>.
- [3] R. Kannan, S. Vempala i A. Vetta, *On clusterings: Good, bad and Spectral*, Journal of the ACM (JACM) (2004), br. 51, 497–515, <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.124.8204&rep=rep1&type=pdf>.
- [4] B. Nadler i M. Galun, *Fundamental Limitations of Spectral Clustering*, Advanced in Neural Information Processing Systems (2007), br. 19, 1017–1024, <https://pdfs.semanticscholar.org/5812/10a24952540aea68c8b121ab59ad7a516b28.pdf>.
- [5] A. Y. Ng, M. Jordan i Y. Weiss, *On spectral clustering: Analysis and an algorithm*, NIPS (2002), <http://ai.stanford.edu/~ang/papers/nips01-spectral.pdf>.
- [6] W. Pentney i M. Meila, *Spectral Clustering of Biological Sequence Data*, AAAI'05 Proceedings of the 20th national conference on Artificial intelligence (2005), br. 2, 845–850, <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.329.6121&rep=rep1&type=pdf>.
- [7] J. Qian i V. Saligrama, *Spectral clustering with imbalanced data*, 2014 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP) (2014), <https://pdfs.semanticscholar.org/c1c0/c2f4a62db4e3a19f1724be29e670e703cf10.pdf>.

- [8] X. L. Ren, N. Gleinig, D. Tolić i N. Antulov-Fantulin, *Underestimated cost of targeted attacks on complex networks*, (2017), <https://arxiv.org/pdf/1710.03522.pdf>.
- [9] J. Shi i J. Malik, *Normalized Cuts and Image Segmentation*, IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence (2000), br. 22, 14–17, <http://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/868688/>.
- [10] G. Strang, *Linear Algebra and Its Applications, 4th Edition*, Thomson Brooks/Cole, 2006.
- [11] P. N. Tan, M. Steinbach i V. Kumar, *Introduction to Data Mining*, Pearson, 2005.
- [12] M. van den Heuvel, R. Mandl i H. H. Pol, *Normalized Cut Group Clustering of Resting-State fMRI Data*, PLoS ONE (2008), br. 3, 537–541, <http://journals.plos.org/plosone/article/file?id=10.1371/journal.pone.0002001&type=printable>.
- [13] L. Xu, W. Li i D. Schuurmans, *Fast Normalized Cut with Linear Constraints*, Proceedings of the 2009 IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (2009), 2866–2873, <https://webdocs.cs.ualberta.ca/~dale/papers/cvpr09.pdf>.
- [14] S. X. Yu i J. Shi, *Multiclass Spectral Clustering*, Proceedings of the Ninth IEEE International Conference on Computer Vision (2003), <http://ieeexplore.ieee.org/document/1238361/>.
- [15] W. Yu, J. Wang i Y. Long, *An Improved Normalized Cut Image Segmentation Algorithm with k-means Cluster*, Applied Mechanics and Materials (2014), br. 548–549, 1179–1184, <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.916.3473&rep=rep1&type=pdf>.

Sažetak

U ovom radu dajemo detaljan opis metode particioniranja težinskog grafa primjenom kriterija spektralnog normaliziranog reza. Argumentiramo odabir takvog kriterija u kontekstu zahtjeva na dobro particioniranje. U teorijskom razvoju metode uglavnom se pozivamo na elementarne pojmove i rezultate iz spektralne teorije matrica. Prvo problem particioniranja oblikujemo kao optimizacijski problem koji potom relaksiramo. Rješenja relaksiranog optimizacijskog problema dana su ortogonalnim transformacijama prvih nekoliko svojstvenih vektora simetrične matrice. U drugom koraku nastojimo pronaći rješenje originalnog diskretnog problema koje je najbliže dobivenom skupu kontinuiranih rješenja. To ostvarujemo iterativnim postupkom u kojem naizmjenično primjenjujemo dvije procedure: metodom potiskivanja ne-maksimuma pronalazimo diskretno rješenje najbliže kontinuiranom, dok se kontinuirano rješenje koje je dobra aproksimacija diskretnog može dobiti rješavanjem ortogonalnog Prokrustovog problema. Možemo garantirati da je tako dobiveno rješenje skoro globalno-optimalno. U zadnjem poglavlju dajemo implementaciju metode koju potom testiramo i evaluiramo.

Summary

In this thesis we give a detailed description of a weighted graph partitioning method using the spectral normalized cut criterion. We argue the choice of such a criterion in the context of good partitioning requirements. In the theoretical development of the method we mainly rely on elementary definitions and results from spectral theory. First we redefine the partitioning problem as an optimization problem that we then relax. The solutions to the relaxed optimization problem are given by orthogonal transformations of the first few eigenvectors of a symmetric matrix. In the next step we try to find a solution to the original discrete problem that is closest to the obtained set of continuous optima. We can achieve this in an iterative fashion by alternately applying two procedures: using non-maximum suppression we find the discrete solution closest to a continuous one, while the continuous optimum that is a good approximation of a discrete one can be obtained by solving the orthogonal Procrustes problem. We can guarantee that the obtained solution is nearly global-optimal. In the last chapter we implement the method which we then test and evaluate.

Životopis

Franjo Palajsa rođen je 5. siječnja 1994. godine u Karlovcu. U rodnom gradu pohađa osnovnu školu, nakon koje upisuje srednju medicinsku školu. Sljedeće godine prepisuje se u karlovačku gimnaziju gdje se ističe sudjelovanjem na natjecanjima. Od značajnijih rezultata možemo istaknuti drugu i treću nagradu na državnim natjecanjima iz matematike. Nakon maturiranja u 2012. godini odlazi u Zagreb gdje upisuje preddiplomski sveučilišni studij *Matematika* na Matematičkom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta. Na istom fakultetu upisuje 2015. godine diplomski sveučilišni studij *Računarstvo i matematika*. Povremeno sudjeluje u nastavi kao demonstrator iz kolegija *Metode matematičke fizike* i *Obične diferencijalne jednadžbe*. Dobitnik je državne stipendije za izvrsnost tri godine zaredom. 2017. godine sudjeluje na studentskom natjecanju *Mozgalo* gdje osvaja treće mjesto.