スペクトルクラスタリング入門

瀧川 一学

2007.4.23 版

線形代数の復習（１）

線形写像

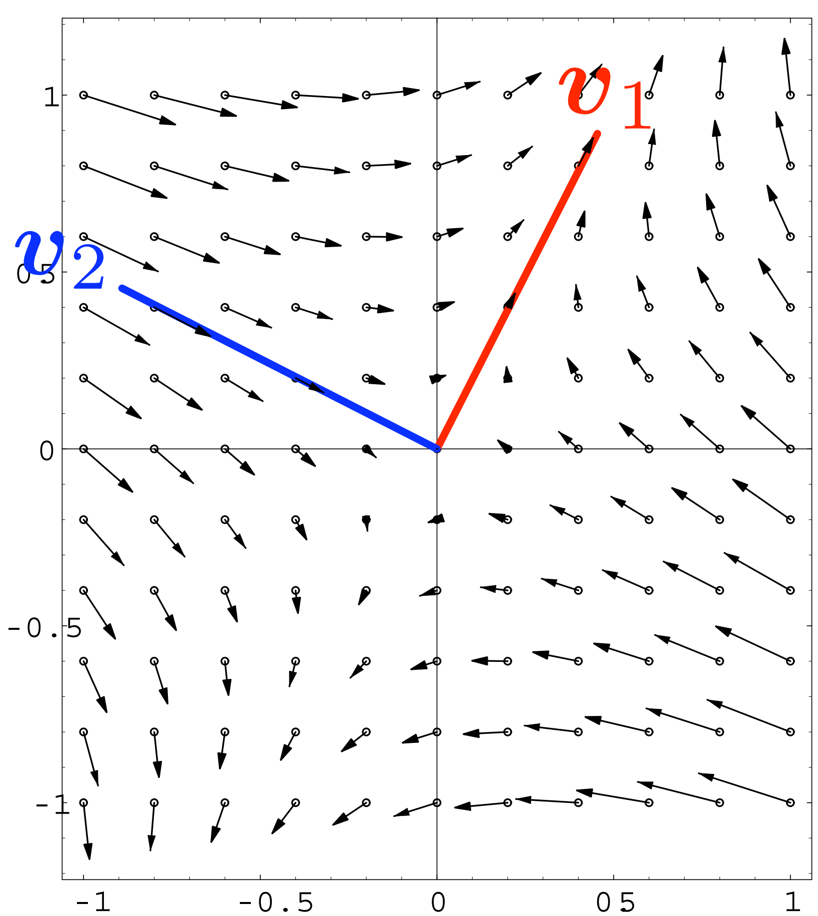
ベクトルxに行列Aをかけてベクトルyを得る。

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

↑２次元の場合の成分表示

元の点xから、写像後の点yに→を引くと…



赤いベクトルの方向と青いベクトルの方向のベクトルに引っ張りがある。

赤い方向のベクトル$(\boldsymbol{v}_1)$は行列 $\boldsymbol{A}$ をかけると、
少し長いベクトルになる (倍率 λ_1)。

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 = \lambda_1 \boldsymbol{v}_1$$

青い方向のベクトル$(\boldsymbol{v}_2)$は行列 $\boldsymbol{A}$ をかけると、
少し短いベクトルになる (倍率λ_2)。

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 = \lambda_2 \boldsymbol{v}_2$$

まとめて書くと

ベクトルを横にならべて行列にしたやつ。

$$\boldsymbol{A} \begin{pmatrix} | & | \\ \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \\ | & | \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} | & | \\ \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \\ | & | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

対称行列Aに対してはこのような**固有値**（倍率のこと）と**固有ベクトル**（方向のこと）が存在し、

- **固有値は常に実数**
- **固有ベクトルは互いに直交**

に出来る。

線形代数の復習（2）

$$\boldsymbol{A}\begin{pmatrix} | & | \\ \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v_2} \\ | & | \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} | & | \\ \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v_2} \\ | & | \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

行列形 $\boldsymbol{AV} = \boldsymbol{V\Lambda}$

固有ベクトルは単位ベクトルにすると、<u>Aが対称なら</u>互いに直交するから

$\boldsymbol{VV}' = \boldsymbol{I}$ または $\boldsymbol{V}^{-1} = \boldsymbol{V}'$

対称行列Aは直交行列Vで固有値分解できる。

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V\Lambda V}'$$

$$\begin{aligned} \det(\boldsymbol{A}) &= \det(\boldsymbol{V\Lambda V}^{-1}) \\ &= \det(\boldsymbol{V}) \cdot \det(\boldsymbol{V})^{-1} \cdot \det(\boldsymbol{\Lambda}) = \det(\boldsymbol{\Lambda}) \\ &= \lambda_1\lambda_2 \cdots \lambda_n \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}) &= \mathrm{tr}(\boldsymbol{V\Lambda V}^{-1}) \\ &= \mathrm{tr}(\boldsymbol{\Lambda V}^{-1}\boldsymbol{V}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{\Lambda}) \\ &= \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_n \end{aligned}$$

行列の演算ルール

$(\boldsymbol{A}')' = \boldsymbol{A}$ $\boldsymbol{A}'$ は $\boldsymbol{A}$ の行と列を入れ替えたもの

$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})' = \boldsymbol{A}' + \boldsymbol{B}'$

$(\boldsymbol{AB})' = \boldsymbol{B}'\boldsymbol{A}'$

$(\boldsymbol{AB})^{-1} = \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1}$

$(\boldsymbol{A}^{-1})' = (\boldsymbol{A}')^{-1}$

$\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}') = \mathrm{tr}(\boldsymbol{A})$ $\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})$ は $\boldsymbol{A}$ の対角成分の和

$\mathrm{tr}(\boldsymbol{AB}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{BA})$

$\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}) + \mathrm{tr}(\boldsymbol{B})$

$\mathrm{tr}(\alpha\boldsymbol{A}) = \alpha\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})$

$\det(\boldsymbol{A}^{-1}) = \det(\boldsymbol{A})^{-1}$

$\det(\alpha\boldsymbol{A}) = \alpha^n\det(\boldsymbol{A})$ n は正方行列 $\boldsymbol{A}$ のサイズ

$\det(\boldsymbol{AB}) = \det(\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{B})$

$\det(\boldsymbol{A}') = \det(\boldsymbol{A})$

線形代数の復習（３）

ここで２次形式と呼ばれる量を考える。

$$\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$
$$= a_{11}x_1^2 + (a_{12}+a_{21})x_1x_2 + a_{22}x_2^2$$

これは定数項の無い単なる二次関数なので一般には

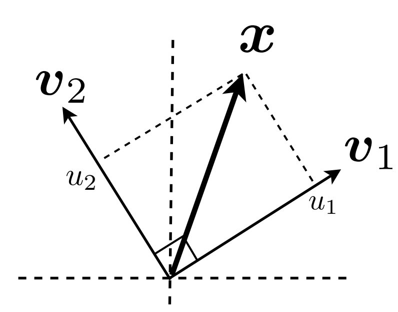
xによっていくらでも大きくできる。

だからどの方向が一番大きくなる度合いが強いかを

xは長さ１のベクトルだとして探してみる。ただし

長さはユークリッド距離(2-norm) $\|\boldsymbol{z}\| = \sqrt{\boldsymbol{z}'\boldsymbol{z}}$ で計る。

$$\max_{\|\boldsymbol{x}\|=1} \boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$



固有ベクトルで座標をとる。

$$\boldsymbol{x} = u_1\boldsymbol{v}_1 + u_2\boldsymbol{v}_2 = \boldsymbol{V}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$
$$u_1^2 + u_2^2 = 1 \Leftrightarrow \|\boldsymbol{x}\| = 1$$

Aが対称とすると、正規直交する固有ベクトルがとれる。

$$\boldsymbol{v}_i'\boldsymbol{v}_i = 1 \quad \text{かつ} \quad \boldsymbol{v}_i'\boldsymbol{v}_j = 0 \quad (i \neq j)$$

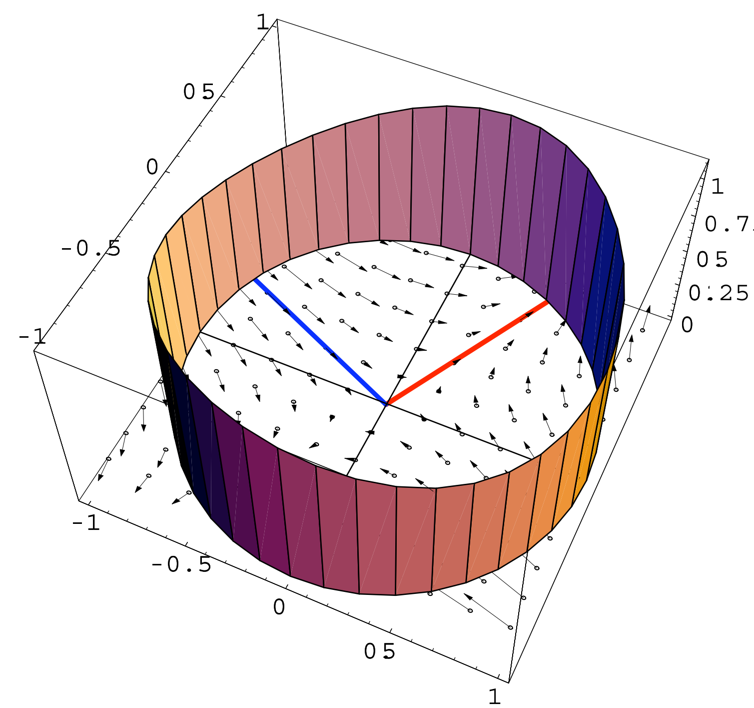
以上より

$$\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{V}'\boldsymbol{x})'\boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{V}'\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{x})'\boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{x})$$
$$= \lambda_1^2 u_1^2 + \lambda_2^2 u_2^2$$

$$(\min_i \lambda_i)(u_1^2+u_2^2) \leq \boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \leq (\max_i \lambda_i)(u_1^2+u_2^2)$$

より $$\max_{\|\boldsymbol{x}\|=1} \boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \max_i \lambda_i$$

$$\min_{\|\boldsymbol{x}\|=1} \boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \min_i \lambda_i$$



$\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ を $\|\boldsymbol{x}\| = 1$ 上にプロットしてみると…

線形代数の復習（４）

ここでRayleigh商と呼ばれる量を考える。

$$\frac{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}}, \quad \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$$

先ほどのように固有ベクトルで座標をとると

$$\boldsymbol{x} = u_1\boldsymbol{v}_1 + u_2\boldsymbol{v}_2 = \boldsymbol{V}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} u_1, u_2 \end{pmatrix}\boldsymbol{V}'\boldsymbol{V}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = u_1^2 + u_2^2$$

また先ほどの結果

$$(\min_i \lambda_i)(u_1^2 + u_2^2) \leq \boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \leq (\max_i \lambda_i)(u_1^2 + u_2^2)$$

より

$$\max_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}} \frac{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}} = \max_i \lambda_i$$
$$\min_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}} \frac{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}} = \min_i \lambda_i$$

最大値・最小値はそれぞれ最大固有値・最小固有値に対応する固有ベクトルxで得られる。

また一般に $\quad \dfrac{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}} = \arg\min_\alpha \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \alpha\boldsymbol{x}\|$

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \alpha\boldsymbol{x}\|^2 = 0$$
$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - 2\alpha\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \alpha^2\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}\right) = 0$$
$$\Leftrightarrow -2\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + 2\alpha\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x} = 0 \Leftrightarrow \alpha = \frac{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}}$$

Rayleigh-Ritz 定理

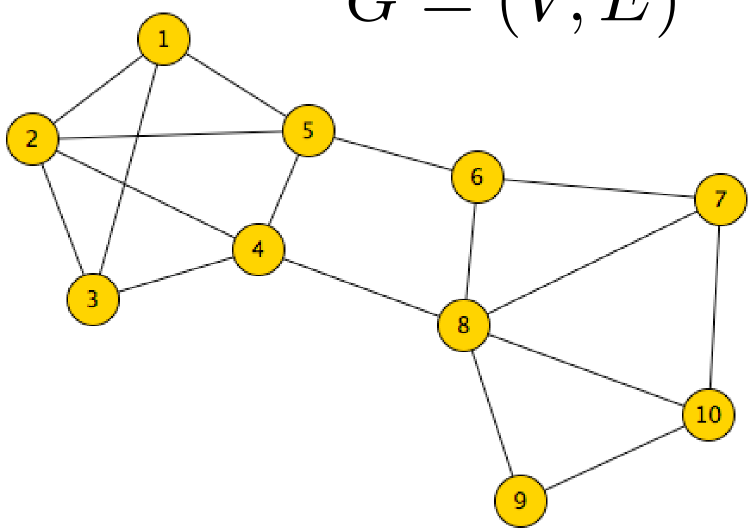
$\boldsymbol{A}$の固有値を $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ とし、対応する正規直交な固有ベクトルを $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n$とする。

$$\lambda_1 = \max_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}} \frac{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}}$$
$$\lambda_k = \max_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}} \left\{ \frac{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}} \,\middle|\, \boldsymbol{x} \perp \boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_{k-1} \right\}, k = 2, \ldots, n$$
$$\lambda_n = \min_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}} \frac{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}}$$
$$\lambda_{n-k} = \min_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}} \left\{ \frac{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}} \,\middle|\, \boldsymbol{x} \perp \boldsymbol{v}_{n-k+1}, \ldots, \boldsymbol{v}_n \right\}, k = 1, \ldots, n-1$$

※これをより精密にしたのがCourant-Fisher 定理

グラフの頂点クラスタリング問題　　テキスト

$$G = (V, E)$$



$$V = \{1, 2, 3, \cdots, 10\}$$

$$E = \{(1,2), (1,3), (2,3), \cdots, (9,10)\}$$

$$\boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

問題（1）：二分割

いろいろな二分割

$$V \to (V_1, V_2), V_1 \cup V_2 = V, V_1 \cap V_2 = \emptyset$$

のなかで、頂点クラス V_1 と V_2 を橋渡しする辺の数（カット）

$$\mathrm{cut}(V_1, V_2) := \sum_{i \in V_1} \sum_{j \in V_2} w_{ij}$$

が最も少ないものを選ぶ。

$$V_1 = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}, V_2 = \{7, 8, 9, 10\}$$

$$\Longrightarrow \mathrm{cut}(V_1, V_2) = 3$$

$$V_1 = \{\}, V_2 = \{1, 2, 3, \cdots, 9, 10\}$$

$$\Longrightarrow \mathrm{cut}(V_1, V_2) = 0$$

問題の書き換え

整数変数 $f_i := \begin{cases} 1 & i \in V_1 \\ -1 & i \in V_2 \end{cases}$ を用いれば $w_{ii} = 0$ と $w_{ij} = w_{ji}$ より

$$\sum_{i \in V_1} \sum_{j \in V_2} w_{ij} = \frac{1}{4} \sum_{i \in V} \sum_{j \in V, j > i} w_{ij}(f_i - f_j)^2 = \frac{1}{8} \sum_{i \in V} \sum_{j \in V} w_{ij}(f_i - f_j)^2$$

$$= \frac{1}{8} \sum_{i \in V} \sum_{j \in V} w_{ij} f_i^2 + \frac{1}{8} \sum_{i \in V} \sum_{j \in V} w_{ij} f_j^2 - \frac{1}{4} \sum_{i \in V} \sum_{j \in V} w_{ij} f_i f_j$$

$$= \frac{1}{4} \sum_{i \in V} \sum_{j \in V} w_{ij} f_i^2 - \frac{1}{4} \sum_{i \in V} \sum_{j \in V} w_{ij} f_i f_j$$

$$d_i := \sum_{j \in V} w_{ij} = \sum_{j \in V} w_{ji}$$

これは $\boldsymbol{D}$ の ii 成分

$$= \frac{1}{4} \sum_{i \in V} d_i f_i^2 - \frac{1}{4} \sum_{i \in V} \sum_{j \in V} w_{ij} f_i f_j$$

$$\boldsymbol{f} := (f_1, f_2, \ldots, f_{|V|})'$$

$$= \frac{1}{4} \boldsymbol{f}' \boldsymbol{D} \boldsymbol{f} - \frac{1}{4} \boldsymbol{f}' \boldsymbol{W} \boldsymbol{f} = \frac{1}{4} \boldsymbol{f}' (\boldsymbol{D} - \boldsymbol{W}) \boldsymbol{f}$$

$\boldsymbol{L} := \boldsymbol{D} - \boldsymbol{W}$ と定義すると $$\sum_{i \in V_1} \sum_{j \in V_2} w_{ij} = \frac{1}{8} \sum_{i \in V} \sum_{j \in V} w_{ij}(f_i - f_j)^2 = \frac{1}{4} \boldsymbol{f}' \boldsymbol{L} \boldsymbol{f}$$

グラフのラプラシアン行列

$*$ $\boldsymbol{L} := \boldsymbol{D} - \boldsymbol{W}$ と定義すると $\mathrm{cut}(V_1, V_2) = \sum_{i \in V_1} \sum_{j \in V_2} w_{ij} = \frac{1}{8} \sum_{i \in V} \sum_{j \in V} w_{ij}(f_i - f_j)^2 = \frac{1}{4} \boldsymbol{f}' \boldsymbol{L} \boldsymbol{f}$

$\boldsymbol{L} := \boldsymbol{D} - \boldsymbol{W}$ をグラフのラプラシアンと呼ぶ。

$\boldsymbol{W}$ 対称行列で成分がすべて非負（通常は隣接行列でi,j成分は辺(i,j)の重み）

$\boldsymbol{D} := \mathrm{diag}\Big((\sum_{j=1} w_{1j}, \sum_{j=1} w_{2j}, \ldots, \sum_{j=1} w_{\|V\| j})' \Big)$ 頂点iの度数をii成分に持つ対角行列（ii成分以外は0）

【性質】

① 任意の $\boldsymbol{x}$ に対し $\boldsymbol{x}' \boldsymbol{L} \boldsymbol{x} = \sum_{i \in V} \sum_{j > i, j \in V} w_{ij}(x_i - x_j)^2$ $*$の後半の同値性は $\boldsymbol{x}$ の定義に依らない

② 任意の $\boldsymbol{x}$ に対し $\boldsymbol{x}' \boldsymbol{L} \boldsymbol{x} \geq 0$ （半正定値） ①と $w_{ij} \geq 0$ より

③ 固有値がすべて実数で非負 $\lambda_{\min} = \min_{\|\boldsymbol{x}\| = 1} \boldsymbol{x}' \boldsymbol{L} \boldsymbol{x}$ と②より

③ 最小固有値は常に0で、その固有ベクトルは直流成分 $c\mathbf{1}$（c は定数、$\mathbf{1} := (1, 1, \ldots, 1)'$ ） 定義より $(\boldsymbol{D} - \boldsymbol{W})\mathbf{1} = 0$

いったんまとめ

問題（1）: 二分割

いろいろな二分割

$$V \to (V_1, V_2), V_1 \cup V_2 = V, V_1 \cap V_2 = \emptyset$$

のなかで、頂点クラス V_1 と V_2 を橋渡しする辺の数

$$\mathrm{cut}(V_1, V_2) := \sum_{i \in V_1} \sum_{j \in V_2} w_{ij}$$

が最も少ないものを選ぶ。

$$\Leftrightarrow$$

問題（2）: 二分割

$$\boldsymbol{f}^* := \arg \min_{\boldsymbol{f} \in \{1, -1\}^{|V|}} \boldsymbol{f}' \boldsymbol{L} \boldsymbol{f}$$

を求めて以下のルールで頂点集合を分割する。

$$(f_1^*, f_2^*, \ldots, f_{|V|}^*)' := \boldsymbol{f}^*$$
$$f_i^* = 1 \quad \Rightarrow \quad i \in V_1$$
$$f_i^* = -1 \quad \Rightarrow \quad i \in V_2$$

【問題点】

① 自明な分割 $V_1 = \{\}, V_2 = V$ が常に最適解を与える。

これ以外の解を探す必要がある。 $\boldsymbol{f} \neq \boldsymbol{1}$ かつ $\boldsymbol{f} \neq -\boldsymbol{1}$

② 解が複数ある場合がほとんど。

橋渡しの辺数（カット）が同じ場合、それ以外の基準で分割を選ぶ必要がある。

$\mathrm{cut}(V_1, V_2)$ が同じ値になる場合、(V_1, V_2) を他の基準で評価できるようにする。

バランスされた分割

$*$ $\mathrm{cut}(V_1, V_2)$ が同じ値になる場合、(V_1, V_2) を
他の基準で評価できるようにする。

各頂点 i に重み z_i が定義できる状況を考える。

$$\mathrm{z} := (z_1, z_2, \ldots, z_{|V|})' \qquad z_i > 0$$

ここで任意の頂点部分集合 $U \subset V$ を

$$Z(U) := \sum_{i \in U} z_i$$

で得点づけるとする。

このとき以下の基準は＊の一つの解決となる。

$$\mathrm{cut}_{\mathbf{z}}(V_1, V_2) := \frac{\mathrm{cut}(V_1, V_2)}{Z(V_1)} + \frac{\mathrm{cut}(V_1, V_2)}{Z(V_2)}$$

このやり方で対応できる基準

Ratio Cut (Hagen & Kahng, 1992) $z_i := 1$

$$\mathrm{cut}_{\mathbf{z}}(V_1, V_2) := \frac{\mathrm{cut}(V_1, V_2)}{|V_1|} + \frac{\mathrm{cut}(V_1, V_2)}{|V_2|}$$

Normalized Cut (Shi & Malik, 2000) $z_i := d_i$

$$\mathrm{cut}_{\mathbf{z}}(V_1, V_2) := \frac{\mathrm{cut}(V_1, V_2)}{\mathrm{cut}(V_1, V)} + \frac{\mathrm{cut}(V_1, V_2)}{\mathrm{cut}(V_2, V)}$$

このやり方で対応できない基準

Min-Max Cut (Ding et al., 2001)

$$\frac{\mathrm{cut}(V_1, V_2)}{\mathrm{cut}(V_1, V_1)} + \frac{\mathrm{cut}(V_1, V_2)}{\mathrm{cut}(V_2, V_2)}$$

Modularity (Newman & Girvan, 2004)

$$\left(\frac{\mathrm{cut}(V_1, V_1)}{\mathrm{cut}(V, V)} - \left(\frac{\mathrm{cut}(V_1, V)}{\mathrm{cut}(V, V)} \right)^2 \right) + \left(\frac{\mathrm{cut}(V_2, V_2)}{\mathrm{cut}(V, V)} - \left(\frac{\mathrm{cut}(V_2, V)}{\mathrm{cut}(V, V)} \right)^2 \right)$$

ただしこの基準は大きいほど良い

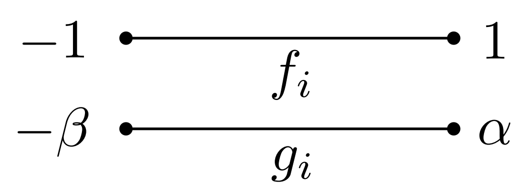
一般指示子

ここで次への準備として、先ほど1/-1で作った指示子をつぎのような一般指示子にした場合に何が起こるかを調べておく。

$$g_i := \begin{cases} \alpha & i \in V_1 \\ -\beta & i \in V_2 \end{cases}$$

これは $[-1,1] \to [-\beta, \alpha]$ と倍率と中心点をいじっただけなので f_i と一対一対応がとれる。

$$\frac{f_i + 1}{2} = \frac{g_i + \beta}{\alpha + \beta}$$



$$\iff \quad g_i = \frac{\alpha + \beta}{2} f_i + \frac{\alpha - \beta}{2}$$

ここで $\boldsymbol{g} := (g_1, g_2, \ldots, g_{|V|})'$ と置くと

$$\boldsymbol{g} = \frac{\alpha + \beta}{2} \boldsymbol{f} + \frac{\alpha - \beta}{2} \boldsymbol{1}$$

$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}'$ と $\boldsymbol{L1} = 0$ より

$$\boldsymbol{g}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{g} = \frac{(\alpha + \beta)^2}{4} \boldsymbol{f}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{f} = (\alpha + \beta)^2 \,\mathrm{cut}(V_1, V_2)$$

ここで重みをバランスさせるために全部足したらゼロになるように調節することにする。

$$\textstyle\sum_{i \in V} z_i g_i = \boldsymbol{z}'\boldsymbol{g} = 0$$

$$\iff \quad Z(V_1)\alpha - Z(V_2)\beta = 0$$

$\boldsymbol{Z} := \mathrm{diag}(\boldsymbol{z})$ とおくと、上記制約は

$$\boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{1} = 0 \quad \iff \quad \alpha = \frac{Z(V_2)}{Z(V_1)} \beta$$

例えば

$$g_i := \begin{cases} Z(V_2) & i \in V_1 \\ -Z(V_1) & i \in V_2 \end{cases} \quad や \quad g_i := \begin{cases} \sqrt{\frac{Z(V_2)}{Z(V_1)}} & i \in V_1 \\ -\sqrt{\frac{Z(V_1)}{Z(V_2)}} & i \in V_2 \end{cases}$$

一般指示子を用いた分割表現

$$\mathrm{cut}_{\mathbf{z}}(V_1,V_2) := \frac{\mathrm{cut}(V_1,V_2)}{Z(V_1)} + \frac{\mathrm{cut}(V_1,V_2)}{Z(V_2)} = \left(\frac{Z(V_1)+Z(V_2)}{Z(V_1)Z(V_2)}\right)\cdot \mathrm{cut}(V_1,V_2)$$

$$= \left(\frac{Z(V_1)+Z(V_2)}{Z(V_1)Z(V_2)} \cdot \frac{\big(Z(V_1)+Z(V_2)\big)\beta^2}{\big(Z(V_1)+Z(V_2)\big)\beta^2}\right)\cdot \mathrm{cut}(V_1,V_2)$$

$$= \left(\frac{\big(Z(V_1)\beta+Z(V_2)\beta\big)^2}{Z(V_1)^2 Z(V_2)\beta^2 + Z(V_2)^2 Z(V_1)\beta^2}\right)\cdot \mathrm{cut}(V_1,V_2)$$

$$= \left(\frac{Z(V_1)^2\cdot\big(\beta+\frac{Z(V_2)}{Z(V_1)}\beta\big)^2}{Z(V_1)^2\cdot\Big(Z(V_2)\beta^2 + Z(V_1)\left(\frac{Z(V_2)}{Z(V_1)}\beta\right)^2\Big)}\right)\cdot \mathrm{cut}(V_1,V_2)$$

$\boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{1} = 0$ を仮定する

$$= \left(\frac{(\alpha+\beta)^2}{Z(V_1)\alpha^2 + Z(V_2)\beta^2}\right)\cdot \mathrm{cut}(V_1,V_2)$$

$$\boldsymbol{g}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{g} = (\alpha+\beta)^2\,\mathrm{cut}(V_1.V_2)$$

$$\boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{g} = \sum_{i\in V} z_i g_i^2 = Z(V_1)\alpha^2 + Z(V_2)\beta^2$$

$$= \frac{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{g}}{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{g}}$$

ただし $\boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{1} = 0$ のとき

組合せ最適化問題の実緩和

結局、バランスされた分割を求める問題は以下のように同値変形できた。

$$\min_{V_1, V_2 \subset V} \left\{ \frac{\mathrm{cut}(V_1, V_2)}{Z(V_1)} + \frac{\mathrm{cut}(V_1, V_2)}{Z(V_2)} \,\middle|\, V_1 \cup V_2 = V, V_1 \cap V_2 = \emptyset \right\}$$

$$\iff \quad \min_{\boldsymbol{g} \in \{\alpha, -\beta\}^{|V|}} \left\{ \frac{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{g}}{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{g}} \,\middle|\, \boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{1} = 0 \right\}$$

この組合せ探索問題は解が有限なので全探索すれば解けるが問題が大きくなると現実的に解けない。(NP困難)

【トリック】 そこで、離散指示子を連続値でも良いことにして以下の問題にすり替える。

$$\boldsymbol{g}^* := \arg\min_{\boldsymbol{g} \neq \boldsymbol{0}} \left\{ \frac{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{g}}{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{g}} \,\middle|\, \boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{1} = 0 \right\}$$

緩和解からの指示子再生（連続緩和解の離散化）

【まとめ】

$$\boldsymbol{g}^* := \arg\min_{\boldsymbol{g}\neq\boldsymbol{0}} \left\{ \frac{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{g}}{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{g}} \,\middle|\, \boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{1} = 0 \right\} \Longleftrightarrow$$

固有値問題 $\boldsymbol{Z}^{-1}\boldsymbol{L}\boldsymbol{g} = \lambda\boldsymbol{g}$ の固有値を $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_{|V|}$
（一般固有値問題 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{g} = \lambda\boldsymbol{Z}\boldsymbol{g}$）
とすると λ_2 に対応する固有ベクトルが $\boldsymbol{g}^*$

もともとは $g_i := \begin{cases} \alpha & i \in V_1 \\ -\beta & i \in V_2 \end{cases}$ だったので値が割りあたれば分割 (V_1, V_2) は自明だったのだが、

連続緩和によって、解が二値でなくなったので単純には割当はできないし、$[-\beta, \alpha]$ の値をとるとも限らない。

【ヒューリスティクス】

$(g_1^*, \ldots, g_{|V|}^*)' := \boldsymbol{g}^*$ とすると g_i^* が相対的に大きいと $i \in V_1$ で小さいと $i \in V_2$

$g_1^*, g_2^*, \ldots, g_{|V|}^*$ を整列し $g_{i_1}^* \leq g_{i_2}^* \leq \cdots \leq g_{i_{|V|}}^*$ とする。

【ナイーブ分割】

$$\begin{cases} i \in V_1 & g_i^* \geq 0 \\ i \in V_2 & g_i^* < 0 \end{cases}$$

【メジアン分割】

$$\begin{cases} i \in V_1 & g_i^* \geq \mathrm{median}(g_1^*, \ldots, g_{|V|}^*) \\ i \in V_2 & g_i^* < \mathrm{median}(g_1^*, \ldots, g_{|V|}^*) \end{cases}$$

【線形スイープ】

$V_1 = \{i_1, i_2, \ldots, i_k\}, V_2 = \{i_{k+1}, i_{k+2}, \ldots, i_{|V|}\}$
$k = 1, 2, \ldots, |V| - 1$ の分割を全て調べ $\mathrm{cut}_z(V_1, V_2)$ が最小のもの

実緩和問題と固有値問題

$$\boldsymbol{g}^* := \arg\min_{\boldsymbol{g}\neq\boldsymbol{0}} \left\{ \frac{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{g}}{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{g}} \,\middle|\, \boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{1} = 0 \right\}$$

$$\iff \begin{cases} \boldsymbol{h}^* := \arg\min_{\boldsymbol{h}\neq\boldsymbol{0}} \left\{ \dfrac{\boldsymbol{h}'\boldsymbol{Z}^{-1/2}\boldsymbol{L}\boldsymbol{Z}^{-1/2}\boldsymbol{h}}{\boldsymbol{h}'\boldsymbol{h}} \,\middle|\, \boldsymbol{h} \perp \boldsymbol{Z}^{1/2}\boldsymbol{1} \right\} \\ \boldsymbol{g}^* = \boldsymbol{Z}^{-1/2}\boldsymbol{h}^* \end{cases}$$

$$\boldsymbol{Z}^{1/2} = \mathrm{diag}((\sqrt{z_1}, \ldots, \sqrt{z_{|V|}})')$$
$$\boldsymbol{Z}^{-1/2} = \mathrm{diag}((1/\sqrt{z_1}, \ldots, 1/\sqrt{z_{|V|}})')$$
$$\boldsymbol{h} := \boldsymbol{Z}^{1/2}\boldsymbol{g}$$

$\tilde{\boldsymbol{L}} := \boldsymbol{Z}^{-1/2}\boldsymbol{L}\boldsymbol{Z}^{-1/2}$ と置くと

① $\tilde{\boldsymbol{L}}(\boldsymbol{Z}^{1/2}\boldsymbol{1}) = 0$ より $\tilde{\boldsymbol{L}}$ は固有値 0 を持ちその固有ベクトルは $\boldsymbol{Z}^{1/2}\boldsymbol{1}$ である。

② $\forall \boldsymbol{y}\ \boldsymbol{y}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{y} \geq 0$ より $\boldsymbol{x}'\tilde{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{Z}^{-1/2}\boldsymbol{x})'\boldsymbol{L}(\boldsymbol{Z}^{-1/2}\boldsymbol{x}) \geq 0$（正定値）

①と②より上の問題は最小固有値　の固有ベクトルと直交する空間でRayleigh商 $\dfrac{\boldsymbol{h}'\tilde{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{h}}{\boldsymbol{h}'\boldsymbol{h}}$ を最小化する問題となる。

従ってRayleigh-Ritz定理より、$\tilde{\boldsymbol{L}}$ の小さいほうから２番目の固有値に対応する固有ベクトルが $\boldsymbol{h}^*$ となる。

Fielder valueなどと言う　　Fielder vectorなどと言う

まず $\boldsymbol{h}^*$ を求めるために固有値問題 $\tilde{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{h} = \lambda\boldsymbol{h}$ を解く。しかし、同じ λ に関する以下の同値変形

$$\tilde{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{h} = \lambda\boldsymbol{h} \iff \boldsymbol{Z}^{-1/2}\boldsymbol{L}\boldsymbol{Z}^{-1/2}\boldsymbol{h} = \lambda\boldsymbol{h} \iff \boldsymbol{Z}^{-1/2}\boldsymbol{L}\boldsymbol{g} = \lambda\boldsymbol{Z}^{1/2}\boldsymbol{g}$$

より、固有ベクトルにも一対一対応がつくので $\boldsymbol{g}^* = \boldsymbol{Z}^{-1/2}\boldsymbol{h}^*$ で答えを求めなくても $\boldsymbol{g}^*$ は以下を解けば求められる。

固有値問題　$\boldsymbol{Z}^{-1}\boldsymbol{L}\boldsymbol{g} = \lambda\boldsymbol{g}$　　または　　一般固有値問題　$\boldsymbol{L}\boldsymbol{g} = \lambda\boldsymbol{Z}\boldsymbol{g}$

二分割のまとめ

$$\min_{V_1,V_2\subset V}\left\{\frac{\mathrm{cut}(V_1,V_2)}{Z(V_1)}+\frac{\mathrm{cut}(V_1,V_2)}{Z(V_2)}\;\middle|\; V_1\cup V_2=V, V_1\cap V_2=\emptyset\right\}$$

$$\Longleftrightarrow \min_{\boldsymbol{g}\in\{\alpha,-\beta\}^{|V|}}\left\{\frac{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{g}}{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{g}}\;\middle|\;\boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{1}=0\right\} \xRightarrow{\text{連続値緩和}} \boldsymbol{g}^* := \arg\min_{\boldsymbol{g}\neq\boldsymbol{0}}\left\{\frac{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{g}}{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{g}}\;\middle|\;\boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{1}=0\right\}$$

$$\Updownarrow$$

固有値問題 $\boldsymbol{Z}^{-1}\boldsymbol{L}\boldsymbol{g}=\lambda\boldsymbol{g}$ の固有値を $\lambda_1\leq\lambda_2\leq\cdots\leq\lambda_{|V|}$
(一般固有値問題 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{g}=\lambda\boldsymbol{Z}\boldsymbol{g}$)
とすると λ_2 に対応する固有ベクトルが $\boldsymbol{g}^*$

$\Longleftarrow$ 離散化

メジアン分割や線形スイープなどで
分割 (V_1,V_2) を求める。

Ratio Cut (Hagen & Kahng, 1992)

$$z_i := 1 \Longleftrightarrow \boldsymbol{Z}=\boldsymbol{I}$$

最小化基準

$$\mathrm{cut}_{\mathbf{z}}(V_1,V_2) := \frac{\mathrm{cut}(V_1,V_2)}{|V_1|}+\frac{\mathrm{cut}(V_1,V_2)}{|V_2|}$$

緩和問題

$$\min_{\boldsymbol{g}\neq\boldsymbol{0}}\left\{\frac{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{g}}{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{g}}\;\middle|\;\boldsymbol{g}\perp\boldsymbol{1}\right\}$$

固有値問題

$$\boldsymbol{L}\boldsymbol{g}=\lambda\boldsymbol{g}$$

Normalized Cut (Shi & Malik, 2000)

$$z_i := d_i \Longleftrightarrow \boldsymbol{Z}=\boldsymbol{D}$$

最小化基準

$$\mathrm{cut}_{\mathbf{z}}(V_1,V_2) := \frac{\mathrm{cut}(V_1,V_2)}{\mathrm{cut}(V_1,V)}+\frac{\mathrm{cut}(V_1,V_2)}{\mathrm{cut}(V_2,V)}$$

緩和問題

$$\min_{\boldsymbol{g}\neq\boldsymbol{0}}\left\{\frac{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{g}}{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{D}\boldsymbol{g}}\;\middle|\;\boldsymbol{g}\perp\boldsymbol{D}\boldsymbol{1}\right\}$$

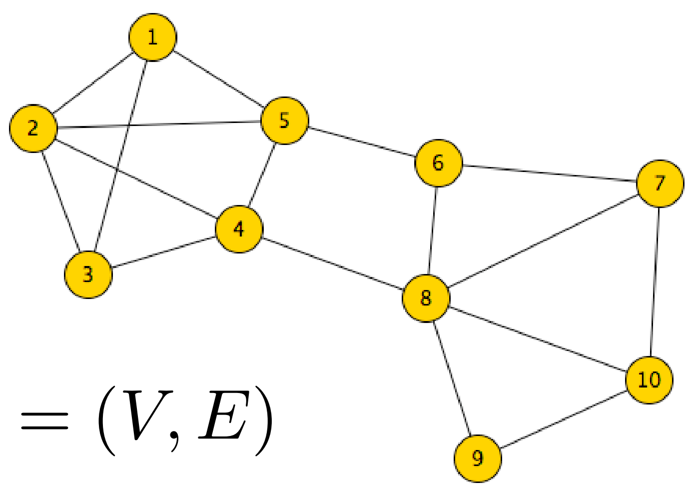
固有値問題

$$\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{L}\boldsymbol{g}=\lambda\boldsymbol{g}$$

例１）Ratio Cutで二分割

$V = \{1, 2, 3, \cdots, 10\}$

$E = \{(1,2), (1,3), (2,3), \cdots, (9,10)\}$



$G = (V, E)$

【手順】

① ラプラシアンを計算

$$\boldsymbol{L} := \boldsymbol{D} - \boldsymbol{W}$$

② その固有値・固有ベクトルを計算

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_{|V|}$$

$$\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_{|V|}$$

③ $\boldsymbol{v}_{|V|-1}$ の要素を離散化

メジアン分割や線形スイープ

Rによる実例

```
> W=rbind(
+ c(0,1,1,0,1,0,0,0,0,0),c(1,0,1,1,1,0,0,0,0,0),
+ c(1,1,0,1,0,0,0,0,0,0),c(0,1,1,0,1,0,0,1,0,0),
+ c(1,1,0,1,0,1,0,0,0,0),c(0,0,0,0,1,0,1,1,0,0),
+ c(0,0,0,0,0,1,0,1,0,1),c(0,0,0,1,0,1,1,0,1,1),
+ c(0,0,0,0,0,0,0,1,0,1),c(0,0,0,0,0,0,1,1,1,0))
> D=diag(apply(W,2,sum))
> L=D-W
> g=eigen(L)
> round(matrix(g$values,1),2)
     [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6] [,7] [,8] [,9] [,10]
[1,] 6.57 5.42    5 4.52 3.79 3.31    3 1.87 0.53     0
```

←ラプラシアン行列の固有値・固有ベクトルを計算

λ_1 λ_2 λ_3 λ_4 λ_5 λ_6 λ_7 λ_8 $\boxed{\lambda_9}$ $\boxed{\lambda_{10}}$

↑ Rでは固有値で降順ソートされている　　最小固有値はゼロ。二番目が求める解

```
> idx=g$vectors[,(length(g$values)+1)-2]
> round(matrix(idx,1),2)
     [,1] [,2] [,3] [,4] [,5]  [,6]  [,7]  [,8]  [,9] [,10]
[1,] 0.38 0.34 0.37  0.2 0.23 -0.13 -0.31 -0.24 -0.43  -0.4
```

←λ_9の固有ベクトル

メジアン分割

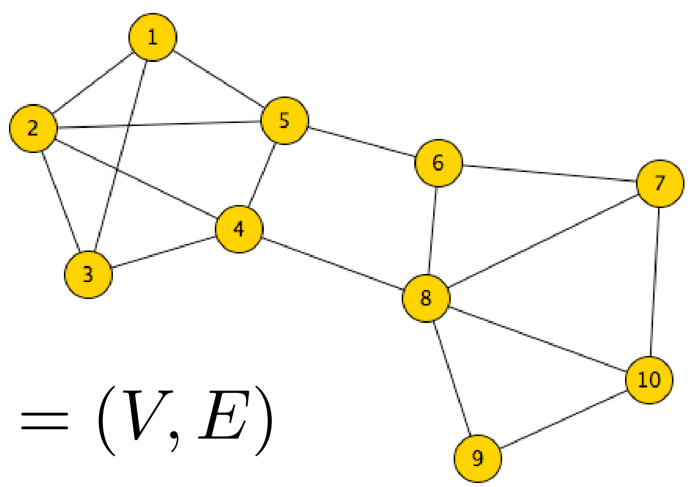
```
> (1:length(idx))[idx>median(idx)]
[1] 1 2 3 4 5
> (1:length(idx))[idx<=median(idx)]
[1]  6  7  8  9 10
```

→分割 ({1,2,3,4,5} , {6,7,8,9,10}) が得られる

例２）Normalized Cutで二分割

$V = \{1, 2, 3, \cdots, 10\}$

$E = \{(1,2), (1,3), (2,3), \cdots, (9,10)\}$



$G = (V, E)$

【手順】

① ラプラシアンを計算

$$\boldsymbol{L} := \boldsymbol{D} - \boldsymbol{W}$$

② $\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{L}$ の固有値・固有ベクトルを計算

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_{|V|}$$

$$\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_{|V|}$$

③ $\boldsymbol{v}_{|V|-1}$ の要素を離散化

メジアン分割や線形スイープ

Rによる実例

```
> W=rbind(
+ c(0,1,1,0,1,0,0,0,0,0),c(1,0,1,1,1,0,0,0,0,0),
+ c(1,1,0,1,0,0,0,0,0,0),c(0,1,1,0,1,0,0,1,0,0),
+ c(1,1,0,1,0,1,0,0,0,0),c(0,0,0,0,1,0,1,1,0,0),
+ c(0,0,0,0,0,1,0,1,0,1),c(0,0,0,1,0,1,1,0,1,1),
+ c(0,0,0,0,0,0,0,1,0,1),c(0,0,0,0,0,0,1,1,1,0))
> D=diag(apply(W,2,sum))
> L=D-W
> g=eigen(diag(1/apply(W,2,sum)) %*% L)
> round(matrix(g$values,1),2)
     [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6] [,7] [,8] [,9] [,10]
[1,] 1.69 1.59 1.37 1.34  1.2    1 0.94 0.69 0.17     0
```

$\lambda_1 \quad \lambda_2 \quad \lambda_3 \quad \lambda_4 \quad \lambda_5 \quad \lambda_6 \quad \lambda_7 \quad \lambda_8 \quad \lambda_9 \quad \lambda_{10}$

← $\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{L}$ の固有値・固有ベクトルを計算

↑ Rでは固有値で降順ソートされている　　最小固有値はゼロ。二番目が求める解

```
> idx=g$vectors[,(length(g$values)+1)-2]
> round(matrix(idx,1),2)
     [,1] [,2] [,3] [,4] [,5]  [,6]  [,7]  [,8]  [,9] [,10]
[1,] 0.35 0.33 0.35 0.18 0.21 -0.16 -0.34 -0.28 -0.42 -0.42
```

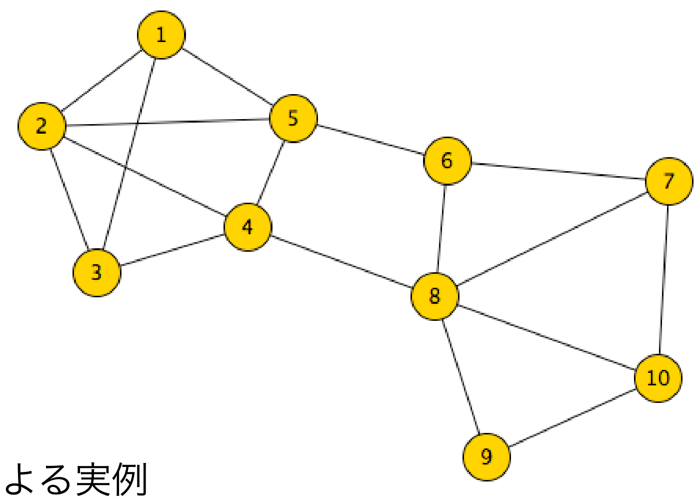
←λ_9の固有ベクトル

メジアン分割

```
> (1:length(idx))[idx>median(idx)]
[1] 1 2 3 4 5
> (1:length(idx))[idx<=median(idx)]
[1]  6  7  8  9 10
```

→分割 ({1,2,3,4,5} , {6,7,8,9,10}) が得られる

例３）線形スイープ



$$G = (V, E)$$

$$V = \{1, 2, 3, \cdots, 10\}$$

$$E = \{(1,2), (1,3), (2,3), \cdots, (9,10)\}$$

データ定義

```
W=rbind(
c(0,1,1,0,1,0,0,0,0,0),c(1,0,1,1,1,0,0,0,0,0),
c(1,1,0,1,0,0,0,0,0,0),c(0,1,1,0,1,0,0,1,0,0),
c(1,1,0,1,0,1,0,0,0,0),c(0,0,0,0,1,0,1,1,0,0),
c(0,0,0,0,0,1,0,1,0,1),c(0,0,0,1,0,1,1,0,1,1),
c(0,0,0,0,0,0,0,1,0,1),c(0,0,0,0,0,0,1,1,1,0))
D=diag(apply(W,2,sum))
L=D-W
```

Rによる実例

```
cut = function(v1,v2,W){
    D=diag(apply(W,2,sum))
    L=D-W
    g = numeric(length(c(v1,v2)))
    g[v1] = 1
    g[v2] = -1
    return(as.numeric((t(g) %*% L %*% g)/4))
}

zcut = function(v1,v2,W,z){
    D=diag(apply(W,2,sum))
    L=D-W
    g = numeric(length(c(v1,v2)))
    g[v1] = sum(z[v2])
    g[v2] = -sum(z[v1])
    return(as.numeric((t(g) %*% L %*% g)/(t(g) %*% g)))
}

rcut = function(v1,v2,W) zcut(v1,v2,W,rep(1,length(c(v1,v2))))
ncut = function(v1,v2,W) zcut(v1,v2,W,apply(W,2,sum))
```

橋渡しの辺数（カット）は上記で計算できる。

```
> cut(c(1,2,3,4,5),c(6,7,8,9,10),W)
[1] 2
> cut(c(1,2,3),c(4,5,6,7,8,9,10),W)
[1] 4
```

←Ratio Cut

```
> g=eigen(L)
> idx=g$vectors[,(length(g$values)+1)-2]
> lorder=order(idx)
> for(k in 1:(length(lorder)-1)){
+  cat("{",lorder[1:k],"}, {",lorder[(k+1):length(lorder)],"} => ",
+      rcut(lorder[1:k],lorder[(k+1):length(lorder)],W),"\n")
+ }
{ 9 }, { 10 7 8 6 4 5 2 3 1 } =>  2.222222
{ 9 10 }, { 7 8 6 4 5 2 3 1 } =>  1.875
{ 9 10 7 }, { 8 6 4 5 2 3 1 } =>  1.904762
{ 9 10 7 8 }, { 6 4 5 2 3 1 } =>  1.25
{ 9 10 7 8 6 }, { 4 5 2 3 1 } =>  0.8
{ 9 10 7 8 6 4 }, { 5 2 3 1 } =>  1.666667
{ 9 10 7 8 6 4 5 }, { 2 3 1 } =>  1.904762
{ 9 10 7 8 6 4 5 2 }, { 3 1 } =>  2.5
{ 9 10 7 8 6 4 5 2 3 }, { 1 } =>  3.333333
>
```

←最小の分割

←Normalized Cut

```
> g=eigen(diag(1/apply(W,2,sum)) %*% L)
> idx=g$vectors[,(length(g$values)+1)-2]
> lorder=order(idx)
> for(k in 1:(length(lorder)-1)){
+  cat("{",lorder[1:k],"}, {",lorder[(k+1):length(lorder)],"} => ",
+      ncut(lorder[1:k],lorder[(k+1):length(lorder)],W),"\n")
+ }
{ 9 }, { 10 7 8 6 4 5 2 3 1 } =>  2.181132
{ 9 10 }, { 7 8 6 4 5 2 3 1 } =>  1.842721
{ 9 10 7 }, { 8 6 4 5 2 3 1 } =>  1.867528
{ 9 10 7 8 }, { 6 4 5 2 3 1 } =>  1.248380
{ 9 10 7 8 6 }, { 4 5 2 3 1 } =>  0.7972414
{ 9 10 7 8 6 4 }, { 5 2 3 1 } =>  1.665706
{ 9 10 7 8 6 4 5 }, { 2 3 1 } =>  1.904448
{ 9 10 7 8 6 4 5 2 }, { 3 1 } =>  2.491379
{ 9 10 7 8 6 4 5 2 3 }, { 1 } =>  3.328215
```

←最小の分割

例３）色々な同値性の乱数検算

① $$\sum_{i\in V_1}\sum_{j\in V_2} w_{ij} = \frac{1}{8}\sum_{i\in V}\sum_{j\in V} w_{ij}(f_i - f_j)^2 = \frac{1}{4}\boldsymbol{f}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{f}$$

```
check1 = function(v1,v2,W){
    D=diag(apply(W,2,sum))
    L=D-W
    v=c(v1,v2)
    cat("v1={",v1,"}, v2={",v2,"}\n")
    s1=0; for(i in v1) for(j in v2) s1 = s1+W[i,j]
    cat("sum_v1 sum_v2 w_ij=",s1,"\n")
    f = numeric(length(c(v1,v2)))
    f[v1] = 1
    f[v2] = -1
    s2=0; for(i in v) for(j in v) s2 = s2+W[i,j]*(f[i]-f[j])^2
    cat("(sum_v sum_v w_ij(f_i-f_j)^2)/8=",s2/8,"\n")
    s3= as.numeric(t(f) %*% L %*% f)
    cat("f'Lf/4=",s3/4,"\n")
    cat("cut(v1,v2)=",cut(v1,v2,W),"\n")
}
```

② $$\boldsymbol{g}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{g} = \frac{(\alpha+\beta)^2}{4}\boldsymbol{f}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{f} = (\alpha+\beta)^2\,\mathrm{cut}(V_1, V_2)$$

```
check2 = function(v1,v2,W,a,b){
    D=diag(apply(W,2,sum))
    L=D-W
    f = numeric(length(c(v1,v2)))
    f[v1] = 1
    f[v2] = -1
    g = numeric(length(c(v1,v2)))
    g[v1] = a
    g[v2] = -b
    s1 = as.numeric(t(g) %*% L %*% g)
    cat("g'Lg=",s1,"\n")
    s2 = as.numeric(t(f) %*% L %*% f)
    cat("(a+b)^2 f'Lf/4=",(a+b)^2*s2/4,"\n")
    cat("(a+b)^2 cut(v1,v2)=",(a+b)^2*cut(v1,v2,W),"\n")
}
```

③ $$\frac{\mathrm{cut}(V_1)}{Z(V_1)} + \frac{\mathrm{cut}(V_2)}{Z(V_2)} = \frac{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{g}}{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{g}}$$ （ただし $\boldsymbol{g}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{1} = 0$ のとき）

```
check3 = function(v1,v2,W,a,b,z){
    D=diag(apply(W,2,sum))
    L=D-W
    g = numeric(length(c(v1,v2)))
    g[v1] = a
    g[v2] = -b
    Z = diag(z)
    cnd = as.numeric(t(g) %*% Z %*% rep(1,length(c(v1,v2))))
    cat("condition: g'Z1=",cnd,"\n")
    s1 = (cut(v1,v2,W)/sum(z[v1]))+(cut(v1,v2,W)/sum(z[v2]))
    cat("cut(v1,v2)/z_1+cut(v1,v2)/z_2=",s1,"\n")
    s2 = as.numeric(t(g) %*% L %*% g)/as.numeric(t(g) %*% Z %*% g)
    cat("g'Lg/g'Zg=",s2,"\n")
}
```

【検算結果】

```
> check1(v1,v2,W)
v1={ 9 4 8 5 3 1 }, v2={ 2 6 7 10 }
sum_v1 sum_v2 w_ij= 9
(sum_v sum_v w_ij(f_i-f_j)^2)/8= 9
f'Lf/4= 9
cut(v1,v2)= 9
```
} 同値 ①

```
> check2(v1,v2,W,13,45)
g'Lg= 30276
(a+b)^2 f'Lf/4= 30276
(a+b)^2 cut(v1,v2)= 30276
```
} 同値 ②

```
> check2(v1,v2,W,221,-108)
g'Lg= 114921
(a+b)^2 f'Lf/4= 114921
(a+b)^2 cut(v1,v2)= 114921
```
} 同値 ②（ $\forall \alpha, \beta$ ）

```
> check3(v1,v2,W,1,1,rep(1,10))
condition: g'Z1= 2
cut(v1,v2)/z_1+cut(v1,v2)/z_2= 3.75
g'Lg/g'Zg= 3.6
```
} 条件を満たさないので不一致

```
> check3(v1,v2,W,length(v2),length(v1),rep(1,10))
condition: g'Z1= 0
cut(v1,v2)/z_1+cut(v1,v2)/z_2= 3.75
g'Lg/g'Zg= 3.75
```
} 同値 ③

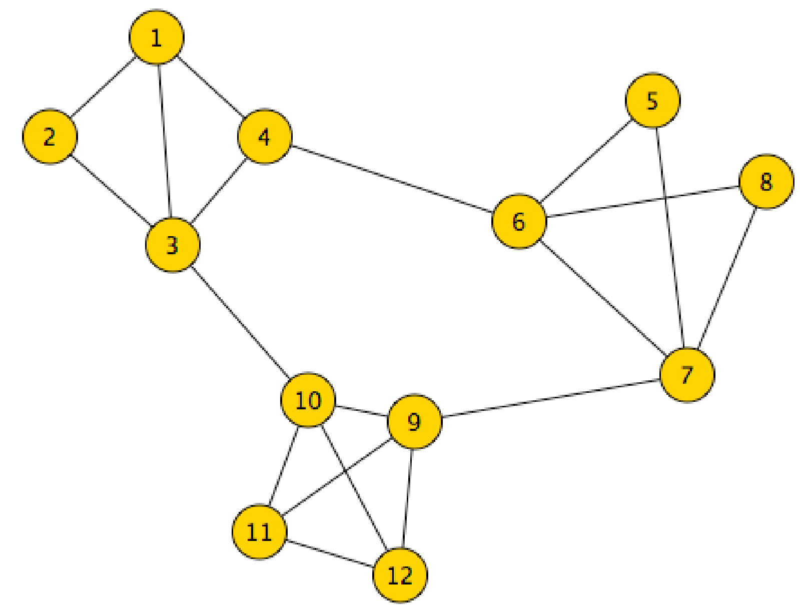
計算機誤差→

```
> check3(v1,v2,W,length(v2)/length(v1),1,rep(1,10))
condition: g'Z1= -2.220446e-16
cut(v1,v2)/z_1+cut(v1,v2)/z_2= 3.75
g'Lg/g'Zg= 3.75
```
} 同値 ④

多分割を考える

以上は与えられたグラフを二分割する問題であった。

でも、時にはk等分したい場合があるのでは…



Ratio Cutによる緩和解

	[,1]	[,2]	[,3]	[,4]	[,5]	[,6]	[,7]	[,8]	[,9]	[,10]	[,11]	[,12]
[1,]	0.39	0.48	0.32	0.18	-0.39	-0.26	-0.32	-0.39	-0.07	0.07	0	0

メジアン分割　({1,2,3,4,10,11},{5,6,7,8,9,12})

線形探索順序　{8,5,7,6,9,12,11,10,4,3,1,2}

線形スイープ

```
{ 8 }, { 5 7 6 9 12 11 10 4 3 1 2 } =>  2.181818
{ 8 5 }, { 7 6 9 12 11 10 4 3 1 2 } =>  2.4
{ 8 5 7 }, { 6 9 12 11 10 4 3 1 2 } =>  1.777778
{ 8 5 7 6 }, { 9 12 11 10 4 3 1 2 } =>  0.75       ←最小の分割
{ 8 5 7 6 9 }, { 12 11 10 4 3 1 2 } =>  1.371429
{ 8 5 7 6 9 12 }, { 11 10 4 3 1 2 } =>  1.666667
{ 8 5 7 6 9 12 11 }, { 10 4 3 1 2 } =>  1.371429
{ 8 5 7 6 9 12 11 10 }, { 4 3 1 2 } =>  0.75       ←最小の分割
{ 8 5 7 6 9 12 11 10 4 }, { 3 1 2 } =>  1.333333
{ 8 5 7 6 9 12 11 10 4 3 }, { 1 2 } =>  1.8
{ 8 5 7 6 9 12 11 10 4 3 1 }, { 2 } =>  2.181818
```

Normallized Cutによる緩和解

	[,1]	[,2]	[,3]	[,4]	[,5]	[,6]	[,7]	[,8]	[,9]	[,10]	[,11]	[,12]
[1,]	-0.29	-0.27	-0.16	-0.28	-0.21	-0.25	-0.11	-0.21	0.32	0.31	0.43	0.43

メジアン分割　({3,7,9,10,11,12},{1,2,4,5,6,8})

線形探索順序　{1,4,2,6,8,5,3,7,10,9,11,12}

線形スイープ

```
{ 1 }, { 4 2 6 8 5 3 7 10 9 11 12 } =>  3.271903
{ 1 4 }, { 2 6 8 5 3 7 10 9 11 12 } =>  2.398671
{ 1 4 2 }, { 6 8 5 3 7 10 9 11 12 } =>  1.763126
{ 1 4 2 6 }, { 8 5 3 7 10 9 11 12 } =>  2.246888
{ 1 4 2 6 8 }, { 5 3 7 10 9 11 12 } =>  2.037629
{ 1 4 2 6 8 5 }, { 3 7 10 9 11 12 } =>  1.951351
{ 1 4 2 6 8 5 3 }, { 7 10 9 11 12 } =>  1.353327
{ 1 4 2 6 8 5 3 7 }, { 10 9 11 12 } =>  0.7458678   ←最小の分割
{ 1 4 2 6 8 5 3 7 10 }, { 9 11 12 } =>  1.776138
{ 1 4 2 6 8 5 3 7 10 9 }, { 11 12 } =>  2.398671
{ 1 4 2 6 8 5 3 7 10 9 11 }, { 12 } =>  3.271903
```

多分割のための評価基準

ここで一般に V のある部分集合 A を定義するための次の指示子を考える。

$$\psi_j := \begin{cases} 1 & i \in A \subset V \\ 0 & i \in V \setminus A \end{cases}$$

←A以外のVの要素

$V_1 := A, V_2 := V \setminus A$ と置けば一般指示子

$$g_i := \begin{cases} \alpha & i \in V_1 \\ -\beta & i \in V_2 \end{cases}$$

で $\alpha = 1, \beta = 0$ とした場合に相当するから、

$$\boldsymbol{g}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{g} = \frac{(\alpha+\beta)^2}{4}\boldsymbol{f}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{f} = (\alpha+\beta)^2 \operatorname{cut}(V_1, V_2)$$

より、$\boldsymbol{\psi} := (\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_{|V|})'$ に対して

$$\boldsymbol{\psi}'\boldsymbol{L}\boldsymbol{\psi} = \operatorname{cut}(A, V \setminus A)$$

また

$$\boldsymbol{\psi}'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{\psi} = 1^2 \cdot \sum_{i \in A} z_i = Z(A)$$

二分割の場合の基準

$$\operatorname{cut}_{\mathbf{z}}(V_1, V_2) := \frac{\operatorname{cut}(V_1, V_2)}{Z(V_1)} + \frac{\operatorname{cut}(V_1, V_2)}{Z(V_2)}$$

の自然な多分割への拡張として

$$\operatorname{cut}_{\mathbf{z}}(V_1, V_2, \cdots, V_k) := \sum_{i=1}^{k} \frac{\operatorname{cut}(V_i, V \setminus V_i)}{Z(V_i)}$$

を考える。

このとき $V_1, \ldots, V_k$ の定義に $\boldsymbol{\psi}_1, \ldots, \boldsymbol{\psi}_k$ をそれぞれ用いると

$$\operatorname{cut}_{\mathbf{z}}(V_1, V_2, \ldots, V_k) = \sum_{i=1}^{k} \frac{\boldsymbol{\psi}_i'\boldsymbol{L}\boldsymbol{\psi}_i}{\boldsymbol{\psi}_i'\boldsymbol{Z}\boldsymbol{\psi}_i}$$

が成り立つ。