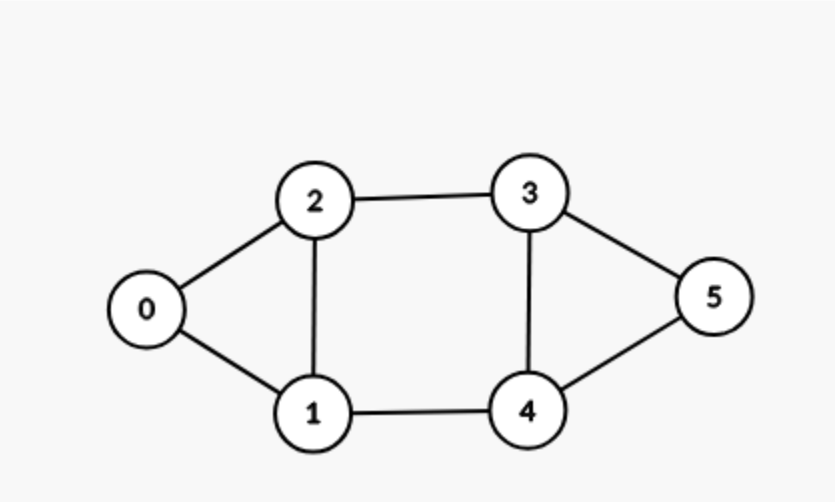
Czym jest spectral clustering?

Spectral clustering to algorytm dzielenia danych (np. wierzchołków grafu) na grupy (klastry) za pomocą analizy spektralnej macierzy.

- Działa na podstawie struktury grafu.
- Używa **macierzy Laplace’a** i jej **wektorów własnych**, aby znaleźć naturalne podziały.

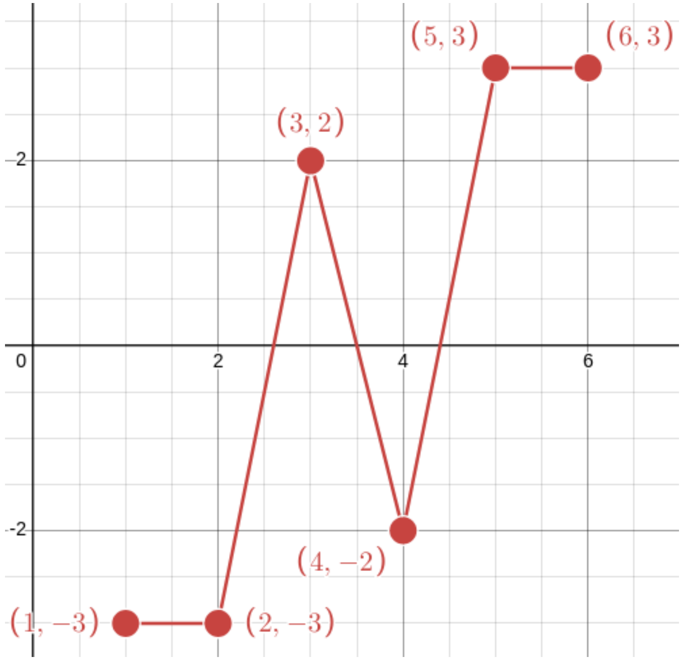
Wszystkie przykłady będą pokazywane na podstawie tego grafu:



Dlaczego spectral clustering działa?

Spectral clustering używa macierzy Laplace'a aby pokazać różnicę pomiędzy sąsiadującymi wierzchołkami. Jest to bardzo podobne do działania operatora Laplace'a.

Wartość połączeń z sąsiadami w macierzy Laplace'a dla każdego wierzchołka:



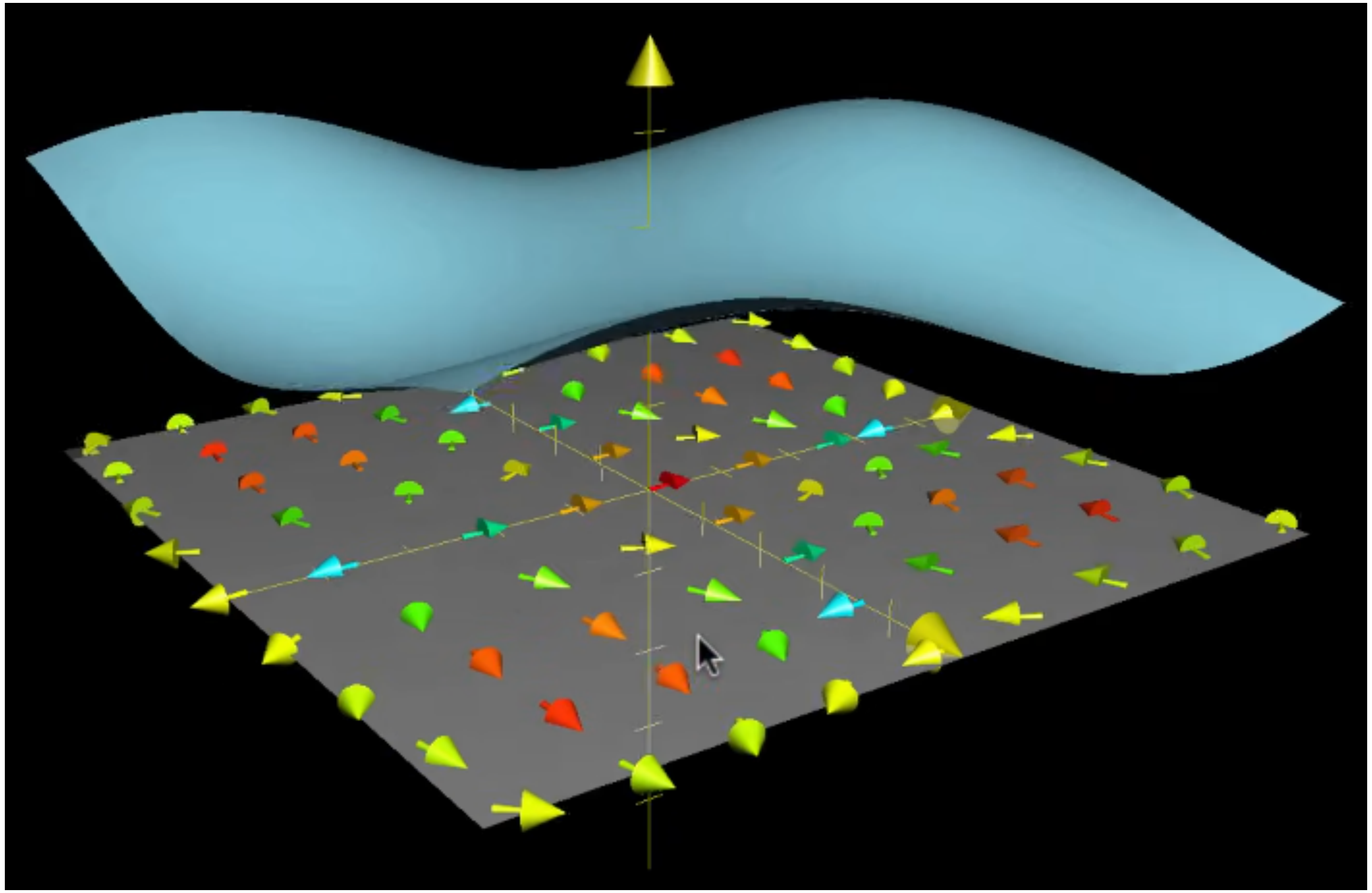
Tutaj widzimy że najlepiej jest podzielić graf pomiędzy wierzchołkami 3 i 4 czyli wierzchołki (1, 2, 3) to klaster 1 a (4, 5, 6) to klaster 2.

Policzone ze wzoru: Lx

Gdzie L to macierz Laplace'a a x to wektor z wierzchołkami np.:

$$x = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \end{pmatrix}$$

Operator Laplace'a na funkcji ciągłej:



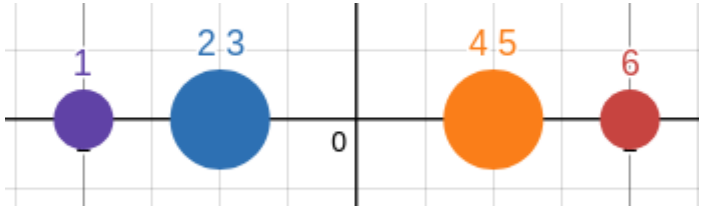
Podobieństwa

Macierz Laplace'a i jej wektory własne są bardzo podobne do tego jak przy całkowaniu możemy przejść z współrzędnych kartezjańskich na biegunowe. Po przejściu na spektrum macierzy (przestrzeń wektorów własnych) łatwiej jest nam podzielić graf na klastry ponieważ wierzchołki dobrze połączone są blisko siebie w przestrzeni wektorowej.

dla najmniejszego nie zerowego wektora (Fiedlera):

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} -2 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Przedstawienie wierzchołków grafu w przestrzeni wektora własnego:



Działanie krok po kroku

1. macierz sąsiedztwa

Macierz sąsiedztwa do podanego grafu wygląda tak:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Macierz sąsiedztwa musi być symetryczna ponieważ w innym przypdaku wektory własne macierzy Laplace'a nie były by orthagonalne (czyli nie były by pod kątem

2. Macierz Laplace'a

Macierz Laplace'a jest liczona następującym wzorem:

$$L = D - A$$

gdzie D jest macierzą diagonalną (Macierz stopniowa):

$$D_{ii} = \sum_{j=0}^{i-1} A_{ij} + \sum_{j=i+1}^{n} A_{ij}$$

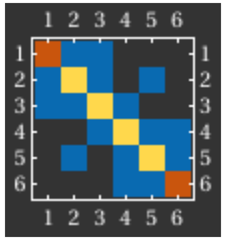
Dla naszego przykładu D ma wartość:

$$D = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Czyli L jest równe:

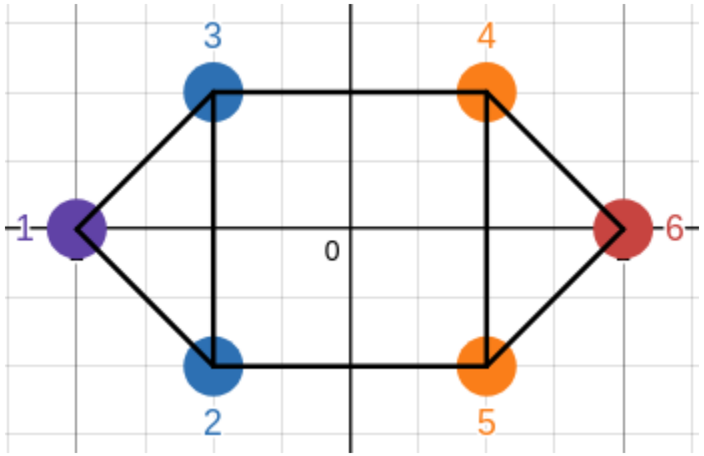
$$L = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 3 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

Tutaj znowu od razu widać jak najlepiej podzielić graf na dwie części.

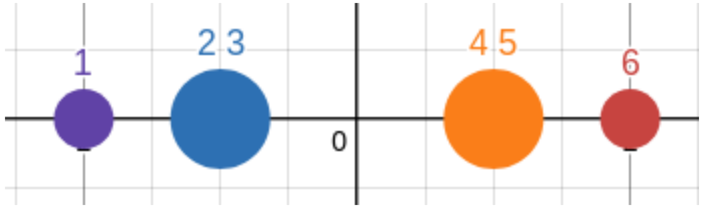


3. Liczenie wektora własnego

Do policzenia wektora własnego używamy metody **Inverse Power Iteration**, następnie do każdego wierzchołka przypisujemy jego odpowiadającą wartość w wektorze własnym.



Po przejściu na spektrum macierzy:



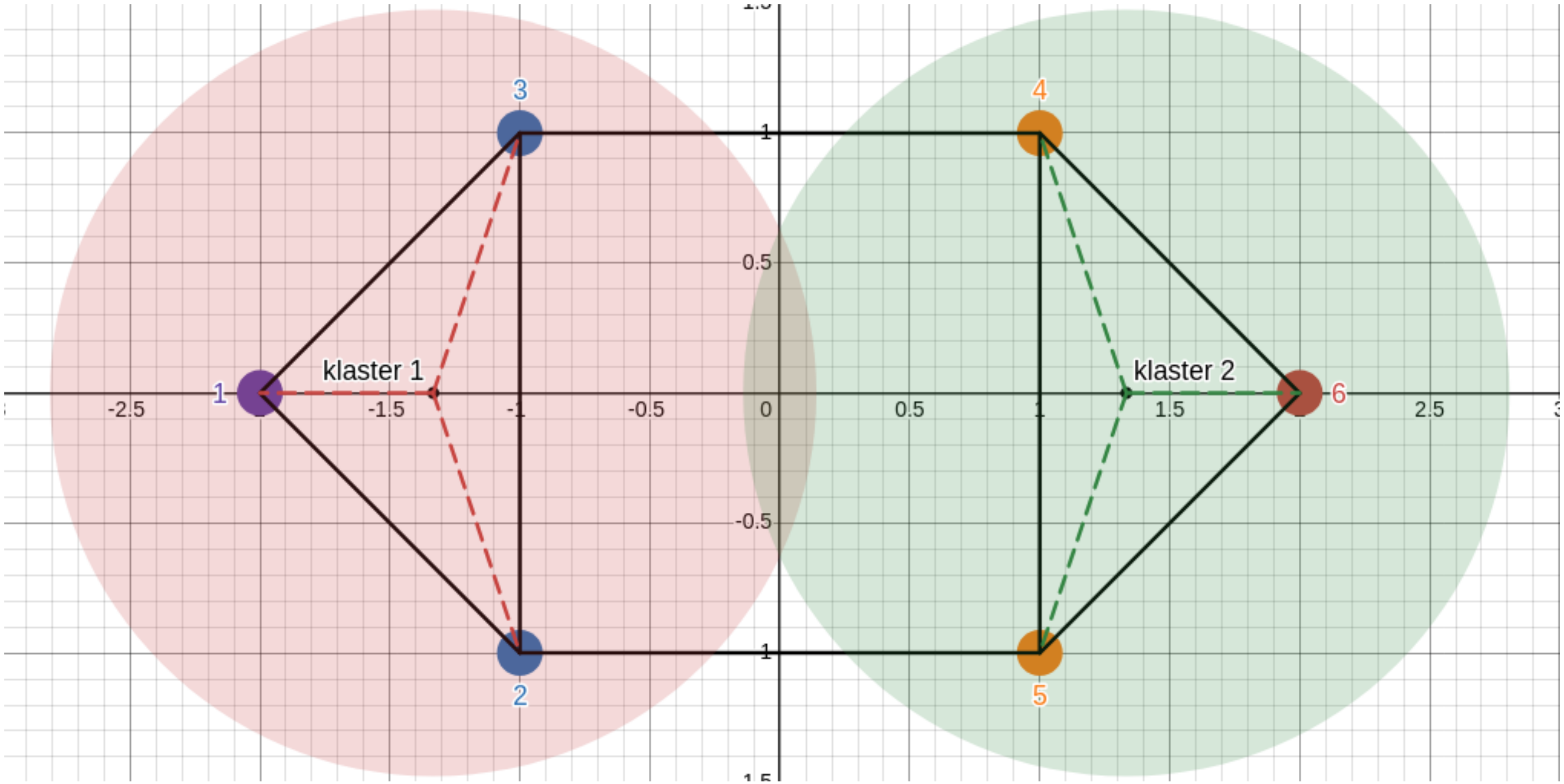
Jak liczymy wektory własne

Kilka słów o metodzie shiftedInversePowerMethod i wizualizacja

Kilka słów o metodzie gausa siedla i wizualizacja + wzór

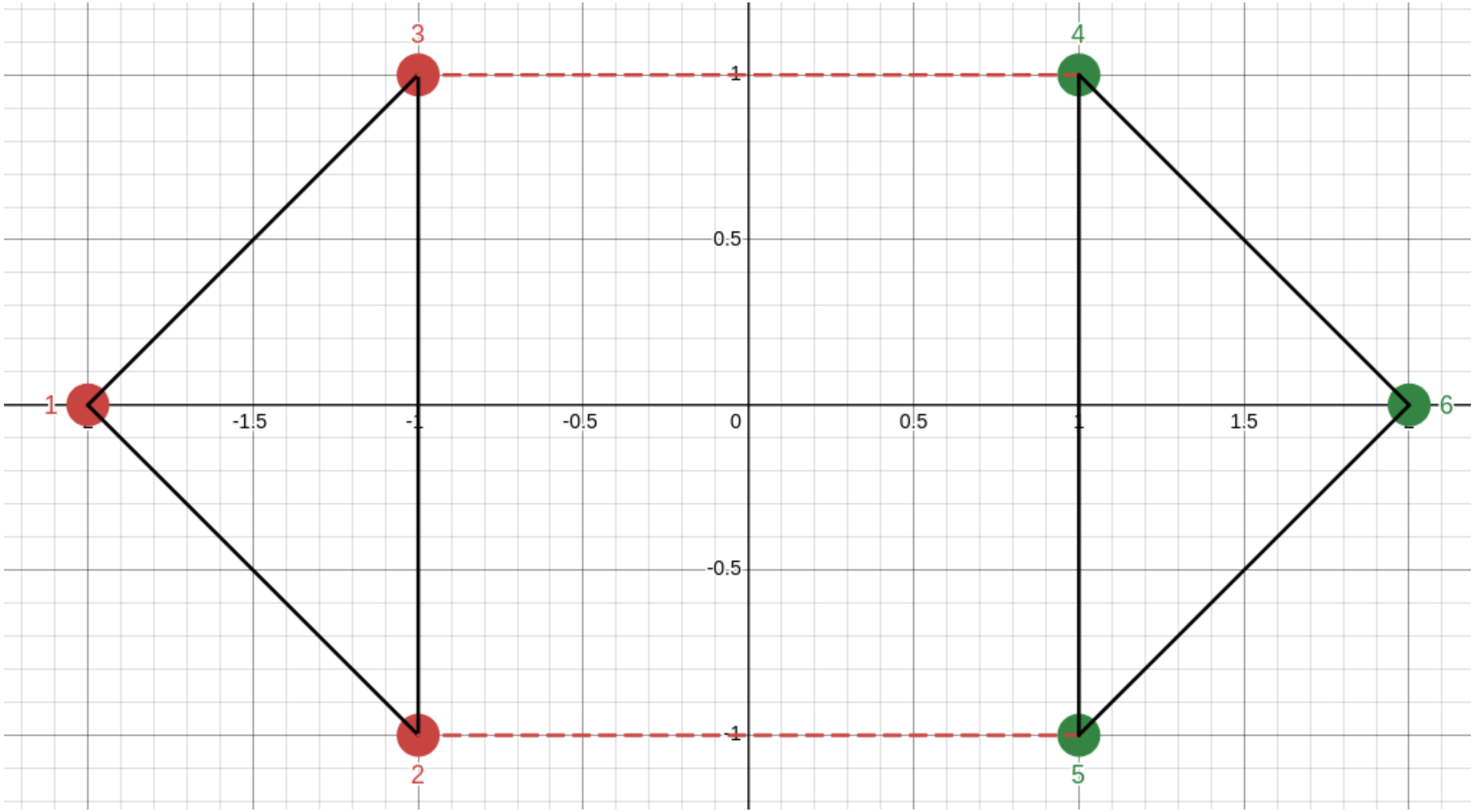
4. Dzielenie grafu

Do dzielenia grafu używam algorytmu k-means który znajduje iteracyjnie idealny środek klastra i przypisując do niego najbliższe wierzchołki.



5. Wynik końcowy

Podzielony graf na dwa klastry:



Źródła

- Spectral Clustering (wikipedia)
- Macierz Laplace'a (wikipedia)
- Spektrum Macierzy (wikipedia)
- Operator Laplace'a (youtube)
- Shifted Inverse Power Iteration Method (youtube)