بسم الله الرحمن الرحیم

مقدار دهی اولیه گرادیان مزدوج در خوشه‌بندی طیفی با الگوریتم ژنتیک

مهدی نعمتی، محمود امین‌طوسی، مهدی زعفرانیه

۱۲ بهمن ۱۳۹۶

تعریف (خوشه‌بندی)

هدف از خوشه‌بندی: افراز داده‌ها به خوشه‌های مختلف، به نحوی که اعضای هر خوشه بیشترین شباهت را به یکدیگر داشته باشند.

تعریف (خوشه‌بندی)

هدف از خوشه‌بندی: افراز داده‌ها به خوشه‌های مختلف، به نحوی که اعضای هر خوشه بیشترین شباهت را به یکدیگر داشته باشند.

کاربردها

کاربردهای مختلف در داده‌کاوی، یادگیری ماشین، شناسایی اشیاء و ...

تعریف (خوشه‌بندی)

هدف از خوشه‌بندی: افراز داده‌ها به خوشه‌های مختلف، به نحوی که اعضای هر خوشه بیشترین شباهت را به یکدیگر داشته باشند.

کاربردها

کاربردهای مختلف در داده‌کاوی، یادگیری ماشین، شناسایی اشیاء و ...

ارتباط با آنالیز هارمونیک: گراف و ماتریس لاپلاسین گراف
Study of the eigenvalues and eigenvectors of the Laplacian on domains, manifolds, and (to a lesser extent) graphs is also considered a branch of harmonic analysis.

مثال

(آ) تصویر اصلی　　(ب) خروجی قطعه‌بندی تصویر

شکل ۱: قطعه‌بندی (خوشه‌بندی) تصویر

هدف: قطعه‌بندی تصویر به قسمت‌های همگن

مثال

(آ) تصویر اصلی

(ب) خروجی قطعه‌بندی تصویر

شکل ۲: قطعه‌بندی (خوشه‌بندی) تصویر

مثال

(آ) تصویر اصلی

(ب) خروجی قطعه‌بندی تصویر

شکل ۳: قطعه‌بندی (خوشه‌بندی) تصویر

تعریف (خوشه‌بندی طیفی)

افراز داده‌ها بر اساس ماتریس لاپلاسین گراف داده‌ها

تعریف (خوشه‌بندی طیفی)

افراز داده‌ها بر اساس ماتریس لاپلاسین گراف داده‌ها

ماتریس مجاورت گراف

ماتریس مجاورت گراف G به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\begin{cases} W_{ij} = ۱ \quad \text{if} \quad (i,j) \in E \\ W_{ij} = ۰ \quad \text{if} \quad (i,j) \notin E \end{cases} \quad \forall i,j \in V$$

که $W_{n\times n}$ یک ماتریس متقارن است.

تعریف (ماتریس درجه)

ماتریس درجه D ، ماتریسی قطری است که d_{ii} درجه رأس i ام در گراف G است.

تعریف (ماتریس لاپلاسین)

ماتریس لاپلاسین گراف به صورت زیر به دست می‌آید که متقارن و معین مثبت است [۴]:

$$L = D - W$$

تعریف (ماتریس درجه)

ماتریس درجه D ، ماتریسی قطری است که d_{ii} درجه رأس i ام در گراف G است.

تعریف (ماتریس لاپلاسین)

ماتریس لاپلاسین گراف به صورت زیر به دست می‌آید که متقارن و معین مثبت است [۴]:

$$L = D - W$$

از این ماتریس برای افراز گراف G استفاده می‌شود.

گراف ساده و بدون جهت $G = (V, E)$ با n رأس و $x \in \{-۱, ۱\}^n$ را در نظر بگیرید.
فرض کنید بردار x گراف را به دو زیرگراف افراز می‌کند.

گراف ساده و بدون جهت $G=(V,E)$ با n رأس و $x\in\{-۱,۱\}^n$ را در نظر بگیرید.
فرض کنید بردار x گراف را به دو زیرگراف افراز می‌کند.

لم

فرض کنید L ماتریس لاپلاسین متناظر با گراف G و $x\in\{-۱,۱\}^n$ باشد؛ در این صورت، تعداد یال‌های بین دو زیرگراف که توسط x تولید شده‌اند، برابر است با $\frac{۱}{۴}(x^tLx)$ [۲].

با استفاده از لم قبل ، با انجام یک آزادسازی[1] و افزودن محدودیت $x^t x = n$ به تابع $f(x) = \frac{۱}{۴}(x^t Lx)$ ، محدودیت عدد صحیح بودن x برداشته می‌شود.

[1] Relaxation

با استفاده از لم قبل ، با انجام یک آزادسازی[۱] و افزودن محدودیت $n = x^tx$ به تابع $f(x) = \frac{۱}{۴}(x^tLx)$ ، محدودیت عدد صحیح بودن x برداشته می‌شود.
برای برابر بودن اندازه دو زیرگراف، محدودیت $e^tx = ۰$ به مساله اضافه و در نهایت، مساله بهینه‌سازی زیر حاصل می‌شود [۲]:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = x^tLx \\ s.t \quad & e^tx = ۰ \\ & \sum_{i=۱}^{n} x_i^۲ = n \end{aligned} \qquad (۱)$$

[۱] Relaxation

لم

فرض کنید $A \in M_n$ یک ماتریس هرمیتی باشد، و $\lambda_۱ \leq \lambda_۲ \leq \ldots \leq \lambda_n$ مقادیرویژه A باشند، و $i_۱, \ldots, i_k$ اعداد صحیحی باشند به طوری که $۱ \leq i_۱ < \cdots < i_k \leq n$ ، و $x_{i_۱}, \ldots, x_{i_k}$ متعامد باشند به گونه‌ای که برای هر $p = ۱, \ldots, k$، $Ax_{i_p} = \lambda_{i_p} x_{i_p}$ ، و همچنین $S = \mathrm{span}\{x_{i_۱}, \ldots, x_{i_k}\}$ ، آنگاه داریم [۳]:

$$\lambda_۲ = \min_{\{x: \circ \neq x \in S\}} \frac{x^t A x}{x^t x} = \min_{\{x: x \in S \text{ and } ||x||_۲ = ۱\}} x^t A x$$

$\lambda_۱$ کمترین مقدار این تقسیم و $\lambda_۲$ مقدار کمینه بعدی است. تقسیم $x^t Mx / x^t x$ به عنوان خارج قسمت رایلی یا تقسیم ریلی-ریتز[۲] شناخته می‌شود.

[۲] Rayleigh quotient

برای ماتریس لاپلاسین گراف، $\lambda_1 = 0$ و بردارویژه متناظر با آن $e = (1, \dots, 1)^t$ است. در نتیجه بردارویژه متناظر با کوچک‌ترین مقدارویژه، جواب مساله (۱) است، اما در محدودیت $e^t x = 0$ صدق نمی‌کند، از این رو از دومین کوچک‌ترین مقدارویژه استفاده می‌شود.

خوشه‌بندی طیفی

خوشه‌بندی گراف با استفاده از بردار ویژه متناظر با دومین مقدار ویژه گراف، خوشه‌بندی طیفی نامیده می‌شود که هدف، کمینه کردن تابع $f(x) = \frac{x^t L x}{x^t x}$ است.

برای ماتریس لاپلاسین گراف، $\lambda_1 = 0$ و بردارویژه متناظر با آن $e = (1, \ldots, 1)^t$ است. در نتیجه بردارویژه متناظر با کوچک‌ترین مقدارویژه، جواب مساله (۱) است، اما در محدودیت $e^t x = 0$ صدق نمی‌کند، از این رو از دومین کوچک‌ترین مقدارویژه استفاده می‌شود.

خوشه‌بندی طیفی

خوشه‌بندی گراف با استفاده از بردار ویژه متناظر با دومین مقدار ویژه گراف، خوشه‌بندی طیفی نامیده می‌شود که هدف، کمینه کردن تابع $f(x) = \frac{x^t L x}{x^t x}$ است.

مشکل: در این روش نیاز به محاسبه بردار ویژه گراف است که از جمله عملیات پرهزینه حساب می‌شود.

برای ماتریس لاپلاسین گراف، $\lambda_1 = ۰$ و بردارویژه متناظر با آن $e = (۱, \dots, ۱)^t$ است. در نتیجه بردارویژه متناظر با کوچک‌ترین مقدارویژه، جواب مساله (۱) است، اما در محدودیت $e^t x = ۰$ صدق نمی‌کند، از این رو از دومین کوچک‌ترین مقدارویژه استفاده می‌شود.

خوشه‌بندی طیفی

خوشه‌بندی گراف با استفاده از بردار ویژه متناظر با دومین مقدار ویژه گراف، خوشه‌بندی طیفی نامیده می‌شود که هدف، کمینه کردن تابع $f(x) = \frac{x^t L x}{x^t x}$ است.

مشکل: در این روش نیاز به محاسبه بردار ویژه گراف است که از جمله عملیات پرهزینه حساب می‌شود.
راهکار: استفاده از روش‌های کمینه‌سازی همانند روش گرادیان مزدوج.

گرادیان مزدوج

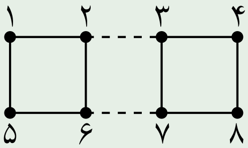
روش گرادیان مزدوج،
یک الگوریتم تکراری است که از یک نقطه اولیه شروع می‌کند و در n گام به نقطه کمینه محلی همگرا می‌شود. بروزرسانی نقاط جواب بر اساس $x_k = x_{k-1} + \alpha_k d_k$ انجام می‌شود؛ که در آن $\alpha_k = \arg\min_{\alpha>0} f(x_k + \alpha d_k)$ و d_k جهتی است که در راستای آن مقدار تابع هدف کاهش می‌یابد.

گرادیان مزدوج

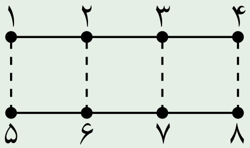
روش گرادیان مزدوج،
یک الگوریتم تکراری است که از یک نقطه اولیه شروع می‌کند و در n گام به نقطه کمینه محلی همگرا می‌شود. بروزرسانی نقاط جواب بر اساس $x_k = x_{k-1} + \alpha_k d_k$ انجام می‌شود؛ که در آن $\alpha_k = \arg\min_{\alpha>0} f(x_k + \alpha d_k)$ و d_k جهتی است که در راستای آن مقدار تابع هدف کاهش می‌یابد.

مشکل: وابستگی به نقطه شروع و همگرایی به کمینه محلی.

مثال



(آ) خروجی درست افراز گراف.

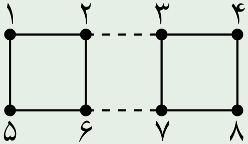


(ب) خروجی نادرست روش گرادیان مزدوج

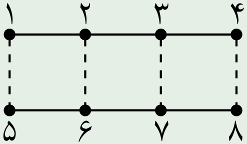
شکل ۴: مثال از عملکرد درست و نادرست الگوریتم گرادیان مزدوج در افراز گراف.

خطچین‌ها معرف لبه‌های مورد برش در گراف هستند.

مثال



(آ) خروجی درست افراز گراف.



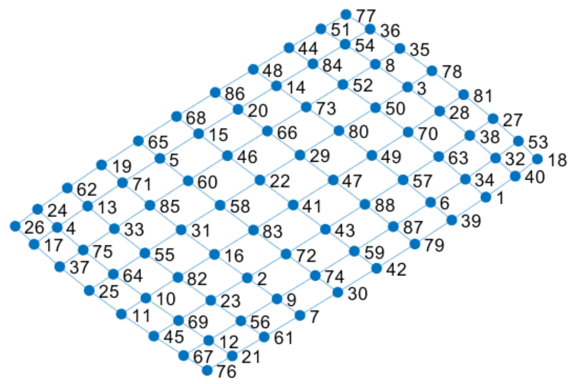
(ب) خروجی نادرست روش گرادیان مزدوج

شکل ۴: مثال از عملکرد درست و نادرست الگوریتم گرادیان مزدوج در افراز گراف.

خطچین‌ها معرف لبه‌های مورد برش در گراف هستند.

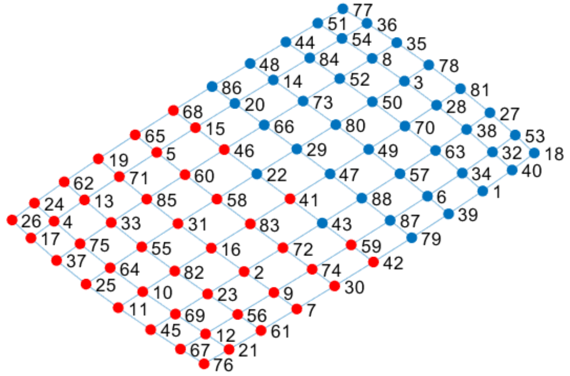
راه حل پیشنهادی: استفاده از الگوریتم ژنتیک

نتایج آزمایشات



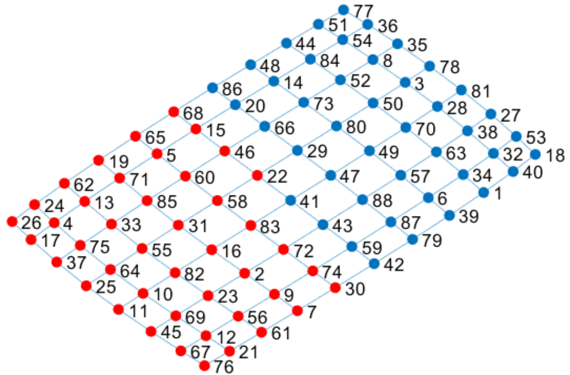
یک گراف شبکه ۸×۱۱

نتایج آزمایشات



خروجی روش گرادیان مزدوج

نتایج آزمایشات



خروجی روش الگوریتم ژنتیک

نتایج آزمایشات بر روی گراف‌هایی تصادفی با ۱۵۰، ۲۰۰، ۲۵۰، ۳۰۰ و ۳۵۰ رأس.

جدول ۱: هزینه افراز

شماره	تابع هدف CG	تابع هدف GACG	تعداد یال‌های برشی CG	تعداد یال‌های برشی GACG
۱	۸/۹۹۱	۷/۷۶۶	۳۳۴/۲۰۰	۳۱۳/۰۰۰
۲	۹/۸۶۳	۸/۷۸۵	۴۹۰/۶۵۰	۴۵۹/۹۰۰
۳	۱۱/۷۲۶	۱۰/۴۱۴	۷۲۶/۴۰۰	۶۷۹/۵۰۰
۴	۱۳/۲۴۸	۱۲/۱۴۳	۹۹۹/۸۰۰	۹۵۷/۵۵۰
۵	۱۵/۲۰۰	۱۴/۲۴۹	۱۳۳۶/۹۵۰	۱۲۸۸/۶۰۰
میانگین	۱۱/۸۰۵	۱۰/۶۷۲	۷۷۷/۶۰۰	۷۳۹/۷۱۰

جدول ۲: زمان اجرا

شماره	روش CG	روش GACG
۱	۰٫۰۸۰	۳٫۱۷۳
۲	۰٫۰۰۷	۲٫۷۶۰
۳	۰٫۰۰۹	۳٫۲۲۲
۴	۰٫۰۱۲	۳٫۷۸۸
۵	۰٫۰۱۳	۴٫۳۹۱
میانگین	۰٫۰۲۴	۳٫۴۶۷

مراجع

- اس.اس، رائو، ترجمه شهیدی‌پور، سید محمد مهدی، بهینه‌سازی (تئوری و کاربردی)، انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ۱۳۷۳.
- احمد ابویی‌مهریزی، رضا قنبری، بررسی تاثیر عددی الگوریتم گرادیان مزدوج ترکیبی بابایی و قنبری در حل مساله افرازبندی گراف ، در هشتمین کنفرانس بین المللی تحقیق در عملیات، (۱۳۹۴) ۱۱۱-۱۱۴.
- R.A. Horn and C.R. Johnson, *Matrix Analysis*, Cambridge University, Cambridge, 1994.
- N.P. Kruyt, Parallel Computing, *A conjugate gradient method for the spectral partitioning of graphs* 22 (11), (1997) 1493-1502.
- A. Pothen, H.D simon and K.P Liou, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, *Partitioning sparse matrices with eigenvectors of graphs* 11 (3), (1990) 430-452.

با سپاس از توجه شما

؟