数理解析研究所講究録
第2069巻 2018年 34-41



# 楕円を用いたスペクトラル法の性能解析に向けて

水谷 友彦*
東京工業大学 工学院 経営工学系

Tomohiko Mizutani
Department of Industrial Engineering and Economics
Tokyo Institute of Technology

**概 要**

本研究の目的はコンダクタンスを用いて記述されるグラフ分割問題に対して [8] で考案した楕円を用いたスペクトラル法を適用して得られる分割の精度を明らかにすることである．本稿ではその前段階として得られた結果を紹介する．

## 1 はじめに

$n$ 個の頂点からなる重み付き無向グラフ $G=(V,E,w)$ を考える．$n$ 個の頂点を整数 $1,\dots,n$ で対応付けて，$V$ でその集合 $\{1,\dots,n\}$ を表す．$E$ は辺の集合を表す．重み関数 $w$ は辺集合 $E$ から正数集合 $\mathbb{R}_{>0}$ への関数である．本稿で扱うグラフ $G$ は常に重み付き無向グラフで，連結であると仮定する．

頂点 $i$ と頂点 $j$ の組 $\{i,j\}$ に対する重み $w_{ij}$ を以下のように定める．$\{i,j\}\in E$ の場合，$w_{ij}=w(i,j)$ とし，そうでない場合，$w_{ij}=0$ と定める．したがって，どんな重み $w_{ij}$ も非負となる．頂点 $v_i$ の次数とは $v_i$ に接続している全ての辺の重みの総和のことを言う．つまり，$v_i$ の次数 $d_i$ は，$d_i=\sum_{j=1}^n w_{ij}$ となる．$V$ の $k$ 個の部分集合 $S_1,\dots,S_k$ で，どんな $i,j$ に対しても $S_i\cap S_j=\emptyset$ で，かつ $S_1\cup\cdots\cup S_k=V$ となるものを $G$ の $k$ 分割と呼び，そのような $S_i$, $i=1,\dots,k$ を $G$ のクラスターと呼ぶことにする．$V$ の部分集合 $S$ を考える．$S$ とその補集合 $S^c$ の間にある辺の重みの総和を $w(S,S^c)$ と表す．また，$S$ に属する頂点の次数の総和を $\mu(S)$ と表す．つまり，$w(S,S^c)$ と $\mu(S)$ は

$$w(S,S^c)=\sum_{i\in S}\sum_{j\in S^c} w_{ij},\quad \mu(S)=\sum_{i\in S} d_i$$

となる．$S$ に対して $\phi_G(S)$ を

$$\phi_G(S)\triangleq\frac{w(S,S^c)}{\mu(S)}$$

と定め，これを $S$ のコンダクタンスと定義する．$\mu(S)=\sum_{i\in S}d_i=\sum_{i\in S}\sum_{j=1}^n w_{ij}$ となることに注意すると，$\phi_G(S)$ は $0\le\phi_G(S)\le 1$ を満たすことが分かる．$S_1,\dots,S_k$ を $G$ の $k$ 分割として，$\phi_G(k)$ を

$$\phi_G(k)\triangleq\min_{S_1,\dots,S_k}\{\phi_G(S_1),\dots,\phi_G(S_k)\}$$

と定める．これを $G$ のコンダクタンスと定義する．

$G$ のコンダクタンス $\phi_G(k)$ を与えるような $k$ 分割 $S_1,\dots,S_k$ を見つける問題を考える．

*連絡先: mizutani.t.ab@m.titech.ac.jp

**問題 1.** グラフ $G$ と正数 $k$ が与えられたとき，$\phi_G(k)$ を達成する $G$ の $k$ 分割 $S_1,\ldots,S_k$ を見つけよ．

$\phi_G(k)$ を与える $G$ の $k$ 分割 $S_1,\ldots,S_k$ を最適な $k$ 分割と呼び，また，各 $S_i$ を $G$ の最適なクラスターと呼ぶことにする．$G$ の最適な $k$ 分割 $S_1,\ldots,S_k$ とは $\phi_G(k)=\min\{\phi_G(S_1),\ldots,\phi_G(S_k)\}$ を満たす $G$ の $k$ 分割のことである．この問題を解くことは困難で，$k=2$ のときでも NP 困難であることが知られている [10].

本研究の目的は問題 1 に [8] で考案した楕円を用いたスペクトラル法を適用して得られる $k$ 分割はどの程度の精度を有するかを明らかにすることである．特に，グラフのコンダクタンスが小さい場合にその手法で得られる $k$ 分割は最適なものに対してどの程度接近するのかを評価したい．その目的に向けての前段階として以下のような結果が得られた．これは 3.2 節の定理 2 と 3.3 節の定理 3 から直ちに導かれる．本稿ではその証明の道筋について説明する．

**定理 1.** グラフ $G$ の最適な $k$ 分割 $S_1,\ldots,S_k$ で，各 $S_i$ において最大の次数を持つ頂点の集合を $I^*$ と書く．$G$ のコンダクタンス $\phi_G(k)$ は

$$\phi_G(k) < \frac{\lambda_{k+1}(1-\theta_{max})^2(\xi^{\curlyvee}_{min})^2}{16k}$$

を満たすとする．このとき，楕円を用いたスペクトラル法のステップ *2* で得られる添字集合 $I$ は $I^*$ と一致する．

楕円を用いたスペクトラル法の詳細は 3.1 節で説明する．$\lambda_{k+1}$ は $G$ の正規化したラプラシアンの $k+1$ 番目に小さい固有値である．$\xi^{\curlyvee}_{\min}$ と $\theta_{\max}$ は $G$ の最適なクラスター $S_i$, $i=1,\ldots,k$ に属する頂点次数によって定まる量である．以下でそれらの詳細を説明する．

$G$ とその最適な $k$ 分割 $S_1,\ldots,S_k$ を考える．頂点 $\ell\in V$ は $S_i$ に属し，$\ell$ の次数は $S_i$ に属する頂点全体の中で $j$ 番目に大きいとき，頂点 $\ell$ を正数 $i$ と正数 $j$ の組 $(i,j)$ に対応付けて，頂点 $(i,j)$ と表すことにする．$S_i$ に属する頂点の個数を $n_i$ と書く．すると，$S_i$ に属する頂点は

$$S_i=\{(i,1),\ldots,(i,n_i)\},\quad d_{i,1}\le\cdots\le d_{i,n_i}=d^{\curlyvee}_i$$

と表現できる．ここで $d_{i,j}$ は頂点 $(i,j)$ の次数を表し，特に，$S_i$ の最大次数 $d_{i,n_i}$ を $d^{\curlyvee}_i$ で表す．$\xi_{i,j}$ を

$$\xi_{i,j}=\sqrt{d_{i,j}/\mu(S_i)},\quad i=1,\ldots,k,\ j=1,\ldots,n_i \tag{1}$$

と定め，特に $\xi_{i,n_i}$ を $\xi^{\curlyvee}_i$ で表す．つまり，$\xi^{\curlyvee}_i=\xi_{i,n_i}$ である．$\xi^{\curlyvee}_{\min}$ は

$$\xi^{\curlyvee}_{\min}=\min_{i=1,\ldots,k}\xi^{\curlyvee}_i \tag{2}$$

と定める．$\theta_{i,j}$ を

$$\theta_{i,j}=\sqrt{d_{i,j}/d^{\curlyvee}_i},\quad i=1,\ldots,k,\ j=1,\ldots,n_{i-1} \tag{3}$$

と定め，$\theta_{\max}$ は

$$\theta_{\max}=\max_{\substack{i=1,\ldots,k\\ j=1,\ldots,n_i-1}}\theta_{i,j} \tag{4}$$

と定める．$\theta_{i,j}$ はその定め方から $\theta_{i,1}\le\cdots\le\theta_{i,n_i-1}\le 1$ を満たすことが分かる．特に，各 $i=1,\ldots,k$ で $S_i$ の頂点最大次数 $d_{i,n_i}$ はその次に大きい頂点次数 $d_{i,n_i-1}$ よりも厳密に大きい場合，$\theta_{\max}<1$ となる．

## 2 スペクトラル法

グラフ $G$ の $k$ 分割を求める手法としてラプラシアンの固有値分解を利用するものが知られている [4, 11, 9, 12, 10]．$G$ のラプラシアン $\boldsymbol{L}$ はその隣接行列 $\boldsymbol{W}$ と次数行列 $\boldsymbol{D}$ を用いて $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{D} - \boldsymbol{W}$ と定められる行列である．隣接行列 $\boldsymbol{W}$ とは，$(i,j)$ 成分の要素の値が頂点 $i$ と頂点 $j$ の組 $\{i,j\}$ に課せられた重み $w_{ij}$ として与えられる $n \times n$ 対称行列のことを言う．次数行列 $\boldsymbol{D}$ とは $(i,i)$ 成分の値が頂点 $v_i$ の次数 $d_i$ で与えられる $n \times n$ 対角行列のことを言う．したがって，定義から $\boldsymbol{L}$ は $n \times n$ 対称行列となることが分かる．$\boldsymbol{f} = (f_1, \dots, f_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^n$ に対して，二次形式 $\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}\boldsymbol{f}$ は $\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}\boldsymbol{f} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} w_{ij}(f_i - f_j)^2$ となることから，$\boldsymbol{L}$ は半正定値であることが分かる．

次数行列 $\boldsymbol{D}$ を用いてラプラシアン $\boldsymbol{L}$ を $\boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{-1/2}$ と正規化する．これを正規化したラプラシアンと呼び，記号 $\mathcal{L}$ で表すことにする．つまり，正規化したラプラシアン $\mathcal{L}$ は

$$\mathcal{L} = \boldsymbol{D}^{-1/2}\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{-1/2}, \quad \boldsymbol{L} = \boldsymbol{D} - \boldsymbol{W}$$

として与えられる $n \times n$ 対称行列である．

グラフ $G$ は連結であり，重み関数 $w$ の値は正なので $\boldsymbol{D}$ は正則となる．したがって，$\boldsymbol{L}$ は半正定値であることから $\mathcal{L}$ も半正定値となることが分かる．$\mathcal{L}$ は半正定値なので，固有値分解が存在し，その固有値は全て非負となる．$\mathcal{L}$ の固有値を小さいものから順番に $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ で表し，その固有値に対応する固有ベクトルを $\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_n$ で表す．固有ベクトル $\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_n$ は $n$ 次元ベクトルで，$\mathbb{R}^n$ の正規直交基底をなすように選ぶことができる．以降では常に $\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_n$ は $\mathbb{R}^n$ の正規直交基底であるとして議論する．$\mathcal{L}$ は $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{D}^{1/2}\boldsymbol{e}$ に対して $\mathcal{L}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ を満たすので，$\mathcal{L}$ の最小固有値は $0$ となることが分かる．ここで $\boldsymbol{e}$ は全ての要素が $1$ となる $n$ 次元ベクトルを表している．つまり，$\lambda_1, \dots, \lambda_n$ は

$$0 = \lambda_1 \leq \cdots \leq \lambda_n$$

という関係を満たす．グラフの $k$ 分割を求めるための手順として以下のものが知られている．グラフ $G$ と正数 $k$ が入力として与えられているとする．

ステップ 1: 正規化したラプラシアン $\mathcal{L}$ の $k$ 個の固有ベクトル $\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_k$ を計算する．行列 $\boldsymbol{F}_k = [\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_k] \in \mathbb{R}^{n \times k}$ を構築し，$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{F}_k^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{k \times n}$ とする．

ステップ 2: $K$ 平均法を利用して $\boldsymbol{P}$ の $n$ 個の列ベクトル $\boldsymbol{p}_1, \dots, \boldsymbol{p}_n \in \mathbb{R}^k$ を $k$ 個のグループに分類する．それぞれのグループにおいて所属する列ベクトルの添字を集めて添字集合 $A_1, \dots, A_k$ を構築し，それを出力する．

ステップ 1 の $\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_k$ は小さいものから順番に並べた $k$ 個の固有値 $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ に対応する固有ベクトルであることに注意する．この手法をスペクトラル法と呼ぶ．

Peng らは論文 [10] において，グラフ $G$ のコンダクタンスが小さいとき，この手順によって得られる $G$ の $k$ 分割 $A_1, \dots, A_k$ は最適な $k$ 分割 $S_1, \dots, S_k$ に接近するということを示している．この結果をもう少し正確に記述する．グラフ $G$ と正数 $k$ が与えられている．$G$ のコンダクタンス $\phi_G(k)$ と正規化したラプラシアン $\mathcal{L}$ の $k+1$ 番目に小さい固有値 $\lambda_{k+1}$ がある正の実数 $c$ が存在して $\phi_G(k) \leq \frac{\lambda_{k+1}}{ck^3}$ となるとき，各 $i = 1, \dots, n$ において，$A_i$ のコンダクタンスは $S_i$ のコンダクタンスに近くなり，かつ，$A_i$ の体積は $S_i$ の体積に近くなるということを定理 1.2 で示している．この定理の証明では，$G$ のコンダクタンスが小さいとき，$\mathcal{L}$ の固有ベクトル $\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_k$ が最適な $k$ 分割 $S_1, \dots, S_k$ に対してある意味で接近するという主張が一つの柱となっている．以降ではこの主張を見ていく．

$G$ の $k$ 分割 $S_1, \dots, S_k$ を $k$ 本の $n$ 次元ベクトル $\boldsymbol{g}_1, \dots, \boldsymbol{g}_k$ を用いて表現する．ここで $G$ は $n$ 個の頂点を有していることに注意する．$\boldsymbol{g}_i$ は $n$ 次元ベクトルでその $j$ 番目の要素 $g_{i,j}$ を $G$ の頂点 $j$

に対応させる．要素 $g_{i,j}$ の値は以下のように定める．$j \in S_i$ の場合は $g_{i,j} = 1$ とし，そうでない場合は $g_{i,j} = 0$ とする．したがって，$S_i$ は $\boldsymbol{g}_i$ の非零要素の添字集合 $\{j : g_{i,j} \neq 0\}$ と一致する．このようなベクトル $\boldsymbol{g}_1, \dots, \boldsymbol{g}_k$ を $G$ の $k$ 分割 $S_1, \dots, S_k$ に対応する指示ベクトルと呼ぶ．次数行列 $\boldsymbol{D}$ を用いて $\boldsymbol{g}_i$ を

$$\bar{\boldsymbol{g}}_i = \frac{\boldsymbol{D}^{1/2}\boldsymbol{g}_i}{\|\boldsymbol{D}^{1/2}\boldsymbol{g}_i\|_2}$$

と正規化する．$\|\bar{\boldsymbol{g}}_i\|_2 = 1$ となることに注意する．このようにして得られる $\bar{\boldsymbol{g}}_1, \dots, \bar{\boldsymbol{g}}_k$ を正規化した指示ベクトルと呼ぶことにする．$\bar{\boldsymbol{g}}_i$ の $j$ 番目の要素 $\bar{g}_{i,j}$ は $\boldsymbol{G}$ の頂点 $j$ に対応している．$j \in S_i$ の場合は $\bar{g}_{i,j} = \sqrt{d_j/\mu(S_i)}$ で，そうでない場合は $\bar{g}_{i,j} = 0$ である．

$\bar{\boldsymbol{g}}_1, \dots, \bar{\boldsymbol{g}}_k$ は $G$ の最適な $k$ 分割 $S_1, \dots, S_k$ に対応する正規化した指示ベクトルとする．$\mathcal{L}$ の固有ベクトル $\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_n$ は $\mathbb{R}^n$ の正規直交基底となるように選ぶので，$\bar{\boldsymbol{g}}_i$ をそれらの線形結合として表すことができる．つまり，ある実数 $c_{i,1}, \dots, c_{i,n}$ が存在して

$$\bar{\boldsymbol{g}}_i = c_{i,1}\boldsymbol{f}_1 + \cdots + c_{i,n}\boldsymbol{f}_n$$

と表現できる．この表現を $k$ 番目の項で打ち切ったものを $\hat{\boldsymbol{f}}_i$ と書く．

$$\hat{\boldsymbol{f}}_i = c_{i,1}\boldsymbol{f}_1 + \cdots + c_{i,k}\boldsymbol{f}_k \tag{5}$$

Peng らは論文 [10] の定理 3.1 で

$$\|\bar{\boldsymbol{g}}_i - \hat{\boldsymbol{f}}_i\|_2^2 \leq \frac{\phi_G(k)}{\lambda_{k+1}},\ i = 1, \dots, k \tag{6}$$

となることを示している．この結果はグラフのコンダクタンス $\phi_G(k)$ が小さい場合，$\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_k$ が張る空間と $\bar{\boldsymbol{g}}_1, \dots, \bar{\boldsymbol{g}}_k$ が張る空間は近くなることを示唆している．

3.2 節では不等式 (6) を利用すると以下のような結果が得られることを解説する．$\bar{\boldsymbol{g}}_1, \dots, \bar{\boldsymbol{g}}_k$ を列に持つ行列 $\bar{\boldsymbol{G}} = [\bar{\boldsymbol{g}}_1, \dots, \bar{\boldsymbol{g}}_k] \in \mathbb{R}^{n \times k}$ と $\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_k$ を列に持つ行列 $\boldsymbol{F}_k = [\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_k] \in \mathbb{R}^{n \times k}$ を考える．このとき，直交行列 $\boldsymbol{U} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ が存在して，$\|\boldsymbol{F}_k\boldsymbol{U} - \bar{\boldsymbol{G}}\|_2$ の値は $\phi_G(k)$ を用いて上から抑えることができる．

# 3　楕円を用いたスペクトラル法の解析

## 3.1　アルゴリズム

楕円を用いたスペクトラル法の詳細を記述する．グラフ $G$ と正数 $k$ が入力として与えられているとする．

ステップ 1: 正規化したラプラシアン $\mathcal{L}$ の $k$ 本の固有ベクトル $\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_k$ を計算する．行列 $\boldsymbol{F}_k = [\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_k] \in \mathbb{R}^{n \times k}$ を構築し，$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{F}_k^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{k \times n}$ とする．

ステップ 2: $\boldsymbol{P}$ の $n$ 個の列ベクトル $\boldsymbol{p}_1, \dots, \boldsymbol{p}_n \in \mathbb{R}^k$ に対して体積最小閉包楕円 $E$ を計算し，$E$ の境界に載っている列ベクトルの添字を集め添字集合 $I$ を構築する．もし，$I$ の要素の個数が $k$ よりも大きい場合，逐次射影法を利用して $k$ 個の要素を選択し $I$ を更新する．

ステップ 3: 集合 $A_1, \dots, A_k$ を空集合と初期化し，$j = 1, \dots, n$ に対して以下の手続きに基づいて更新した $A_1, \dots, A_k$ を出力する．各 $i \in I$ に対して $\boldsymbol{p}_i$ と $\boldsymbol{p}_j$ の距離を計算し，$\boldsymbol{p}_j$ との距離が最も短くなる $\boldsymbol{p}_{i^*}$，$i^* \in I$ を見つける．$A_{i^*}$ を $A_{i^*} \cup \{j\}$ と更新する．

この手法のステップ 1 はスペクトラル法のステップ 1 と同じである．スペクトラル法では $K$ 平均法を利用して $\boldsymbol{P}$ の列ベクトルをグループ分けするが，この手法では楕円を利用してグループ分けを行う．体積最小閉包楕円の計算は効率的に実行できることが知られており [6]，また，その計算は半正定値計画問題として定式化できる [2]．

### 3.2 $F_k$ と $\bar{G}$ の差

(5) の $\hat{f}_i$ は $\mathcal{L}$ の固有ベクトル $f_1,\dots,f_k$ とある実数 $c_{i,1},\dots,c_{i,k}$ を用いて $\hat{f}_i = c_{i,1}f_1+\cdots+c_{i,k}f_k$ となるベクトルである．この実数 $c_{i,1},\dots,c_{i,k}$ を要素に持つベクトル $c_i = [c_{i,1},\dots,c_{i,k}]^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^k$ と，行列 $F_k = [f_1,\dots,f_k] \in \mathbb{R}^{n\times k}$ を用いて，$\hat{f}_i$ を $\hat{f}_i = F_k c_i$ と表す．行列 $C \in \mathbb{R}^{k\times k}$ を $C = [c_1,\dots,c_k]$ と定める．すると，$\hat{f}_1,\dots,\hat{f}_k$ を列に持つ行列 $\hat{F} = [\hat{f}_1,\dots,\hat{f}_k] \in \mathbb{R}^{n\times k}$ は，$\hat{F} = F_k C$ と表すことできる．$\|\hat{F} - \bar{G}\|_2$ の上界を評価する．一般に $n\times k$ 行列 $A = [a_1,\dots,a_k]$ の 2 ノルムはその列の 2 ノルムを用いて $\|A\|_2 \le \sqrt{k}\max_{i=1,\dots,k}\|a_i\|_2$ と抑えることができる．この不等式と (6) の不等式から

$$\|F_k C - \bar{G}\|_2 = \|\hat{F} - \bar{G}\|_2 \le \sqrt{k}\max_{i=1,\dots,k}\|\hat{f}_i - \bar{g}_i\|_2 \le \sqrt{\frac{k\cdot\phi_G(k)}{\lambda_{k+1}}}$$

を得る．この結果を踏まえると，$C$ の各列ベクトル $c_1,\dots,c_k$ が正規直交基底に近くなっている場合，ある直交行列 $U$ が存在して，

$$\|F_k U - \bar{G}\|_2 \approx \|F_k C - \bar{G}\|_2 \le \sqrt{\frac{k\cdot\phi_G(k)}{\lambda_{k+1}}}$$

となることが期待できる．

実際，定理 2 からグラフのコンダクタンス $\phi_G(k)$ が小さい場合，$c_1,\dots,c_k$ は正規直交基底に接近すること分かる．$\hat{f}_i$ と $\hat{f}_j$ の内積は

$$\hat{f}_i^{\mathrm{T}}\hat{f}_j = c_i^{\mathrm{T}}F_k^{\mathrm{T}}F_k c_j = c_i^{\mathrm{T}}c_j$$

となるので，$c_i$ と $c_j$ の内積は $\hat{f}_i$ と $\hat{f}_j$ の内積と等しいことが分かる．不等式 (6) は $\phi_G(k)$ が小さい場合，$\hat{f}_i$ は $\bar{g}_i$ に接近すると主張している．$\bar{g}_1,\dots\bar{g}_k$ は正規直交で，$\phi_G(k)$ が小さいとき $\hat{f}_1,\dots,\hat{f}_k$ はそれらに接近する．つまり，$i\neq j$ のとき，$c_i^{\mathrm{T}}c_j = \hat{f}_i^{\mathrm{T}}\hat{f}_j$ は 1 に近くなり，$i=j$ のとき，$c_i^{\mathrm{T}}c_j = \hat{f}_i^{\mathrm{T}}\hat{f}_j$ は 0 に近くなる．この議論を精緻化すると次の結果が得られる．

**定理 2.** グラフ $G$ の正規化したラプラシアン $\mathcal{L}$ の固有ベクトル $f_1,\dots,f_k$ を列に並べた行列 $F_k = [f_1,\dots,f_k]$ と，$G$ の最適な $k$ 分割に対応する正規化した指示ベクトル $\bar{g}_1,\dots,\bar{g}_k$ を列に並べた行列 $\bar{G} = [g_1,\dots,g_k]$ に対して，

$$\|F_k U - \bar{G}\|_2 \le 2\sqrt{\frac{k\cdot\phi_G(k)}{\lambda_{k+1}}}$$

を満たす直交行列 $U \in \mathbb{R}^{k\times k}$ が存在する．

### 3.3 非負行列分解からの視点

$F_k$ の転置行列を $P$ と書き，$\bar{G}$ の転置行列を $Q$ と書く．すると，定理 2 から $P$ は

$$P = UQ + R,\quad \|R\|_2 \le 2\sqrt{\frac{k\cdot\phi_G(k)}{\lambda_{k+1}}}$$

と表すことができる．$U$ は $k\times k$ 直交行列である．$R$ は $k\times n$ 行列で，$P$ と $UQ$ の残差を表す行列である．

$P$ の列を適切に並べ替えると $P$ は摂動された分離可能な非負行列分解とみなすことができる．そのことを見るためにまずは $Q$ の列と行を考察する．この行列は $Q = \bar{G}^{\mathrm{T}} = [\bar{g}_1,\dots,\bar{g}_k]^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{k\times n}$

となるものである．$\bar{\boldsymbol{g}}_1,\dots,\bar{\boldsymbol{g}}_k$ はグラフ $G$ の最適な $k$ 分割 $S_1,\dots,S_k$ に対応する正規化した指示ベクトルで $\bar{\boldsymbol{g}}_j = \boldsymbol{D}^{1/2}\boldsymbol{g}_j/\|\boldsymbol{D}^{1/2}\boldsymbol{g}_j\|_2$ である．したがって，$\boldsymbol{Q}$ の $j$ 番目の行はクラスター $S_j$ に対応し，$i$ 番目の列は $G$ の頂点 $i$ に対応する．$\boldsymbol{Q}$ の各列は一つだけ非零要素を持ち，それ以外は零である．$i$ 番目の列が $j$ 番目の行に非零要素を持つことは，頂点 $i$ がクラスター $S_j$ に所属することを意味する．また，その非零要素の値は $\sqrt{d_i/\mu(S_j)}$ となる．

$\boldsymbol{Q}$ の列は左から右に $G$ の頂点 1 から $n$ に対応している．それを $\boldsymbol{Q}$ の列が左から右に頂点

$$\underbrace{(1,n_1),\dots,(k,n_k)}_{k},\underbrace{(1,1),\dots,(1,n_1-1)}_{n_1-1},\dots,\underbrace{(k,1),\dots,(k,n_k-1)}_{n_k-1}$$

に対応するように並べ替える．1 節で説明したように，頂点 $\ell$ が $S_i$ に属し，$\ell$ の次数は $S_i$ に属する頂点全体の中で $j$ 番目に大きいとき，その頂点を $(i,j)$ と表している．つまり，置換行列 $\boldsymbol{\Pi}$ を適切に選んで，$\boldsymbol{Q}$ の列を以下のように並べ替える．

$$\boldsymbol{Q} = \left[\begin{array}{cccc|ccc|ccc|c|ccc} \xi_1^{\curlyvee} & & & & \xi_{1,1} & \cdots & \xi_{1,n_1-1} & & & & & & & \\ & \xi_2^{\curlyvee} & & & & & & \xi_{2,1} & \cdots & \xi_{2,n_2-1} & & & & \\ & & \ddots & & & & & & & & \ddots & & & \\ & & & \xi_k^{\curlyvee} & & & & & & & & \xi_{k,1} & \cdots & \xi_{k,n_k-1} \end{array}\right]\boldsymbol{\Pi}$$

ここで $\xi_{i,j}$ は (1) で定めたもので，$\xi_i^{\curlyvee}$ は $\xi_i^{\curlyvee} = \xi_{i,n_i}$ である．行列 $\boldsymbol{B}$ と行列 $\boldsymbol{H}$ を以下のように定める．

$$\begin{aligned} \boldsymbol{B} &= \begin{bmatrix} \xi_1^{\curlyvee} & & \\ & \ddots & \\ & & \xi_k^{\curlyvee} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{k\times k} \\ \boldsymbol{H} &= \left[\begin{array}{ccc|ccc|c|ccc} \theta_{1,1} & \cdots & \theta_{1,n_1-1} & & & & & & & \\ & & & \theta_{2,1} & \cdots & \theta_{2,n_2-1} & & & & \\ & & & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & & \theta_{k,1} & \cdots & \theta_{k,n_k-1} \end{array}\right] \in \mathbb{R}^{k\times(n-k)} \end{aligned}$$

ここで $\theta_{i,j}$ は (3) で定めたものである．すると，$\boldsymbol{Q}$ は非負行列 $\boldsymbol{B}$ と非負行列 $[\boldsymbol{I},\boldsymbol{H}]\boldsymbol{\Pi}$ の積の形で書くことができる．

$$\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{B}[\boldsymbol{I},\boldsymbol{H}]\boldsymbol{\Pi}$$

$\boldsymbol{I}$ は $k\times k$ 単位行列である．これを $\boldsymbol{Q}$ の 2 つの因子 $\boldsymbol{B}$ と $[\boldsymbol{I},\boldsymbol{H}]\boldsymbol{\Pi}$ への行列分解とみると，非負行列分解に対応することが分かる．因子 $\boldsymbol{B}$ の全ての列 $\boldsymbol{b}_1,\dots,\boldsymbol{b}_k$ を $\boldsymbol{Q}$ は自身の列として有しているので，この分解は特に分離可能な非負行列分解と呼ばれる．本稿では $\boldsymbol{B}$ を基底行列と呼び，$\boldsymbol{B}$ の列 $\boldsymbol{b}_1,\dots,\boldsymbol{b}_k$ に対応する $\boldsymbol{Q}$ の列の添字集合を基底添字集合と呼ぶことにする．基底添字集合 $I$ は $k$ 個の要素 $i_1,\dots,i_k$ を含んでおり，これらは $G$ の各クラスター $S_1,\dots,S_k$ における最大次数の頂点 $(1,n_1),\dots,(k,n_k)$ に対応している．

$\boldsymbol{P}$ は

$$\begin{aligned} \boldsymbol{P} &= \boldsymbol{U}\boldsymbol{Q}+\boldsymbol{R} \\ &= \boldsymbol{U}\boldsymbol{B}[\boldsymbol{I},\boldsymbol{H}]\boldsymbol{\Pi}+\boldsymbol{R} \end{aligned}$$

と書ける．$\boldsymbol{P}$ と正数 $k$ が与えられたとき，基底添字集合 $I$ を見つけるという問題は分離可能な非負行列分解問題として知られており，最近活発に研究が行われている．例えば，論文 [1, 3, 5, 7] で考案されたアルゴリズムは，$\boldsymbol{R}$ のノルムが小さい場合，$I$ を見つけることができる．$\boldsymbol{P}$ における

$\boldsymbol{UQ}$ を $\boldsymbol{UB}$ と $[\boldsymbol{I}, \boldsymbol{H}]\Pi$ への分解とみると，これはもはや非負行列分解となっていないかもしれない．$[\boldsymbol{I}, \boldsymbol{H}]\Pi$ は非負であるが，一方で，$\boldsymbol{U}$ は一般的な直交行列なので $\boldsymbol{UB}$ は非負であるとは限らない．しかしながら，例えば [5, 7] において考案されたアルゴリズムは基底行列が必ずしも非負でなくても動作するように設計されており，$\boldsymbol{P}$ に対して適用することができる．

$\boldsymbol{P}$ の基底添字集合 $I$ を見つけるために [7] で考案された楕円丸め法を利用する．この手法は $\boldsymbol{P}$ の列ベクトル $\boldsymbol{p}_1, \dots, \boldsymbol{p}_n$ を包含する楕円の中で最も体積が小さくなるものを計算し，その境界に載っている $\boldsymbol{P}$ の列ベクトルの添字を集めて添字集合を構築する．添字集合が $k$ 個以上の要素を持つ場合は逐次射影法を利用して，その中から $k$ 個の要素を選択する．逐次射影法とは [5] において考案された分離可能な非負行列分解問題を解くためのアルゴリズムである．楕円丸め法は $\|\boldsymbol{R}\|_2$ がある値よりも小さいとき，$\boldsymbol{P}$ から基底添字集合を抽出できることが [7] の定理 9 で示されている．その証明に従うと下記の結果が得られる．$\xi^{\Upsilon}_{\min}$ と $\theta_{\max}$ は (2) と (4) で定めたものである．

**定理 3.** $\boldsymbol{P}$ の列ベクトル $\boldsymbol{p}_1, \dots, \boldsymbol{p}_n$ に対して体積最小閉包楕円 $E$ を計算する．もし $\|\boldsymbol{R}\|_2 < \frac{1}{2}(1 - \theta_{max})\xi^{\Upsilon}_{min}$ ならば，$E$ の境界に載っている $\boldsymbol{P}$ の列ベクトルの添字集合は基底添字集合に一致する．

## 参考文献


[1] S. Arora, R. Ge, R. Kannan, and A. Moitra. Computing a nonnegative matrix factorization – Provably. In *Proceedings of the 44th symposium on Theory of Computing (STOC)*, pages 145–162, 2012.

[2] A. Ben-Tal and A. Nemirovski. *Lectures on modern convex optimization.* SIAM, 2001.

[3] V. Bittorf, B. Recht, C. Re, and J. Tropp. Factoring nonnegative matrices with linear programs. In *Advances in Neural Information Processing Systems 25 (NIPS)*, pages 1223–1231, 2012.

[4] F. R. K. Chung. *Spectral Graph Theory.* AMS, 1997.

[5] N. Gillis and S. A. Vavasis. Fast and robust recursive algorithms for separable nonnegative matrix factorization. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 36(4):698–714, 2014.

[6] L. G. Khachiyan. Rounding of polytopes in the real number model of computation. *Mathematics of Operations Research*, 21(2):307–320, 1996.

[7] T. Mizutani. Ellipsoidal rounding for nonnegative matrix factorization under noisy separability. *Journal of Machine Learning Research*, 15:1011–1039, 2014.

[8] T. Mizutani. Spectral clustering by ellipsoid and its connection to separable nonnegative matrix factorization. arXiv:1503.01531, 2015.

[9] A. Y. Ng, M. Jordan, and Y. Weiss. On spectral clustering: Analysis and an algorithm. In *Advances in Neural Information Processing Systems 14 (NIPS)*, pages 849–856, 2001.

[10] R. Peng, H. Sun, and L. Zanetti. Partitioning well-clustered graphs: Spectral clustering works! In *Proceedings of the 28th Conference on Learning Theory*, volume 40, pages 1423–1455, 2015.

[11] J. Shi and J. Malik. Normalized cuts and image segmentation. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 22(8):888–905, 2000.

[12] U. von Luxburg. A tutorial on spectral clustering. *Statistics and Computing*, 17(4):395–416, 2007.