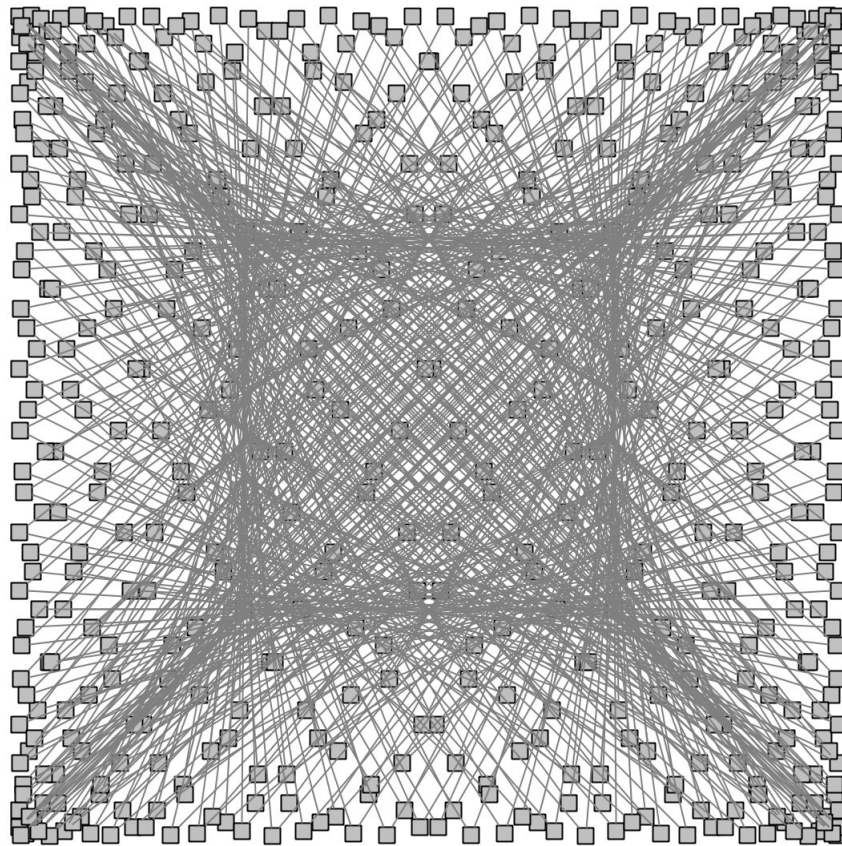


Studienarbeit:
Ein multidimensionaler Vergleich zwischen spektralen
und kräftebasierten Layouts

Marcus Krug



Betreuer: Prof. Dr. Dorothea Wagner, Marco Gaertler
ILKD Prof. Dr. Dorothea Wagner, Universität Karlsruhe

Oktober 2005

Das Titelbild zeigt ein zweidimensionales Spektrallayout eines Pfades mit 500 Knoten bezüglich der Laplace-Eigenwerte $\{\lambda_{352}, \lambda_{353}\}$.

Zusammenfassung

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, einen Beitrag zum Verständnis der Zusammenhänge zwischen spektralen und kräftebasierten Layouts zu leisten. Die Zusammenhänge werden besonders deutlich, wenn man sich von einer zweidimensionalen Betrachtung der Problematik löst und stattdessen einen multidimensionalen Ansatz wählt. Mithilfe des sogenannten Potentials wird der Dimensionsbegriff eines Graphen in Hinsicht auf sein Spring Embedder Layout definiert und als Maßzahl für den Vergleich von spektralen und kräftebasierten Layouts zugrundegelegt. Die Arbeit gliedert sich in einen theoretischen Teil, in welchem die Paradigmen beider Layout-Techniken dargelegt und das Potential hinsichtlich seiner Eigenschaften untersucht werden, und einen empirischen Teil, in welchem der Dimensionsbegriff präzisiert und auf Zusammenhänge zwischen den genannten Layout-Techniken eingegangen werden soll. Ein direkter Vergleich der Layouts gestaltet sich aus verschiedenen Gründen schwierig, soll aber dennoch Erwähnung finden. Eine fundierte theoretische Basis für die vermuteten Zusammenhänge kann im Rahmen der vorliegenden Arbeit jedoch nicht bereitgestellt werden.

Danksagung

Mein Dank gilt Prof. Dr. Dorothea Wagner und Marco Gaertler, welche mir bei meiner Arbeit am Lehrstuhl eine Vielzahl interessanter Einblicke in das Spektrum der Graphentheorie ermöglicht haben. Ferner möchte ich mich bei Marco Gaertler für die immer nette und hilfreiche Betreuung bei der Erstellung der vorliegenden Studienarbeit bedanken.

Ich versichere hiermit wahrheitsgemäß, die Arbeit bis auf die dem Aufgabensteller bereits bekannte Hilfe selbständig angefertigt, alle benutzten Hilfsmittel vollständig und genau angegeben und alles kenntlich gemacht zu haben, was aus Arbeiten anderer unverändert oder mit Abänderung entnommen wurde.

Unterschrift:

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung & Motivation	4
2	Spektrallayouts	7
3	Kräftebasierte Layouts	10
3.1	Multidimensionale Erweiterung des klassischen kräftebasierten Layoutverfahrens nach Eades	11
3.2	Der Dimensionsbegriff	13
3.2.1	Wohldefiniertheit	15
3.3	Extraktionsverfahren	27
3.3.1	Hauptkomponentenanalyse	28
3.3.2	Dimensionsanalyse ausgewählter Graphen	31
3.3.3	“Grenzen” der Extraktionsverfahren	37
4	Empirischer Vergleich von spektralen und kräftebasierten Layouts	39
4.1	Zusammenhang zwischen Dimension und Vielfachheit der Laplace-Eigenwerte	39
4.1.1	Überprüfbarkeit der These	40
4.1.2	Ergebnisse	40
4.2	Zusammenhang zwischen kräftebasierten und spektralen Layouts	41
4.2.1	Überprüfbarkeit der These	41
4.2.2	Ergebnisse	41
5	Zusammenfassung & Ausblick	46

1 Einführung & Motivation

Ein Graph $G = (V, E)$ ist ein abstraktes Konstrukt bestehend aus einer Menge von Knoten V und einer Menge von Kanten E , welche je ein Paar von Knoten verbinden. Oft korrespondieren die Knoten eines Graphen mit realen Objekten wie den Routern des Internets. Kanten modellieren in der Regel Relationen zwischen diesen Objekten, so etwa die (physikalische) Verbindung zweier Router im Internet. Der resultierende Graph ist dann ein formales Modell der Relationen zwischen den betrachteten Objekten.

Eine Repräsentation eines Graphen ist eine Konkretisierung der Knoten und Kanten in einem gegebenen Medium. Die Speicherung eines Graphen in Form von verzeigerten Objekten etwa ist eine mögliche Repräsentation eines Graphen. Von größerer historischer Bedeutung jedoch sind visuelle Repräsentationen von Graphen. Die ersten solchen Repräsentationsformen von Graphen sind vermutlich Stammbäume der Art wie sie die Atria römischer Patriziervillen schmückten – sie werden bereits von dem römischen Philosophen Seneca im 1. Jahrhundert n. Chr. beschrieben. Die ersten überlieferten Zeichnungen jedoch stammen aus dem Mittelalter [3]. Bereits diese Graphen modellierten die Verwandtschaftsbeziehung (Relation) von Personen (Objekten) als Graph. Auch die ersten geodätischen Problemstellungen, insbesondere das Zeichnen von Karten aus gemessenen Entfernungen, dürfte Probleme des Graphzeichnens aufgeworfen haben, die auch heute noch von Bedeutung sind.

Grafische Repräsentationen können einen intuitiven Eindruck der Struktur des zugrundeliegenden Graphen vermitteln und somit zu einem schnellen Verständnis der mit dem Graphen modellierten Relationen beitragen. Vor allem größere Graphen lassen sich auf diese Weise bezüglich ihrer Struktur recht schnell und effektiv analysieren. Die ersten Stammbäume erfreuten sich nicht ohne Grund recht großer Beliebtheit: Sie vermitteln auch einem flüchtigen Betrachter en passant einen prägenden Eindruck von Größe, Einfluss und Tradition selbst einer recht großen Familie. Die eingangs erwähnte Netzwerk-Analyse des Internets stellt eine große Herausforderung im Zusammenhang mit dem Zeichnen von Graphen dar. Jedoch selbst bei einem Graphen dieser Größe dürfte der flüchtige Eindruck bereits einen erheblichen Erkenntnisgewinn darstellen.



Die Nachkommen des Paul Johann Anselm Ritter von Feuerbach.

1. Jakob Anselm (1744-1818)	2. Carl Anselm (1774-1848)	3. Johann Anselm (1794-1868)	4. Ludwig Anselm (1804-1878)	5. Friedrich Anselm (1814-1888)	6. Nikolaus Anselm (1824-1898)	7. Hermann Anselm (1834-1908)	8. Otto Anselm (1844-1918)
9. Paul Anselm (1854-1928)	10. Maria Anselm (1864-1938)	11. Anton Anselm (1874-1948)	12. Elisabeth Anselm (1884-1958)	13. August Anselm (1894-1968)	14. Emil Anselm (1904-1978)	15. Alfred Anselm (1914-1988)	16. Hans Anselm (1924-1998)

Abbildung 1: Stammbaum der Familie Lee (Virginia und Maryland) [Quelle: <http://www.loc.gov/rr/genealogy/images/family-tree.jpg>] (links), Stammbaum der Familie Ludwig Feuerbachs [Quelle: www.ludwig-feuerbach.de/stammbaum.jpg] (rechts).

Prinzipiell gibt es eine Vielzahl von möglichen visuellen Repräsentationsformen, auf die an dieser Stelle nicht weiter eingegangen werden soll. Im folgenden sollen im Sinne einer Abstraktion der Repräsentationsform Knoten als Punkte und Kanten als Linien ohne Ausdehnung modelliert sein.

Die ästhetischen Kriterien, welche eine wohlgeformte visuelle Repräsentation eines Graphen von einer misslungenen unterscheiden, sind in gewisser Weise abhängig von der zugrundeliegenden Semantik der Daten. Das Schienennetz einer U-Bahn genügt aus guten Gründen anderen ästhetischen Forderungen als ein UML-Klassendiagramm. In beiden Fällen nutzt

man semantische Informationen, um die Lesbarkeit der graphische Repräsentation zu verbessern. Solche Kriterien sind in hohem Maße subjektiv, was man nicht zuletzt an der Anzahl unterschiedlicher Ausprägungsformen der eingangs erwähnten Stammbäume nachvollziehen kann – man vergleiche hierzu die in Abbildung 1 dargestellten Exemplare.

Oft jedoch sind die semantischen Informationen nicht vorhanden und die Repräsentation soll automatisch so gefunden werden, dass die Semantik der zugrundeliegenden Daten möglichst gut ablesbar ist – etwa zum Zwecke einer Netzwerkanalyse. Eine solche Problematik wirft die Fragestellung auf, ob es allgemeine Kriterien zur Bewertung einer gegebenen Repräsentation gibt.

In [2] gilt eine Repräsentation als wohlgeformt oder ansprechend, wenn alle Kanten etwa die gleiche Länge haben und das resultierende Layout ein Maximum an Symmetrie zum Vorschein bringt. In [1] wird gefordert, dass die Knoten gleichmäßig über die Zeichenfläche verteilt werden, und adjazente Knoten nahe beieinander liegen. Diese Kriterien scheinen geeignet, ein unverzerrtes, übersichtliches Bild eines Graphen hervorzubringen. Man könnte ihnen vermutlich noch eine Vielzahl weiterer Kriterien hinzufügen. Es hat sich jedoch gezeigt, dass selbst ein solche doch recht vage Formulierung bereits akzeptable Ergebnisse liefert.

Im Rahmen dieser Problemstellung haben sich eine ganze Reihe recht unterschiedlicher Heuristiken zum Zeichnen von Graphen etabliert, von denen in der vorliegenden Arbeit jedoch lediglich zwei genauer betrachtet werden können. Für den interessierten Leser sei vielmehr auf [6] verwiesen.

Eine solche Klasse von Heuristiken stützt sich beim Zeichnen von Graphen auf physikalische Analogien. Die Elemente des Graphen werden dabei als interagierende physikalische Objekte aufgefasst. Eine oft nur implizit gegebene – im physikalischen Modell inhärente – Bewertungsfunktion definiert einen Gleichgewichtszustand, welcher als optimales Layout von geeigneten Algorithmen approximiert wird. Ein prominenter Vertreter einer solchen Heuristik ist der bereits 1984 von Eades in [2] vorgestellte Spring Embedder, welcher sich aus den physikalischen Eigenschaften von Federn und sich gegenseitig abstoßenden Metallkugeln ableitet.

Eine vollkommen andere Klasse von Heuristiken hingegen sind die sogenannten spektralen Layouttechniken. Bei einem Spektrallayout werden die Knoten den Eigenvektoren einer mit dem Graphen assoziierten Matrix entsprechend positioniert. Ein solches Vorgehen minimiert die Kantenlängen unter der Nebenbedingung, dass die Koordinaten der Knoten orthogonal zueinander und zum Einsvektor sind. Auch dies ist eine implizite Formulierung von ästhetischen Kriterien im obigen Sinne.

Beide Ansätze sind populäre Methoden zum Zeichnen von Graphen, deren Struktur zunächst als unbekannt angenommen wird. Sie liefern in einer Vielzahl von Anwendungen passable, bisweilen auch hervorragende Ergebnisse. Ein Vergleich der beiden Methoden ist bislang nach meinem Erkenntnisstand noch nicht durchgeführt worden, obwohl es durchaus Gründe gibt anzunehmen, dass die beiden Methoden mehr gemeinsam haben als es zunächst den Anschein hat. Die folgenden Beispiele sollen dies illustrieren.

Beispiel 1. *Die Layouts eines Kreises in Abbildung 2 sind fast identisch.*

Beispiel 2. *Üblicherweise werden für Spektrallayouts, denen die Laplacematrix des Graphen zugrundeliegt, die Eigenvektoren zum zweit- und drittkleinsten Eigenwert herangezogen. Im Falle eines Pfades liefert dies die folgenden in Abbildung 3 dargestellten – durchaus unterschiedlichen – zweidimensionalen Einbettungen.*

Vergleicht man hingegen die eindimensionalen Layouts (Abbildung 4), so weisen auch diese beiden Layouts bereits etwas mehr Gemeinsamkeiten auf.

Auch das folgende Beispiel zeigt, dass die beiden Layouts durchaus sehr verschieden sein können.

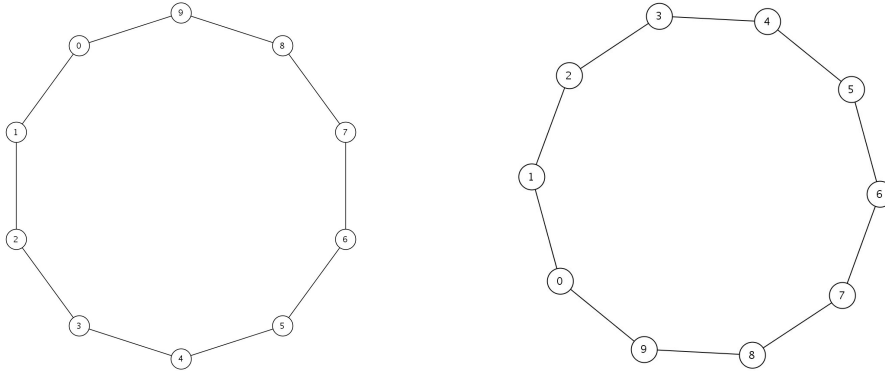


Abbildung 2: Vergleich am Beispiel eines Kreises mit $n = 10$ Knoten: Spektrallayout (links) und kräftebasiertes Layout (rechts)

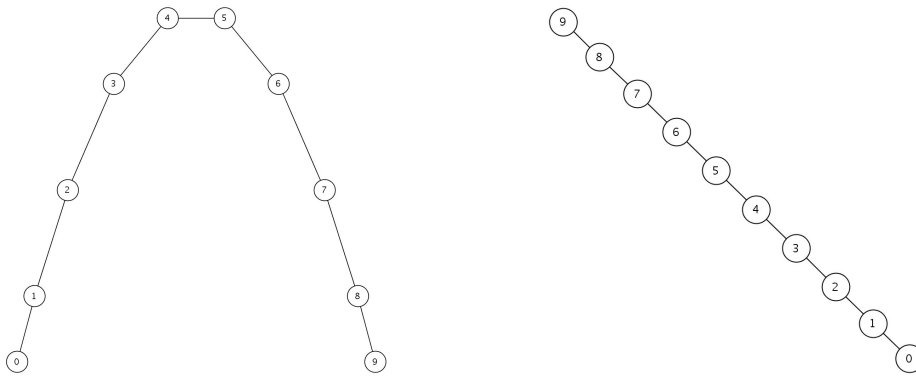


Abbildung 3: Vergleich am Beispiel eines Pfades mit $n = 10$ Knoten: Spektrallayout (links) und kräftebasiertes Layout (rechts)

Beispiel 3. *Betrachtet man den Vergleich der beiden Methoden am Beispiel eines Sternes (Abbildung 3), so lassen sich in jeder zweidimensionalen Projektion des spektralen Layouts deutliche Unterschiede feststellen: Während das kräftebasierte Verfahren die Knoten mit einer gewissen Regularität in konzentrischen Kreisen anordnet, erscheinen die Knoten im spektralen Layout fast sämtlich an derselben Position.*

Betrachtet man das spektrale Layout des Sternes hingegen als multidimensionales Layout (Abbildung 6), so wird klar, dass auch hier die Knoten auf konzentrischen Hyper-Sphären angeordnet werden.

Ein Vergleich der beiden Methoden erfordert offenbar eine präzisere Auseinandersetzung mit den Eigenschaften selbiger und kann sinnvoll nur in einem geeigneten Kontext erfolgen. Dies

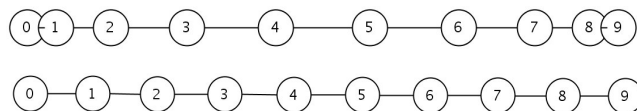


Abbildung 4: Eindimensionaler Vergleich am Beispiel eines Pfades mit $n = 10$ Knoten: Spektrallayout (links) und kräftebasiertes Layout (rechts)

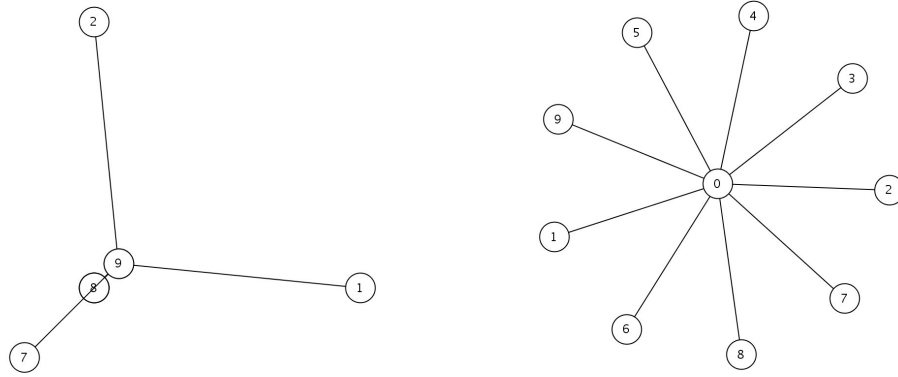


Abbildung 5: Vergleich am Beispiel eines Sternes mit $n = 10$ Knoten: Spektrallayout (links) und kräftebasiertes Layout (rechts)

ist, wie die Beispiele illustrieren sollten, nicht immer die zweidimensionale Zeichenfläche. Im folgenden soll daher ein Ansatz verfolgt werden, welcher die Dimensionalität der Layouts stärker in Betracht zieht.

Zunächst wird in Kapitel 2 die Methodik beim Erstellen von Spektrallayouts erläutert. In Kapitel 3 wird dann das klassische kräftebasierte Layoutverfahren nach Eades [2] für multidimensionale Layouts verallgemeinert. In Kapitel 3.2 wird ein Dimensionsbegriff für kräftebasierte Layouts eingeführt. Schließlich werden die Layoutverfahren in Kapitel 4 auf empirischer Basis verglichen.

2 Spektrallayouts

Ein Graph kann durch verschiedene Matrizen repräsentiert werden. Hierzu zählen die Inzidenzmatrix, die Adjazenzmatrix, die Laplacematrix, sowie die normalisierte Laplacematrix. Im Rahmen von Spektrallayouts werden hauptsächlich die letztgenannten Matrizen benutzt.

Für die vorliegende Arbeit sollen zunächst nur solche Layouts betrachtet werden, die sich aus den Eigenvektoren der mit einem Graphen assoziierten Laplacematrix ergeben.

Definition (*Laplacematrix eines Graphen*)

Sei $G = (V, E)$ ein Graph mit $V = \{0, \dots, n - 1\}$. Die Laplacematrix $L = (l_{i,j})$ von G ist eine $n \times n$ -Matrix mit den folgenden Einträgen:

$$l_{i,j} = \begin{cases} -1 & \text{falls } \{i, j\} \in E \\ d(i) & \text{falls } i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (1)$$

Dabei ist $d(i)$ der Grad des Knotens i . Die Laplacematrix eines Graphen ist symmetrisch.

Für eine Menge $U = \{u^{(1)}, \dots, u^{(r)}\} \subseteq \text{spectrum}L$ von r Eigenvektoren von L lässt sich ein r -dimensionales Layout von G generieren, indem man dem Knoten v die Position $p(v) = (u_v^{(1)}, \dots, u_v^{(r)})^T \in \mathbb{R}^r$ zuweist.

Bemerkung 1. Die Eigenwerte der Laplacematrix sind sämtlich nicht negativ. Für einen Beweis sei auf [11] verwiesen.

Notation. Die Eigenwerte von L werden mit $\text{spectrum}L = \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$ bezeichnet. Dabei gelte $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$. Die zugehörigen Eigenvektoren seien mit v_1, \dots, v_n bezeichnet.

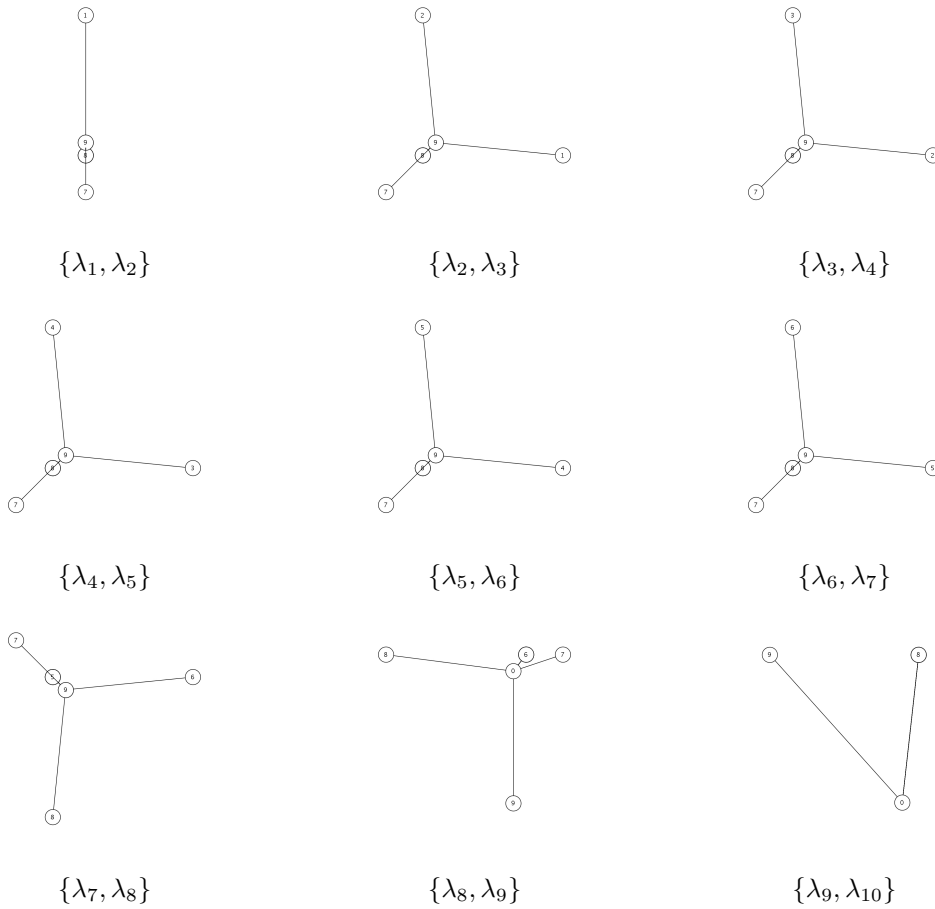


Abbildung 6: Multidimensionales Layout am Beispiel eines Sternes mit $n = 10$ Knoten

Ein dreidimensionaler Hyperwürfel W mit 8 Knoten und Laplacematrix L_W hat die Eigenwerte $\text{spectrum}L_W = \{0, 2, 2, 2, 4, 4, 4, 6\}$. Abbildung 7 zeigt zwei ebene Einbettungen des Graphen bezüglich der Eigenwerte $\{\lambda_2, \lambda_3\} = \{2, 2\}$ beziehungsweise $\{\lambda_4, \lambda_7\} = \{2, 4\}$.

Bemerkung 2. Die Anzahl der Eigenvektoren mit Eigenwert Null entspricht der Anzahl der Zusammenhangskomponenten eines Graphen. Ist ein Graph also zusammenhängend, so gilt $\lambda_1 = 0$ und $\lambda_i > 0$ für $i \in \{2, \dots, n\}$. Für einen Beweis sei auch hier auf [11] verwiesen.

Der Vektor $\mathbf{1}$, der nur aus Einsen besteht ist ein Eigenvektor jeder Laplacematrix zum Eigenwert Null. Dies ergibt sich direkt aus der Definition der Laplacematrix.

Bemerkung 3. Es gelten:

$$\lambda_2 = \min_{x \perp \mathbf{1}_n} \frac{x^T L x}{x^T x} \quad (2)$$

$$\lambda_n = \max_{x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0} \frac{x^T L x}{x^T x} \quad (3)$$

(siehe [11]).

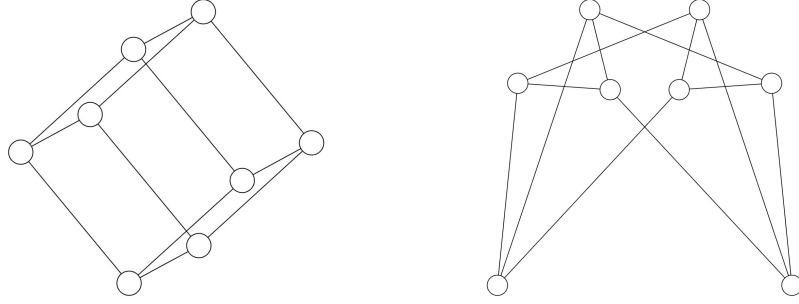


Abbildung 7: Zweidimensionale Einbettung eines dreidimensionalen Hyperwürfels bezüglich der Eigenwerte $\{\lambda_2, \lambda_3\}$ (links) beziehungsweise $\{\lambda_4, \lambda_7\}$ (rechts).

Folglich minimiert v_2 den Term

$$E(x) := x^T L x = \sum_{i,j=1}^n w_{ij} (x_i - x_j)^2 \quad (4)$$

mit $w_{ij} = l_{ij}$ und den Nebenbedingungen

$$x^T x = 1 \quad (5)$$

$$x^T \mathbf{1}_n = 0 \quad (6)$$

Dieser Term entspricht der in [4] definierten Hall'schen Energiefunktion (mit Einheitsgewichten) für eine eindimensionale Koordinate x (siehe auch [7]). In dem resultierenden eindimensionalen Layout werden also die Längen der Kanten unter den gegebenen Nebenbedingungen minimiert. Genauer gesagt minimiert der Term die Länge eines Vektors, welcher als Einträge die (eindimensionalen) Längen der Kanten des Graphen hat. Bezüglich der Energiefunktion von Hall lässt sich der folgende Zusammenhang feststellen.

Korrolar 1. Sei $E(x)$ die Hall'sche Energiefunktion mit Einheitsgewichten für eine eindimensionale Koordinate x gemäß Gleichung 4 und seien v_1, \dots, v_n die Eigenvektoren der zugehörigen Laplacematrix L . Dann gilt

$$E(v_1) \leq E(v_2) \leq \dots \leq E(v_n). \quad (7)$$

Beweis

Sei $i \in \{0, \dots, n\}$ und sei v_i ein Eigenvektor von L zum Eigenwert λ_i . Dann gilt $L v_i = \lambda_i v_i$. Somit gilt dann

$$E(v_i) = v_i^T L v_i = v_i^T \lambda_i v_i = \lambda_i v_i^T v_i = \lambda_i. \quad (8)$$

Also gilt für $j > i$ die Ungleichung $E(v_i) = \lambda_i \leq \lambda_j = E(v_j)$.

□

Sei λ_i ein Eigenwert mit Vielfachheit k . Dann gibt es einen k -dimensionalen Eigenraum von λ_i , welcher von den k Eigenvektoren v_{i_1}, \dots, v_{i_k} mit $i_j \in \{1, \dots, n\}$ zum Eigenwert λ_i aufgespannt wird. Eine Projektion des n -dimensionalen Layouts in diesen Eigenraum hat dann die Eigenschaft, dass die Hall'sche Energie für jede Koordinate des projizierten Layouts gleich ist, nämlich $E(v_{i_j}) = \lambda_i$. Eine solche Projektion genügt also einer gewissen Ausgewogenheit. Die (einzelnen) unter den genannten Nebenbedingungen optimierten Koordinaten sind in einer solchen Projektion gleichwertig. Für zweidimensionale Spektrallayouts verwendet man

in der Regel die Eigenvektoren v_2 und v_3 . Diese haben bezüglich der beiden Koordinaten des zweidimensionalen Layouts die geringste Energie. Der Einseigenvektor $v_1 = \mathbf{1}$ ist ein Eigenvektor jeder Laplacematrix und somit unabhängig vom Graphen. In dieser Eigenschaft ist er für ein Layout nicht aussagekräftig. Der Vektor v_2 minimiert die Länge der Kanten in einem zum Einsvektor orthogonalen Unterraum von \mathbb{R}^n . Der Vektor v_3 minimiert die Länge der Kanten in einem zum Einsvektor und zum Vektor v_2 orthogonalen Unterraum von \mathbb{R}^n . Allgemeiner gilt: Der Vektor v_i minimiert die Länge der Kanten in einem zu v_1, \dots, v_{i-1} orthogonalen Unterraum. Für ein solches Layout gilt, dass die Projektionen der Koordinaten auf die Achsen eine gewisse Minimalität bei gleichzeitiger Orthogonalität aufweisen. Hieraus ergibt sich, dass auch die effektiven Kanten einer gewissen Minimalität genügen.

Die Orthogonalität sorgt in einem n -dimensionalen Spektrallayout dafür, dass je zwei Knoten unterschiedliche Positionen im \mathbb{R}^n einnehmen. Diese Eigenschaft bleibt für r -dimensionale Projektionen mit $r < n$ im Allgemeinen allerdings nicht erhalten, wie man am Beispiel der zweidimensionalen Projektion des Sterns in Abbildung 3 nachvollziehen kann. Ferner betragen die Kanten- und Nichtkanten-Längen eines beliebigen Spektrallayouts eines Graphen mit n Knoten im \mathbb{R}^n genau $\sqrt{2}$ als Folge der Normierung und der Orthogonalität der Eigenvektoren.

Korollar 2. *Die Länge der Kanten und Nichtkanten eines n -dimensionalen Spektrallayouts eines Graphen G mit n Knoten beträgt $\sqrt{2}$.*

Beweis

Sei L die zu G gehörige Laplace-Matrix. Dann existiert eine orthogonale Matrix Q mit

$$Q^T L Q = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n). \tag{9}$$

Die Spalten von Q sind die Eigenvektoren von L . Ein n -dimensionales Spektrallayout erhält man, wenn man den Knoten von G als Koordinaten je eine Spalte der Matrix Q^T zuweist. Da Q orthogonal ist, ist auch Q^T orthogonal, und es gilt $Q Q^T = Q^T Q = E$. Seien nun x_i, x_j zwei Spaltenvektoren der Matrix Q^T , mithin die Koordinaten der Knoten v_i beziehungsweise v_j . Dann gilt $x_i^T x_j = \delta_{ij}$. Seien $i \neq j$. Dann gilt $\|x_i\| = \|x_j\| = 1$ wegen $\|x_i\| = \sqrt{x_i^T x_i} = 1$ und x_i ist orthogonal zu x_j . Mit dem Satz des Pythagoras folgt dann, dass $\|x_i - x_j\| = \sqrt{\|x_i\|^2 + \|x_j\|^2} = \sqrt{2}$.

□

Betrachtet man also ein multidimensionales Spektrallayout nur hinsichtlich seiner Kantenlängen, d.h. ungeachtet isometrischer Transformationen, so gleichen sich die Spektrallayouts unterschiedlicher Graphen mit gleicher Knotenzahl vollkommen. Die Spektrallayouts unterschiedlicher Graphen gleicher Knotenzahl unterscheiden sich also lediglich bezüglich ihrer Lage und Orientierung im Raum. Tabelle 1 zeigt die Spektren ausgewählter Graphen, bei denen sich diese in geschlossener Form angeben lassen.

3 Kräftebasierte Layouts

Kräftebasierte Layouttechniken sind nach [1] vor allem aus drei Gründen so attraktiv: Erstens sind sie sehr intuitiv, da sie sich auf (physikalische) Gesetzmäßigkeiten beziehen, die der Alltagserfahrung entspringen. Zweitens sind die Layout-Paradigmen dieser Techniken relativ einfach zu verstehen und zu programmieren, und drittens schließlich erzielen sie auf kleineren Graphen mit bis zu 50 Knoten zufriedenstellende Ergebnisse. Sie beruhen gemäß [1] einerseits auf einem *Modell* von physikalischen Objekten, welche die Knoten und Kanten des

Graph		Spektrum
Pfad	P_n	$\{2 - 2 \cos\left(\frac{\pi(k-1)}{n}\right) \mid k \in \{1, \dots, n\}\}$
Kreis	C_n	$\{2 - 2 \cos\left(\frac{2\pi(k-1)}{n}\right) \mid k \in \{1, \dots, n\}\}$
Hypercubus	P_2^d	$\{2i \mid i = 0, \dots, d \text{ mit Vielfachheit } \binom{d}{i}\}$
Stern	S_n	$\{0, 1, \dots, 1, n\}$
Clique	K_n	$\{0, n, \dots, n\}$
Kart. Produkt	$G \square H$	$\{\lambda_i(G) + \lambda_j(H)\}$

Tabelle 1: Spektren ausgewählter Graphen

Graphen repräsentieren, und einem *Algorithmus* andererseits, welcher eine Gleichgewichts-Konfiguration des Systems approximiert. Die genaue Beschreibung des Modells beinhaltet bei diesen Layout-Methoden bereits die vollständige ästhetische Information, welche idealerweise graphenabhängig ist.

3.1 Multidimensionale Erweiterung des klassischen kräftebasierten Layoutverfahrens nach Eades

Die Grundlage für viele Verfeinerungen und Erweiterungen lieferte Eades [2] bereits 1984 in einem kurzen Beitrag mit seinem “embedder”, einer auf physikalischen Analogien beruhenden Heuristik zum Zeichnen von Graphen, deren strukturelle Eigenschaften unbekannt sind. In einem solchen Fall ist es offensichtlich sinnvoll, ein Layout anzustreben, bei welchem die Kanten des Graphen die gleiche Länge haben. Dem steht entgegen, dass nicht jeder Graph eine solche Einbettung zulässt, und dass bereits die Frage, ob eine solche Einbettung für einen gegebenen Graphen existiere, \mathcal{NP} -hart ist.

Der “embedder” hat ein Layout zum Ziel, bei welchem die Kanten möglichst gleich lang sind und die Symmetrie des Graphen möglichst gut ablesbar ist. Eades beruft sich auf folgende Analogien:

- Um eine gleichmäßige Verteilung der Knoten über die Zeichenfläche zu erreichen, werden die Knoten als sich gegenseitig abstoßende Objekte modelliert. Die Abstoßung nimmt mit der Entfernung zweier Knoten ab und betrifft nur nicht adjazente Knoten.
- Kanten hingegen werden durch Federn modelliert, was gegenüber anderen physikalischen Analogien den Vorteil hat, dass die Kanten ausgehend von ihrer optimalen Länge sowohl gedehnt als auch gestaucht werden können. Die Federn werden nicht linear nach dem Hook’schen Gesetz modelliert, sondern logarithmisch.

Es sei erwähnt, dass die Abstoßung der Knoten untereinander es erfordert, dass ein zu zeichnender Graph zusammenhängend ist, da andernfalls die Zusammenhangskomponenten in unterschiedliche Richtungen auseinanderdriften würden.

Im folgenden soll eine genauere Beschreibung der Kräfte gegeben und der Algorithmus vorgestellt werden. Die zugrundeliegenden Definitionen beziehen sich bei Eades jeweils auf eine zweidimensionale Zeichenebene. Sie sollen hier jedoch für ein mehrdimensionales Layout erweitert werden.

Notation. Sei $G = (V, E)$ ein zusammenhängender, ungerichteter Graph und $p = (p_v)_{v \in V}$ ein Vektor von Knotenpositionen $p_v = (x_1^{(v)}, \dots, x_r^{(v)})^T \in \mathbb{R}^r$ in einem r -dimensionalen (reellen) Vektorraum. Der Vektor p heißt *Konfiguration* von G . Dann bezeichne $\overrightarrow{p_u p_v}$ den Einheitsvektor $\frac{p_v - p_u}{\|p_v - p_u\|}$, welcher von p_u nach p_v zeigt.

Die abstoßende Kraft zwischen zwei nicht adjazenten Knoten $u, v \in V$ ist gegeben durch

$$f_{rep}(p_u, p_v) = \frac{c_p}{\|p_u - p_v\|^2} \cdot \overrightarrow{p_u p_v}. \quad (10)$$

Die Federkraft zwischen zwei adjazenten Knoten $u, v \in V$ hingegen ist gegeben durch

$$f_{spring}(p_u, p_v) = c_\sigma \log \frac{\|p_u - p_v\|}{l} \cdot \overrightarrow{p_u p_v}. \quad (11)$$

Die Federkraft verschwindet, wenn die Kante $\{u, v\}$ genau die Länge l hat. Eine Dehnung der Kante verursacht eine Kraft, welche die adjazenten Knoten zusammenzieht, ein Stauchung hingegen verursacht eine Kraft, die die beiden Knoten auseinandertreibt. Über die Konstanten c_σ und c_p lassen sich die Kräfte regulieren. Abbildung 8 illustriert die Wirkungsweise der Federkraft-Analogie.

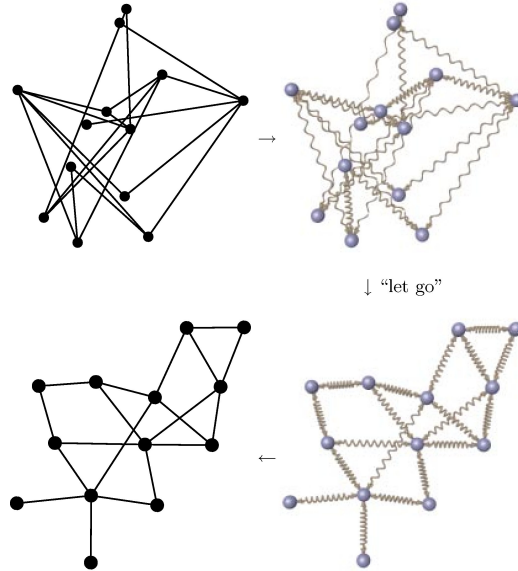


Abbildung 8: Die Analogie der Federkräfte [1].

Für jede Konfiguration p und jeden Knoten v lässt sich der sogenannte *Kraft-Verschiebungsvektor* $F_v(p)$ aus der Summe aller im Knoten v wirkenden Kräfte berechnen. Ist dieser Vektor in jedem Knoten des Graphen der Nullvektor, so befindet sich der Graph in einem Gleichgewichtszustand. Der Spring Embedder-Algorithmus (Algorithmus 3.1) approximiert einen solchen Gleichgewichtszustand, indem er jeden Knoten v in jedem Schritt der Iteration ein Stück weit entlang seines Kraft-Verschiebungsvektors bewegt. Dieser Prozess entspricht einer Relaxation der im Knoten v wirkenden Kräfte und kommt der Minimierung einer impliziten Bewertungsfunktion gleich, die auf den Kräften beruht. Dabei ist die Wahl des Parameters δ , welcher die Schrittgröße bestimmt, von entscheidender Bedeutung: Wählt man δ zu klein besteht die Gefahr ein lokales Minimum zu approximieren. Überdies erhöht eine solche Wahl die Anzahl der notwendigen Iterationen beträchtlich. Wählt man δ hingegen zu groß kann es zu unnötigen Oszillationen kommen – auch dies erhöht die Anzahl der nötigen Iterationen.

Algorithmus 3.1. Spring Embedder

```

begin
  for  $t \leftarrow 1$  to ITERATIONS do
    for  $v \in V$  do
       $F_v(p) \leftarrow \sum_{u:\{u,v\} \notin E} f_{rep}(p_u, p_v) + \sum_{u:\{u,v\} \in E} f_{spring}(p_u, p_v)$ 
    od
    for  $v \in V$  do
       $p_v \leftarrow p_v + \delta \cdot F_v(p)$ 
    od
  od
end
    
```

3.2 Der Dimensionsbegriff

Der multidimensionale Spring Embedder kann im Prinzip im \mathbb{R}^N für beliebige $N \in \mathbb{N}$ verwendet werden. Die n Knoten eines Graphen können jedoch einen maximal $(n - 1)$ -dimensionalen Raum aufspannen, so dass man die Betrachtungen für einen gegebenen Graphen ohne weiteres auf ein $N \leq n - 1$ einschränken kann. In jedem Schritt der Iteration des Spring Embedders ist das Layout maximal $(n - 1)$ -dimensional. Zudem scheinen die meisten Graphen sogar erheblich weniger Dimensionen zur vollen Entfaltung zu benötigen. Die Knoten eines Pfades etwa sind nach einer ausreichenden Anzahl von Iterationen des multidimensionalen Spring Embedders fast kollinear. Ein Großteil der Information einer $(n - 1)$ -dimensionalen Repräsentation eines Pfades kann infolgedessen auch in einer eindimensionalen Repräsentation wiedergegeben werden. Der intuitive Gedanke diesen Sachverhalt mit einem Dimensionsbegriff zu verbinden ist naheliegend. Im folgenden soll ein solcher Dimensionsbegriff präzisiert werden. Zunächst jedoch noch einige Definitionen.

Definition (*Matrix der normalisierten Differenzvektoren*)

Sei p eine Konfiguration eines Graphen G mit n Knoten v_1, \dots, v_n im \mathbb{R}^N . Die $(N \times \binom{n}{2})$ -Matrix

$$D = D(p) = (\overrightarrow{p_{v_1}p_{v_2}} \mid \cdots \mid \overrightarrow{p_{v_{n-1}}p_{v_n}}) \quad (12)$$

heißt *Matrix der normalisierten Differenzvektoren*.

Der Rang dieser Matrix ist maximal $n - 1$ und gibt an, wieviel linear unabhängige Kanten- und Nicht-Kanten-Vektoren es gibt. Er entspricht somit der minimalen Anzahl an Dimensionen, die man benötigte, um einen solchen – in geeigneter Weise rotierten – Graphen zeichnen zu können. Erwartungsgemäß müsste der Rang dieser Matrix für einen Pfad mit n Knoten also genau eins betragen. Es wäre daher naheliegend, die Dimension eines Graphen durch den Rang dieser Matrix anzugeben, wenn die zugrundeliegende Konfiguration des Graphen im Gleichgewicht ist, d.h. wenn der Kraft-Verschiebungsvektor in jedem Knoten der Nullvektor ist. Diese Definition jedoch ist nicht wohldefiniert, wie das folgende Beispiel illustrieren soll. Zwar befinden sich beide in Abbildung 9 dargestellten Konfigurationen eines Pfades im Gleichgewicht. Der Rang der zugehörigen Matrizen jedoch ist im einen Fall eins und im anderen zwei.

Um Fälle wie den in Abbildung 9 vorgestellten auszuschließen, muss die Definition der Dimension erweitert werden. Leider reicht es nicht aus die Dimension über den kleinsten Rang

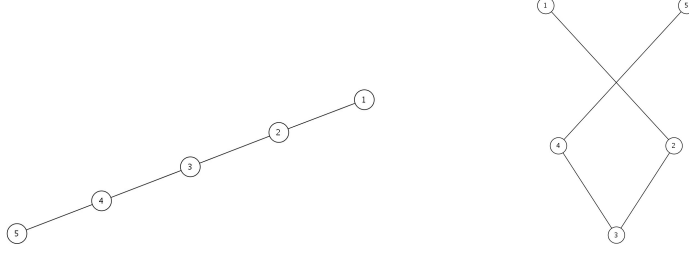


Abbildung 9: Ein- und zweidimensionale Gleichgewichtskonfiguration eines Pfades

aller sich im Gleichgewicht befindlichen Einbettungen zu definieren. Initiiert man einen beliebigen Graphen mit kollinearen Knoten, so sind auch alle in diesem Layout wirkenden Kraft-Vektoren in einem eindimensionalen Unterraum. Der Spring Embedder konvergiert dann in dem durch die Knoten aufgespannten eindimensionalen Unterraum. Auf diese Weise lässt sich auch eine eindimensionale Einbettung eines Kreises finden. Allerdings sind diese Konfigurationen nicht stabil in dem Sinne, dass eine leichte Störung der Kollinearität der Knoten bereits die Beschränkung auf einen eindimensionalen Unterraum aufheben würde. Auch das in Abbildung 9 dargestellte Layout ist nicht stabil in diesem Sinne. Ein solches Layout eines Pfades ist zwar als Ergebnis des Spring Embedder Algorithmus aufgrund dieser Instabilität äußerst unwahrscheinlich, es zeigt jedoch, dass solche Konfigurationen grundsätzlich existieren. Zudem könnten diese bei komplexeren Graphen sogar ein wenig stabiler sein und durchaus als Resultat einer Spring Embedder Optimierung in Erscheinung treten – man stelle sich etwa ein zweidimensionales Gitter vor, bei welchem die Knoten (etwa durch ein zufälliges Initiallayout) auf komplexe Weise ineinander verwoben sind. Im folgenden soll der Versuch unternommen werden, die implizite Bewertungsfunktion des Spring Embedders explizit anzugeben. Sinnvollerweise müsste eine solche Bewertungsfunktion die in einer Konfiguration eines Graphen wirkenden Kräfte in ihrer Gesamtheit erfassen. Die folgende Definition stellt einen möglichen Ansatz hierzu dar.

Definition (*Potential*)

Das Potential P einer Konfiguration p eines Graphen G ist gegeben durch die Formel

$$P = P(p) = \sum_{\{u,v\} \in E} \|f_{spring}(u,v)\| + \sum_{\{u,v\} \notin E} \|f_{rep}(u,v)\|. \quad (13)$$

Folglich gilt

$$P = \sum_{\{u,v\} \in E} \left| c_\sigma \log \frac{\|p_u - p_v\|}{l} \right| + \sum_{\{u,v\} \notin E} \left| \frac{c_\rho}{\|p_u - p_v\|^2} \right|. \quad (14)$$

Die Dimension eines Graphen in Hinblick auf sein Spring Embedder Layout lässt sich dann wie folgt formulieren.

Definition (*Dimension*)

Sei G ein Graph und \hat{p} eine Gleichgewichts-Konfiguration von G mit minimalem Potential, d.h.

$$\hat{p} = \operatorname{argmin}_{p \in \Sigma} P(p) \quad (15)$$

mit $\Sigma = \{p \in \mathbb{R}^{V \times n-1} \mid p \text{ ist Gleichgewichtskonfiguration von } G\}$. Sei $D(\hat{p})$ die zu \hat{p} gehörige Matrix der normalisierten Differenzvektoren. Dann ist die Dimension von G der Rang der Matrix D , also

$$\dim(G) = \operatorname{rank}(D(\hat{p})). \quad (16)$$

Hiermit lässt sich die in Abbildung 9 vorgestellte Problematik umgehen: Die eindimensionale Einbettung des Pfades hat mit 0.4170 ein deutlich geringeres Potential als die zweidimensionale Einbettung mit 1.1939.

3.2.1 Wohldefiniertheit

Zunächst sollen die Eigenschaften des Potentials, welches der im vorigen Kapitel gegebenen Definition der Dimension zugrundeliegt, etwas genauer untersucht werden. Dabei wird neben einer Untersuchung der extremalen Eigenschaften des Potentials, also der Frage nach *Existenz* und *Eindeutigkeit* eines Potential-Minimums, die Frage nach der *Verträglichkeit* des Potentials mit der auf den Kraft-Verschiebungsvektor eines Graphen beruhenden Update-Strategie des Spring Embedders im Vordergrund stehen. Ferner streift das Kapitel einige interessante Aspekte des kräftebasierten Ansatzes, ohne jedoch den Anspruch zu erheben, diese in ihrer Gesamtheit erklären zu wollen.

Existenz

Die in Kapitel 3.2 gegebene Definition der Konfiguration eines Graphen und des Potentials bezieht sich explizit auf die Koordinaten der einzelnen Knoten. Dennoch ist das Potential unabhängig von isometrischen Transformationen des Layouts. Eine Drehung des Layouts um einen Winkel α oder eine Spiegelung verändert zwar die Lage des Layouts auf der Zeichenfläche und somit die Konfiguration des Graphen, lässt aber das Potential invariant, da die Längenverhältnisse gleich bleiben, und das Potential im Grunde genommen eine Funktion von (Kanten- und Nicht-Kanten)-Längen ist. Es erscheint also sinnvoll, von den Koordinaten eines Layouts zu abstrahieren und die Konfiguration eines Graphen als Konfiguration der Längen seiner Kanten und Nicht-Kanten zu betrachten.

Definition (*Äquivalenzklasse einer Konfiguration*)

Die Äquivalenzklasse $[p]$ einer Konfiguration $p = (p_v)_{v \in V}$ im \mathbb{R}^N ist gegeben durch

$$[p] := \{ \Phi(p) \in \mathbb{R}^{V \times N} \mid \Phi : \mathbb{R}^{V \times N} \rightarrow \mathbb{R}^{V \times N}, \Phi|_V \text{ Isometrie} \}. \quad (17)$$

Korrolar 3. $[p] = \{ p' = (p'_v)_{v \in V} \mid \forall u, v \in V : \|p'_u - p'_v\| = \|p_u - p_v\| \}$

Beweis

Sei $\Phi : \mathbb{R}^{V \times N} \rightarrow \mathbb{R}^{V \times N}$ eine Abbildung, welche p auf p' mit $\|p'_u - p'_v\| = \|p_u - p_v\|$ abbildet. Dann ist $\Phi|_V$ eine Isometrie. Also gilt $\{ p' = (p'_v)_{v \in V} \mid \forall u, v \in V : \|p'_u - p'_v\| = \|p_u - p_v\| \} \subseteq [p]$. Die umgekehrte Richtung folgt direkt aus der Definition der Äquivalenzklasse.

□

Die Äquivalenzklasse einer Konfiguration p wird also genau von der Menge der Konfigurationen mit gleichen Kanten- und Nicht-Kanten-Längen gebildet.

Notation. Im Folgenden ist mit einer Konfiguration eines Graphen immer eine Konfiguration der Längen seiner Kanten und Nicht-Kanten gemeint. Eine solche Konfiguration x kann

als Vektor in einem $\binom{n}{2}$ -dimensionalen (reellen) Vektorraum, dem *Konfigurationsraum* aufgefasst werden. Darüber hinaus bezeichne M im folgenden die Anzahl der Kanten und Nicht-Kanten in einem Graph mit n Knoten, mithin $\binom{n}{2}$. Sei $x = (x_1, \dots, x_m, x_{m+1}, \dots, x_M)^T$ eine Konfiguration eines Graphen G mit n Knoten und m Kanten. Dann bezeichnen x_1, \dots, x_m die Längen der Kanten von G und x_{m+1}, \dots, x_M die Längen der Nicht-Kanten von G .

Hiermit wird das Potential eines Graphen zu einer Funktion von Kanten- und Nicht-Kanten-Längen gemäß der folgenden Definition.

Definition (Potential-Funktion)

Sei $U := \{x = (x_i) \in \mathbb{R}^M \mid x_i > 0\} \subset \mathbb{R}^M$. Die Potential-Funktion F ist gegeben durch

$$\begin{aligned} F : U \subset \mathbb{R}^M &\longrightarrow \mathbb{R} \\ x &\longmapsto F(x) := \sum_{i=1}^m |c_\sigma \log \frac{x_i}{l}| + \sum_{i=m+1}^M \frac{c_\rho}{x_i^2} \end{aligned}$$

Die Potential-Funktion entspricht also dem bereits definierten Potential, wenn man als Parameter nicht die Koordinaten der Knoten, sondern die Längen der Konfiguration angibt, und ist als eine Funktion auf den Konfigurations-Äquivalenzklassen eines Graphen zu verstehen. Bei dieser Transformation ist zu beobachten, dass nun nicht länger jede Konfiguration in \mathbb{R}^M eine gültige Konfiguration ist. Bei der Definition der Konfiguration eines Graphen über die Koordinaten seiner Knoten ist jede Konfiguration $p \in \mathbb{R}^{V \times N}$ im \mathbb{R}^N eine gültige Konfiguration. Bei einer Definition über die Längen hingegen ist die Konfiguration $(1, 1, 3)^T$ eines Dreiecks etwa nicht gültig, da sie eine Dreiecksungleichung verletzt. Ein Vorteil dieser Vorgehensweise allerdings ist, dass sie zunächst unabhängig von der Dimension des zugrundeliegenden Koordinatenraumes ist.

Lemma 1. *Die Funktion F ist stetig in $U := \{x = (x_i) \in \mathbb{R}^M \mid x_i > 0\} \subset \mathbb{R}^M$.*

Beweis

Seien $x \in U \subset \mathbb{R}^M$ und $\varepsilon > 0$ gegeben. Seien f, g gegeben durch

$$\begin{aligned} f(x) : (0, \infty) &\longrightarrow \mathbb{R} \\ x &\longmapsto f(x) = |c_\sigma \log \frac{x}{l}| \\ g(x) : (0, \infty) &\longrightarrow \mathbb{R} \\ x &\longmapsto g(x) = \frac{c_\rho}{x^2}. \end{aligned} \tag{18}$$

Da f und g stetig in $(0, \infty)$ sind, existiert zu jedem x_i mit $i \leq m$ ein δ_i , so dass $|f(x_i) - f(x)| \leq \frac{\varepsilon}{M}$ und zu jedem x_i mit $i > m$ ein δ_i , so dass $|g(x_i) - g(x)| \leq \frac{\varepsilon}{M}$ für alle x mit $|x_i - x| \leq \delta_i$.

Sei $\delta = \min \delta_i$ und sei $y \in \mathbb{R}^M$ mit $\|x - y\| \leq \delta$. Dann gilt $|x_i - y_i| \leq \delta \leq \delta_i$ für alle $i \in \{1, \dots, M\}$.

Also gilt

$$|F(x) - F(y)| = \left| \sum_{i=1}^m f(x_i) + \sum_{i=m+1}^M g(x_i) - \sum_{i=1}^m f(y_i) + \sum_{i=m+1}^M g(y_i) \right| \quad (19)$$

$$= \left| \sum_{i=1}^m \{f(x_i) - f(y_i)\} + \sum_{i=m+1}^M \{g(x_i) - g(y_i)\} \right| \quad (20)$$

$$\leq \sum_{i=1}^m |f(x_i) - f(y_i)| + \sum_{i=m+1}^M |g(x_i) - g(y_i)| \quad (21)$$

$$\leq \sum_{i=1}^m \frac{\varepsilon}{M} + \sum_{i=m+1}^M \frac{\varepsilon}{M} \quad (22)$$

$$= M \cdot \frac{\varepsilon}{M} = \varepsilon \quad (23)$$

□

Zu klären ist nun, wann eine Konfiguration $x \in \mathbb{R}^M$ von Kanten- und Nichtkanten-Längen eine gültige Konfiguration in dem Sinne ist, dass sie in einem N -dimensionalen Raum realisiert werden kann. Eine notwendige Bedingung hierfür ist sicherlich, dass alle Dreiecksungleichungen für die gegebene Konfiguration x erfüllt sind. Die Menge der Dreiecke in G ist gegeben durch

$$\text{triangles}^0(G) = \left\{ \{u, v, w\} \mid u, v, w \in V : \{u, v\}, \{v, w\}, \{w, u\} \in \binom{V}{2} \right\} \quad (24)$$

und schließt im Gegensatz zur allgemein üblichen Definition der Dreiecke eines Graphen auch solche Dreiecke ein, die mit den Nicht-Kanten des Graphen gebildet werden, was durch den Index null angedeutet werden soll.

Korrolar 4. *In einem Graphen mit n Knoten gibt es*

$$D_n = \sum_{i=2}^{n-1} \binom{i}{2}. \quad (25)$$

Dreiecke in $\text{triangles}^0(G)$.

Beweis

Für den Beweis betrachte man nacheinander die Knoten des Graphen. Für einen beliebigen Knoten beträgt die Anzahl der inzidenten Kanten $n-1$ und man kann genau $\binom{n-1}{2}$ Dreiecke bilden, die diesen Knoten beinhalten. Alle weiteren Dreiecke können diesen Knoten nicht mehr beinhalten, so dass die Rekursionsformel

$$D_n = \binom{n-1}{2} + D_{n-1} \quad (26)$$

gilt. Hieraus folgt die obige Formel.

□

Zu jedem solchen Dreieck mit den Kantenlängen a, b, c gibt es Dreiecksungleichungen der Form

$$|b - c| \leq a \leq b + c \quad (27)$$

Analoge Ungleichungen gelten für die Seiten b und c . Diese Form der Dreiecksungleichung schließt auch degenerierte Dreiecke ein, deren Eckpunkte kollinear sind.

An einem Beispiel soll nun gezeigt werden, dass der Umkehrschluß, dass nämlich jede Konfiguration, die sämtliche Dreiecksungleichungen erfüllt, eine gültige Konfiguration sei, leider falsch ist. Man stelle sich einen Graphen mit $n = 4$ Knoten vor, dessen Kanten mit Länge eins beziehungsweise d wie in Abbildung 10 vorgegeben sind. Die Kante der Länge d erreicht bei einer ebenen Einbettung des Graphen ihre maximale Länge von $\sqrt{3}$, wie sich leicht nachvollziehen lässt. Jede Konfiguration mit $d \leq \sqrt{3}$ ist eine gültige Konfiguration des Graphen. Jedoch auch die Konfiguration mit $d = 2$ erfüllt alle Dreiecksungleichungen, obwohl $2 > \sqrt{3}$ gilt. Dieser Sachverhalt kann mit einer Modifikation der bestehenden Dreiecksungleichung ausgedrückt werden. Eine Modifikation einer Dreiecksungleichung dieser Art ergibt eine (modifizierte) Dreiecksungleichung der Form

$$\alpha_0 |b - c| \leq a \leq \alpha_1 (b + c) \quad (28)$$

mit $0 \leq \alpha_0, \alpha_1 \leq 1$. Die Faktoren α_0 und α_1 reflektieren den Kontext der Winkel der gegebenen Seite. Der Winkel φ , welcher in Abbildung 10 von der Kante der Länge d und einer beliebigen weiteren Kante eingeschlossen wird, ist auf das Intervall $[\frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{2}]$ beschränkt, so dass in diesem Fall die modifizierte Dreiecksungleichung durch

$$0 = \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) |b - c| \leq a \leq \frac{\pi}{6} (b + c) = \frac{\sqrt{3}}{2} (b + c) = \sqrt{3} \quad (29)$$

gegeben ist. Im Allgemeinen ist selbstverständlich nur das restriktivste Winkelintervall von Bedeutung.

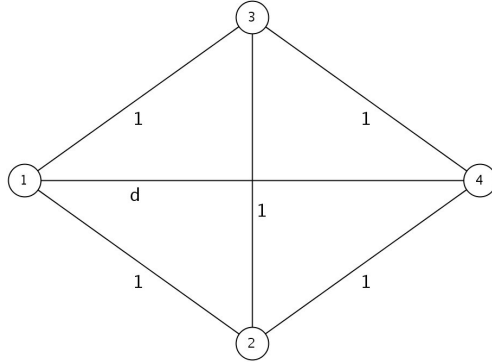


Abbildung 10: Graph mit $n = 4$ Knoten

Notation. Eine Konfiguration x von Längen, welche diese Nebenbedingungen in Form von (modifizierten) Dreiecksungleichungen erfüllt, ist eine gültige Konfiguration. Dies werde mit $Nb(x)$ bezeichnet.

Definition (Konfigurationsraum)

Der Konfigurationsraum K ist gegeben durch

$$K := \{x \in \mathbb{R}^M \mid Nb(x)\} \subseteq \mathbb{R}^M \quad (30)$$

und bezeichnet die Menge der gültigen Konfigurationen eines Graphen mit n Knoten.

Nach Wahl der Nebenbedingungen existiert zu jeder Längenkonfiguration von G ein gültige Koordinatenkonfiguration, also eine Konfiguration $p = (p_v)_{v \in V}$ im \mathbb{R}^{n-1} , welche die Längen von x realisiert.

Lemma 2. *Der Konfigurationsraum K ist konvex.*

Beweis

Seien $x, y \in K$, seien weiter $\lambda \in (0, 1)$ und $z := \lambda x + (1 - \lambda)y$. Die Nebenbedingungen für eine gültige Konfiguration haben die Form

$$\alpha_0|x_k - x_l| \leq x_i \leq \alpha_1(x_k + x_l)$$

für ein Dreieck mit den Kanten i, k, l . Falls die Dreiecksungleichung nicht modifiziert ist, gilt $\alpha_0 = \alpha_1 = 1$. Da $x, y \in K$ gelten folglich:

$$\alpha_0|x_k - x_l| \leq x_i \leq \alpha_1(x_k + x_l)$$

sowie

$$\alpha_0|y_k - y_l| \leq y_i \leq \alpha_1(y_k + y_l).$$

Hieraus folgt nun

$$z_i = \lambda x_i + (1 - \lambda)y_i \tag{31}$$

$$\leq \lambda \alpha_1(x_k + x_l) + (1 - \lambda)\alpha_1(y_k + y_l) \tag{32}$$

$$= \alpha_1(\lambda x_k + (1 - \lambda)x_l + \lambda y_k + (1 - \lambda)y_l) \tag{33}$$

$$= \alpha_1(z_k + z_l) \tag{34}$$

und weiter

$$z_i = \lambda x_i + (1 - \lambda)y_i \tag{35}$$

$$\geq \lambda \alpha_0|x_k - x_l| + (1 - \lambda)\alpha_0|y_k - y_l| \tag{36}$$

$$\geq \alpha_0|\lambda(x_k - x_l) + (1 - \lambda)(y_k - y_l)| \tag{37}$$

$$= \alpha_0|\lambda x_k + (1 - \lambda)y_k - (\lambda x_l + (1 - \lambda)y_l)| \tag{38}$$

$$= \alpha_0|z_k - z_l| \tag{39}$$

Also erfüllt auch z_i die Nebenbedingung, und es gilt $z \in K$.

□

Um zu die Existenz eines Potential-Minimums zu zeigen, soll zunächst der Suchraum für eventuell vorhandene Minima eingeschränkt werden. Es lässt sich nämlich zeigen, dass die Konfigurationen mit "geringem" Potential in einem beschränkten Unterraum von K liegen. K selbst ist nicht beschränkt.

Lemma 3. *Der Konfigurationsraum K ist nicht beschränkt.*

Beweis

Sei $x \in K$ mit $\|x\| = 1$ und $Nb(x)$, d.h. x erfüllt die Dreiecksungleichungen. Dann gilt auch $Nb(tx)$ für beliebige $t > 0$, denn

$$\alpha_0|tx_k - tx_l| = t\alpha_0|x_k - x_l| \leq tx_i \leq \alpha_1 t(x_k + x_l) = \alpha_1(tx_k + tx_l). \tag{40}$$

Ferner gilt

$$\|tx\| = t \rightarrow \infty \quad (t \rightarrow \infty) \tag{41}$$

□

Genau genommen lässt sich die Aussage des Lemmas noch etwas präzisieren. Eine Konfiguration x mit $\|x\| = 1$ lässt sich als vorgegebenes Seitenverhältnis der Kanten und Nicht-Kanten eines Graphen interpretieren. Der Faktor t skaliert dieses Seitenverhältnis, ohne dabei die Dreiecksungleichungen zu verletzen. Man kann zeigen, dass es zu jeder solchen Konfiguration ein eindeutig bestimmtes t_0 gibt mit $F(t_0x) = \min_{t>0} F(tx)$.

Theorem 1. *Die Funktion F besitzt in jeder Richtung $e \in K$ – d.h. es gilt $Nb(e)$ – ein eindeutiges Minimum.*

Beweis

Sei $G(t) := F(te)$. Seien weiter $I(t) := \{i \in \{0, \dots, m-1\} \mid t < \frac{1}{e_i}\}$ und $J(t) := \{i \in \{0, \dots, m-1\} \mid t > \frac{1}{e_i}\}$. Dann gilt

$$G'(t) = \sum_{i \in J} \frac{1}{t} - \sum_{i \in I} \frac{1}{t} - \sum_{i=m}^{M-1} \frac{c_\rho}{t^3 e_i^2} \quad (t \neq \frac{1}{e_i}; i = 0, \dots, m-1) \quad (42)$$

$$= \frac{1}{t} \left(\#J(t) - \#I(t) - \frac{1}{t^2} \cdot \underbrace{\sum_{i=m}^{M-1} \frac{c_\rho}{e_i^2}}_{=: c \text{ konst.}} \right) \quad (t \neq \frac{1}{e_i}; i = 0, \dots, m-1). \quad (43)$$

Für $t < \min_{i=0, \dots, m-1} \{\frac{1}{e_i}\}$ gilt $G'(t) < 0$, da in diesem Falle $\#J = 0$ und $\#I = m$ gilt. Der Term $\#J - \#I$ ist monoton steigend in t , der Term $\frac{1}{t^2} \cdot c$ ist streng monoton fallend. G' ist stückweise definiert, und zwar jeweils auf den Intervallen $(\frac{1}{e_i}, \frac{1}{e_j})$, wobei $\frac{1}{e_j}$ der “nächstgrößere” Term dieser Art ist. Innerhalb dieser Intervalle ist der Term $\#J - \#I$ jeweils konstant und der Klammerterm ist streng monoton steigend.

Sei $\phi(i)$ die Vielfachheit der Kantenlänge e_i . Dann gilt:

$$\lim_{t \rightarrow \frac{1}{e_i}, t < \frac{1}{e_i}} G'(t) = \left(\#J\left(\frac{1}{e_i}\right) - \#I\left(\frac{1}{e_i}\right) - e_i^2 \cdot c - \phi(i) \right) \cdot e_i \quad (44)$$

und

$$\lim_{t \rightarrow \frac{1}{e_i}, t > \frac{1}{e_i}} G'(t) = \left(\#J\left(\frac{1}{e_i}\right) - \#I\left(\frac{1}{e_i}\right) - e_i^2 \cdot c + \phi(i) \right) \cdot e_i \quad (45)$$

Bei $t = \frac{1}{e_i}$ macht die Ableitung also einen echt positiven Sprung der Höhe $2\phi(i)e_i$. Somit ist die G' auf dem gesamten Definitionsbereich streng monoton steigend, d.h. es gibt ein eindeutiges $t_0 \in \mathbb{R}$, so dass $G'(t) < 0$ für $t < t_0$ und $G'(t) > 0$ für $t > t_0$. Also hat G in t_0 ein eindeutiges Minimum. □

Von grundlegendem Interesse ist aber auch die Frage, wie sich Konfigurationen verhalten, wenn die Kanten des Graphen unterschiedlich skaliert werden. An einer einzelnen Dreiecksungleichung lässt sich bereits verdeutlichen, dass ein beliebiges Skalieren einzelner Kanten nicht immer möglich ist. Fixiert man zwei Kanten eines Dreiecks, so ist die Länge der dritten Kante aufgrund der Dreiecksungleichung auf ein abgeschlossenes (reelles) Intervall beschränkt.

Notation. Eine Kante eines Graphen, deren Länge durch ein abgeschlossenes (reelles) Intervall $[a, b]$ beschränkt ist, heißt *restringiert*.

Die folgenden Lemmata über Restriktionen von Kanten und Nicht-Kanten werden für die Konstruktion eines geeigneten Suchraumes benötigt.

Lemma 4. *Sind zwei Kanten eines Dreiecks restringiert, so auch die dritte.*

Beweis

Die Kantenlängen seien durch a, b, c bezeichnet und es gelte $a \in [a_0, a_1], b \in [b_0, b_1]$. Dann gilt

$$|a_0 - b_0| \leq c \leq a_1 + b_1 \tag{46}$$

also ist auch c durch ein abgeschlossenes Intervall beschränkt.

□

Bevor gezeigt werden kann, dass durch eine Restriktion der Kanten eine Restriktion der Nicht-Kanten erfolgt, muss das folgende Lemma bewiesen werden.

Lemma 5. *Sei G ein zusammenhängender Graph mit $n > 2$ Knoten, der nicht vollständig ist. Dann existiert ein Dreieck aus einer Nicht-Kante und zwei Kanten.*

Beweis

Annahme: Ein solches Dreieck existiert nicht. Betrachte die Nicht-Kante $\{u, w\}$ und Knotenmengen V_u bzw. V_w , die sich wie folgt bilden:

V_u beinhaltet den Knoten u und alle Knoten, die über Kanten (Pfade) von u erreichbar sind (V_w analog). Dann ist der durch V_u induzierte Subgraph vollständig. Ist nämlich $x \in V_u$, so existiert ein Pfad $(x_n)_{n=0}^N$ in V_u mit $x_0 = u$ und $x_N = x$, so dass die Kanten $\{x_i, x_{i+1}\}$ jeweils in E sind. Nach Annahme existieren dann auch die Kanten $\{x_i, x_{i+2}\}$, da diese sonst das gewünschte Dreieck bilden würden. Also ist auch (x_{n_k}) ein Pfad in V_u , wenn $n_{k+1} - n_k < 2$ gilt. Per Induktion zeigt man, dass alle transitiven Kanten vorhanden sind, so mithin auch die Kante $\{x_0, x_N\}$ in V_u ist.

Sind nun $x, y \in V_u$, so sind die Kanten $\{u, x\}$ und $\{u, y\}$ in E . Nach Annahme existiert dann auch die Kante $\{x, y\}$. Also ist der induzierte Subgraph vollständig. Dies gilt analog für V_w .

Wenn der Knoten $z \in V_w$ von einem Knoten $x \in V_u$ aus auf einem Pfad erreichbar wäre, so existierte bereits die Kante $\{u, w\}$ im Gegensatz zur Voraussetzung, da sowohl u von x aus als auch w von z aus auf einem Pfad erreichbar wäre. Folglich sind die Mengen V_u und V_w disjunkt.

G ist also im Widerspruch zur Annahme nicht zusammenhängend (es gibt keine Verbindung zwischen V_u und V_w).

□

Lemma 6. *Sei G ein zusammenhängender Graph mit $n > 2$ Knoten. Sind alle Kanten von G restringiert, so auch alle Nicht-Kanten.*

Beweis

Wenn der Graph vollständig ist, ist nichts zu beweisen. Sei also G nicht vollständig. Vorgehen:

1. Markiere alle Kanten als restringiert.

2. Solange G nicht vollständig ist: Suche eine Nicht-Kante η , die ein Dreieck mit zwei Kanten bildet (existiert nach Lemma 5). Dann ist η nach Lemma 4 restringiert. Markiere η und füge η zu E hinzu.

Das Vorgehen terminiert, wenn G vollständig ist. Dann sind alle Kanten als restringiert markiert.

□

Eine ausgezeichnete Konfiguration eines Graphen G ist die Konfiguration \underline{l} , welche jeder Kante und Nicht-Kante die Länge l zuweist.

Lemma 7. *Die Konfiguration \underline{l} mit $l_i = l$ für alle $i \in \{1, \dots, M\}$ liegt in K .*

Beweis

Sei $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine Orthogonale Matrix. Dann haben die mit den Spaltenvektoren von Q konstruierten Punkte jeweils einen Abstand von $\sqrt{2}$ gemäß Korollar 2. Skaliert man die Koordinaten entsprechend, so erhält man die gewünschte Konfiguration. Eine Dreiecksungleichung für ein beliebiges Dreieck ist dann trivialerweise erfüllt.

$$0 = |l - l| \leq l \leq l + l = 2l. \quad (47)$$

□

Nun kann der bereits erwähnte Suchraum konstruiert werden.

Lemma 8. *Sei \underline{l} die Konfiguration, die jeder Kante die Länge l zuweist. Dann liegen die Konfigurationen mit $F(x) \leq F(\underline{l})$ in einem abgeschlossenen und beschränktem Suchraum $S \subseteq K$.*

Beweis

Es gilt

$$\inf_{x \in K} F(x) \leq F(\underline{l}) = \sum_{i=m}^{M-1} \frac{c_\rho}{l^2} = \frac{c_\rho(M-m)}{l^2}.$$

Konfigurationen, bei welchen dieser Wert bereits durch den Anteil einer Kanten am Potential überschritten wird, kommen als Minimum also nicht in Frage. Für jede solche Konfiguration x gilt

$$\exists i \in \{0, \dots, m-1\} \ c_\sigma \left| \log \frac{x_i}{l} \right| > \frac{c_\rho(M-m)}{l^2}$$

und somit

$$F(x) \geq c_\sigma \left| \log \frac{x_i}{l} \right| > \frac{c_\rho(M-m)}{l^2} = F(\underline{l}).$$

Ein abgeschlossener und beschränkter Suchraum, welcher ein Minimum enthält, falls dieses existiert, lässt sich wie folgt konstruieren:

1. Für $k = 1, \dots, m$: Setze $I_k := [l \cdot e^{-\frac{(m-M)c_\rho}{l^2 c_\sigma}}, l \cdot e^{\frac{(M-m)c_\rho}{l^2 c_\sigma}}]$, falls x_k nicht restringiert ist. (Für x_0 ist dies immer möglich.) Setze I_k auf das Restriktionsintervall, falls x_i restringiert ist.

2. Nach Schritt 1 sind alle Kanten restringiert, d.h. auch alle Nicht-Kanten sind nach Lemma 6 restringiert. Setze also für $k = m + 1, \dots, M$ I_k auf das Restriktionsintervall von x_k .
3. Setze $S := \bigcup_{k=0}^{M-1} I_k$.

Der so konstruierte Suchraum S ist abgeschlossen und beschränkt, da K konvex ist. Nach Konstruktion gilt außerdem $S \subseteq K$. Wegen $I_0 := [l \cdot e^{\frac{m-M}{l^2}}, l \cdot e^{\frac{M-m}{l^2}}]$ gilt $F(x) > F(l)$ für alle $x \in K - S$, denn $F(x) > c_\sigma |\log \frac{x_0}{l}| > \frac{c_\rho(M-m)}{l^2} = F(l)$.

□

Lemma 9. *Der Suchraum S ist kompakt.*

Beweis

S ist abgeschlossen und beschränkt und $S \subseteq K \subseteq \mathbb{R}^N$. Somit ist S also kompakt.

□

Nun kann auch die Existenz des Minimums gezeigt werden.

Theorem 2. *Die Potential-Funktion F nimmt ihr Minimum auf K an.*

Beweis

Da S kompakt ist, und F stetig und reelwertig, nimmt F auf S das Minimum an, d.h. es existiert ein x_0 mit $F(x_0) = \min_{x \in S} F(x)$.

Es gilt $F(x_0) \leq F(l)$ nach Konstruktion von S . Für $x \in K - S$ gilt $F(x) > F(l)$. Somit gilt sogar $F(x_0) = \min_{x \in K} F(x)$.

□

Die Länge des Kraft-Verschiebungsvektors wird nach oben durch das Potential beschränkt. Eine Minimierung des Potentials führt zwar nicht zwangsläufig zu einer Minimierung des Kraft-Verschiebungsvektors, begünstigt diese aber. Der Zusammenhang zwischen Potential- und Kraft-Verschiebungsvektor-Minimalität wird im Abschnitt Verträglichkeit untersucht.

Eindeutigkeit

Nach Theorem 2 wird das Potential-Minimum also angenommen. Zum Zwecke einer Untersuchung der Eindeutigkeit des Potential-Minimums werden zunächst die Abbildungen $K \rightarrow K$, welche das Potential eines gegebenen Graphen invariant lassen, betrachtet.

Notation. Sei $x \in K$ eine Konfiguration eines Graphen G . Dann bezeichne

$$x^* = \{\phi : K \rightarrow K \mid F(\phi(x)) = F(x)\} \quad (48)$$

die Menge der Abbildungen mit der oben genannten Eigenschaft. Sei weiter $I_1 := \{1, \dots, m\}$ und $I_2 := \{m + 1, \dots, M\}$. Dann bezeichne

$$x^\pi = \{\phi : K \rightarrow K \mid \exists \pi_1 \in S_m, \pi_2 \in S_{M-m} : \phi(x)_i = \pi_j(x_i) \ (i \in I_j)\} \quad (49)$$

die Menge der Abbildungen $K \rightarrow K$, die sich als Permutation der Kanten und Nicht-Kanten (jeweils untereinander) darstellen lassen.

Korrolar 5. Sei $x \in K$ eine Konfiguration eines Graphen G . Dann gilt

$$x^\pi \subseteq x^*. \quad (50)$$

Beweis

Sei $\phi \in x^\pi$. Dann gibt es Permutationen π_1, π_2 mit den genannten Eigenschaften und es gilt:

$$F(\phi(x)) = \sum_{i=1}^m \left| c_\sigma \log \frac{\phi(x)_i}{l} \right| + \sum_{i=m+1}^M \frac{c_\rho}{\phi(x)_i^2} \quad (51)$$

$$= \sum_{i=1}^m \left| c_\sigma \log \frac{\pi_1(x_i)}{l} \right| + \sum_{i=m+1}^M \frac{c_\rho}{\pi_2(x_i)^2} \quad (52)$$

$$= \sum_{i=1}^m \left| c_\sigma \log \frac{x_i}{l} \right| + \sum_{i=m+1}^M \frac{c_\rho}{x_i^2} \quad (53)$$

$$= F(x) \quad (54)$$

aufgrund der Kommutativität der Summen. Also gilt $\phi \in x^*$.

□

Dass es solche Abbildungen gibt, lässt sich an dem folgenden Beispiel illustrieren:

Beispiel 4. Sei G ein Pfad der Länge 3 mit der Konfiguration $x = (3, 4, 5)^T$. Die Konfiguration $x' = (4, 3, 5)^T$ ist eine Konfiguration von G mit gleichem Potential, die aus x durch Permutation der Kantenlängen entsteht.

Anders jedoch verhält es sich mit einer symmetrischen Konfiguration des Pfades, etwa der Konfiguration $x = (1, 1, 2)$. In diesem Falle ist das Ergebnis jeder Permutation wieder die Ausgangskonfiguration.

Prinzipiell stellt sich also die Frage, wann es nichttriviale Permutation gibt, die das Potential einer Konfiguration invariant lassen und überdies sicherstellen, dass die Dreiecksungleichungen erfüllt bleiben.

Hierzu soll die Äquivalenz von Kanten wie folgt definiert sein.

Notation. Sei $e = \{u, v\}$ eine Kante oder eine Nicht-Kante eines Graphen G . Dann bezeichnet

$$\text{triangles}^0(e) := \{\{u, v, w\} \mid w \in V\} \quad (55)$$

die Menge der Dreiecke mit der Kante e .

Definition (Äquivalenz von Kanten)

Zwei Kanten $e_1 = \{u_1, v_1\}$ und $e_2 = \{u_2, v_2\}$ sind äquivalent ($e_1 \sim e_2$), wenn die Mengen $\text{triangles}^0(e_1)$ und $\text{triangles}^0(e_2)$ isomorph sind ($\text{triangles}^0(e_1) \cong \text{triangles}^0(e_2)$), d.h. wenn es eine bijektive Abbildung

$$\begin{aligned} \phi: \text{triangles}^0(e_1) &\longrightarrow \text{triangles}^0(e_2) \\ \{u_1, v_1, w\} &\longmapsto \phi(\{u, v, w\}) = \{u_2, v_2, w'\} \end{aligned} \quad (56)$$

gibt, so dass Kanten auf Kanten und Nicht-Kanten auf Nicht-Kanten sowie $\{u_1, v_1\}$ auf eine äquivalente Kante oder Nicht-Kante $\{u_2, v_2\}$ abgebildet werden. Eine solche Abbildung heißt *verträgliche Äquivalenztransformation* und induziert eine Abbildung der Kantenlängen

$$\begin{aligned} \psi: K &\longrightarrow \mathbb{R}^M \\ x = (x_{\{u,w\}})_{u,w \in V} &\longmapsto \psi(x). \end{aligned} \quad (57)$$

Die Abbildung ψ ist eine Permutation der Kanten, welche die Identität auf allen Kanten ist, welche nicht in einem der Dreiecke vorkommen. Die Abbildung ψ permutiert also genau die Kanten und Nicht-Kanten, welche durch $\text{triangles}^0(e_1)$ induziert werden und läßt die übrigen fest, indem sie ganze Dreiecke austauscht.

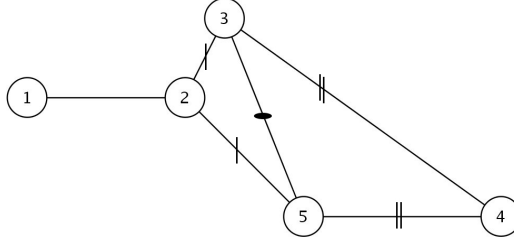


Abbildung 11: Graph mit $n = 5$ Knoten. Gleich markierte Kanten sind äquivalent.

Korrolar 6. Sei $x \in K$ eine Konfiguration eines Graphen G und seien $e_1 \sim e_2 \in E$. Sei weiter ϕ eine verträgliche Abbildung $\text{triangles}^0(e_1) \rightarrow \text{triangles}^0(e_2)$. Dann ist die Abbildung ψ , welche durch ϕ induziert wird, eine Abbildung $K \rightarrow K$, also eine Abbildung, welche eine gültige Konfiguration in eine gültige überführt und dabei das Potential invariant läßt.

Beweis

Für alle Dreiecke in $\text{triangles}^0(e_1)$ gilt auch nach Anwendung von ψ die Dreiecksungleichung, da solche Dreiecke auf Dreiecke in $\text{triangles}^0(e_2)$ abgebildet werden, welche die Dreiecksungleichung erfüllen. Gleiches gilt für Dreiecke in $\text{triangles}^0(e_2)$.

Sei $\{u, v\}$ eine Kante oder Nicht-Kante, welche nicht in $e_1 = \{u_1, v_1\}$ bzw. $e_2 = \{u_2, v_2\}$ vorkommt. Dann wird die Länge der Kante durch die Abbildung ψ nicht verändert.

Sei $w \in V$ ein beliebiger Knoten ungleich u_1, v_1 . Dann gilt $\{u_1, v_1, w\} \in \text{triangles}^0(e_1)$. Sei $w' \in V$ mit $\phi(\{u_1, v_1, w\}) = \{u_2, v_2, w'\}$.

Nach Voraussetzung ($x \in K$) erfüllt das Dreieck $\{u, v, w'\}$ die Dreiecksungleichungen. Dies gilt für beliebige Knoten $w \in V$. Folglich ist für jedes Dreieck, in welchem die Kante $\{u, v\}$ vorkommt, die Dreiecksungleichung erfüllt.

Da die Kanten- und Nicht-Kantenlängen lediglich (jeweils untereinander) permutiert werden, wird das Potential nicht verändert.

□

Also lassen sich auf diese Weise Konfigurationen mit gleichem Potential konstruieren. Von Interesse sind allerdings nur die nichttrivialen Abbildungen, die mindestens eine Länge echt verändern. Eine Abbildung ist in jedem Falle trivial, wenn alle äquivalenten Kanten und Nicht-Kanten gleich lang sind. Eine solche Konfiguration existiert für jeden Graphen: z.B. die (triviale) Konfiguration, die jeder Kante die Länge l zuweist, und ausgehend davon weitere nichttriviale Konfigurationen, die durch gleichartige Skalierung der äquivalenten Kanten und Nicht-Kanten entstehen. Abbildung 12 zeigt eine solche nichttriviale bijektive Abbildung zwischen den Mengen der Dreiecke, welche jeweils durch die eingestrichelten Kanten induziert werden. Die Abbildung ist nicht zu verwechseln mit einer Spiegelung, welche ebenfalls dargestellt ist und im Konfigurationsraum der Längen lediglich die Identität und somit trivial ist.

Die Vermutung liegt nahe, dass äquivalente Kanten in einem kräfteminimalen Layout jeweils gleiche Längen haben. So sind alle Kanten eines Kreises äquivalent, jedoch nur Nichtkanten

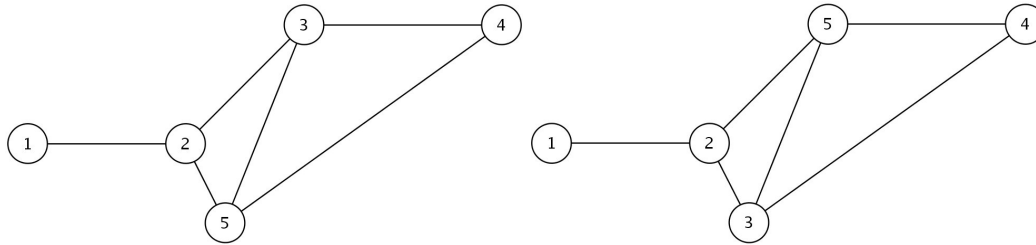


Abbildung 12: Graph aus Abbildung 11 nach Permutation der Dreiecke der eingestrichelten äquivalenten Kanten (links) und Spiegelung (rechts).

mit gleicher graphentheoretischer Distanz. Die äquivalenten Kanten in einem Kreis haben gleiche Längen. Diese Beobachtung kann als Präzisierung der Forderung gewertet werden, dass das kräftebasierte Layout ein Maximum an Symmetrie erreichen solle.

Die vorgestellten Äquivalenztransformationen stellen für die Bestimmung der Dimension eines Graphen allerdings keine Schwierigkeit dar, da sie dimensionsinvariant sind. Vermutlich bilden sie jedoch nur einen Teil der nichttrivialen Transformationen. Leider kann die Frage nach der Eindeutigkeit des Minimums nicht geklärt werden.

Verträglichkeit

Die im Abschnitt 3.2 eingeführte Definition des Potentials wurde zwar in Anlehnung an die im Spring Embedder Algorithmus wirkenden Kräfte gewählt, entbehrt jedoch nicht jeglicher Willkür und muss daher auf ihre Verträglichkeit mit dem Algorithmus untersucht werden. Der Dimensionsbegriff soll explizit die Eigenschaften des Spring Embedder Layouts reflektieren. So stellt sich etwa die Frage, ob ein Iterationsschritt des Spring Embedder Algorithmus das Potential verringert. Die folgenden Abbildungen zeigen das Potential verschiedener Graphen während des Verlaufs des Spring Embedders. Die beiden Graphiken in Abbildung 13 sowie weitere Untersuchungen scheinen die Vermutung zu belegen, dass eine Relaxation der Kräfte zu einer Verminderung des Potentials führen.

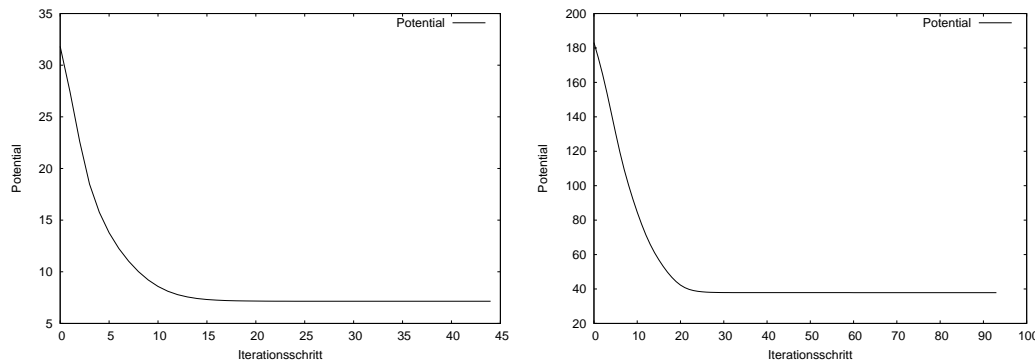


Abbildung 13: Potential eines Kreises mit 10 Knoten (links) und eines Gitters mit 5×5 Knoten (rechts) im Verlauf des Spring Embedder Algorithmus

Der Verlauf des Algorithmus bei einem Pfad allerdings widerspricht der Vermutung. In Abbildung 14 ist ein entsprechender Verlauf des Potentials dargestellt. Im rechten Bild ist deutlich erkennbar, dass der Algorithmus nicht in einer potential-minimalen Konfiguration abbricht, sondern weiter optimiert. Dabei steigt das Potential noch etwas an.

Eine systematischere Untersuchung ergibt, dass es eine ganze Reihe von Graphen gibt, bei welchen das Potential während der Spring Embedder Optimierung nicht monoton abnimmt.

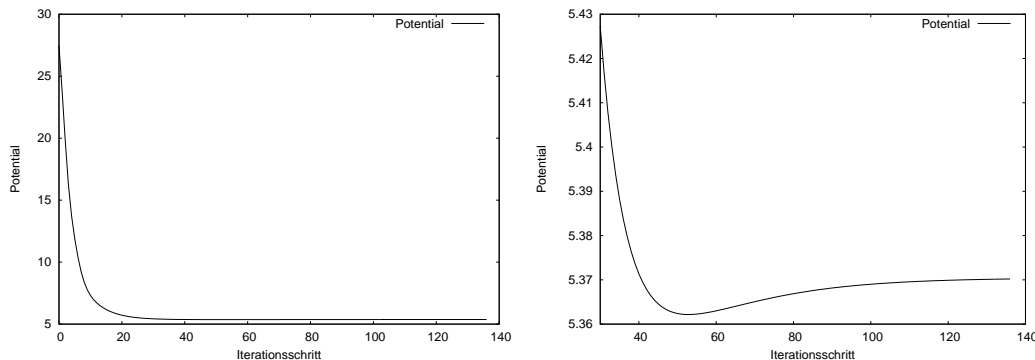


Abbildung 14: Potential eines Pfades mit 10 Knoten: Kompletter Verlauf des Algorithmus (links) und Verlauf ab 25. Iteration (rechts)

Abbildung 15 zeigt einen Pfad mit $n = 5$ Knoten, bei welchem der Spring Embedder nach einem Anstieg des Potentials abgebrochen wurde. Dabei wird deutlich, dass es durchaus potentialvermindernde Transformationen gibt, welche das Layout des Pfades in erwarteter Weise verändern würde. Diese entsprechen im vorliegenden Fall jedoch offenbar nicht dem Update des Spring Embedders. Es lässt sich aber vermuten, dass das Potential-Minimum und das Minimum des Spring Embedders möglicherweise weniger weit auseinander liegen, als es in dem dargestellten Beispiel erscheint.

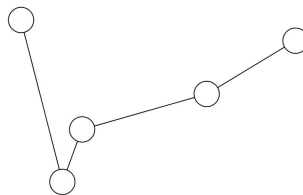


Abbildung 15: Layout ausgewählter Graphen nach abgebrochener Iteration bei steigendem Potential.

Wohldefiniertheit

Ein Beweis für die Wohldefiniertheit der gegebenen Definition der Dimension gestaltet sich aus verschiedenen Gründen schwierig. Zum einen wird das Potential-Minimum nicht wie im vorigen Abschnitt über alle gültigen Konfigurationen genommen, sondern lediglich über die Gleichgewichtskonfigurationen des Spring Embedders. Leider ist allein die Frage nach der Anzahl der möglichen Gleichgewichtskonfigurationen schwer zu beantworten. Die Vermutung des Autors ist, dass die Anzahl der Äquivalenzklassen von Gleichgewichtskonfigurationen endlich ist. Dies würde immerhin die Existenz des Minimums beweisen. Zum anderen hängt die Eindeutigkeit der Definition von der Art der zu einem gegebenen Layout existierenden potential-erhaltenden Transformationen ab. Sind diese trivial oder dimensionsinvariant wie die vorgestellten verträglichen Äquivalenztransformationen, so ist das Minimum im Falle der Existenz auch eindeutig. Leider konnte nicht gezeigt werden, dass sich der Spring Embedder und das Potential verträglich verhalten, so dass die Frage nach der Wohldefiniertheit nicht auf die Frage nach der Eindeutigkeit des Potential-Minimums reduziert werden kann.

3.3 Extraktionsverfahren

In Kapitel 3.2 wurde der Versuch unternommen, eine formale Definition eines Dimensionsbegriffs anzugeben, welcher seinen Ursprung im Layout des Spring Embedders hat. In diesem

Kapitel soll eine Möglichkeit zur algorithmischen Bestimmung der Dimension diskutiert werden.

Prinzipiell kann man sich eine Reihe von Verfahren vorstellen, welche geeignet wären die Dimension eines Graphen zu ermitteln. So könnte man sich etwa ein inkrementelles Verfahren vorstellen, welches – ausgehend von einer eindimensionalen Einbettung eines Graphen – jeweils durch Hinzunahme weiterer Dimensionen bei gleichzeitiger Perturbation des Layouts evaluiert, ob die neu hinzugenommene Dimension für das Layout genutzt wird, indem man jeweils überprüft, ob der Rang der zugehörigen Matrix der normalisierten Differenzvektoren der Dimension des aktuellen Layouts entspricht. Ein solches Verfahren hätte jedoch einige Nachteile: Zum einen ist nicht klar, ob ein solches Vorgehen wirklich alle Freiheitsgrade eines $(n - 1)$ -dimensionalen Layouts nutzen würde. Zum anderen würde die mehrmalige Evaluation des Rangs einen erheblichen Overhead verursachen. Dem steht jedoch entgegen, dass viele Graphen eine Dimension haben, welche echt kleiner als $n - 1$ ist.

Um diese Nachteile zu umgehen, soll ein Verfahren vorgestellt werden, welches die Dimension eines Graphen – ausgehend von einem $(n - 1)$ -dimensionalen Layout – zu bestimmen sucht. Ein grundsätzliches Problem ergibt sich jedoch aus der Tatsache, dass ein solches Layout nur approximiert werden kann. Infolgedessen kann davon ausgegangen werden, dass der Rang der zugehörigen Matrix der Differenzvektoren echt kleiner als $n - 1$ ist. Dennoch wird man in vielen Fällen feststellen können, dass nicht alle Koordinatenpaare vollkommen unkorreliert sind.

3.3.1 Hauptkomponentenanalyse

Die Hauptkomponentenanalyse oder principal component analysis (PCA) ist ein multivariates statisches Verfahren, welches sich bei Reduktion der Dimensionalität von Daten vielfach bewährt hat.

Formal gesehen wird hierbei zunächst nur eine geeignete Rotation der Daten vorgenommen. Die erste Koordinatenachse (Hauptkomponente) wird dabei so gewählt, dass die Varianz der Daten in Richtung der Hauptkomponente maximiert wird, die zweite Hauptkomponente wird orthogonal zur ersten gewählt, so dass auch in dieser Richtung die Varianz der Daten maximiert wird. Führt man dieses Verfahren induktiv fort, so erhält man ein orthogonales Koordinatensystem, welches die Varianz der Daten reflektiert.

Im Falle von unkorrelierten Daten wird die Varianz in allen Hauptkomponenten recht hoch sein. Sind die Daten jedoch korreliert, so gibt es Hauptkomponenten mit geringer Varianz. Bei perfekt korrelierten Daten ist die Varianz sogar null. Eine Reduzierung der Daten erfolgt durch Auswahl der Hauptkomponenten mit hoher Varianz und Projektion der Hauptkomponenten mit geringer Varianz auf die erstgenannten Hauptachsen. Dabei geht Information verloren, sofern keine perfekte Korrelation vorliegt.

Die Hauptkomponentenanalyse ist ein geeignetes Mittel zur Approximation des gewünschten Ranges: Sei D die Matrix der normalisierten Differenzvektoren eines Graphen mit n Knoten und Dimension d , d.h. es gelte $\text{rank}(D) = d$. Dann liegen die Koordinaten der Knoten in einem d -dimensionalen Unterraum von \mathbb{R}^{n-1} . Durch eine geeignete Rotation des Koordinatensystems lässt sich ein Zustand herstellen, bei dem die Koordinaten der Knoten für die Koordinatenachsen $d + 1, \dots, n - 1$ jeweils konstant sind. Die Varianz der Koordinaten in Richtung dieser Koordinatenachsen ist dann jeweils null. In diesem Grenzfall entspricht die Anzahl der Hauptkomponenten einer geeigneten Datenreduktion genau der Dimension des Graphen. Sind Zeilen der Matrix der normalisierten Differenzvektoren nur “fast linear abhängig”, so ist die Varianz der entsprechenden Koordinatenachsen gering.

Wenn die Daten bezüglich ihrer Mittelwerte normalisiert vorliegen, lässt sich die Vorgehensweise bei der Hauptkomponentenanalyse erheblich vereinfachen. Eine solche Normalisierung kommt einer Translation des Layouts gleich und ist somit eine Transformation des Layouts

innerhalb seiner Äquivalenzklasse.

Das normalisiertes Layout eines Graphen im \mathbb{R}^{n-1} sei gegeben durch $p = (p_v)_{v \in V}$ mit $p_v = (p_1^{(v)}, \dots, p_{n-1}^{(v)})^T$. Sei $X_i = (x_i^{(v)})_{v \in V}$ für ein $i \in \{1, \dots, n-1\}$, also der Vektor der Koordinaten aller Knoten bezüglich einer Koordinatenachse i . Dann gilt

$$\mathbb{E}[X_i] = 0. \quad (58)$$

Die Varianz einer Koordinatenachse ist gegeben durch

$$V(X_i) = \mathbb{E}[(X_i - \mathbb{E}[X_i])^2] = \mathbb{E}[X_i^2], \quad (59)$$

die Kovarianz zweier Koordinatenachsen i und j ist gegeben durch

$$C(X_i, X_j) = \mathbb{E}[(X_i - \mathbb{E}[X_i])(X_j - \mathbb{E}[X_j])] = \mathbb{E}[X_i \cdot X_j]. \quad (60)$$

Sei $Z = (z_{ij})$ die $(n-1) \times n$ -Matrix der normalisierten Daten mit den Einträgen

$$z_{ij} = p_i^{v_j}. \quad (61)$$

Die Hauptkomponenten w_1, \dots, w_{n-1} lassen sich als Eigenvektoren der Kovarianzmatrix $\text{cov}(Z)$ berechnen.

Die Kovarianzmatrix $\text{cov}(Z)$ ist eine symmetrische $(n-1) \times (n-1)$ -Matrix mit den Einträgen

$$\text{cov}(Z)_{ij} = \begin{cases} V(X_i) = C(X_i, X_i) & (i = j) \\ C(X_i, X_j) & (i \neq j). \end{cases} \quad (62)$$

Dann gilt $\text{cov}(Z) = \mathbb{E}[ZZ^T]$.

Sei W die Matrix der Eigenvektoren von $\text{cov}(Z)$ mit

$$\text{cov}(Z) \cdot W = W \cdot \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_{n-1}) \quad (63)$$

und o.B.d.A. $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{n-1}$.

Die Kovarianzmatrix von $Y = W^T Z$ ist gegeben durch

$$\text{cov}(Y) = \mathbb{E}[YY^T] \quad (64)$$

$$= \mathbb{E}[(W^T Z)(W^T Z)^T] \quad (65)$$

$$= \mathbb{E}[W^T Z Z^T W] \quad (66)$$

$$= W^T \mathbb{E}[Z Z^T] W \quad (67)$$

$$= W^T \text{cov}(z) W \quad (68)$$

$$= W^T W \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_{n-1}) \quad (69)$$

$$= \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_{n-1}). \quad (70)$$

Die Matrix $\text{cov}(Y)$ ist eine $(n-1) \times (n-1)$ -Matrix mit

$$V(Y_i) = \lambda_i \quad (71)$$

$$C(Y_i, Y_j) = 0 \quad (72)$$

für Zeilen Y_i, Y_j der Matrix Y .

Die Eigenwerte der Matrix $\text{cov}(Z)$ sind also genau die Varianzen der neuen Koordinaten von Y . Die Matrix Y enthält die Koordinaten der Knoten bezüglich des rotierten Koordinatensystems aus Eigenvektoren. Zur Reduktion der Daten auf einen r -dimensionalen Unterraum werden lediglich die ersten r Spalten von Y betrachtet. Sie enthalten aufgrund der Sortierung der Eigenwerte die Koordinaten mit den größten Varianzen. Die Reduktion entspricht

einer orthogonalen Projektion. Wenn die Anzahl r der Dimensionen, auf welche die Daten reduziert werden sollen nicht bereits vorgegeben ist, ist die Auswahl des Parameters r von entscheidender Bedeutung.

Die einfachste Methode zur Reduktion der Daten besteht sicherlich in der Auswahl aller Hauptkomponenten mit Eigenwerten, die einen vorgegebenen Schwellwert θ überschreiten. Für die wenigen Fälle, in welchen der Schwellwert gut angegeben werden kann, ist dies sicherlich eine geeignete Methode.

Eine weitere Methode benutzt das Verhältnis

$$\gamma(r) = \frac{\sum_{i=1}^r \lambda_i}{\sum_{i=1}^{n-1} \lambda_i} \quad (73)$$

der Summe der Eigenwerte, deren zugehörige Hauptkomponenten zur Reduktion hinzugenommen werden, und der Gesamtsumme der Eigenwerte. Das Verhältnis entspricht dem Anteil der in der reduzierten Repräsentation vorhandenen Gesamtvarianz. Durch Vorgabe eines Wertes, kann man sicherstellen, dass ein Mindestanteil der Gesamtvarianz in der reduzierten Repräsentation der Daten vorhanden ist.

Eine dritte Methode schließlich geht von der Annahme aus, dass die Eigenwerte einer zufälligen Kovarianzmatrix annähernd kollinear sind, so dass jede signifikante Abweichung einer solchen annähernd kollinearen Anordnung als signifikante Information angesehen werden kann. Bei dieser Methode wird ausgehend vom kleinsten Eigenwert eine solche Gerade approximiert und der Index der ersten signifikanten Abweichung gesucht.

Im Allgemeinen wird man versuchen, eine Kombination dieser verschiedenen Methoden zu realisieren, um möglichst viel Robustheit zu erlangen. Für die im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Analysen wurde der Einfachheit halber die Schwellwert-Methode gewählt. Sie liefert bei den untersuchten Graphen zufriedenstellende Ergebnisse. Somit ergibt sich der folgende Algorithmus zur Extraktion der Dimension, gegeben ein Graph mit n Knoten und ein Schwellwert θ :

Algorithmus 3.2. Spring Embedder Dimension

1. Berechne ein $(n - 1)$ -dimensionales Spring Embedder Layout für G .
2. Normalisiere das Layout.
3. Berechne und sortiere die Eigenwerte und Eigenvektoren der zugehörigen Kovarianzmatrix.
4. Rotiere das Layout mit der Matrix der Eigenvektoren.
5. Wähle den Index r , so dass $\lambda_r \geq \theta$ und $\lambda_{r+1} < \theta$.
6. Projiziere das Layout auf die ersten r Achsen.

Abbildung 16 zeigt die Vorgehensweise bei der Extraktion der Dimension am Beispiel eines Pfades mit 10 Knoten. Die gekrümmte Lage der Ausgangsdaten ist typisch für das approximierte Layout eines Pfades mit einer Vielzahl von Knoten. Da die abstoßenden Kräfte weit voneinander entfernter Knoten sehr geringe Auswirkungen haben, benötigt man in der Regel sehr viele Iterationen, um ein vollkommen lineares Layout zu erhalten.

Das normalisierte Layout ist durch die Matrix

$$Z = \begin{pmatrix} -4.5 & -3.5 & -2.5 & -1.5 & -.5 & .5 & 1.5 & 2.5 & 3.5 & 4.5 \\ -5.58 & -3.58 & -2.18 & -.78 & .42 & 1.22 & 2.02 & 2.42 & 2.82 & 3.22 \end{pmatrix} \quad (74)$$

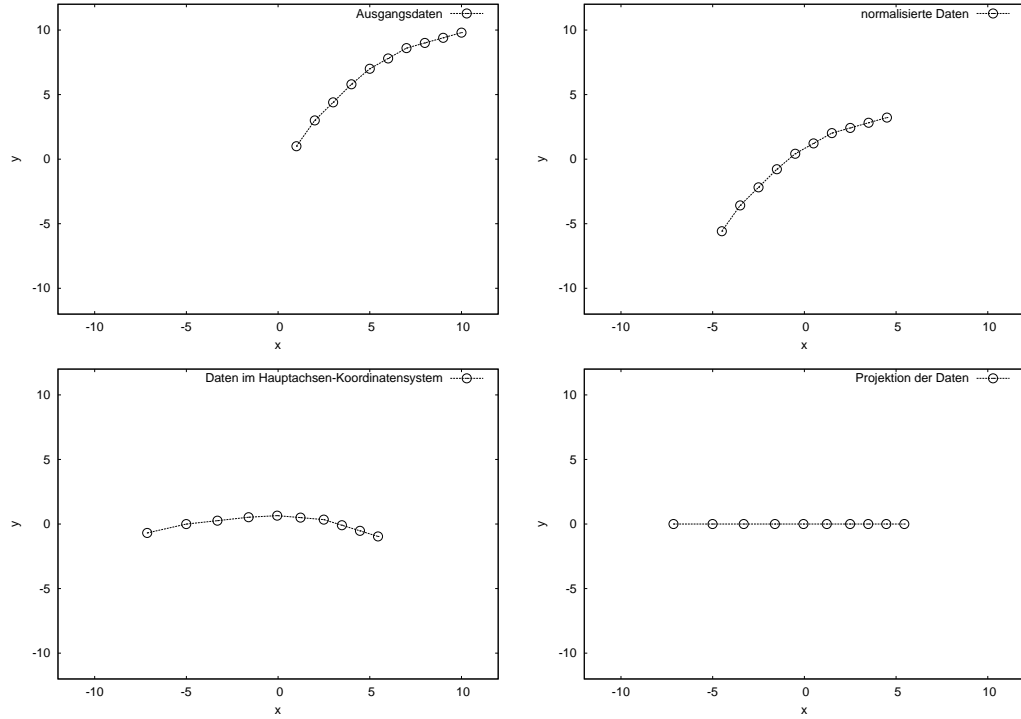


Abbildung 16: Hauptkomponentenanalyse am Beispiel eines Pfades mit $n = 10$ Knoten.

gegeben. Damit gilt

$$\text{cov}(Z) = \mathbb{E}[ZZ^T] = \frac{1}{9}ZZ^T = \begin{pmatrix} 9.167 & 8.6789 \\ 8.678 & 8.804 \end{pmatrix}. \quad (75)$$

Die Kovarianzmatrix $\text{cov}(Z)$ hat die Eigenwerte $\lambda_1 = 17.665$ und $\lambda_2 = 0.306$. Der Eigenwert λ_1 ist somit deutlich größer als der Eigenwert λ_2 und erklärt mehr als 98% der Gesamtvarianz.

3.3.2 Dimensionsanalyse ausgewählter Graphen

Im folgenden Kapitel soll die Dimensionalität einiger ausgewählter Graphen untersucht werden. Problematisch bei der theoretischen Dimensionsanalyse ist der noch ausstehende Beweis der Eindeutigkeit der Dimension und die mangelhafte Verträglichkeit des Potentials mit dem Spring Embedder. Eine umfassende Dimensionsanalyse ausgewählter Graphen auf einer theoretischen Basis lässt sich daher nicht durchführen. Für eine empirische Auswertung der Dimension der zu untersuchenden Graphen wurden die im Kapitel 3.3 vorgestellten Methoden angewandt. Die Eigenwerte der Hauptkomponentenanalyse, welche hier als Stichprobe X aufgefasst werden sollen, wurden mit einer hypothetischen Stichprobe Y verglichen. Die Stichprobe Y stellt dabei das ideale Ergebnis einer Hauptkomponentenanalyse des entsprechenden Graphen bis auf einen konstanten Faktor dar.

Notation. Die Hypothese d_r besagt, dass der Graph G r -dimensional anzunehmen ist.

Das ideale Ergebnis einer Hauptkomponentenanalyse eines r -dimensionalen Graphen im \mathbb{R}^{n-1} besitzt die Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_{n-1}$ mit $\lambda_1 = \dots = \lambda_{n-r-1} = 0$ und $\lambda_{n-r}, \dots, \lambda_{n-1} > 0$. Für einen Graphen, welcher in jeder Dimension etwa die gleiche Ausdehnung hat, lässt sich weiter $\lambda_{n-r} = \dots = \lambda_{n-1} = c$ annehmen. Für den Vergleich der beiden Stichproben X und Y wurde die Unabhängigkeit der beiden Merkmale mithilfe eines t-Tests mit

einer Irrtumswahrscheinlichkeit von $\alpha = .05$ getestet und der Korrelationskoeffizient ϱ_{XY} untersucht.

Die Tabellen 2 bis 5 stellen eine Auswahl von Ergebnissen dar, die den Begriff der Dimension untermauern sollen. Sie zeigen jeweils den Korrelationskoeffizienten ϱ_{XY} der Merkmale X (Eigenwert-Verteilung der Hauptkomponentenanalyse) und Y (hypothetische, auf Dimensionshypothese beruhende Eigenwertverteilung). Darüber hinaus wurde ein Test auf Unabhängigkeit der beiden Merkmale mit einer Irrtumswahrscheinlichkeit von $\alpha = .05$ durchgeführt. Hierzu wurde die Hypothese $\varrho_{XY} = 0$ wie folgt überprüft: Mithilfe der Irrtumswahrscheinlichkeit und des Freiheitsgrades $m = (n - 1) - 2$ kann das Quantil $t_{\alpha,m} = t_{.05,m}$ der t -Verteilung (Verteilung der Korrelationskoeffizienten) berechnet werden. Anschließend wird die Testgröße

$$t = \frac{\varrho_{XY} \sqrt{m}}{\sqrt{1 - r_{XY}^2}} \quad (76)$$

mit dem berechneten Quantil $t_{\alpha,m}$ verglichen. Die Hypothese $\varrho_{XY} = 0$ kann verworfen werden, falls $|t| \geq t_{\alpha,m}$ gilt. In diesem Fall kann ein zufälliger Zusammenhang der beiden Merkmale mit einer Irrtumswahrscheinlichkeit von $\alpha = .05$ ausgeschlossen werden. Den Tabellen sind die Größen $t, t_{.05,m}$ sowie der Korrelationskoeffizient ϱ_{XY} zu entnehmen.

Allen Ergebnissen ist gemein, dass sie auf einem hohen Niveau signifikant mit den hypothetischen Eigenwert-Verteilungen korrelieren. Mit steigendem n nimmt das Niveau der Korrelation etwas ab, was jedoch vermutlich damit zu begründen ist, dass die maximale Anzahl von Iterationen nicht länger ausreicht, um ein Layout konstanter Qualität zu erreichen. Abbildung 17 zeigt die Eigenwerte der Hauptkomponentenanalyse ausgewählter Graphen exemplarisch.

n	ϱ_{XY}	t	$t_{.05,m}$	Hypothese $\varrho_{XY} = 0$ abgelehnt
3	1.0	6.7108864E7	3.182	ja
4	1.0	1.3843501628E7	2.776	ja
5	1.0	2.1966532077E7	2.571	ja
6	1.0	1.2797158246E7	2.447	ja
7	1.0	1409091.562	2.365	ja
8	1.0	52602.621	2.306	ja
9	1.0	21216.827	2.262	ja
10	1.0	4184.26	2.228	ja
11	1.0	550.374	2.201	ja
12	1.0	670.379	2.179	ja
13	1.0	269.115	2.16	ja
14	0.999	98.547	2.145	ja
15	0.998	62.007	2.131	ja
16	0.999	71.434	2.12	ja
17	0.995	38.27	2.11	ja
18	0.999	75.563	2.101	ja
19	0.992	32.777	2.093	ja
20	0.995	41.187	2.086	ja

Tabelle 2: Korrelation der Eigenwerte der PCA eines Pfades mit n Knoten und der Hypothese d_1 .

Allen hier betrachteten Graphen ist gemein, dass sie in jeder Hauptkomponente etwa gleiche Varianz aufweisen. Ein Problem ergibt sich allerdings bei der Analyse von allgemeinen Graphen. Hier lässt sich der ideale Verlauf der Eigenwerte der Hauptkomponentenanalyse weniger genau voraussagen. Um dennoch in der Lage zu sein, die algorithmisch mittels Schwellwert gefundene Dimension hinsichtlich ihrer Objektivität beurteilen zu können, wurde die Hypothese in Analogie mit dem bereits vorgestellten Vorgehen mithilfe der Eigenwerte

n	ϱ_{XY}	t	$t_{.05,m}$	Hypothese $\varrho_{XY} = 0$ abgelehnt
3	1.0	3313.688	3.182	ja
4	1.0	710654.202	2.776	ja
5	1.0	11163.043	2.571	ja
6	1.0	10713.544	2.447	ja
7	1.0	8009.92	2.365	ja
8	1.0	5483.42	2.306	ja
9	1.0	7306.326	2.262	ja
10	1.0	5371.11	2.228	ja
11	1.0	5710.002	2.201	ja
12	1.0	3753.611	2.179	ja
13	1.0	4167.849	2.16	ja
14	1.0	3976.42	2.145	ja
15	1.0	3962.154	2.131	ja
16	1.0	3544.392	2.12	ja
17	1.0	746.795	2.11	ja
18	1.0	451.188	2.101	ja
19	1.0	245.887	2.093	ja
20	1.0	1649.124	2.086	ja

Tabelle 3: Korrelation der Eigenwerte der PCA eines Kreises mit n Knoten und der Hypothese d_2 .

n	ϱ_{XY}	t	$t_{.05,m}$	Hypothese $\varrho_{XY} = 0$ abgelehnt
3	1.0	6.7108864E7	3.182	ja
4	1.0	3397.351	2.776	ja
5	1.0	1806.166	2.571	ja
6	1.0	1904.499	2.447	ja
7	1.0	1564.009	2.365	ja
8	1.0	1396.591	2.306	ja
9	1.0	1653.919	2.262	ja
10	1.0	1597.916	2.228	ja
11	1.0	1099.18	2.201	ja
12	1.0	1168.14	2.179	ja
13	1.0	158.556	2.16	ja
14	1.0	570.205	2.145	ja
15	1.0	222.009	2.131	ja
16	0.996	42.689	2.12	ja
17	0.995	39.164	2.11	ja
18	0.885	7.595	2.101	ja
19	0.932	10.591	2.093	ja
20	0.997	51.398	2.086	ja

Tabelle 4: Korrelation der Eigenwerte der PCA eines Sterns mit n Knoten und der Hypothese d_{n-1} .

der Hauptkomponentenanalyse selbst formuliert und das Verhältnis von akkumulierter Varianz und Gesamtvarianz betrachtet.

Seien $\lambda_1, \dots, \lambda_{n-1}$ die Eigenwerte der Hauptkomponentenanalyse eines Graphen G mit n Knoten in absteigender Reihenfolge und sei r die algorithmisch ermittelte Dimension. Dann wurde die Korrelation zwischen den Vektoren $X = (\lambda_1, \dots, \lambda_{n-1})$ (beobachtete Eigenwertverteilung) und $Y = (\lambda_1, \dots, \lambda_{r-1}, 0, \dots, 0)$ (Dimensionshypothese d_{r-1}) beziehungsweise $Z = (\lambda_1, \dots, \lambda_r, 0, \dots, 0)$ (Dimensionshypothese d_r) betrachtet und auf Signifikanz geprüft.

n	ϱ_{XY}	t	$t_{.05,m}$	Hypothese $\varrho_{XY} = 0$ abgelehnt
3	1.0	6.2774594176E7	2.262	ja
4	1.0	2.3941290841E7	2.12	ja
5	1.0	2.060387432E7	2.06	ja
6	1.0	1.760580435E7	2.028	ja

Tabelle 5: Korrelation der Eigenwerte der PCA eines Gitters mit $n \times n$ Knoten und der Hypothese d_2 .

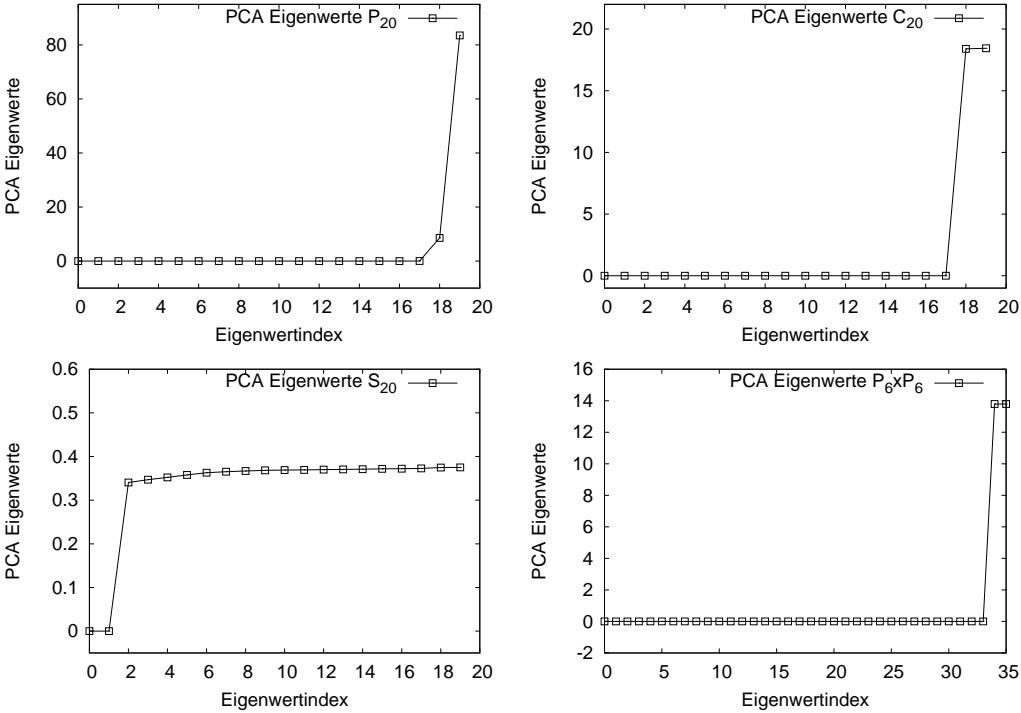


Abbildung 17: Eigenwerte einer Hauptkomponentenanalyse der Graphen P_{20} (links oben), C_{20} (recht oben), S_{20} (links unten) und $P_6 \times P_6$ (rechts unten).

Die Abbildungen 18 und 19 zeigen jeweils die Korrelation der Eigenwerte der Hauptkomponentenanalyse mit den Dimensionshypothesen r und $r - 1$ sowie den Anteil $\gamma(r - 1)$ beziehungsweise $\gamma(r)$ der akkumulierten Varianz bezogen auf die Gesamtvarianz des zugrundeliegenden Layouts für Graphen mit $n = 5$ beziehungsweise $n = 6$ Knoten.

Die Korrelationskoeffizienten für die Dimensionshypothese d_r sind sämtlich signifikant. Selbiges lässt sich allerdings nur über einen Teil der Korrelationskoeffizienten für die Dimensionshypothese d_{r-1} zeigen. Zudem machen die Abbildungen deutlich, dass erst bei der Dimensionshypothese d_r ein nur unwesentlich von eins verschiedener Anteil akkumulierter Varianz erreicht werden kann. Dieses Argument beweist zwar nicht, dass der gewählte Ansatz in allen Fällen die richtige Dimension liefert, zeigt aber wohl, dass der Ansatz in vielen Fällen vernünftig Ergebnisse liefert. Dabei kann beobachtet werden, dass der Anteil akkumulierter Varianz bei allen r -dimensionalen Einbettungen sehr nahe bei eins liegt ($1 - \varepsilon$ mit $\varepsilon \ll 10^{-4}$).

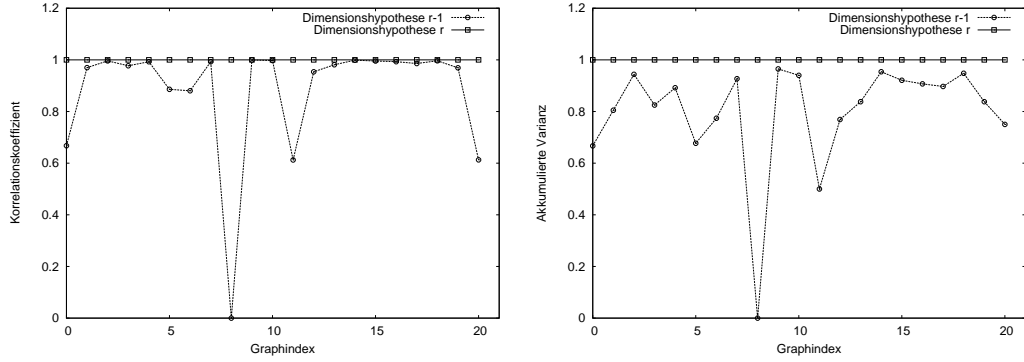


Abbildung 18: Korrelation von Dimensionshypothese und PCA-Eigenwerten (linkes Bild) und Anteil akkumulierter Varianz (rechtes Bild) von Graphen mit $n = 5$ Knoten.

Index	Bezeichnung	Dimension	d_{r-1}		d_r	
			ϱ_{XY}	$\gamma(d_{r-1})$	ϱ_{XZ}	$\gamma(d_r)$
1	G_1	2	.970	.805	1.000	1.000
8	G_8	1	0	0	1.000	1.000
9	G_9	2	.999	.965	1.000	1.000
11	G_{11}	2	.613	.500	1.000	1.000

Tabelle 6: Ausgewählte Ergebnisse der Dimensionsanalyse von Graphen mit $n = 5$ Knoten.

An einigen in Tabelle 6 dargestellten Beispielen sollen die Ergebnisse der Dimensionsanalyse explizit diskutiert werden:

Der Graph G_1 , dessen Dimension mit zwei ermittelt wurde, korreliert zwar auf einem hohen Niveau ($\varrho_{XY} = .970$) signifikant mit der Dimensionshypothese d_1 , die akkumulierte Varianz entspräche bei einer eindimensionalen Einbettung des Graphen aber lediglich .805. Dies macht deutlich, warum eine zweidimensionale Einbettung sinnvoller erscheint. Sie würde fast die gesamte Varianz repräsentieren. Abbildung 20 zeigt eine zweidimensionale Einbettung dieses Graphen.

Der Graph G_8 ist ein Pfad, dessen Dimension mit eins ermittelt wurde. Das Ergebnis korreliert auf einem hohen Niveau ($\varrho_{XZ} > 1 - 10^{-15}$) signifikant mit der Dimensionshypothese d_1 und eine eindimensionale Einbettung des Graphen repräsentiert auch hier fast die gesamte Varianz.

Der Graph G_9 mit Dimension zwei korreliert bereits auf einem sehr hohen Niveau ($\varrho_{XY} = .999$) signifikant mit der Dimensionshypothese d_1 . Darüber hinaus repräsentiert eine eindimensionale Einbettung bereits einen Anteil von .965 der Gesamtvarianz. Hier ist die Frage durchaus angebracht, ob eine eindimensionale Einbettung nicht die bessere sei. Abbildung 20 zeigt eine zweidimensionale Einbettung des Graphen, welche verdeutlichen soll, dass eine eindimensionale Einbettung auch in diesem Fall kein zufriedenstellendes Ergebnis liefern würde. In der Tat ist der Pfad wohl der einzige Graph, der sinnvoll in nur einer Dimension dargestellt werden kann. Die Ergebnisse der empirischen Untersuchung aller zusammenhängenden Graphen der Größe fünf, sechs und sieben scheinen dies zu bestätigen.

Zu guter Letzt sei der Graph G_{11} erwähnt. Hier wird am deutlichsten klar, warum eine zweidimensionale Einbettung des Graphen weit sinnvoller ist als eine eindimensionale. Zum einen korreliert das Ergebnis der Hauptkomponentenanalyse nur auf einem niedrigen Niveau ($\varrho_{XY} = .613$) mit der Dimensionshypothese d_1 . Zum anderen ist bei dieser Einbettung lediglich die Hälfte der gesamten Varianz repräsentiert, was sicherlich nicht wünschenswert sein kann. Das Ergebnis ist nicht verwunderlich, da es sich bei diesem Graphen um einen Kreis handelt.

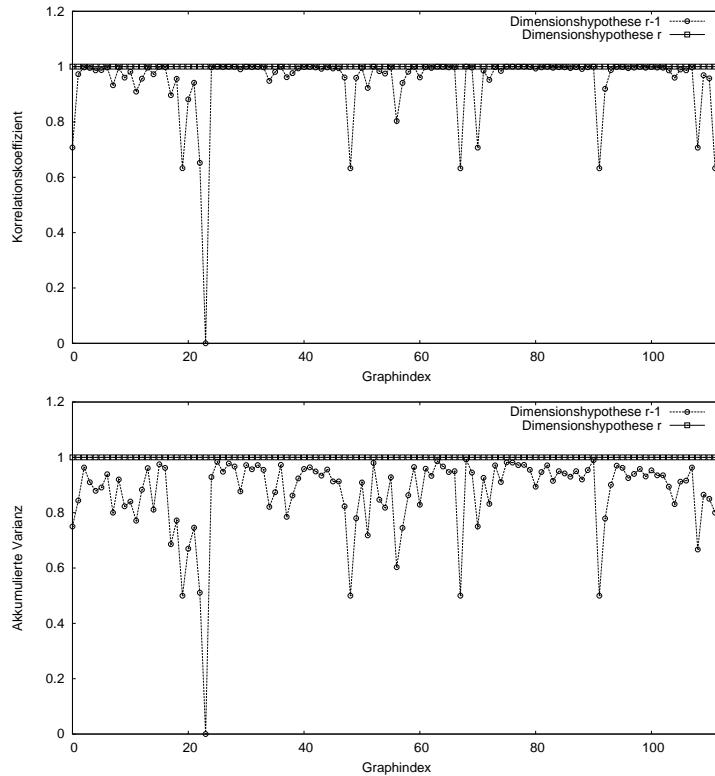


Abbildung 19: Korrelation von Dimensionshypothese und PCA-Eigenwerten (oberes Bild) und Anteil akkumulierter Varianz (unteres Bild) von Graphen mit $n = 6$ Knoten.

Eine obere Schranke für die Dimension eines Graphen

Die empirischen Untersuchungen an zusammenhängenden Graphen mit fünf, sechs und sieben Knoten scheinen zu belegen, dass der maximale Knotengrad Δ eines Graphen eine obere Schranke für seine Dimension ist. Die Abbildungen 21 und 22 verdeutlichen den Zusammenhang zwischen ermittelter Dimension eines Graphen und maximalem Knotengrad. Beide Größen haben eine natürliche Obere Schranke von $n - 1$, wenn man annimmt, dass der Graph n Knoten hat. In fast allen Fällen ist der maximale Knotengrad eine obere Schranke für die Dimension. Lediglich einer von 112 zusammenhängenden Graphen der Größe sechs widerspricht dieser These. Da das Extraktionsverfahren jedoch nicht zwingendermaßen die korrekte Dimension eines Graphen liefert, könnte es sich in diesem Fall durchaus um eine Fehleinschätzung der Dimension handeln.

Für eine Clique lässt sich die Dimensionalität immerhin beweisen. Die Einbettung, bei welcher alle Kanten die Länge l haben, erzeugt keine Kräfte, so dass der Kraft-Verschiebungsvektor

Graph		Dimension
Pfad	P_n	1
Kreis	C_n	2
Hypercubus	P_2^d	d
Stern	S_n	n-2
Clique	K_n	n-1
Kart. Produkt	$G \square H$	$\dim(G) + \dim(H)$

Tabelle 7: Zusammenfassung der Experimentellen Ergebnisse



Abbildung 20: Zweidimensionale Einbettung von G_1 (linkes Bild) und G_9 (rechtes Bild).

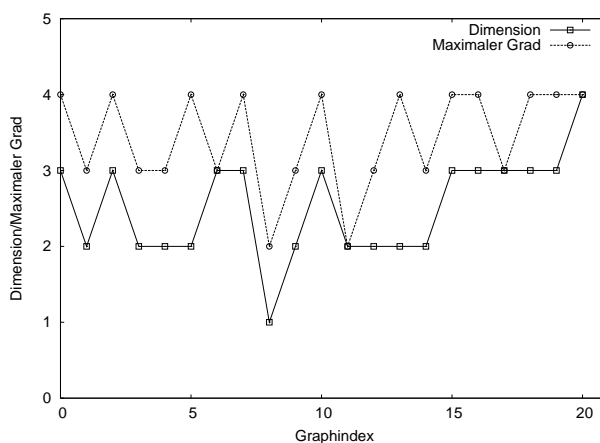


Abbildung 21: Dimension und maximaler Knotengrad von Graphen mit $n = 5$ Knoten.

in jedem Knoten der Nullvektor ist. Das Potential hat mit null sein globales Minimum erreicht und jede andere Konfiguration hat ein echt positives Potential.

3.3.3 “Grenzen” der Extraktionsverfahren

Die formale Definition der Dimension eines Graphen beruht auf dem Rang der Matrix der normalisierten Differenzvektoren, der eine Gleichgewichtskonfiguration eines Graphen im Sinne des Spring Embedders zugrunde liegt. Im Allgemeinen kann man eine solche Konfiguration nur näherungsweise iterativ bestimmen, so dass eine Bestimmung des Ranges dieser Matrix grundsätzlich von gestörten Daten ausgehen muss. Eine im mathematischen Sinne präzise Bestimmung des Ranges würde im Allgemeinen vermutlich einen maximalen Rang liefern, da davon auszugehen ist, dass sich der aus der Approximation resultierende Fehler gleichmäßig verteilt. Die Ranganalyse muss infolgedessen – unabhängig von numerischen Überlegungen zur Berechenbarkeit des Ranges einer Matrix – mit einer gewissen Unschärfe erfolgen. Im Grunde kommt dies einer Ranganalyse bezüglich schwacher linearer Abhängigkeit gleich. Zwei Vektoren sind in diesem Sinne schwach linear abhängig, wenn der eingeschlossene Winkel einen Schwellwert ε nicht überschreitet. Leider wird der Fehler der Approximation mit steigendem n vor allem bei Graphen mit vielen Nicht-Kanten immer größer, wenn man die maximale Anzahl von Iterationen nicht überlinear mit n skaliert, so dass auch eine solche unscharfe Ranganalyse immer ungenauer wird.

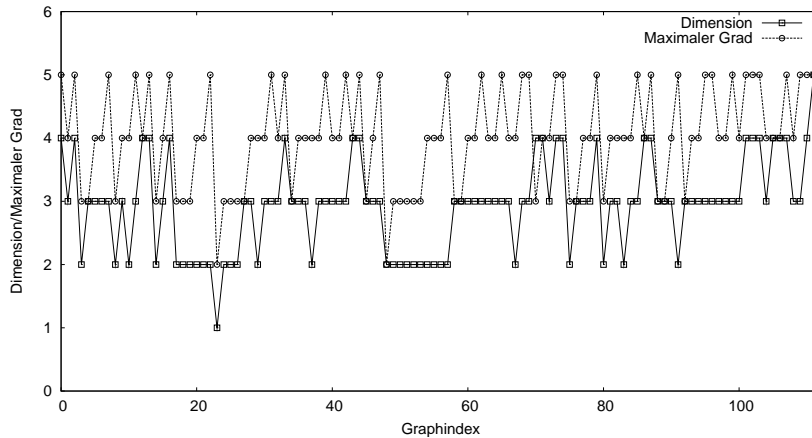


Abbildung 22: Dimension und maximaler Knotengrad von Graphen mit $n = 6$ Knoten.

Verheerender noch ist die Situation bei dem – aus praktischen Überlegungen verwendeten – Verfahren zur Extraktion der Dimension eines Graphen. Es beruht auf einer Analyse der Eigenwerte der Hauptkomponentenanalyse einer approximierten Gleichgewichtskonfiguration. Abbildung 23 zeigt einen typischen Verlauf der Eigenwerte eines Kreises. Hier liefert die Schwellwertmethode zufriedenstellende Ergebnisse: Das gefundene Spektrum korreliert signifikant mit der Dimensionshypothese d_2 und nicht signifikant mit der Hypothese d_1 . Darüber hinaus repräsentiert die eindimensionale Einbettung dieses Graphen nur etwa die Hälfte der Gesamtvarianz.

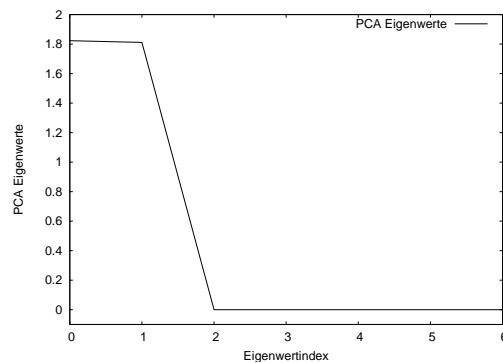


Abbildung 23: Eigenwerte der Hauptkomponentenanalyse eines Kreises mit $n = 7$ Knoten.

Abbildung 24 zeigt jeweils den drittgrößten Eigenwert λ_3 einer Hauptkomponentenanalyse eines Gitters mit $2 \times n$ Knoten. Dabei wird deutlich, dass es zu jedem Schwellwert θ ein n_0 gibt, so dass $\lambda_3 > \theta$ für alle $n > n_0$ gilt. Der Schwellwert muss also in Abhängigkeit der Größe des Graphen gewählt werden, vorausgesetzt natürlich, man will annehmen, dass die Dimension eines Gitters nun einmal zweidimensional sei. Zur Beurteilung einer mit einem gewählten Schwellwert gefundenen Dimension wurde das Verhältnis von akkumulierter Varianz und gesamter Varianz gebildet. Dieses kann aber mit steigendem n bereits für die Dimensionshypothese d_1 beliebig nahe bei eins liegen, so dass sich die gefundene Dimension auf diese Weise nicht mehr beurteilen lässt. Bei solchen Graphen ist die Angabe eines Schwellwertes an sich schwierig und die Beurteilung der Dimension mit dem Anteil akkumulierter Varianz versagt ebenso. Ein mit der Schwellwertmethode gefundenen Dimension eines solchen Graphen entbehrt also nicht jeglicher Willkür und sollte auf andere Weise überprüft verifiziert werden.

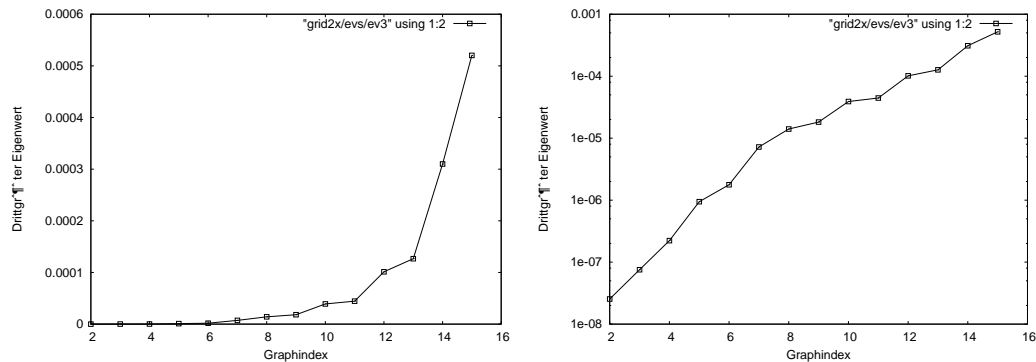


Abbildung 24: Drittgrößter Eigenwert eines Gitters mit $2 \times n$ Knoten (lineare und logarithmische Skala).

4 Empirischer Vergleich von spektralen und kräftebasierten Layouts

Für einen Vergleich von spektralen und kräftebasierten Layouts bieten sich eine ganze Reihe von Möglichkeiten an, von denen hier nur einige wenige etwas ausführlicher diskutiert werden sollen.

In den Kapitel 2 und 3 wurde gezeigt, dass beide Layouts eine Energie- beziehungsweise Potentialfunktion minimieren. Im Falle des Spektrallayouts geschieht die Minimierung unter gewissen Nebenbedingungen für jede Dimension an sich, im kräftebasierten Layout hingegen global. Ein direkter Vergleich bezüglich dieser Funktionen ist jedoch nicht aussagekräftig, da einerseits alle Spektrallayouts aufgrund Korrolar 2 das gleiche Potential haben, und andererseits die Berechnung der Hall'schen Energie für ein kräftebasiertes Layout von der Lage des Layouts auf der Zeichenfläche abhinge. Allerdings ließe sich die Hall'sche Energiefunktion für ein kräftebasiertes Layout möglicherweise dann mit der Energie des Eigenvektors v_2 eines entsprechenden Spektrallayouts vergleichen, wenn man das kräftebasierte Layout so rotierte, dass die Hall'sche Energiefunktion unter Beibehaltung aller Kanten- und Nichtkanten-Längen minimiert würde. Problematisch bei einem solchen Vorgehen bleibt die Skalierung der Kanten und Nichtkanten – oder genauer: die Wahl der Parameter l , c_ρ und c_σ , welche sich in direkter Weise auf die Längen der Kanten und Nichtkanten und somit auf die Hall'sche Energie auswirkt.

In den folgenden Kapiteln sollen der Zusammenhang zwischen Dimension und Vielfachheit von Spektraleigenwerten sowie der Zusammenhang von kräftebasierten und spektralen Layouts gleicher Dimension untersucht werden.

4.1 Zusammenhang zwischen Dimension und Vielfachheit der Laplace-Eigenwerte

In Kapitel 3.3.2 wurde die Vermutung geäußert, dass der maximale Knotengrad eines Graphen eine obere Schranke für die Dimension eines Graphen sei. Nun soll untersucht werden, ob sich die Vielfachheit der Laplace-Eigenwerte eines Graphen als untere Schranke für die Dimension eignet, oder anders formuliert, ob die Dimension eines Graphen eine obere Schranke für die Vielfachheit der Laplace-Eigenwerte sein kann.

4.1.1 Überprüfbarkeit der These

In Ermangelung theoretisch fundierter Erklärungsmodelle für die noch vorzustellenden Ergebnisse der Untersuchung und mangels eines handfesten Beweises seien einige Worte zur Überprüfbarkeit der These verwendet:

Sowohl die Vielfachheit der Laplace-Eigenwerte als auch die Dimension eines Graphen haben eine natürliche obere Schranke von $n - 1$. Im Falle der Dimension ist dies schlichtweg eine Folge der Tatsache, dass n Punkte im Raum einen maximal $(n-1)$ -dimensionalen Unterraum aufspannen können. Im Falle der Laplace-Eigenwerte folgt dies aus der Tatsache, dass für den Vergleich lediglich zusammenhängende Graphen herangezogen werden können. Eine unabhängige Menge der Größe n ist der einzige Graph, dessen maximale Vielfachheit eines Eigenwertes ($\lambda_1 = 0$) genau n beträgt, da dieser aus genau n Zusammenhangskomponenten besteht. Ist der Graph zusammenhängend, so kommt der Eigenwert $\lambda_1 = 0$ genau einmal vor, und jeder andere Eigenwert kann daher maximal mit Vielfachheit $n - 1$ im Laplace-Spektrum vertreten sein.

Die Berechnung der Dimension ist – wie bereits gezeigt wurde – in gewisser Weise problematisch. Durch die Wahl eines ungeeigneten Schwellwertes oder die Vorgabe eines zu hohen Anteils akkumulierter Varianz kann die Dimension eines Graphen innerhalb der natürlichen Grenzen beliebig groß “berechnet” werden. Durch Vorgabe des Schwellwertes von $\theta = 10^{-20}$ etwa würde die Dimension aller bisher in der vorliegenden Arbeit systematisch betrachteten Graphen mit sieben oder weniger Knoten maximal ermittelt werden. Ein solches Vorgehen ist zwar nicht im Sinne des Autors, zeigt aber eine der grundlegenden Schwierigkeiten bei der Überprüfung dieser These auf. Es sei daher auf die Ergebnisse des Kapitels 3.3.2 verwiesen, in welchem der Versuch einer systematischen Verifizierung der gefundenen Dimensionen unternommen wurde. In diesem Kapitel wurde die Vermutung geäußert, dass der maximale Knotengrad eines Graphen eine obere Schranke für die Dimension sei. Diese Größe ist in vielen Graphen erheblich kleiner als das Maximum der erreichbaren Dimensionalität einer Einbettung, so dass man davon ausgehen kann, dass sich hierdurch eine gewisse Einschränkung der Willkür bei der Ermittlung der Dimension festmachen lässt.

4.1.2 Ergebnisse

Die Abbildungen 25 und 26 zeigen die empirischen Ergebnisse der Untersuchung aller zusammenhängenden Graphen der Größe fünf beziehungsweise sechs. Die These wird weder bei den in den Abbildungen dargestellten Graphen noch bei allen 853 zusammenhängenden, nicht isomorphen Graphen der Größe sieben verletzt. Darüber hinaus zeigt Tabelle 8 eine Gegenüberstellung der beiden Größen Dimension und maximale Vielfachheit von Laplace-Eigenwerten an weiteren Graphen. Die in der Tabelle aufgelisteten Vielfachheiten der Eigenwerte lassen sich algebraisch ermitteln und entstammen im Wesentlichen einer Auflistung in [11]. Bei den gelisteten Dimensionen hingegen handelt es sich lediglich um Spekulationen, welche sich allerdings auf die Untersuchung einiger kleiner Graphen selben Typs in Kapitel 3.3.2 stützen können. Bei den genannten Graphen ist die Dimension eine Invariante.

Auffallend dabei ist die Tatsache, dass die in Tabelle 8 gelisteten Dimensionen eine scharfe obere Schranke der maximalen Vielfachheit dieser in ihrer Struktur regelmäßig angelegten Graphen bildet. Der Hypercubus jedoch widerlegt die These für $d \geq 4$. Diese Tatsache muss wohl als Indiz dafür gewertet werden, dass die Stichprobe der untersuchten Graphen nicht geeignet ist, die These zu belegen. Trotz der vorliegenden Ergebnisse muss daher der Schluss gezogen werden, dass die beobachteten Zusammenhänge rein zufälliger Natur sind.

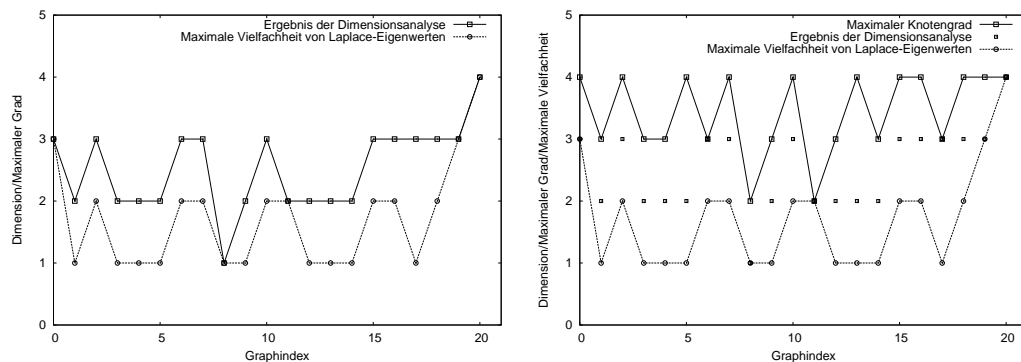


Abbildung 25: Dimension und maximale Vielfachheit von Laplace-Eigenwerten von Graphen mit $n = 5$ Knoten.

Graph		Dimension	maximale Vielfachheit	Eigenwert
Pfad	P_n	1	1	$\lambda_2 = 2 - 2 \cos\left(\frac{\pi}{n}\right)$
Kreis	C_n	2	2	$\lambda_2 = 2 - 2 \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right)$
Hypercube	K_2^d	d	$\binom{d}{\lfloor \frac{d}{2} \rfloor + 1}$	$\lambda = 2 \binom{d}{\lfloor \frac{d}{2} \rfloor + 1}$
Stern	S_n	$n - 2$	$n - 2$	$\lambda_2 = 1$
Clique	K_n	$n - 1$	$n - 1$	$\lambda_2 = n$

Tabelle 8: Dimension und maximale Vielfachheit einiger Graphen

4.2 Zusammenhang zwischen kräftebasierten und spektralen Layouts

Bereits in Kapitel 1 wurden Beispiele von Graphen angeführt, bei denen kräftebasiertes und spektrales Layout jeweils gewisse Ähnlichkeiten aufwiesen. Ob diese Ähnlichkeiten bei allen Graphen zu finden sind, oder ob es sich dabei eher um zufällige Phänomene handelt, soll in diesem Kapitel untersucht werden.

4.2.1 Überprüfbarkeit der These

Wie im vorigen Kapitel auch muss eine Überprüfung eines Zusammenhangs zwischen kräftebasierten und spektralen Layouts zunächst ohne theoretische Fundierung auskommen. Mehr noch als im vorigen Kapitel jedoch scheint bei dieser These die Frage nach der Repräsentativität der untersuchten Graphen angebracht. Aus offensichtlichen Gründen können nur recht kleine Graphen in ihrer Gesamtheit systematisch untersucht werden: Es gibt bereits 853 nicht isomorphe Graphen mit $n = 7$ Knoten. Schon eine systematische Untersuchung aller nicht isomorphen Graphen mit $n = 8$ Knoten – immerhin mehr als 11.000 Graphen – dürfte sich schwierig gestalten. Eine systematische Untersuchung der Graphen mit $n > 9$ Knoten ist gänzlich ausgeschlossen. Es gibt mehr als 10^7 solcher Graphen. Kleine Graphen haben allerdings den Nachteil, dass sie in ihrer Struktur nicht sehr komplex sind. Auch die Graphen in Tabelle 8 sind eher einfach strukturiert. Eine Interpretation der Ergebnisse sollte also unbedingt mit Vorbehalt durchgeführt werden kann und mehr als Möglichkeit denn als Tatsache gewertet werden, solange keine beweisbaren Ergebnisse vorliegen.

4.2.2 Ergebnisse

Tabelle 9 zeigt eine Gegenüberstellung von kräftebasiertem und spektralem Layout von zweidimensionalen Graphen mit $n = 5$ Knoten. Bei allen dargestellten Graphen kann eine

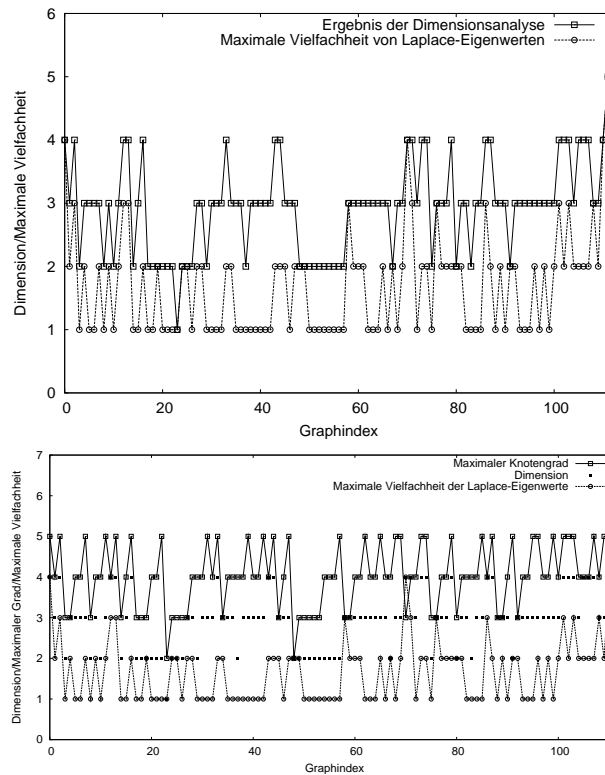
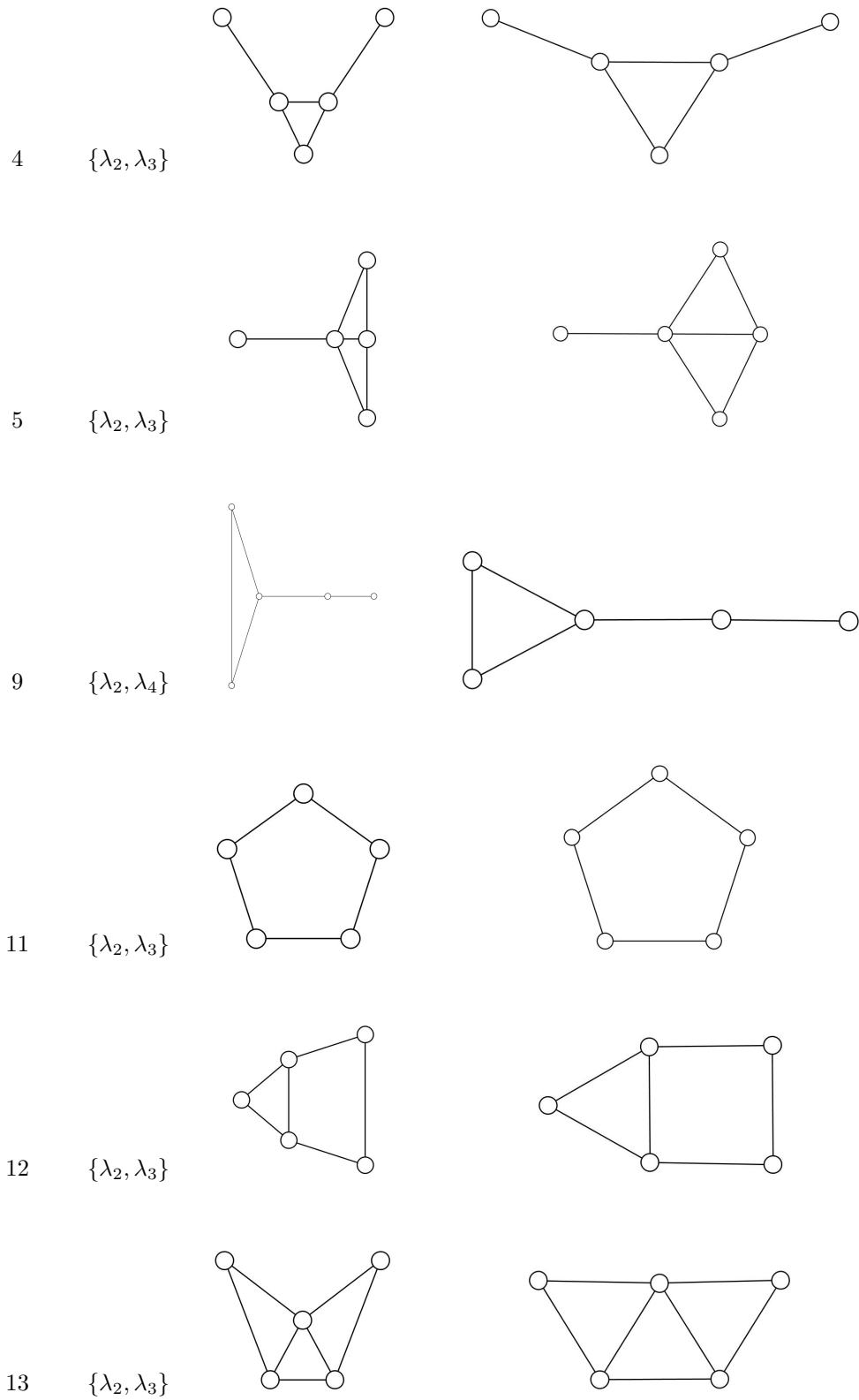


Abbildung 26: Dimension und maximale Vielfachheit von Laplace-Eigenwerten von Graphen mit $n = 6$ Knoten.

optische Übereinstimmung von zweidimensionalem kräftebasiertem Layout und zweidimensionaler Projektion festgestellt werden. Es sei jedoch darauf hingewiesen, dass nicht wie erwartet in allen Fällen die Projektion bezüglich der Eigenwerte λ_2 und λ_3 die besten Ergebnisse liefert. In zwei Fällen scheint eine Projektion bezüglich der Eigenwerte λ_2 und λ_4 optisch besser geeignet den Graph zu repräsentieren.

Index	Projektion	Spektrallayout	Kräftebasiertes Layout
1	$\{\lambda_2, \lambda_3\}$		
3	$\{\lambda_2, \lambda_3\}$		



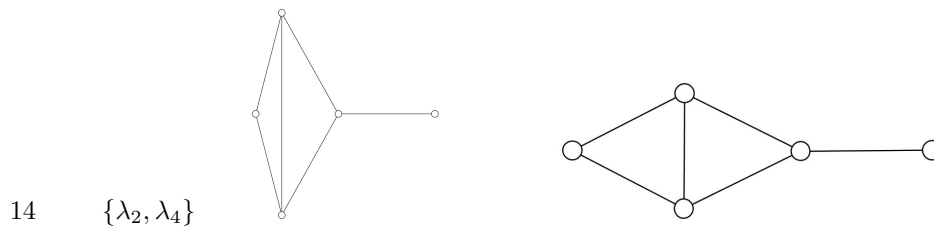


Tabelle 9: 2D-Layouts aller zweidimensionalen Graphen mit $n = 5$ Knoten

Nun ist eine solche Gegenüberstellung selbstverständlich nur ein mehr oder minder schwaches Indiz für einen Zusammenhang zwischen kräftebasierten und spektralen Layouts, insbesondere, wenn man die Repräsentativität der zugrundeliegenden Stichprobe infrage stellt. Offensichtlich ist eine solche Gegenüberstellung auch nicht geeignet, eine Vielzahl von Graphen oder Graphen mit hoher Dimension zu vergleichen, und eine Beurteilung der Gegenüberstellung ist in hohem Maße subjektiv. Dennoch dient sie aus Sicht des Autors in eindrucksvoller Weise der Untermauerung der These, und hat als Legitimation für eine genauere Untersuchung selbiger durchaus ihren Platz in der vorliegenden Arbeit.

Zunächst muss jedoch geklärt werden, wie ein weniger subjektiver Vergleich der Layouts erfolgen könnte. Der geometrische Ähnlichkeitsbegriff ist für diese Problemstellung nicht geeignet, da er voraussetzt, dass Winkel und Streckenverhältnisse in ähnlichen Figuren gleich sind. Geeigneter erscheint da schon eine schwache Form der geometrischen Ähnlichkeit, welche leichte Unterschiede der Winkel und Seitenverhältnisse toleriert. Betrachtet man jedoch die Abbildungen in Tabelle 9, so wird man feststellen müssen, dass bereits die Differenzen der Winkel etwa bei den meisten Graphen jeden vernünftigen Schwellwert für eine solche schwache Definition von geometrischer Ähnlichkeit überschreiten, und dass ein solches Vorgehen mit einem vernünftigen Schwellwert die wenigsten dieser Graphen als schwach ähnlich klassifizieren würde.

Eine noch schwächere Forderung, die jedoch einiges mit dem Ähnlichkeitsbegriff gemein hat, bestünde in der Forderung nach Korrelation der Kantenlängen. In der Tat kann man bei einigen Graphen eine signifikante Korrelation – wenn auch auf stark unterschiedlichem Niveau – beobachten. Abbildung 27 zeigt die entsprechenden Korrelationen aller zusammenhängenden Graphen der Größe fünf (oberes Bild) und der Größe sechs (unteres Bild). Untersucht wurde die Korrelation der Längen der Kanten und Nichtkanten der jeweiligen Graphen bezogen auf ihre Dimension. Für das Spektrallayout wurde eine Projektion bezüglich der ersten r Eigenwerte betrachtet. Es korrelieren 7 von 21 Längenvektoren von Graphen mit $n = 5$ Knoten, 41 von 112 Längenvektoren von Graphen mit $n = 6$ Knoten und immerhin 434 von 852, mithin ein wenig mehr als die Hälfte, aller Graphen mit $n = 7$ Knoten signifikant. Den Abbildungen ist ferner zu entnehmen, dass der Korrelationskoeffizient in vielen Fällen ein durchaus zufriedenstellendes Niveau hat. Es sei an dieser Stelle noch einmal auf Tabelle 9 verwiesen, in der ja ersichtlich wurde, dass die Wahl der Projektion eines zweidimensionalen Graphen bezüglich der Eigenwerte λ_2 beziehungsweise λ_3 nicht immer zufriedenstellende Ergebnisse liefert. Dies könnte das geringe Niveau der Korrelation in einigen Fällen erklären. So ist es nicht verwunderlich, dass die Längen bei dem Graphen mit Index 9 nicht signifikant korrelieren, handelt es sich bei der betrachteten Projektion doch nicht um die geeignetste.

Betrachtet man jedoch die Abbildung 27 genauer und vergleicht die Ergebnisse mit der Gegenüberstellung der Layouts in Tabelle 9, so kommen Zweifel an der Aussagekraft der Ergebnisse auf. So korrelieren die Längen des Graphen mit Index 3 nicht signifikant, obwohl das menschliche Auge die beiden Layouts des entsprechenden Graphen in eindeutiger Weise identifizieren würde. Offenbar ist für das menschliche Auge von größerer Bedeutung, ob die

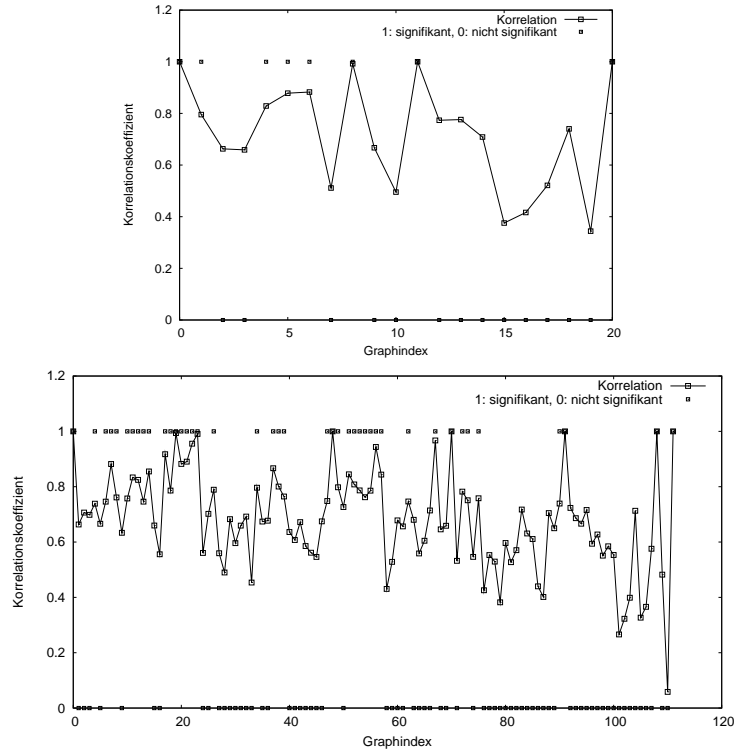


Abbildung 27: Korrelation der Kantenlängen von kräftebasierten und spektralen Layouts.

Knoten geometrisch gleich angeordnet sind.

Definition (*Geometrisch gleiche Anordnung*)

Die Layouts $p = (p_v)_{v \in V}$ und $p' = (p'_v)_{v \in V}$ mit $p_v, p'_v \in \mathbb{R}^N$ eines Graphen G sind geometrisch gleich angeordnet, wenn es eine auf der Menge der Knoten isometrische Transformation $\phi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ mit $\|p'_v - p'_u\| = \|\phi(p'_v) - \phi(p'_u)\|$ für $u, v \in V$ gibt, so dass für beliebige $u, v \in V$ und $i \in \{1, \dots, N\}$ die folgende Implikation gilt:

$$p_i^{(u)} \sim p_i^{(v)} \Rightarrow \phi(p_i^{(u)}) \sim \phi(p_i^{(v)}) \quad (\sim \in \{\leq, \geq\}). \quad (77)$$

Zwei Layouts sind also genau dann geometrisch gleich angeordnet, wenn es eine isometrische Transformation des einen Layouts gibt, so dass die Knoten des Graphen bezüglich jeder Koordinate die gleiche (An-)Ordnung besitzen.

Bezüglich dieser Definition sind die kräftebasierten und spektralen Layouts in Tabelle 9 jeweils gleich angeordnet. Eine Schwierigkeit bei der Implementation eines solchen Tests besteht – insbesondere in höheren Dimensionen – darin, eine geeignete isometrische Transformation ϕ anzugeben. In erster Näherung könnte man versuchen, eine Normalisierung der Layouts mittels Hauptkomponentenanalyse durchzuführen, ein solches Vorgehen wäre jedoch bei einigen Graphen – hierzu zählt unter anderen der Kreis – vollkommen unangebracht. Eine detaillierte und systematische Untersuchung mit diesem Test sprengt leider den Rahmen der vorliegenden Arbeit.

Zur Erläuterung dieses Sachverhaltes sei die folgende Überlegung angestellt. Die eindimensionale Einbettung eines Graphen mit n Knoten bezüglich des Laplace-Eigenwertes λ_2 minimiert die Hall'sche Energiefunktion bezüglich dieser Koordinate. Offensichtlich minimiert sie in gewisser Weise auch die Anzahl der sich überschneidenden Kanten. Abbildung 28 zeigt

eine sich überschneidende und eine überschneidungsfreie eindimensionale Einbettung eines Pfades mit $n = 3$ Knoten. Die überschneidungsfreie Einbettung minimiert die Hall'sche Energie, die ja eine Funktion der (eindimensionalen) Kantenlängen ist, unter Beibehaltung der Koordinaten, so dass die Orthogonalität zum Einsvektor und die Normierung des Layoutvektors erhalten bleibt. Die sich überschneidende Konfiguration kommt somit als Lösung des Eigenwertproblems nicht infrage.



Abbildung 28: Sich überschneidende und überschneidungsfreie eindimensionale Einbettung eines Pfades mit $n = 3$ Knoten.

Auch bei einem eindimensionalen kräftebasierten Layout wird die Anzahl der Kantenüberschneidungen implizit minimiert. Allerdings ist dies hier nicht ganz so leicht nachzuvollziehen. Ein einfaches Vertauschen von Knotenkoordinaten könnte dazu führen, dass die Länge einer betreffenden Kante ihre optimale Länge unterschreitet und möglicherweise sogar einen größeren Anteil zum Potential beiträgt als zuvor. Dies kann allerdings nur dann der Fall sein, wenn die entsprechende Nichtkante sehr kurz war. Dies wiederum ist in einem kräfte-minimalen Layout eher unwahrscheinlich.

Von weiterem Interesse sind auch die bereits erwähnten höherdimensionalen Einbettungen, also R -dimensionale Gleichgewichts-Einbettungen von r -dimensionalen Graphen, wobei $R > r$ gilt. Hier kommt erschwerend hinzu, dass das Gleichgewicht solcher Layouts von instabiler Natur ist, und somit nur schwer gefunden werden kann. In einem normalen Layoutprozess treten solche Konfigurationen praktisch nicht auf. Sie sind nur als Ergebnis einer restringierten Optimierung reproduzierbar. Diese allerdings erfordert die Kenntnis der entsprechenden Layouts. Im Fall des zweidimensionalen Pfadlayouts etwa erfordert sie die Kenntnis der sich überschneidenden Kanten, da die restringierte Optimierung es erfordert, dass die Anordnung der Kanten in der zweiten Dimension erhalten bleibt, damit das gewünschte zweidimensionale Ergebnis reproduzierbar ist. Im Falle des Pfades ließe sich die entsprechende zweidimensionale Spektral-Einbettung hinsichtlich ihrer Anordnung analysieren. Im Allgemeinen ist aber nicht bekannt, welche Spektralprojektion für eine solche Analyse herangezogen werden muss. Bei einem Pfad ist es naheliegend, die Projektion bezüglich der Eigenwerte λ_3 beziehungsweise λ_4 zu nutzen, da die eindimensionale Einbettung bezüglich des Eigenwertes λ_2 am sinnvollsten ist. Anders ist die Lage allerdings bei Graphen, bei denen etwa die zweidimensionale Einbettung bezüglich der Eigenwerte λ_2 beziehungsweise λ_4 am besten erscheint.

5 Zusammenfassung & Ausblick

Obgleich die Paradigmen von spektralen und kräftebasierten Layout-Techniken auf den ersten Blick unterschiedlicher nicht sein könnten – ein Layout basierend auf der Formulierung eines Eigenwertproblems einerseits und die iterative Annäherung an einen Gleichgewichtszustand in einem physikalischen System andererseits – lassen sich an einigen Graphen auffällige Gemeinsamkeiten bezüglich der Layouts beobachten. Optisch sind die zweidimensionalen Layouts der beiden Techniken von Kreisen überhaupt nicht und die entsprechenden Layouts von Gittern nur an Kleinigkeiten unterscheidbar. Die vorliegende Arbeit soll als Ausgangspunkt einer tiefen, systematischen Untersuchung der Zusammenhänge zwischen spektralen und kräftebasierten Layouts dienen.

Der gewählte multidimensionale Ansatz ist von entscheidender Bedeutung für die Vergleichbarkeit der Layouts. Ziel dieses Ansatzes ist es, alle in der Struktur eines Graphen inhärenten Freiheitsgrade für ein Layout zu nutzen, da nur auf diese Weise die vollständige Struktur des Graphen im Layout manifest wird. Ein beliebiges Layout eines Graphen mit n Knoten kann

in einem $(n - 1)$ -dimensionalen Raum eingebettet werden. Einige Graphen können jedoch bereits in kleineren Räumen eingebettet werden. Die Dimension des kleinsten Raumes, in welchem ein sich im Gleichgewicht befindendes Layout eines gegebenen Graphen eingebettet werden kann, wird in der vorliegenden Arbeit als Dimension des Graphen interpretiert. Um Gleichgewichtskonfigurationen lokaler Minima auszuschließen, wurde zur formalen Definition der Dimension das Potential hinzugezogen. Dabei handelt es sich um eine Größe, welche die betragsmäßige Gesamtheit aller im Graphen wirkenden Kräfte reflektiert. Als Grundlage des Dimensionsbegriffs wird nun eine Gleichgewichtskonfiguration mit minimalem Potential herangezogen. Offensichtlich ist ein kräftebasiertes Layout, bei welchem sich neutralisierende Kräfte betragsmäßig möglichst klein sind besser als eines mit betragsmäßig großen sich neutralisierenden Kräften. In Kapitel 3.2.1 wurden einige grundlegende Eigenschaften des Potentials diskutiert. Man kann zeigen, dass das Potential für ein vorgegebenes Seitenverhältnis eines Graphen ein eindeutiges Minimum besitzt, ferner, dass das Potential ein globales Minimum annimmt. Leider konnte die Frage nach der Verträglichkeit des Potentials mit dem Spring Embedder nicht eindeutig geklärt werden. Zwar kann man sich durchaus Konfigurationen vorstellen, bei denen das Potential durch Update mit dem Kraft-Verschiebungsvektor zunimmt. Dennoch ist der Potentialverlauf bei einigen Graphen während des Spring Embedder Algorithmus streng monoton fallend.

In Kapitel 3.3.2 wurde der Versuch einer systematischen Untersuchung der Dimensionalität mit anschließender Validierung unternommen. Die Ergebnisse legen nahe, dass der maximale Knotengrad eines Graphen eine obere Schranke für dessen Dimension ist. Ein solches Ergebnis ist allerdings in Hinblick auf die Ergebnisse des Kapitels 4.1 mit äußerster Vorsicht zu genießen.

Als Maßzahl wurde die Dimension eines Graphen für den Vergleich von spektralen und kräftebasierten Layouts herangezogen. Bei allen untersuchten Graphen mit weniger als acht Knoten ist die Dimension eine obere Schranke für die Vielfachheit der Laplace-Eigenwerte eines Graphen. Am Beispiel des Hypercubus allerdings lässt sich die These eines Zusammenhangs dieser zwei Größen verwerfen.

Einem rein geometrischen Vergleich von spektralen und kräftebasierten Layouts muss ein Kriterium für die Gleichheit von Layouts zugrundegelegt werden. In Kapitel 4.2 wurden hierfür schwache geometrische Ähnlichkeit, Korrelation der Kantenlängen und geometrische Anordnung der Knoten diskutiert. Bei jeweils mehr als einem Drittel der Graphen mit fünf beziehungsweise sechs Knoten und mehr als der Hälfte aller Graphen mit sieben Knoten kann man einen signifikanten Zusammenhang der Längen der beiden Layouts feststellen. Die größte Übereinstimmung mit einer intuitiven Beurteilung der Gleichheit liefert allerdings der Test auf geometrisch gleiche Anordnung. Die Schwierigkeit bei der Anwendung eines solchen Tests besteht darin, eine geeignete Normalisierungstransformation der Layouts anzugeben.

Die vorliegende Arbeit liefert aus Sicht des Autors eine Reihe vielversprechender Anhaltspunkte für einen weiteren Vergleich von spektralen und kräftebasierten Layouts und die Präzisierung der angesprochenen Problemstellungen. Ein Beleg für die Verträglichkeit von Potential und Spring Embedder könnte neue Erkenntnisse und eine effizientere mathematische Beschreibung bezüglich der Arbeitsweise des Algorithmus liefern. Möglicherweise lassen sich die Eigenschaften des Potentials sogar für eine Verbesserung des Algorithmus nutzen. Eine Ausweitung des Vergleichs, insbesondere eine Implementierung des Tests auf geometrisch gleiche Anordnung, könnte weitere Erkenntnisse in Bezug auf den Zusammenhang zwischen spektralen und kräftebasierten Layouts vor allem in höheren Dimensionen liefern. Vor allem aber scheint eine theoretische Fundierung der beobachteten Zusammenhänge erstrebenswert.

Literatur

- [1] Ulrik Brandes. Drawing on physical analogies. In Michael Kaufmann and Dorothea Wagner, editors, *Drawing Graphs: Methods and Models*, number 2025 in *Lecture Notes in Computer Science*, pages 71–86. Springer-Verlag, Berlin, Germany, 2001.
- [2] P. Eades. A heuristic for graph drawing. *Congressus Numerantium*, 42:149–160, 1984.
- [3] Ann Blair und Richard Waters Eriola Kruja, Joe Marks. A short note on the history of graph drawing. In *Graph Drawing: 9th International Symposium*, volume 2265 of *Springer Lecture Notes in Computer Science*, pages 272–286. Springer, Wien, Sept. 2001.
- [4] K. M. Hall. An r-dimensional quadratic placement algorithm. *Manage Science*, pages 219–229, 1970.
- [5] I. T. Jolliffe. *Principal Component Analysis*. Springer Series in Statistics. New York Springer-Verlag New York, 2nd ed. edition, 2002.
- [6] Michael Kaufmann and Dorothea Wagner, editors. *Drawing Graphs: Methods and Models*, volume 2025 of *Lecture Notes in Computer Science*. Springer-Verlag, 2001.
- [7] Y. Koren, L. Carmel, and D. Harel. Ace: A fast multiscale eigenvectors computation for drawing huge graphs.
- [8] Bojan Mohar. The laplacian spectrum of graphs. In O.R. Oellermann Y. Alavi, G. Chartrand and A.J. Schwenk, editors, *Graph Theory, Combinatorics and Applications*, volume 2, pages 871–898. John Wiley & Sons, Inc., 1991.
- [9] Bojan Mohar. Some applications of laplace eigenvalues of graphs. In G. Hahn und G. Sbidussi, editor, *Graph Symmetry: Algebraic Methods and Applications*, pages 225–275. Kluwer, 1997.
- [10] Gene H. Golub und Charles F. van Loan. *Matrix Computations*. The John Hopkins University Press, 2nd edition, 1996.
- [11] Ulrik Brandes und Thomas Erlebach, editor. *Network Analysis: Methodological Foundations*. *Lecture Notes in Computer Science*. Springer-Verlag, 2005.