Графовые задачи в терминах линейной алгебры

Рустам Азимов

2022г.

Примеры задач на графах

- Обход графа
- Нахождение транзитивного замыкания графа
- Поиск путей в графе
  - Могут фиксироваться начальная и/или конечная вершины пути
  - Могут накладываться дополнительные ограничения на искомые пути (ищем кратчайший путь, с минимальным весом и т.д.)
- Задача о максимальном потоке
- Задача о минимальном остове
- Подсчёт треугольников в графе
- Поиск максимального паросочетания

Сложность анализа графов

- Современные компьютерные архитектуры хороши в обработке линейных и иерархических структур данных
  - lists
  - stacks
  - trees
- Требуется огромный объём произвольного доступа к данным, CPU часто пропускает кэш и реализация параллелизма трудна
- Pre-fetching и branch prediction малоэффективны
- Нужно использовать достаточно выразительную модель данных и вычислений, которые также удобны и портативны

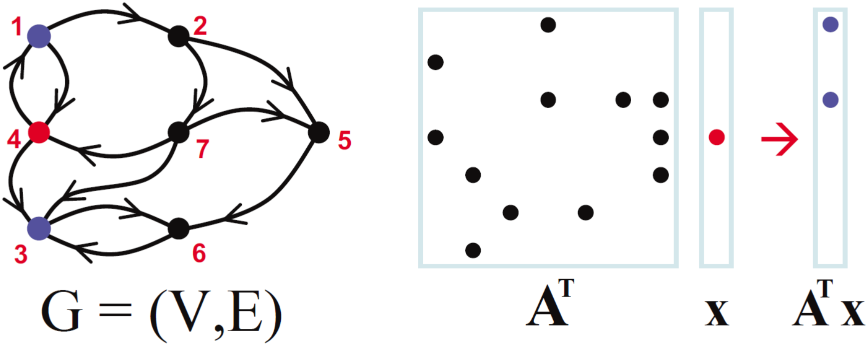
Решение графовых задач с помощью линейной алгебры

- Уже давно известно о том, что граф может быть представлен в виде разреженной матрицы смежности
- А операции с графом могут выполняться с помощью линейных алгебраических операций
- Но технологии были недостаточно развиты для эффективной реализации данной идеи
- В настоящее время, с появлением эффективных алгоритмов для разреженных массивов и матриц, данный подход стал очень популярен

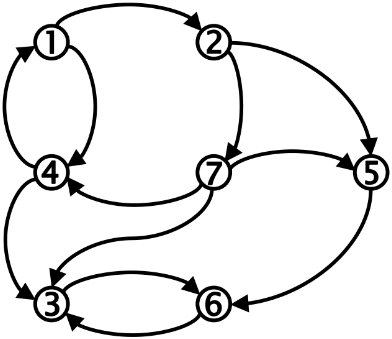
Мотивация

- Многие графовые алгоритмы сформулированные в терминах линейной алгебры более компактны и просты для понимания
- Они легки в реализации из-за возможности использовать существующие высокоуровневые библиотеки для вычисления операций линейной алгебры
- Они очень эффективны на практике
  - Существующие библиотеки используют широкий класс оптимизаций, например, параллельное вычисление
  - Такие алгоритмы более явно определяют шаблон доступа к данным, что также может быть использованно для оптимизаций

Пример

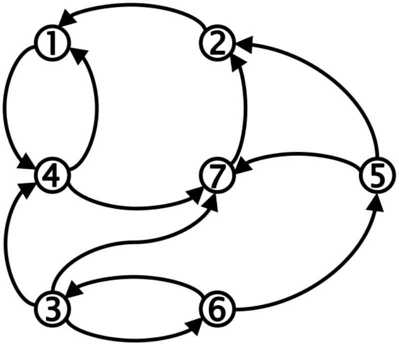


Матрица смежности

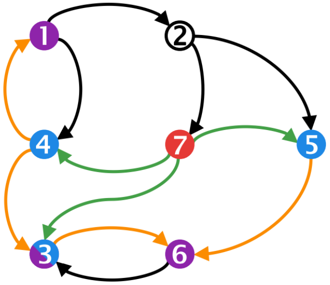


A	①	②	③	④	⑤	⑥	⑦
①		1		1			
②					1		1
③						1	
④	1		1				
⑤						1	
⑥			1				
⑦			1	1	1		

Транспонированная матрица смежности



A^T	①	②	③	④	⑤	⑥	⑦
①				1			
②	1						
③				1		1	1
④	1						1
⑤		1					1
⑥			1		1		
⑦		1					



$\mathbf{f}\mathbf{A}^k$ means k hops in the graph

A	1	2	3	4	5	6	7
1		1		1			
2					1		1
3						1	
4	1		1				
5						1	
6			1				
7			1	1	1		

	1	2	3	4	5	6	7
f							1

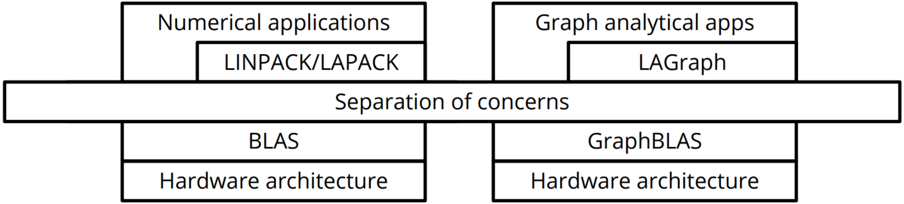
	1	2	3	4	5	6	7
one hop: $\mathbf{f}\mathbf{A}$			1	1	1		

	1	2	3	4	5	6	7
two hops: $\mathbf{f}\mathbf{A}^2$	1		1			2	

Стандарт GraphBLAS

- Большой популярностью пользуется стандарт **GraphBLAS**, использующий вышеизложенные идеи
- **Цель**: разделить проблемы разработки аппаратных средств, библиотек и приложений
- **GraphBLAS** (2013 г.) — определяет стандартные строительные блоки для графовых алгоритмов на языке линейной алгебры
- Для многих графовых алгоритмов была найдена формулировка на языке линейной алгебры (BFS, PageRank, Graph coloring, Connected components, ...)
- Для остальных неизвестно существует ли такая формулировка (DFS, ...)

Стандарт GraphBLAS



Стандарт GraphBLAS

- **SuiteSparse:GraphBLAS** — высокопроизводительная реализация на языке Си
- Использует разреженный формат матриц, например, CSR
- Умножает только на пересечении ненулевых индексов строки в матрице A и столбца матрицы B:

$$C(i,j) = \bigoplus_{k \in ind(A(i,:)) \cap ind(B(:,j))} A(i,k) \otimes B(k,j)$$

Графовые алгоритмы и полукольца

- Одним из способов сформулировать графовые алгоритмы на языке линейной алгебры является определение полукольца
- Полученные полукольца могут быть использованы для определения матрично-векторных операций соответствующих различным обходам графа и его анализу
- Будем использовать нотацию Matlab $A\ op_1.op_2\ v$
- Например, алгоритм Беллмана-Форда поиска кратчайшего пути может быть перезаписан в виде
$$d = d\ min.+\ A$$

Полукольцо в GraphBLAS

Определение

Алгебраическая структура $< D, \oplus, \otimes, 0 >$ *является полукольцом в GraphBLAS, если:*

- $< D, \oplus, 0 >$ *является коммутативным моноидом с операцией сложения* $\oplus : D \times D \rightarrow D$, *где* $a, b, c \in D$:
  - *Коммутативность:* $a \oplus b = b \oplus a$
  - *Ассоциативность:* $(a \oplus b) \oplus c = a \oplus (b \oplus c)$
  - *Нулевой элемент:* $a \oplus 0 = a$
- *Оператор умножения является замкнутым бинарным оператором* $\otimes : D \times D \rightarrow D$

Математическое определение более строгое ($\otimes$ — моноид и дистрибутивен над $\oplus$)

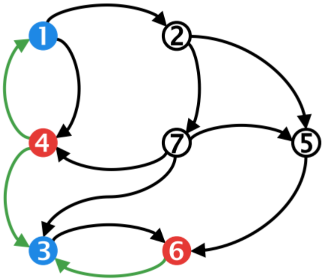
Примеры полуколец в GraphBLAS и их смысл

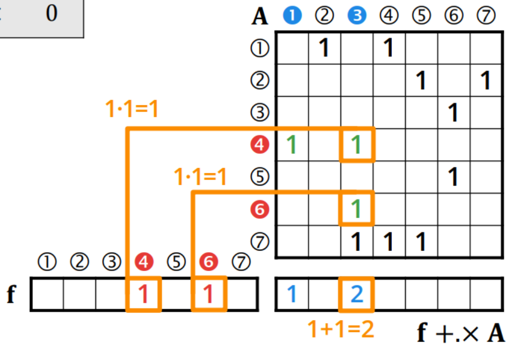
semiring	set	$\oplus$	$\otimes$	$\mathbb{0}$	graph semantics
lor-land	$a \in \{\mathrm{F}, \mathrm{T}\}$	$\vee$	$\wedge$	F	connectivity
any-pair	arbitrary	any	pair	F/0	connectivity
integer arithmetic	$a \in \mathbb{N}$	$+$	$\times$	0	number of paths
real arithmetic	$a \in \mathbb{R}$	$+$	$\times$	0	strength of all paths
min-plus	$a \in \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$	min	$+$	$+\infty$	shortest path
max-plus	$a \in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$	max	$+$	$-\infty$	graph matching

Примеры семантик матрично-векторных произведений

semiring	set	⊕	⊗	0
integer arithmetic	$a \in \mathbb{N}$	$+$	$\times$	0

Semantics: **number of paths**

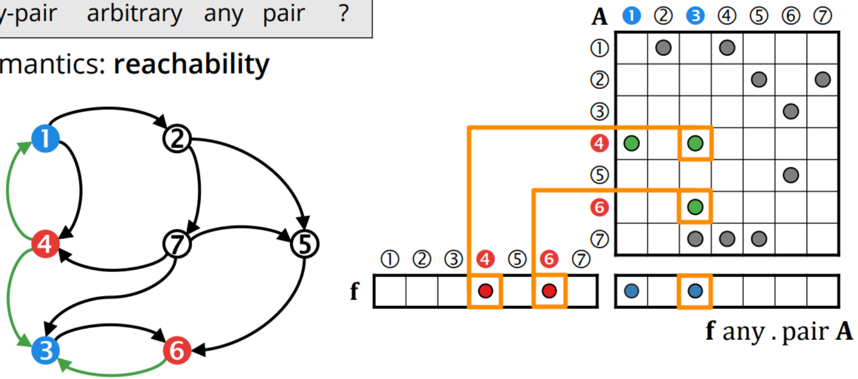




Примеры семантик матрично-векторных произведений

semiring	set	⊕	⊗	0
any-pair	arbitrary	any	pair	?

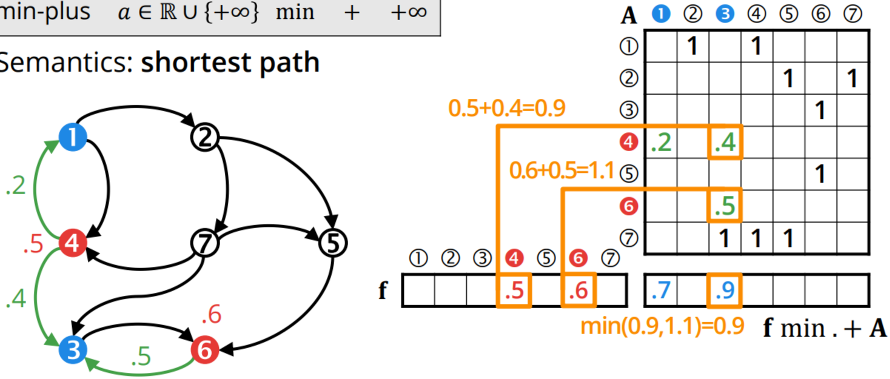
Semantics: **reachability**



Примеры семантик матрично-векторных произведений

semiring	set	⊕	⊗	0
min-plus	$a \in \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$	min	+	$+\infty$

Semantics: **shortest path**



Вопросы

- Какова семантика поэлементного умножения матриц смежности двух графов?
- Какова семантика поэлементного сложения матриц смежности двух графов?
- С помощью каких алгебраических операций над матрицей смежности ориентированного графа можно получить матрицу смежность его неориентированной версии?

Источники

- Книга: Kepner J., Gilbert J. - "Graph algorithms in the language of linear algebra"
- Презентация: Gábor Szárnyas - "Introduction to GraphBLAS"