# Теория графов. Лекции. Заметки.

Семён Григорьев

5 апреля 2021 г.

## Содержание

1	Лекция 1: Разреженные матрицы		
	1.1	Форматы разреженных матриц	3
	1.2	Умножение разреженных матриц	4
<b>2</b>	Спє	ектральная теория графов. Введение	5
	2.1	Лекция 2	8
		2.1.1 Укладка графов	g
		2.1.2 Матрицы смежности	10
	2.2	Задачи	12

## 1 Лекция 1: Разреженные матрицы

### 1.1 Форматы разреженных матриц

Важно то, что их дофига. И разные хороши для разных задач.

Рассмотрм матрицу

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 \\ 0 & 3 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & -3 & 0 & 0 & 0 & 0 & -7 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

В ней всего 15 ненулевыз элементов (NNZ(M) = 15). Попробуем представить её в разных форматах.

**Покоординатный (COO).** Часто он же *triple store*. Просто коллекция троек вида (строка, столбец, значение) только для ненулевых элементов.

$$M_{COO} = [(0,0,1); (0,4,3); (0,6,9); (1,2,2); (1,5,-1); (2,3,7); (3,1,6); (3,7,5); (4,1,3); (4,2,4); (5,4,2); (5,6,8); (6,2,-3); (2,7,-7); (7,4,-4)]$$

Потратили 3\*NNZ(M) памяти.

Формат простой. Можно предварительно сортировать по столбцам или строкам. Достаточно просто удалять и добавлять элементы. Не самый оптимальный по доступу и по дополнительной памяти.

Compressed row storage (CRS). Заведём 3 массива: val для хранения значений,  $col\_id$  для хранения номера столбца,  $row\_ptr$  для указателя на начало строки в  $col\_id$ .

Потратили 2\*NNZ(M)+n памяти. Сложнее построить, сложно удалять и добавлять. Достаточно просто последовательно обходить, лучше по памяти и по обращению к элементу. Наиболее часто встречается в современных библиотеках.

Compressed column storage (CCS) и compressed dioganal storage (CDS). Вариации на тему CRS. Второй — для диоганальных матриц.

**Блочный CRS (CCS, CDS).** Когда мы знаем, что матрица имеет блочную структуру, а каждый блок — разреженная матрица. Пример — результат тензорного произведения.

#### Quad-tree.

Предположим, что  $n=2^k$ . Если это не так, то выравниваем нулями. После этого строим рекурсивно дерево: дели матрицу на 4 блока, корень — это текущая матрица, листья — 4 полученных блока.

Если в блоке все элементы нули, то сразу рисуем лист типа (этот блок - ноль), иначе продолжаем разбиение. И так до тех пор пока не получатся блоки из одного элемента.

Относительно сложно построить, легко разделить на части (хорошо для распределённых вычислений), достаточно быстрый доступ к элементу, простой рекурсивный алгоритм перемножения.

Часто используется в композиции с CRS или другими форматами: до какого-то момента строим дередо, а потом в листьях храним сравнительно большие подматрицы в CRS.

### 1.2 Умножение разреженных матриц

Временная сложность оценивается относительно количества ненулевых элементов (NNZ) либо во входных матрицах, либо в выходной матрице, либо и там и там.

При использовании GPGPU возникают проблемы с необходимостью динамически выделять память. Поэтому используют два шага: оценка NNZ в результирующей матрице с последующим выделением нужного количества памяти, собственно перемножение.

### 2 Спектральная теория графов. Введение

Матрица смежности.

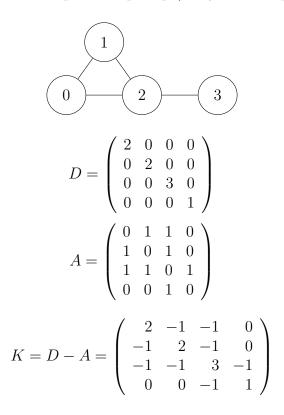
Матрица Кирхгофа. Оператор Лапласа. Для неориентированного графа без кратных рёбер и петель.

**Определение 2.1.** Пусть неориентированный граф без кратных рёбер и петель (простой граф)  $G = \langle V, E \rangle, |V| = n$ . Тогда матрица Кирхгофа  $K = (k_{i,j})_{n \times n}$ .

$$k_{i,j} := \begin{cases} \deg(v_i) & \text{при } i = j, \\ -1 & \text{при } (v_i, v_j) \in E(G), \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

K=D-A, где A — матрица смежности графа, а D — матрица, на диагонали которой строят степени вершин, а остальные элементы равны нулю.

Пример 2.1 (Пример графа и его матрицы Кирхгофа). Пусть дан граф:



Определитель матрицы.

**Определение 2.2** (Дополнительный минор).  $M_{i,j}$  — дополнительный минор, определитель матрицы, получающейся из исходной матрицы A путём вычёркивания i-й строки и j-го столбца.

**Определение 2.3** (Определитель матрицы  $2 \times 2$ ). Для матрицы  $2 \times 2$  определитель вычисляется как:

$$\Delta = \begin{vmatrix} a & c \\ b & d \end{vmatrix} = ad - bc$$

**Определение 2.4** (Определитель матрицы  $N \times N$ ).

$$\Delta = \sum_{i=0}^{n-1} (-1)^j a_{0,j} M_{0,j}$$

, где  $M_{0,j}$  — дополнительный минор к элементу  $a_{0,j}$ .

Это было разложение по строке и, вообще говоря, подобная операция может быть проделяна для любой строки. Аналогично можно использовать разложение по столбцу.

**Определение 2.5** (Определитель матрицы  $3 \times 3$ ).

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_{0,0} & a_{0,1} & a_{0,2} \\ a_{1,0} & a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{2,0} & a_{2,1} & a_{2,2} \end{vmatrix} = a_{0,1} \begin{vmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{2,1} & a_{2,2} \end{vmatrix} - a_{0,2} \begin{vmatrix} a_{1,0} & a_{1,2} \\ a_{2,0} & a_{2,2} \end{vmatrix} + a_{0,3} \begin{vmatrix} a_{1,0} & a_{1,1} \\ a_{2,0} & a_{2,1} \end{vmatrix} = a_{0,0}a_{1,1}a_{2,2} - a_{0,0}a_{1,2}a_{2,1} - a_{0,1}a_{1,0}a_{2,2} + a_{0,1}a_{1,2}a_{2,0} + a_{0,2}a_{1,0}a_{2,1} - a_{0,2}a_{1,1}a_{2,0}$$

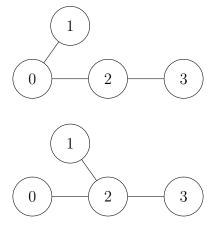
**Определение 2.6** (Алгебраическое дополнение). Алгебраическим дополнением элемента  $a_{i,j}$  матрицы A называется число  $A_{i,j} = (-1)^{i+j} M_{i,j}$ , где  $M_{i,j}$  — дополнительный минор.

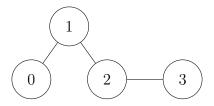
**Пример 2.2** (Определитель). Найдём определитель матрицы Кирхгофа для нашего графа. Будем использовать разложение по 3-й строке.

$$\Delta \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} = (-1)^5 (-1) \begin{vmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{vmatrix} + (-1)^6 1 \begin{vmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 3 \end{vmatrix} = 1((2 \cdot 2 \cdot -1) - (2 \cdot 0 \cdot -1) - (-1 \cdot -1 \cdot -1) + (-1 \cdot 0 \cdot -1) + (0 \cdot -1 \cdot -1) - (0 \cdot 2 \cdot -1)) + 1((2 \cdot 2 \cdot 3) - (2 \cdot -1 \cdot -1) - (-1 \cdot -1 \cdot 3) + (-1 \cdot -1 \cdot -1) + (-1 \cdot -1 \cdot -1) - (-1 \cdot 2 \cdot -1)) = (-4 + 1) + (12 - 2 - 3 - 1 - 1 - 2) = -3 + 3 = 0$$

**Теорема 2.1** (Матричная теорема об остовных деревьях). Пусть G — связный простой граф с матрицей Кирхгофа K. Все алгебраические дополнения матрицы Кирхгофа K равны между собой и их общее значение равно количеству остовных деревьев графа G.

**Пример 2.3** (Количество остовных деревьев). Из примера выше, значения миноров равно 3. Деревья:





Сумма элементов каждой строки (столбца) матрицы Кирхгофа равна нулю:  $\sum_{i=0}^{|V|-1} k_{i,j} = 0$ .

Определитель матрицы Кирхгофа равен нулю:  $\Delta K = 0$ .

Собственные числа и собственные вектора.

Нам понядобится поле F.

**Определение 2.7** (Собственный вектор). Ненулевой вектор x называется собственным вектором матрицы A для некоторого элемента  $\lambda \in F$ , если  $Ax = \lambda x$ 

**Определение 2.8** (Собственное число (Собственное значение)). Собственным числом матрицы A называется такое  $\lambda \in F$ , что существует ненулевое решение уравнения  $Ax = \lambda x$ .

Как видно, собственные числа и собственные вектора "ходят парами".

Пример 2.4 (Собственные числа и вектора).

$$A = \left(\begin{array}{cccc} 2 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{array}\right)$$

По определению  $Ax = \lambda x$ .

$$Ax - \lambda x = 0$$

$$(A - \lambda E)x = 0$$

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix})x = 0$$

Данное уравнение имеет ненулевое решение тогда и только тогда, когда  $|A - \lambda E| = 0$ 

$$|A - \lambda E| = \begin{vmatrix} 2 - \lambda & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 - \lambda & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 - \lambda & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^4 - 8\lambda^3 + 19\lambda^2 - 12\lambda$$

То есть надо решить уравнение

$$\lambda^4 - 8\lambda^3 + 19\lambda^2 - 12\lambda = 0$$

$$\lambda^4 - 8\lambda^3 + 19\lambda^2 - 12\lambda = \lambda(\lambda^3 - 8\lambda^2 + 19\lambda - 12) = \lambda(\lambda - 1)(\lambda^2 - 7\lambda + 12) = \lambda(\lambda - 1)(\lambda - 3)(\lambda - 4) = 0$$

Корни:  $\lambda \in \{0, 1, 3, 4\}$ .

Далее для каждого совственного числа нужно найти соответсвующий вектор. Для этого решаем системы линейных уравнений (метод Гаусса в помощь).

$$(A - 0 \cdot E)x = 0$$
$$(A - 1 \cdot E)x = 0$$
$$(A - 3 \cdot E)x = 0$$
$$(A - 4 \cdot E)x = 0$$

$$x_{0} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$x_{1} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$x_{2} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$x_{3} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

**Определение 2.9** (Спектр графа). Спектром графа называется упорядоченное по возростанию мультимножество собственных значений его матрицы смежности.

Так как мы говорим о неориентированном графе, то собственные значения всегд вещественные числа (почему?).

Хотя матрица смежности и зависит от нумерации вешин, спектр является инвариантом графа (почему?).

Следствие: изоморфные графы имеют одинаковый спектр.

Графы с одинаковым спектром — изоспектральные (или коспектральные).

**Теорема 2.2.** Изоморфные графы всегда изоспектральны. Обратное не верно (изоспектральные графы не обязательно изоморфны).

### 2.1 Лекция 2

Вернёмся к собственным числам матрицы Кирхгофа.

Минимальное значение собственных чисел — это 0.

**Теорема 2.3.**  $\lambda_1 = 0$  тогда и только тогда, когда в графе больше одной компоненты связянности.

Напомним, что нумерация с нуля. То есть речь про второе совственное число.

Кратность нуля как собственного числа — количество компонент явязанности.

**Определение 2.10** (Алгебраическая связянность графа). Занчение второго собственного числа матрицы Кирхгофа называют алгебраической связанностью графа. Соотвтетсвующий собственный вектор — вектор Фидлера (Fiedler).

 $\lambda_1$  монотонно неубывает при добавлении рёбер.

### 2.1.1 Укладка графов

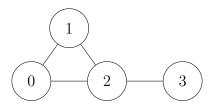
Hall, Kenneth M. "An r-Dimensional Quadratic Placement Algorithm." Management Science, vol. 17, no. 3, 1970, pp. 219–229. JSTOR, www.jstor.org/stable/2629091. Accessed 4 Apr. 2021.

Цель: нарисовать граф. Построить отоброжение из  $V \mathbb{R}^n$ .

Для начала, на прямой (n=1). То есть хотим получить вектор координат вершин x. Для этого минимизируем

$$\sum_{(i,j)\in E} (x_i + x_j)^2 = x^T K x$$

Тривиальное решение: x=1. Чтобы его не допускать, потребуем, чтобы  $x^T1=0$ . Тогда решением будет второй собственный вектор.



$$x_1 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

 $B \mathbb{R}^2$  интереснее. Хотим минимизировать суму расстояний:

$$\sum_{(i,j)\in E} (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2$$

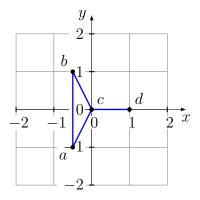
при условии

$$\sum_{i \in V} (x_i, y_i) = (0, 0)$$

чтобы избежать тривиального решения. Дополнительно потребуем ортогональность x и y.

Тогда решение — второй и третий собственные вектора.

$$x_{2} = \begin{pmatrix} -1\\1\\0\\0 \end{pmatrix}$$
$$a: (-\frac{1}{2}, -1)$$
$$b: (-\frac{1}{2}, 1)$$
$$c: (0, 0)$$
$$d: (1, 0)$$



### 2.1.2 Матрицы смежности

Вернёмся к матрицам смежности. Те же собственные числа, те же собственные вектора. Только упорядочиваем наоборот:  $\lambda_0 \geq \lambda_1 \ldots \geq \lambda_n$ .

Теорема 2.4.

$$d_{avg} \le \lambda_0 \le d_{max}$$

, где d — степень вершины.

Что будет, если начать удалять вешины с наименьшими степенями?

**Теорема 2.5.** Граф раскрашиваем в  $\lfloor \lambda_0 \rfloor + 1$  цвет

Пример 2.5.

$$A = \left(\begin{array}{cccc} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{array}\right)$$

$$\lambda \in \{2.170, 0.311, -1, -1.481\}$$

(все, кроме одного — приближённые значения).

Раскрашиваем ли он наш граф в  $\lfloor \lambda_0 \rfloor + 1 = \lfloor 2.170 \rfloor + 1 = 2 + 1 = 3$  цвета?

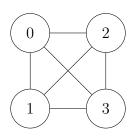
**Теорема 2.6.** Хроматическое число  $\chi \geq 1 + \frac{\lambda_0}{-\lambda_n}$ 

**Теорема 2.7.** Граф двудольный тогда и только тогда, когда для любого собственного числа  $\lambda_i$ , величина  $-\lambda_i$  также является собственным числом.

Теорема 2.8. Ещё немного характеристик на основе собственных значений.

- Граф с одним собственным числом граф без рёбер.
- Граф с двумя собственными числами полный граф.

Пример 2.6 (Пример полного графа и его матриц смежности и Кирхгофа). Пусть дан граф:



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

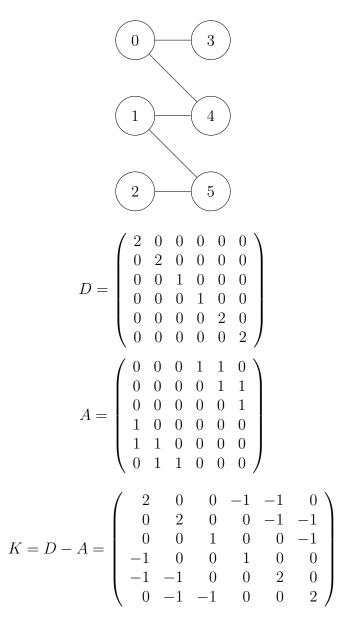
$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$K = D - A = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

Начнём с матрицы смежности. Посчитаем её собственные числа.

$$\lambda_0 = 3; \lambda_1 = -1$$

Пример 2.7 (Пример двудольного графа и его матриц смежности и Кирхгофа). Пусть дан граф:



$$Q = D + A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Начнём с матрицы смежности. Посчитаем её собственные числа.

$$\lambda_0 \approx 1.802; \lambda_1 \approx 1.247; \lambda_2 \approx 0.445;$$
 $\lambda_3 \approx -0.445; \lambda_4 \approx -1.247; \lambda_5 \approx -1.802$ 

Собственные числа и собственные вектора матрицы Кирхгофа.

$$\lambda_0 = 0; \lambda_1 = -\sqrt{3} + 2; \lambda_2 = 1;$$
  
 $\lambda_3 = 2; \lambda_4 = 3; \lambda_4 = \sqrt{3} + 2;$ 

$$x_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ \frac{\sqrt{3}-1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}+1}{2} \\ \frac{-\sqrt{3}-1}{2} \\ \frac{-\sqrt{3}+1}{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$x_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Заметим, что спектр K равен спектру Q.

Спектр Q:

$$\lambda_0^q = 0; \lambda_1^q = -\sqrt{3} + 2; \lambda_2^q = 1;$$
  
 $\lambda_3^q = 2; \lambda_4^q = 3; \lambda_4^q = \sqrt{3} + 2;$ 

**Теорема 2.9.** Граф двудольный тогда и только тогда, когда спектр матрицы Кирхгофа равен спектру беззнаковой матрицы Кирхгофа.

### 2.2 Задачи

- 1. **[2 балла]** Доказать формулу Кэли, пользуясь матричной теоремой об остовных деревьях. Формула Кэли даёт оценку числа остовных деревьев полного графа  $K_n$ :  $n^{n-2}$ .
- 2. **[2 балла]** Доказать, пользуясь матричной теоремой об остовных деревьях, что число остовных деревьев полного двудольного графа  $K_{m,n}$  равно  $m^{n-1} \cdot n^{m-1}$ .
- 3. [2 балла] Доказать, что спектр является инвариантом графа.

4. **[4 балла]** Реализовать визуализацию графов через собственные вектора. Граф принимается либо как матрица смежности в формате .mtx, либо как список рёбер (лучше предусмотреть обв варианта). Предусмотреть возможность "зума"результирующей картинки. Для экспорта лучше выбирать векторный формат, тогда проблем не будет. Можно использовать готовые компоненты.