Теория графов. Лекции. Заметки.

Семён Григорьев

24 марта 2021 г.

Содержание

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.

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

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*.

$$M_{CRS} = (val, col\_id, row\_ptr)$$

val	1	3	9	2	-1	7	6	5	3	4	2	8	-3	-7	-4
col_id	0	4	6	2	5	3	1	7	1	2	4	6	2	7	4

row_ptr	0	3	5	6	8	10	12	14

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.

$$M = \left[\begin{array}{cccc|cccc} 1 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 \\ \hline 0 & 3 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & -3 & 0 & 0 & 0 & 0 & -7 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right]$$

$$M_{(0,0)} = \left[\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 7 \\ 0 & 6 & 0 & 0 \end{array}\right], M_{(0,1)} = \left[\begin{array}{cc|cc} 3 & 0 & 9 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 5 \end{array}\right]$$

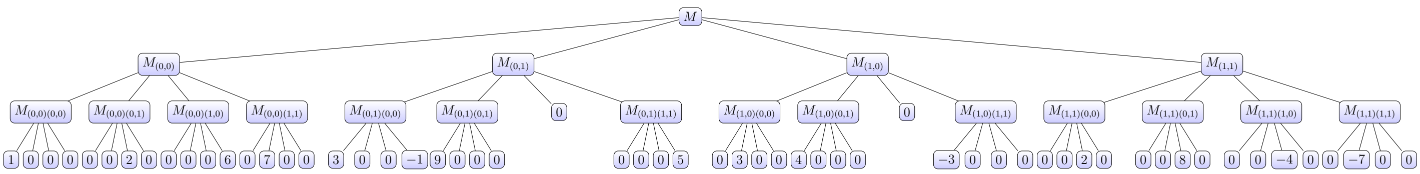
$$M_{(1,0)} = \left[\begin{array}{cc|cc} 0 & 3 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right], M_{(1,1)} = \left[\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 8 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & -7 \\ -4 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right]$$

$$M_{(0,0)(0,0)} = \left[\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array}\right], M_{(0,0)(0,1)} = \left[\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 2 & 0 \end{array}\right], M_{(0,0)(1,0)} = \left[\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 0 & 6 \end{array}\right], M_{(0,0)(1,1)} = \left[\begin{array}{c|c} 0 & 7 \\ \hline 0 & 0 \end{array}\right]$$

$$M_{(0,1)(0,0)} = \left[\begin{array}{c|c} 3 & 0 \\ \hline 0 & -1 \end{array}\right], M_{(0,1)(0,1)} = \left[\begin{array}{c|c} 9 & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array}\right], M_{(0,1)(1,1)} = \left[\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 0 & 5 \end{array}\right]$$

$$M_{(1,0)(0,0)} = \left[\begin{array}{c|c} 0 & 3 \\ \hline 0 & 0 \end{array}\right], M_{(1,0)(0,1)} = \left[\begin{array}{c|c} 4 & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array}\right], M_{(1,0)(1,1)} = \left[\begin{array}{c|c} -3 & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array}\right]$$

$$M_{(1,1)(0,0)} = \left[\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 2 & 0 \end{array}\right], M_{(1,1)(0,1)} = \left[\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 8 & 0 \end{array}\right], M_{(1,1)(1,0)} = \left[\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline -4 & 0 \end{array}\right], M_{(1,1)(1,1)} = \left[\begin{array}{c|c} 0 & -7 \\ \hline 0 & 0 \end{array}\right]$$



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.

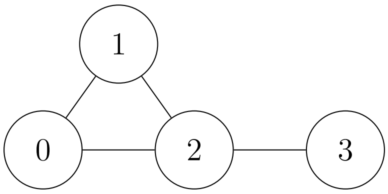
Матрица Кирхгофа. Оператор Лапласа. Для неориентированного графа без кратных рёбер и петель.

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:



$$D = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

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

$$K = D - A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

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 2×2)**.** Для матрицы 2×2 определитель вычисляется как:

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

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

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

, 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 3×3)**.**

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

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.

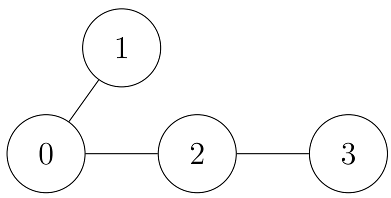
Пример 2.2 (Определитель)**.** Найдём определитель матрицы Кирхгофа для нашего графа. Будем использовать разложение по 3-й строке.

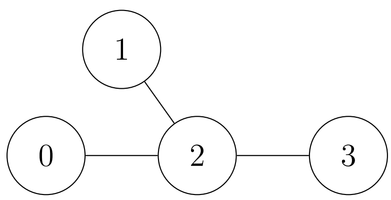
$$\Delta \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} = (-1)^5(-1) \begin{vmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{vmatrix} + (-1)^6 1 \begin{vmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 3 \end{vmatrix} =$$
$$1((2 \cdot 2 \cdot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

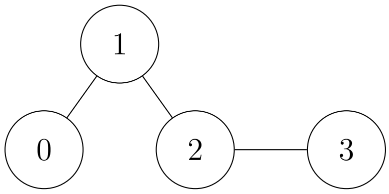
Теорема 2.1 (Матричная теорема об остовных деревьях)**.** Пусть G — связный простой граф с матрицей Кирхгофа K. Все алгебраические дополнения матрицы Кирхгофа K равны между собой и их общее значение равно количеству остовных деревьев графа G.

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:ΔK.

2.1 Задачи

1. Доказать формулу Кэли, пользуясь матричной теоремой об остовных деревьях. Формула Кэли даёт оценку числа остовных деревьев полного графа K_n: n^{n-2}.

2. Доказать, пользуясь матричной теоремой об остовных деревьях, что число остовных деревьев полного двудольного графа $K_{m,n}$ равно $m^{n-1} \cdot n^{m-1}$.