Теория графов. Лекции. Заметки.

Семён Григорьев

29 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.

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

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*.

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

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.

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

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

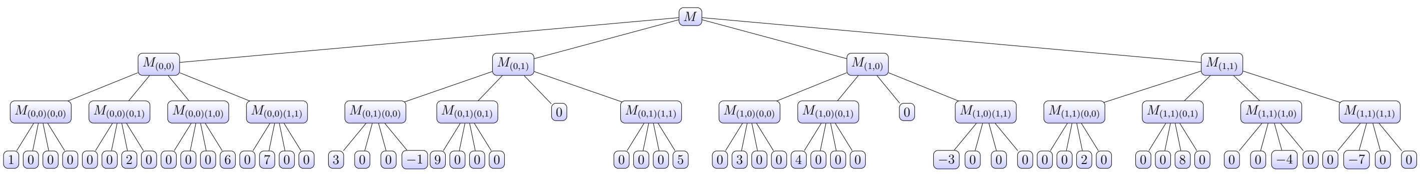
$$M_{(1,0)} = \left[\begin{array}{cc|cc} 0 & 3 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right], M_{(1,1)} = \left[\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 8 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & -7 \\ -4 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right]$$

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

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

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

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



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.

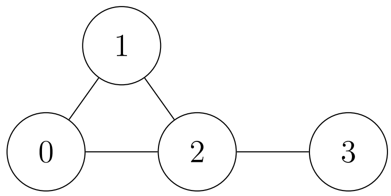
Матрица Кирхгофа. Оператор Лапласа. Для неориентированного графа без кратных рёбер и петель.

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.

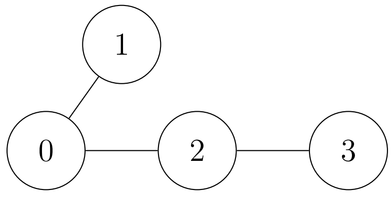
Пример 2.2 (Определитель). Найдём определитель матрицы Кирхгофа для нашего графа. Будем использовать разложение по 3-й строке.

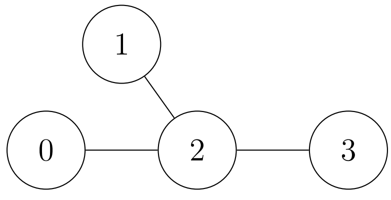
$$\Delta \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} = (-1)^5(-1) \begin{vmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \end{vmatrix} + (-1)^6 1 \begin{vmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 3 \end{vmatrix} =$$
$$1((2 \cdot 2 \cdot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

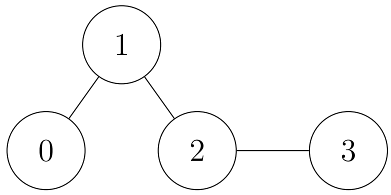
Теорема 2.1 (Матричная теорема об остовных деревьях). Пусть G — связный простой граф с матрицей Кирхгофа K. Все алгебраические дополнения матрицы Кирхгофа K равны между собой и их общее значение равно количеству остовных деревьев графа G.

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: $\Delta K = 0$.

Собственные числа и собственные вектора.

Нам понадобится 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)**.**

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

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 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 $m^{n-1} \cdot n^{m-1}$.

3. Доказать, что спектр является инвариантом графа.