Решение системы Лапласа для графа

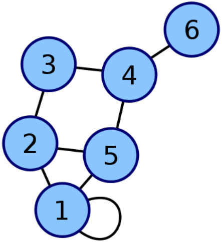
А. В. Новиков[1]

[1]МГУ, ВМиК, каф. ММП

Спецсеминар «Байесовские методы машинного обучения»

Оглавление

Матрица смежности



(a) Граф

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

(b) Его матрица смежности

$$A(i,j) = \begin{cases} 1, & \text{if } (i,j) \in E \\ 0, & otherwise \end{cases}$$

λ называют *собственным значением, соответствующим* собственному векторуs v если:

$$Av = \lambda v$$

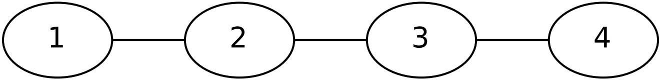
Спектром матрицы называют множество её собственных чисел.

Лапласиан: естественная квадратичная форма

$$x^T L x = \sum_{(i,j) \in E} (x(i) - x(j))^2 \tag{1}$$

Матрицу $L = D - A$ называют *Лапласианом, где D это диагональная матрица со степенями вершин.*

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



Лапласиан: простые факты

$L\mathbf{1} = \mathbf{0}$, то-есть 0 это всегда собственное значение.

$$0 = \lambda_1 < \lambda_2 < \ldots < \lambda_l$$

Если в графе k компонент связности, то кратность $0 = \lambda_1$ равна k.
λ_2 показывает степень связности графа.

Укладка графа на прямую

Построим отображение из V в R.

Попробуем минимизировать $\sum\limits_{(i,j)\in E} (x(i) - x(j))^2 = x^T Lx$.

Есть очевидное решение $x = \mathbf{1}$, так что дополнительно потребуем $x \perp \mathbf{1}$.

Укладка графа на прямую

Построим отображение из V в R.

Попробуем минимизировать $\sum_{(i,j)\in E} (x(i) - x(j))^2 = x^T Lx$.

Есть очевидное решение $x = \mathbf{1}$, так что дополнительно потребуем $x \perp \mathbf{1}$.

Теперь решение $x = v_2$.

$$\lambda_1 = \min_{x \neq 0} \frac{x^T L x}{x^T x} \qquad v_1 = \arg\min_{x \neq 0} \frac{x^T L x}{x^T x}$$

$$\lambda_2 = \min_{x \perp v_1} \frac{x^T L x}{x^T x} \qquad v_2 = \arg\min_{x \perp v_1} \frac{x^T L x}{x^T x}$$

$$\boxed{\begin{aligned} \lambda_k &= \min_{x \perp v_1, \ldots, v_{k-1}} \frac{x^T L x}{x^T x} \\ v_k &= \arg\min_{x \perp v_1, \ldots, v_{k-1}} \frac{x^T L x}{x^T x} \end{aligned}}$$

Укладка графа на плоскость

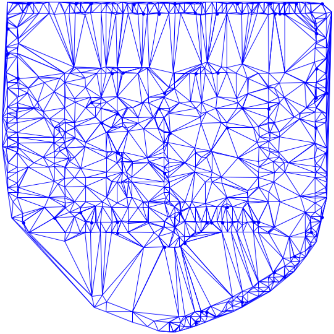
Построим отображение из V в R^2.
$$\sum_{(i,j)\in E} dist^2\left(\overrightarrow{x}(i) - \overrightarrow{x}(j)\right) \to \min.$$

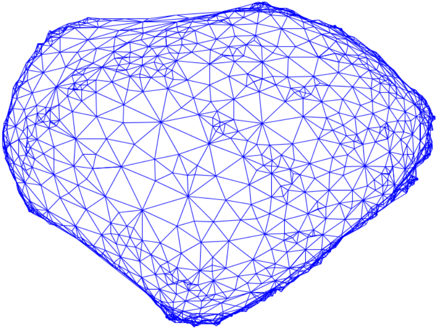
Есть очевидное решение $\overrightarrow{x}(i) = (1,1)$.
Есть вырожденное решение $\overrightarrow{x}(i) = (v_2(i), v_2(i))$.

Давайте потребуем $\overrightarrow{x}_1 \perp \mathbf{1}, \overrightarrow{x}_2 \perp \mathbf{1}, \overrightarrow{x}_1 \perp \overrightarrow{x}_2$.

Теперь решение $\overrightarrow{x}(i) = (v_2(i), v_3(i))$ с точностью до вращения.

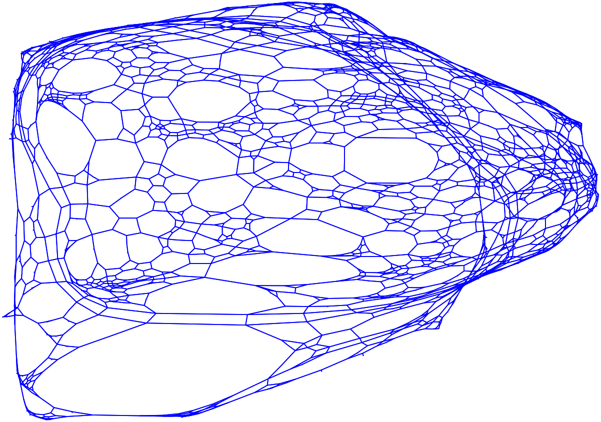
Пример укладки графа на плоскость 1



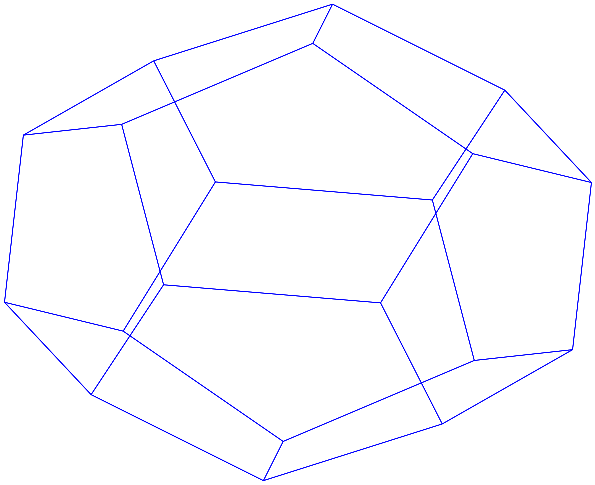


Рисуем вершину i в точке $(v_2(i), v_3(i))$.

Пример укладки графа на плоскость, дороги Рима



Пример укладки графа на плоскость, Додекаэдр



Вектор признаков вершин

Полученное представление вершин графа в k-мерном пространстве полезно не только для визуализации. Его часто используют как признаковое описание вершин для более классических алгоритмов, например кластеризации.

Другие приложения спектральной теории графов

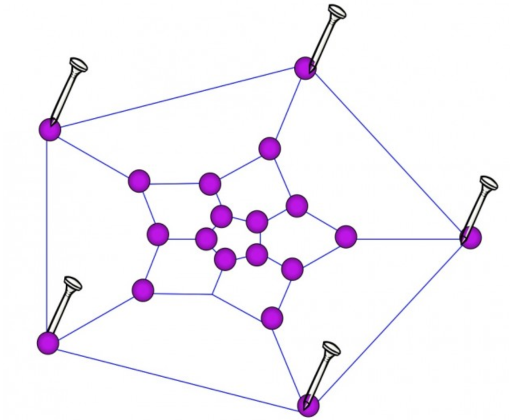
- Раскраска графов
- Проверка на изоморфизм
- Случайные блуждания (например, Page Rank) ...

Источники:
Spectral Graph Theory and its Applications, Daniel A. Spielman
Spectral Graph Theory, Fan R. K. Chung

Базовые примеры

1. Предсказание про людей из социального графа
2. Паутина из эластичных ниток
3. Электрическая сеть с резисторами и проводниками

Задача



Формальная постановка задачи

Для паутины на прямой получается следующая задача оптимизации

$$\begin{aligned} \underset{x_1,\dots,x_n}{\text{minimize}} \quad & \sum_{(i,j)\in E} (x_i - x_j)^2 = x^T L x \\ \text{subject to} \quad & x_7 = p_7, x_{15} = p_{15}, \dots, x_{32} = p_{32}. \end{aligned}$$

Формальная постановка задачи 2

$$L^* x = b$$

где

$$L^*(i,:) = \begin{cases} L(i,:), & \text{if } x_i \text{ — independent variable} \\ [0, ..., 0, 1, 0, ..., 0], & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$b(i) = \begin{cases} 0, & \text{if } x_i \text{ — independent variable} \\ p_i, & \text{otherwise} \end{cases}$$

Но эта система линейных уравнений очень большая!
Легко обобщить до взвешенного графа на плоскости.

Предобуславливание уравнения

Попробуем итеративно заменять нашу задачи на задачу попроще.
Например:

$$24x = 101 \Rightarrow x = 4.208333333$$

Предобуславливание уравнения

Попробуем итеративно заменять нашу задачи на задачу попроще. Например:

$$24x = 101 \Rightarrow x = 4.208333333$$

Давайте заменим на

$$25x_1 = 100 \Rightarrow x_1 = 4$$

Насколько хороший ответ мы получили?

$$24 \cdot 4 = 96$$

Предобуславливание уравнения

Попробуем итеративно заменять нашу задачи на задачу попроще. Например:

$$24x = 101 \Rightarrow x = 4.208333333$$

Давайте заменим на

$$25x_1 = 100 \Rightarrow x_1 = 4$$

Насколько хороший ответ мы получили?

$$24 \cdot 4 = 96$$

Попробуем найти необходимую добавку:

$$24\Delta x = 101 - 96 = 5$$
$$25\Delta x_1 = 5$$
$$\Delta x_1 = 0.2$$

Мы получили неплохой ответ $x_2 = 4.2$.

Предобуславливание системы

$$\begin{cases} 100x + y = 200, \\ x + 50y = 100 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x = 1.9804 \\ y = 1.9604 \end{cases}$$

Предобуславливание системы

$$\begin{cases} 100x + y = 200, \\ x + 50y = 100 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x = 1.9804 \\ y = 1.9604 \end{cases}$$

Упрощение:

$$\begin{cases} 100x_1 = 200 \\ 50y_1 = 100 \end{cases}$$

Предобуславливание системы

$$\begin{cases} 100x + y = 200, \\ x + 50y = 100 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x = 1.9804 \\ y = 1.9604 \end{cases}$$

Упрощение:

$$\begin{cases} 100x_1 = 200 \\ 50y_1 = 100 \end{cases}$$

Поиск добавки:

$$\begin{cases} 100\Delta x + \Delta y = -2 \\ \Delta x + 50\Delta y = -2 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 100\Delta x_1 = -2 & x_2 = 1.98 \\ 50\Delta y_1 = -2 & y_2 = 1.96 \end{cases}$$

Предобуславливание Лапласиана

Какой предобуславливатель взять для Лапласиана?

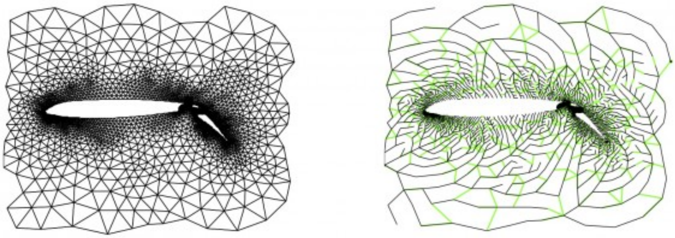
Предобуславливание Лапласиана

Какой предобуславливатель взять для Лапласиана?
Используем подграф H графа G:

1. Графы похожи, т.е. $\frac{x^T L_G x}{x^T L_H x}$ близко к единице
2. $L_H^* x = b$ легко решить

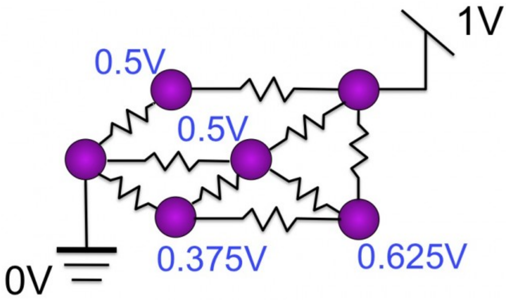
Выбор подграфа

Давайте возьмем остовное дерево и будем добавлять туда важные ребра.



Например ребра, которые соединяют два кластера вместе важнее внутрекластерных ребер.
Развитие этих идей привело к алгоритму, который работает за $O(mlog^{100}m)$ — асимптотически быстрее любого другого известного метода на тот момент.

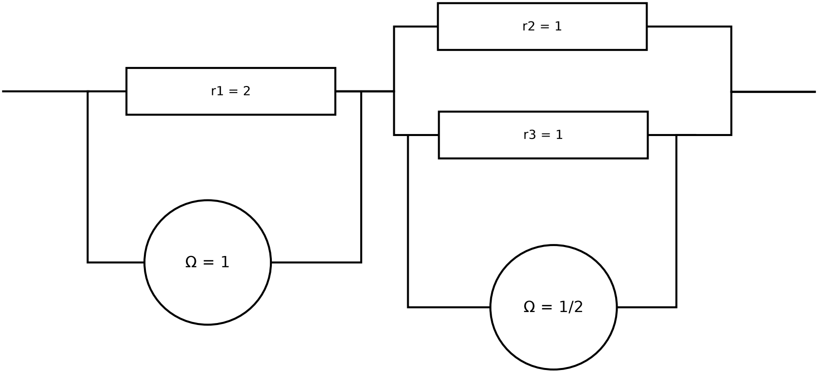
Эффективное сопротивление



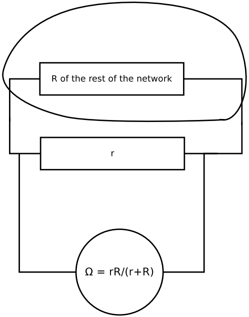
Рассмотрим эквивалентную постановку задачи в терминах электрической сети.
Удаление ребра (резистора), которое соединяет удаленные участки сети сильно повлияет на итоговое решение.
Удаление ребра в кластере практически ничего не изменит.

Эффективное сопротивление, пример

Назовём эффективным сопротивление ребра сопротивление сети померенное на концах ребра.



Эффективное сопротивление, интуиция



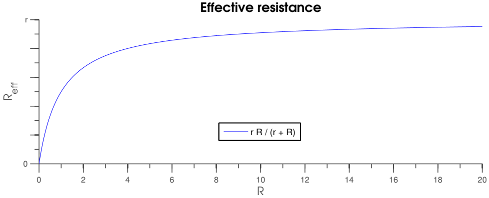
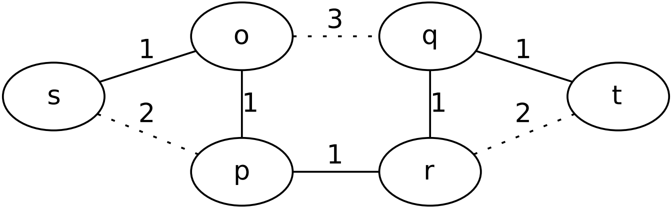


Рис.: Заменим всю сеть кроме фиксированного резистора на один резистор с сопротивлением R.

Обозначим за R сопротивление всей сети без фиксированного ребра, за r — сопротивление ребра.
Чем больше R, тем важнее ребро. Чем меньше r, тем важнее ребро.
Make sense.

Аппроксимация эффективного сопротивления

В качестве оценки эффективного сопротивления Спилман предлагает использовать длину пути в остовном дереве (фиксированном заранее).



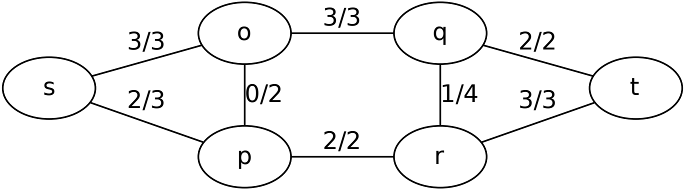
Спилман сумел довести этот алгоритм до сложности $O(m \log m)$[1].

[1] Daniel A Spielman и Nikhil Srivastava. "Graph sparsification by effective resistances". в: *SIAM Journal on Computing* 40.6 (2011), с. 1913–1926.

Поиск максимального потока

Постановка задачи: Дан граф, в нём зафиксирован исток (S), сток (T) и пропускная способность каждого ребра. В каждую вершину кроме истока и стока втекает и вытекает одинаковое количество жидкости.

Какое максимальное количество жидкости может втекать в исток?



$F^* = 3 + 2$ — максимальный поток.

Допустимое решение $f \geq (1-\epsilon)F^*$ называется $(1-\epsilon)$-оптимальным.

Поиск максимального потока 2

Перейдём от жестких ограничений к штрафам.

Заменим граф с пропускными способностями c_e на сеть с резисторами $r_e = \frac{1}{c_e^2}$;
while *не сойдемся* **do**
    Подключим батарейку к истоку и стоку. Возьмем силу тока на каждом ребре за оценку потока жидкости в этом ребре;
    Увеличим сопротивление в ребрах, где пропускная способность превышена;
end

Algorithm 1: Алгоритм поиска максимального потока

Поиск максимального потока 3

Если аккуратно продумать детали, получается алгоритм который вычисляет $(1-\epsilon)$-максимальный поток за $\widetilde{O}(mn^{1/3}\epsilon^{-11/3})$ [2] (лучшая асимптотическая сложность на данный момент)[3].

---

[2] $\widetilde{O}(f(n)) = O(f(n)log^c(f(n))$

[3] Paul Christiano и др. "Electrical flows, laplacian systems, and faster approximation of maximum flow in undirected graphs". в: *Proceedings of the 43rd annual ACM symposium on Theory of computing*. ACM. 2011, с. 273–282.

Кластеризация

Основная идея: если мы прибьём гвоздями несколько элементов одного кластера к 0 и несколько элементов другого к 1, то в результате работы алгоритма получим кластеризацию[4].

[4] Ioannis Koutis, Gary L Miller и David Tolliver. "Combinatorial preconditioners and multilevel solvers for problems in computer vision and image processing". в: *Computer Vision and Image Understanding* 115.12 (2011), с. 1638–1646.

Предсказания

Если есть граф с людьми, про некоторых известна числовая характеристика. Можно предсказывать её для остальных людей. Даниель Спилман применял это для Netflix-а.

Частичное обучение

Люди прибивают гвоздями часть данных, остальное компьютер делает сам.

Исходники

LAMG, последнее обновление год назад, заверяют что работает линейно от m.

Graph Sparsification, Local Clustering, Low-Stretch Trees, etc — обзор текущего состояния дел со ссылками на статьи и исходники.