WPROWADZENIE DO OPERATORÓW RÓŻNICZKOWYCH NA GRAFACH

ANNA MURANOVA

STRESZCZENIE. Krótkie wprowadzenie do operatorów różniczkowych na grafach: laplasjan oraz operator prawdopodobieństwa.

SPIS TREŚCI

OZNACZENIA

$\mathbb{N}$ – zbiór liczb naturalnych
$\mathbb{R}$ – ciało liczb rzeczywistych
$\mathbb{R}^+$ – zbiór liczb rzeczywistych dodatnich
$\#$ – ilość elementów w zbiorze.

1. GRAFY WAŻONE

*Graf ważony (inaczej graf z wagami)*jest parą (V, b), gdzie V jest zbiorem wierzchołków (tj. dowolnym zbiorem) oraz $b : V \times V \to \mathbb{R}$ spełnia następujące warunki:
$b(x, y) \leq 0$ dla każdego $x, y \in V$,
$b(x, y) = b(y, x)$ dla każdego $x, y \in V$,
$b(x, x) = 0$ dla każdego $x \in V$.

Jeśli $(x, y) \neq 0$, to mówimy, że pomiędzy x, y jest *krawędź* i zapisujemy $x \sim y$. Trzeci warunek oznacza, że rozważamy grafy bez pętle.

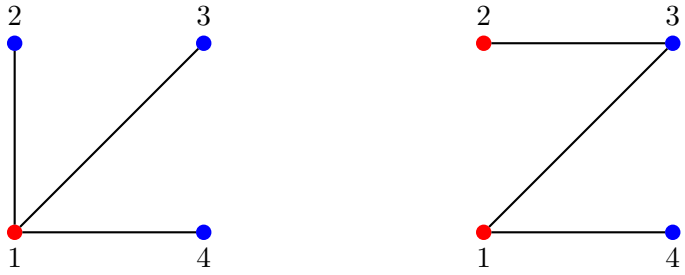
Ścieżka w grafie to dowolny ciąg wierzchołków, taki że

$$x_1 \sim x_2 \sim \cdots \sim x_n.$$

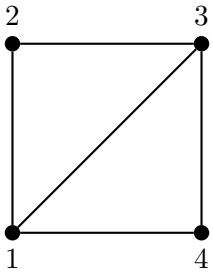
Spójnym graf– graf, w którym każdą parę wierzchołków łączy pewna ścieżka. *Graf skonczony* ma skończoną ilość wierzchołków ($\#V < \infty$). W tym wprowadzeniu rozważamy wyłącznie skończone spójne grafy.

Graf pełny – graf w którym if $x \sim y$ dla każdego $x, y \in V$. Inaczej graf nazywa się *niepełnym*.

Graf nazywa się *dwudzielnym*, jeżeli istnieje podział jego wierzchołków $V = V_1 \cup V_2$ taki że z $x \sim y$ $(x, y \in V)$ wynika albo $x \in V_1, y \in V_2$, albo $x \in V_2, y \in V_1$.



Rysunek 1. Grafy dwudzielne



Rysunek 2. Ten graf nie jest dwudzielnym

Będziemy tez rozpatrzyć wagi *znormalizowane*:

$$p(x, y) = \frac{b(x, y)}{b(x)}, \tag{1}$$

gdzie $b(x) = \sum_y b(x, y)$. Trzeba uważać, że ogólnie $p(x, y) \neq p(y, x)$.

2. Podstawowe operatory różniczkowe

Rozważmy następujący zbiór funkcji na wierzchołkach grafu ważonego

$$\mathfrak{F} = \{f \mid f : V \to \mathbb{R}\}$$

Naszym głównym zainteresowaniem będzie znormalizowany operator Laplace'a (laplasjan) oraz operator prawdopodobieństwa $\mathfrak{F}$. *Operator Laplace'a (laplasjan)* jest zdefiniowany jako

$$\mathcal{L}f(x) = \sum_{y \in V} (f(x) - f(y)) \frac{b(x, y)}{b(x)} = \sum_{y \in V} (f(x) - f(y)) p(x, y) \tag{2}$$

dla wszystkich $f \in \mathfrak{F}$.

Operator $\mathcal{P} = I - \mathcal{L}$ dla $f \in \mathfrak{F}$ nazywa się *operatorem prawdopodobieństwa.*

Definicja 1. Operator *różnicy* jest zdefiniowany jako

$$\nabla_{xy} f = f(y) - f(x) \tag{3}$$

Operator różnicy jest dyskretnym analogiem pochodnej $\frac{\partial f}{\partial x}$. Z (3) wynika, że

$$\mathcal{L}f(x) = -\sum_{y\in V} \nabla_{xy} f \frac{b(x,y)}{b(x)} = -\sum_{y\in V} \nabla_{xy} f p(x,y). \tag{4}$$

Oprócz tego,wprowadzimy następujące oznaczenie:

$$\begin{aligned}\Delta f(x) = -\mathcal{L}f(x) &= -\sum_{y\in V} \nabla_{xy} f \frac{b(x,y)}{b(x)} = -\sum_{y\in V} \nabla_{xy} f p(x,y) \\ &= \sum_{y\in V} (f(y) - f(x)) \frac{b(x,y)}{b(x)} = \sum_{y\in V} (f(y) - f(x)) p(x,y).\end{aligned}$$

Twierdzenie 2 (Formula Greena)**.** *Dla każdych dwóch funkcji $f, g : V \to \mathbb{R}$ i dla każdego $\emptyset \neq \Omega \subset V$ spełnią się następująca tożsamość:*

$$\sum_{x\in\Omega} \Delta_\rho f(x) g(x) = -\frac{1}{2} \sum_{x,y\in\Omega} (\nabla_{xy} f)(\nabla_{xy} g)\rho_{xy} + \sum_{x\in\Omega} \sum_{y\in V\setminus\Omega} (\nabla_{xy} f) g(x) \rho_{xy}. \tag{5}$$

Dowód.

$$\begin{aligned}\sum_{x\in\Omega} \Delta_\rho f(x) g(x) &= \sum_{x\in\Omega} \left(\sum_{y\in V} (f(y) - f(x))\rho_{xy} \right) g(x) \\ &= \sum_{x\in\Omega} \sum_{y\in V} (f(y) - f(x)) g(x) \rho_{xy} \\ &= \sum_{x\in\Omega} \sum_{y\in\Omega} (f(y) - f(x)) g(x) \rho_{xy} + \sum_{x\in\Omega} \sum_{y\in V\setminus\Omega} (f(y) - f(x)) g(x) \rho_{xy} \\ &= \sum_{y\in\Omega} \sum_{x\in\Omega} (f(x) - f(y)) g(y) \rho_{xy} + \sum_{x\in\Omega} \sum_{y\in V\setminus\Omega} (\nabla_{xy} f) g(x) \rho_{xy},\end{aligned}$$

gdzie w ostatnim wierszu zmieniliśmy notację zmiennych x i y w pierwszej sumie. Dodając do siebie ostatnie dwa wierszy i dzieląc przez 2, otrzymujemy(5). □

Jeżeli $\Omega = V$, to $V \setminus \Omega$ jest zbiorem pustym , więc ostatni wyraz w (5) znika i otrzymujemy

$$\sum_{x\in V} \Delta_\rho f(x) g(x) = -\frac{1}{2} \sum_{x,y\in V} (\nabla_{xy} f)(\nabla_{xy} g)\rho_{xy}. \tag{6}$$

Następstwo 3. *Dla każdej funkcji $f : V \to \mathbb{R}$,*

$$\sum_{x\in V} \Delta_\rho f(x) = 0. \tag{7}$$

Dowód. Użyć (6) dla $g \equiv 1$. □

3. Problem Dirichleta

Niech $\emptyset \neq B \subset V$ i $h : B \to \mathbb{R}$. Problem w postaci

$$\begin{cases} \Delta v(x) = 0 \text{ on } V \setminus B, \\ v|_B \equiv h, \end{cases} \tag{8}$$

nazywa się *problemem Dirichleta*. Ten problem jest dyskretną wersją ciągłego problemu Dirichleta.

Twierdzenie 4. *Problem Dirichleta* (8) *zawsze ma dokładnie jedno rozwiązanie* $v : V \to \mathbb{R}$.

Punktem kluczowym dla dowodu twierdzenia 4 jest następna lemma.

Lemat 5 (Zasada maksimuma i minimuma)**.** *Niech* $\neq B \subset V$*, takie że* $V \setminus B \neq$*. Wtedy dla każdej funkcji* $u : V \to K$ *dla której* $\Delta u(x) > 0$ *(tj.* u *jest* sub-harmoniczną*) na* $V \setminus B$*, spełnia się*

$$\max_{V \setminus B} u \leq \max_{B} u \tag{9}$$

oraz dla każdej funkcji$u : V \to K$ *dla której* $\Delta_\rho u(x) \preceq 0$ *(tj.* u *jest* super-harmoniczną*) na* $V \setminus B$*, spełnia się*

$$\min_{V \setminus B} u \geq \min_{B} u. \tag{10}$$

4. Macierz sąsiedztwa

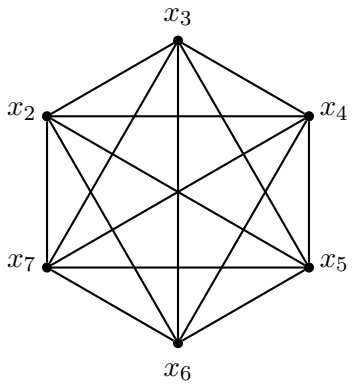
Jeżeli uporządkujemy wierzchołki grafa jako $x_1, x_2, \ldots, x_n$ gdzie $\#n = V$, to macierz sąsiedztwa albo laplasjana można zdefiniować jako

$$\begin{pmatrix} 1 & -p(x_1,x_2) & -p(x_1,x_3) & \ldots & -p(x_1,x_{n-1}) & -p(x_1,x_n) \\ -p(x_2,x_1) & 1 & -p(x_2,x_3) & \ldots & -p(x_2,x_{n-1}) & -p(x_2,x_n) \\ \ldots & & & & & \\ -p(x_{n-1},x_1) & -p(x_{n-1},x_2) & -p(x_{n-1},x_3) & \ldots & 1 & -p(x_{n-1},x_n) \\ -p(x_n,x_1) & -p(x_n,x_2) & -p(x_n,x_3) & \ldots & -p(x_n,x_{n-1}) & 1 \end{pmatrix},$$

Będzie to oczywiście, macierz kwadratowa $n \times n$.

5. Przykłady grafów

1. **Graf pełny** – graf, w którym dla każdej pary węzłów istnieje krawędź je łącząca. Graf pełny o n wierzchołkach oznacza się przez K_n . Niektóre źródła podają, że litera K pochodzi od niemieckiego słowa *komplett*, lecz niemiecki termin *vollständiger Graph*, oznaczający graf pełny, nie zawiera nawet tej litery. Inne źródła stwierdzają, że tę notację przyjęto w uznaniu zasług Kazimierza Kuratowskiego [2] dla teorii grafów.



Rysunek 3. Pełny graf z 6 wierzchołkami

2. **Pełny dwudzielny graf** – $G := (V_1 + V_2, E)$ jest grafem dwudzielnym, takim że dla każdych $x \in V_1, y \in V_2$ spełnia się $x \sim y$. Jeżeli $\#V_1 = m$ oraz $\#V_2 = n$, to odpowiedni pełny dwudzielny graf oznacza się $K_{m,n}$.
3. **Ścieżka** – ścieżką o n wierzchołków, to graf w którym $V = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ i pomiędzy $x_i, x_j \in V$ istniej krawędź wtedy i tylko wtedy, gdy $i = j \pm 1$.
4. **Cykl** – cykl o n wierzchołków, to graf w którym $V = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ i pomiędzy $x_i, x_j \in V$ istniej krawędź wtedy i tylko wtedy, gdy $i = j \pm 1$ albo $\{i, j\} = \{1, n\}$.

6. Algorytm Dijkstry

Algorytm Dijkstry, opracowany przez holenderskiego informatyka Edsgera Dijkstrę, służy do znajdowania najkrótszej ścieżki z pojedynczego źródła (s) w grafie o nieujemnych wagach krawędzi [1].

$$\min_{\text{ścieżka od } s \text{ do } x} \{b(s, x_1) + b(x_1, x_2) + \cdots + b(x_{n-1}, x)\}.$$

Mając dany graf z wyróżnionym wierzchołkiem (źródłem) algorytm znajduje odległości od źródła do wszystkich pozostałych wierzchołków. Łatwo zmodyfikować go tak, aby szukał wyłącznie (najkrótszej) ścieżki do jednego ustalonego wierzchołka, po prostu przerywając działanie w momencie dojścia do wierzchołka docelowego, bądź transponując tablicę incydencji grafu.

Algorytm Dijkstry znajduje w grafie wszystkie najkrótsze ścieżki pomiędzy wybranym wierzchołkiem a wszystkimi pozostałymi, przy okazji wyliczając również koszt przejścia każdej z tych ścieżek.

Algorytm działa w następujący sposób:

- Stwórz tablicę d odległości od źródła dla wszystkich wierzchołków grafu. Na początku $d[s] = 0$, zaś $d[x] = \infty$ dla wszystkich pozostałych wierzchołków.
- Utwórz kolejkę priorytetową s wszystkich wierzchołków grafu. Priorytetem kolejki jest aktualnie wyliczona odległość od wierzchołka źródłowego s.
- Dopóki kolejka nie jest pusta:

- Usuń z kolejki wierzchołek u u o najniższym priorytecie (wierzchołek najbliższy źródła, który nie został jeszcze rozważony)
- Dla każdego sąsiada v v wierzchołka u u dokonaj relaksacji poprzez y: jeśli $d[y] + b(y, x) < d[x]$ (poprzez y da się dojść do $x$szybciej niż dotychczasową ścieżką), to $d[x] := d[y] + w(y, x)$.

Na końcu tablica d zawiera najkrótsze odległości do wszystkich wierzchołków.

Dodatkowo możemy w tablicy poprzednik przechowywać dla każdego wierzchołka numer jego bezpośredniego poprzednika na najkrótszej ścieżce, co pozwoli na odtworzenie pełnej ścieżki od źródła do każdego wierzchołka – przy każdej relaksacji w ostatnim punkcie y staje się poprzednikiem x.

Algorithm 1 Pseudokod algorytma Dijkstry

```
Require: graph, source,
  dist[s] ← 0 // Initialization
  create vertex priority queue Q
  for x in Graph.Vertices do
      if x ≠ s then
          dist[x] ← INFINITY // Unknown distance from source to x
          prev[x] ← UNDEFINED // Predecessor of x
          Q.add_with_priority(x, dist[x])
      end if
  end for
  while Q is not empty do // The main loop u ← Q.extract_min() //
  Remove and return best vertex
      for neighbor x of y do // Go through all x neighbors of y
          alt ← dist[y] + Graph.Edges(y, x)
          if alt < dist[x] then
              dist[x] ← alt
              prev[x] ← y
              Q.decrease_priority(x, alt)
          end if
      end for
  end while
  return dist, prev
```

Literatura

[1] E. W. Dijkstra. *A note on two problems in connexion with graphs. In Numerische Mathematik*, 1 (1959), S. 269–271.

[2] Kazimierz Kuratowski. *Sur the problème des courbes gauches en Topologie*. Fundamenta Mathematicae 15 (1930) ss. 271–283