МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра компьютерной алгебры и теории чисел

# Лапласиан Ходжа на графах

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 421 группы

направление 02.03.01 — Математика и компьютерные науки

механико-математического факультета

Карачарова Максима Максимовича

Научный руководитель
доцент, к.ф.-м.н. __________________ Е.В. Коробченко

Зав. кафедрой
зав. каф., к.ф.-м.н., доцент __________________ А.М. Водолазов

Саратов 2022

**Введение.** Основная цель этой выпускной квалификационной работы - изучить теорию Лапласиана Ходжа на графе и рассмотреть ее практическое применение.

Если классическая теория Ходжа на римановых многообразиях является «дифференцируемой теорией Ходжа», теория Ходжа на метрических пространствах «непрерывной теорией Ходжа», а теория Ходжа на симплициальных комплексах «дискретной теории Ходжа», то здесь можно говорить о «теоретико-графовой теорией Ходжа».

В отличие от физических задач, возникающих в таких областях, как механика сплошных сред или электромагнетизм, где дифференцируемая теория Ходжа-де Рама с большой эффективностью применялась как для моделирования, так и для вычислений, возникающих из приложений для анализа данных. Теоретико-графовой теорией Ходжа будет изложена для неориентированного графа, и больше подходит для нефизических приложений, возникающих в различных разделах обработки информации, таких как машинное обучение, матричные вычисления, числовые уравнениями в частных производных, оптимизация, статистика или теорией вычислений.

Первый раздел работы посвящен изложению теории когомологий, необходимой для построения Лапласиана Ходжа. При этом когомологии определяются чисто алгебраически через линейную алгебру матриц, удовлетворяющих условию $AB = 0$.

Второй раздел содержит основные результаты теоретического исследования по выбранной теме для операторов Лапласа и Гельмгольца на графе.

В заключительной части работы представлены обобщения полученных результатов для высших порядков. Как показывают конкретные вычисления по разобранным в работе методам, подсчет Лапласианов и операторов Гельмгольца высших порядков также бывает важен в зависимости от поставленной задачи.

Для упрощения обсчета графов были использованы программы на языке C++, код которых приведен в приложениях.

**Основное содержание работы.** Рассмотрим две матрицы $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ и

$B \in \mathbb{R}^{n \times p}$, удовлетворяющие свойству

$$AB = 0. \tag{1}$$

(1) эквивалентно включению $im(B) \subseteq ker(A)$. Тогда определим группу когомологий относительно $A$ и $B$ как фактор-группу векторных пространств, $ker(A)/im(B)$. Ее элементы будем называть классами когомологий. Слово «группа» здесь относится к структуре $ker(A)/im(B)$, как абелевой группы по сложению.

Элемент когомологий $ker(A)/im(B)$ представляет собой набор векторов $x + im(B) = \{x + y \in \mathbb{R}^n | \ y \in im(B)\}$ для некоторого $x \in ker(A)$. Задача заключается в выборе $x_H \in x + im(B)$ каким-то уникальным способом для представления всего множества.

Предложение 1. Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Тогда

$$1.\ ker(A^*A) = ker(A), \tag{2}$$

$$2.\ ker(A^*) = im(A)^{\perp}, \tag{3}$$

$$3.\ im(A^*) = ker(A)^{\perp}, \tag{4}$$

$$4.\ \mathbb{R}^n = ker(A) \oplus im(A^*), \tag{5}$$

$$5.\ im(A^*A) = im(A^*). \tag{6}$$

Стандартный способ определения уникального представителя это - выбрать $x_H$ так, чтобы он был ортогонален любому другому вектору в $im(B)$. Поскольку $im(B)^{\perp} = ker(B^*)$, (предложение 1) это эквивалентно требованию, чтобы $x_H \in ker(B^*)$.

Следовательно, нужно выбрать $x_H \in ker(A) \cap ker(B^*)$. Такой $x_H$ называется гармоническим представителем класса когомологий $x + im(B)$.

**Предложение 2** Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ и $B \in \mathbb{R}^{n \times p}$, $AB = 0$. Тогда следующие пространства естественным образом изоморфны: $ker(A)/im(B) \cong ker(A) \cap$ $\cap ker(B^*) \cong ker(B^*)/im(A^*)$.

Отображение, сопоставляющее классу когомологий $x + im(B)$ единственный гармонический представитель $x_H$, дает естественный изоморфизм векторных пространств,

$$ker(A)/im(B) \cong ker(A) \cap ker(B^*). \tag{7}$$

Таким образом, можем переопределить группу когомологий относительно $A$ и $B$ как подпространство $ker(A) \cap ker(B^*)$ в $\mathbb{R}^n$, а класс когомологий теперь можно рассматривать как действительный вектор $x_H \in ker(A) \cap ker(B^*)$.

Положим, что $AB = 0$. Тогда определим Лапласиан Ходжа следующим образом:

$$A^*A + BB^* \in \mathbb{R}^{n \times n}. \tag{8}$$

Предложение 3. Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ и $B \in \mathbb{R}^{n \times p}$, а $AB = 0$. Тогда

$$1.\ ker(A^*A + BB^*) = ker(A) \cap ker(B^*), \tag{9}$$

$$2.\ ker(A) = im(B) \oplus ker(A^*A + BB^*), \tag{10}$$

$$3.\ ker(B^*) = im(A^*) \oplus ker(A^*A + BB^*), \tag{11}$$

$$4.\ \mathbb{R}^n = im(A^*) \oplus ker(A^*A + BB^*) \oplus im(B), \tag{12}$$

$$5.\ im(A^*A + BB^*) = im(A^*) \oplus im(B). \tag{13}$$

Используя (8), получим, что гармонический представитель $x_H$ является решением уравнения Лапласа

$$(A^*A + BB^*)x = 0. \tag{14}$$

Поскольку решения уравнения Лапласа называются гармоническими функциями, этим и объясняется название «гармонический» представитель.

Из (14) следует, что можно определить группу когомологий (относительно $A$ и $B$) как ядро Лапласиана Ходжа, то есть $ker(A)/im(B) \cong ker(A^*A + BB^*)$.

Доказанная в предложении 3 формула (12) представляет собой разложение Ходжа (разложение в прямую сумму ортогональных пространств). Другими словами, всякий раз, когда $AB = 0$, каждый $x \in \mathbb{R}^n$ может быть однозначно разложен как $x = A^*w + x_H + Bv$, $\langle A^*w, x_H \rangle = \langle x_H, Bv \rangle = \langle A^*w, Bv \rangle = 0$ для некоторых $v \in \mathbb{R}^p$ и $w \in \mathbb{R}^m$.

Напомним известные разложения (иногда называемые альтернативой Фредгольма), связанные с четырьмя фундаментальными подпространствами, связанными с матрицей $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, (предложение 1)

$$\mathbb{R}^n = ker(A) \oplus im(A^*),\ \mathbb{R}^m = ker(A^*) \oplus im(A). \tag{15}$$

Разложение Ходжа (6) можно рассматривать как аналог (7) для пары матриц, удовлетворяющих условию $AB = 0$. Действительно, объединяя (6) и (15), получаем

$$\mathbb{R}^n = \overbrace{im(A^*) \oplus ker(A^*A + BB^*)}^{ker(B^*)} \oplus im(B)$$

$$\mathbb{R}^n = im(A^*) \oplus \underbrace{ker(A^*A + BB^*) \oplus im(B)}_{ker(A)}$$

Пересечение $ker(A)$ и $ker(B^*)$ дает $ker(A^*A+ +BB^*)$, подтверждая (4). Поскольку $A^*A + BB^*$ - эрмитово, отсюда также следует, что

$$im(A^*A + BB^*) = im(A^*) \oplus im(B). \tag{16}$$

Для частного случая, когда $A$ - произвольная матрица и $B = 0$, разложение Ходжа (6) принимает вид

$$\mathbb{R}^n = im(A^*) \oplus ker(A^*A), \tag{17}$$

которая также может быть выведена непосредственно из альтернативы Фредгольма (7), поскольку

$$ker(A^*A) = ker(A). \tag{18}$$

Таким образом, было рассмотрено три различных способа определения когомологий: если $A$ и $B$ - матрицы, удовлетворяющие $AB = 0$, то группа когомологий относительно $A$ и $B$ может быть принята в виде любого из следующих выражений:

$$ker(A)/im(B), \quad ker(A) \cap ker(B^*), \quad ker(A^*A + BB^*). \tag{19}$$

Заметим, что если $AB = 0$, то $B^*A^* = 0$, и можем позволить $B^*$ и $A^*$ играть роль $A$ и $B$ соответственно. Тогда группа гомологии по отношению к $A$ и $B$ может быть любой из следующих:

$$ker(B^*)/im(A^*), \quad ker(B^*) \cap ker(A), \quad ker(BB^* + A^*A). \tag{20}$$

Можно увидеть, что последние два пространства в (12) и (13) совпадают, т. е. между когомологиями и гомологиями в нашем контексте нет разницы.

Когомологии, построенные в предыдущем разделе, основаны исключительно на линейной алгебре операторов, удовлетворяющих условию $AB = 0$. Это «алгебраическая сторона» вопроса. Существует также «топологическая сторона», которая получается путем наложения требования, чтобы $A$ и $B$ были кограничными операторами. Но сначала вспомним основные понятия.

Пусть $G = (V, E)$ - неориентированный невзвешанный граф без петель и кратных ребер, где $V = \{1, \ldots, n\}$ - конечное множество вершин, а $E \subseteq \binom{V}{2}$ - множество ребер. Заметим, что как только задается $G$, автоматически получаем клики более высокого порядка — например, множество треугольников или 3-клики $T \subseteq \binom{V}{3}$ определяется формулой $\{i, j, k\} \in$ $\in T \Leftrightarrow \{i,j\}, \{i,k\}, \{j,k\} \in E$. В более общем случае множество $k$-клики $K_k(G) \subseteq \binom{V}{k}$ определяется формулой $\{i_1, \ldots, i_k\} \in K_k(G) \Leftrightarrow \{i_p, i_q\} \in E$ для всех $1 \leq p < q \leq k$, т. е. все пары вершин в $\{i_1, \ldots, i_k\}$ лежат в $E$. Ясно, что задание $V$ и $E$ однозначно определяет $K_k(G)$ для всех $k \geq 3$. В частности, имеем $K_1(G) = V, \ K_2(G) = E, \ K_3(G) = T$.

На топологическом языке непустое семейство $K$ конечных подмножеств множества $V$ называется симплициальным комплексом (точнее, абстрактным симплициальным комплексом), если для любого множества $S$ в $K$ каждое подмножество $S' \subseteq S$ также принадлежит $K$.

Ясно, множество, состоящее из всех кликов графа $G$, $K(G) = \bigcup\limits_{k=1}^{\omega(G)} K_k(G)$, является симплициальным комплексом и называется кликовым комплексом графа $G$. Кликовое число $\omega(G)$ - это число вершин в наибольшем клике графа $G$.

Для графа $G = (V, E)$ будем рассматривать вещественнозначные функции на его вершинах $f : V \to \mathbb{R}$. Также будем рассматривать вещественнозначные функции на $E$, $T$ и в общем случае на $K_k(G)$, но потребуем, чтобы они были знакопеременными. Под знакопеременной функцией на $E$ будем понимать функцию вида $X : V \times V \to \mathbb{R}$, где $X(i,j) = -X(j,i)$ для всех $\{i,j\} \in E$ и $X(i,j) = 0$ для всех $\{i,j\} \notin E$.

Знакопеременной функцией на $T$ называется функция вида $\Phi : V \times V \times$ $\times V \to \mathbb{R}$ , где $\Phi(i,j,k) = \Phi(j,k,i) = \Phi(k,i,j) = -\Phi(j,i,k) = -\Phi(i,k,j) =$ $= -\Phi(k,j,i)$ для всех $\{i,j,k\} \in T$ и $\Phi(i,j,k) = 0$ для всех $\{i,j,k\} \notin T$.

В более общем смысле знакопеременная функция — это функция, в которой перестановка аргументов приводит к изменению ее значения на знак перестановки.

На топологическом языке функции $f,\ X,\ \Phi$ называются $0-$, $1-$, $2-$ коцепями. Это дискретные аналоги дифференциальных форм на многообразиях. Поэтому, можно функции $f,\ X,\ \Phi$ называть $0-$, $1-$, $2-$формами на $G$.

Заметим, что $1-$форма $X$ полностью задается значениями, которые она принимает на множестве $\{(i,j) :\ i < j\}$, а $2-$форма $\Phi$ полностью задается значениями, которые она принимает на множестве $\{(i,j,k) :\ i < j < k\}$.

Снабдим пространства коцепей скалярными произведениями, например, в виде взвешенных сумм

$$\begin{gathered}\langle f, g\rangle_V = \sum_{i=1}^{n} w_i f(i) g(i), \quad \langle X, Y\rangle_E = \sum_{i<j} w_{ij} X(i,j) Y(i,j), \\ \langle \Phi, \Phi\rangle_T = \sum_{i<j<k} w_{ijk} \Phi(i,j,k) \Phi(i,j,k),\end{gathered} \tag{21}$$

где веса $w_i,\ w_{ij}, w_{ijk}$ задаются любыми положительными значениями, инвариантными относительно произвольной перестановки индексов. Когда веса принимают постоянное значение 1, будем называть их стандартными скалярными произведениями. Суммируя только по множествам $\{(i,j) :\ i < j\}$ и $\{(i,j,k) :\ i < j < k\}$, будем считать каждое ребро или треугольник ровно один раз в скалярных произведениях.

Обозначать гильбертово пространства $0-$, $1-$ и $2-$коцепей как $L^2(V)$, $L^2_\wedge(E)$ и $L^2_\wedge(T)$ соответственно. Нижний индекс $\wedge$ предназначен для обозначения знакопеременности. Заметим, что $L^2_\wedge(V) = L^2(V)$, так как для функции одного аргумента знакопеременность не определяется.

Положим $L^2_\wedge(\varnothing) = \{0\}$ по определению. Префикс $L^2$ означает на наличие скалярного произведения.

Элементы $L^2_\wedge(E)$ (т.е. $1-$формы) хорошо известны в теории графов и часто называются потоками на ребрах. Хотя графы, рассматриваемые в работе всегда неориентированные и невзвешенные, ориентированный граф — это просто граф, оснащенный выбором потока на ребрах $X \in L^2_\wedge(E)$, вследствие чего неориентированное ребро $\{i,j\} \in E$ становится ребром $(i,j)$, если $X(i,j) > 0$, или $(j,i)$, если $X(i,j) < 0$, а величина $X(i,j)$ может быть принята как вес этого ориентированного ребра. Таким образом, $L^2_\wedge(E)$ дает все взвешенные ориентированные графы, которые в основе своей имеют одинаковую базовую структуру неориентированного исходного графа.

Рассмотрим стандартные скалярные произведения на $L^2(V)$ и $L^2_\wedge(E)$. Тогда дивергенцию потока на реберах относительно вершины $i \in V$ можно интерпретировать следующим образом

$$(div\ X)(i) = (inflow\ X)(i) - (outflow\ X)(i), \tag{22}$$

где $inflow$ и $outflow$ определены соответственно для любого $X \in L^2_\wedge(E)$ и любой $i \in V$ как

$$(inflow\ X)(i) = \sum_{j:X(i,j)<0} X(i,j), \quad (outflow\ X)(i) = \sum_{j:X(i,j)>0} X(i,j).$$

Для обозначения введенных величин используются термины: входящий поток, исходящий поток и общий поток.

Пусть $X \in L^2_\wedge(E)$. Вершина $i \in V$ называется стоком $X$, если $X(i,j) < 0$ для каждого соседа $\{i,j\} \in E$ вершины $i$. Точно так же вершина $i \in V$ называется источником $X$, если $X(i,j) > 0$ для каждого соседа $\{i,j\} \in E$ вершины $i$. В общем, поток на ребрах может не иметь источника или стока. В этом случае можем записать, что $X = -grad\ f$ для некоторой $f \in L^2(V)$, часто называемой потенциальной функцией. В этом случае $X$ будет иметь свойство течь из источников (локальные максимумы $f$) в стоки (локальные минимумы $f$).

Рассмотрим теоретико-графовые аналоги $grad$, $curl$ и $div$ в многомерном исчислении. Градиент — это линейный оператор $grad: \ L^2(V) \to L^2_\wedge(E)$, определяемый формулой $(grad\ f)(i,j) = f(j) - f(i)$ для всех $\{i,j\} \in E$ и ноль в противном случае.

Вихрь — это линейный оператор $curl : L^2_\wedge(E) \to L^2_\wedge(T)$, определяемый формулой $(curl\ X)(i,j,k) = X(i,j) + X(j,k) + X(k,i)$ для всех $\{i,j,k\} \in T$ и ноль в противном случае.

Дивергенция — это линейный оператор $div : L^2_\wedge(E) \to L^2(V)$, определяемый формулой $(div\ X)(i) = \sum\limits_{j=1}^{n} \frac{w_{ij}}{w_i} X(i,j)$ для всех $i \in V$.

Используя эти определения, можно построить другие линейные операторы, в частности, хорошо известный Лапласиан на графе, $\Delta_0 : L^2(V) \to L^2(V)$, определяемый равенством $\Delta_0 = -div\ grad$.

**Предложение 2.1** Оператор $\Delta_0 = -div\ grad$ дает обычный Лапласиан на графе.

Менее известен оператор Гельмгольца для графа, это теоретико-графовый аналог векторного Лапласиана $\Delta_1 : L^2_\wedge(E) \to L^2_\wedge(E)$, определяемый равенством $\Delta_1 = -grad\ div + curl^*\ curl$.

Рассмотрим $L^2_\wedge(E)$ и $L^2_\wedge(T)$ вместе с определенными в (21) скалярными произведениями. Тогда можем получить следующий факт

**Предложение 2.2** Двойственным оператором к оператору $curl$ будет оператор $curl^*$, определяемый по следующей формуле.

$$curl^*\ \Phi(i,j) = \sum_{k=1}^{n} \frac{w_{ijk}}{w_{ij}} \Phi(i,j,k).$$

Градиент и вихрь являются частными случаями кограничных операторов, дискретными аналогами внешних производных, а Лапласиан на графе и оператор Гельмгольца на графе являются частными случаями Лапласиана Ходжа.

То есть к этим операторам применимы результаты 1-го раздела, где $A = curl$ и $B = grad$. Позже для общего случая произвольной размерности будет доказано, что

$$curl\ grad = 0. \tag{23}$$

**Предложение 3.1** Для $L^2(V)$ и $L^2_\wedge(E)$ вместе с определенными на них скалярными произведениями имеет место равенство

$$grad^* \ X(i) = -\sum_{j=1}^{n} \frac{w_{ij}}{w_i} X(i,j) = -div \ X(i). \tag{24}$$

**Заключение.** В работе была изложена теория Ходжа для графов. В рамках которой были получены теоретико-графовые аналоги операторов Лапласа и Гельмгольца. В качестве вспомогательного инструмента была построена теория когомологий относительно матриц, удовлетворяющих $AB = 0$. Основной результат был проверен непосредственными вычислениями для пары графов, используя программы на языке C++.

Стоит отметить, что простой подход к когомологиям и теории Ходжа, использованный в работе требует только линейной алгебры и теории графов. При изложении основной теории алгебра была полностью изолирована от топологии, чтобы показать, что большая часть когомологий и теории Ходжа есть не что иное, как линейная алгебра матриц. Что касается оставшегося топологического аспекта, рассуждения проводятся в терминах графов, а не через симплициальные комплексы. Такая форма построения теории, используя простую структуру, позволяет облегчить разработку приложений. приложений.