

# РОЗШИРЕННЯ ПРОГРАМНОГО WEB-ІНСТРУМЕНТУ ДЛЯ СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛІЗУ ГРАФІВ: АВТОМАТИЗАЦІЯ ПОБУДОВИ КОСПЕКТРАЛЬНИХ ПАР

Леонтюк Нікіта Сергійович

*студент групи МАМм -1-25-1.4д,*

*Київського столичного університету імені Бориса Грінченка,*

*науковий керівник - к.ф.-м.н., доц. Соломко В.О.*

## ВСТУП

Графи слугують універсальною математичною моделлю зв'язків між об'єктами: за їх допомогою описують соціальні мережі, транспортні та біологічні системи, інформаційні потоки тощо (наприклад, [1]).

**Актуальність і постановка проблеми.** Спектральна теорія графів вивчає власні значення та власні вектори матриць, пов'язаних із графом. Вони відображають низку структурних характеристик, зокрема кількість компонент зв'язності та наявність кластерів (наприклад, [2]), і лежать в основі методів спектральної кластеризації даних.

Водночас спектр не завжди визначає граф однозначно: існують неізоморфні графи з однаковим спектром, які називають коспектральними [3]. Саме це явище показує, які властивості графа можна відновити зі спектра, а які ні.

У межах попереднього етапу дослідження було розроблено програмний web-інструмент, що перевіряв коспектральність двох графів відносно наперед заданих користувачем матриць (суміжності, Лапласа, Зейделя) [4]. Поза увагою залишалося питання, як саме обраний тип матриці впливає на спроможність розрізняти неізоморфні графи, а також можливість автоматичної побудови коспектральних пар - усі приклади на попередньому етапі бралися з літератури вручну.

**Мета дослідження.** Метою цього етапу роботи є масштабування раніше створеного інструменту. А саме розширення переліку асоційованих з графом матриць з трьох до п'яти, створення можливості задавати граф за допомогою списку ребер та автоматизація побудови коспектральних неізоморфних пар за допомогою алгоритмічних методів переключення, що дозволяє перейти від перевірки окремих заздалегідь заданих прикладів до систематичного експериментального дослідження коспектральності на довільних графах.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** Перші приклади неізоморфних графів з однаковим спектром з'явилися в хімічній теорії графів у 1950–1960-х роках: у роботах Гюнхарда і Прімаса було показано, що різні молекулярні структури можуть мати однакові спектральні характеристики, тобто спектр не є «унікальним відбитком» графа. Перший приклад неізоморфних коспектральних дерев навели Колатц і Сіноговіц [5]. Значний внесок в алгоритмічний аналіз графів зробив Б. Мак-Кей, який у роботі [6] запропонував ефективні методи генерування та перевірки малих неізоморфних графів.

Сучасні дослідження зосереджені на побудові коспектральних пар графів та вивченні властивостей, які спектр не визначає. Так, у роботі [7] запропоновано підхід до побудови коспектральних графів відносно узагальненої матриці суміжності, у [2] побудовано пару коспектральних 5-регулярних графів, один з яких має досконале парування, а інший ні, а в [1] спектральний аналіз поширено на унітарні графи Келі кілець верхньотрикутних матриць.

Систематичний огляд цього напрямку, зокрема умов коспектральності та означеності графів власним спектром (DS-графів) відносно різних асоційованих матриць - суміжності, Лапласа, беззнакової Лапласа та нормалізованої Лапласа, - представлено у роботі [8], яка також узагальнює класичні конструктивні методи побудови коспектральних пар, зокрема переключення Зейделя та метод Годзіла-Маккея [9]. Останній, запропонований у 1982 році, дозволяє будувати коспектральні графи на основі лише локальної умови регулярності виділеного підграфа, що робить його застосовним і до нерегулярних графів загалом. Саме ці два конструктивні методи було обрано як основу для розширення програмного інструменту в межах цього етапу дослідження.

### **КОРОТКИЙ ОПИС ДОСЛІДЖЕННЯ, ЙОГО МЕТОДІВ І ЗАСОБІВ**

Дослідження буде спрямоване на порівняльний аналіз роздільної здатності різних матричних представлень графа - тобто здатності кожної з матриць розрізняти неізоморфні графи. Для цього програмний інструмент (web-додаток на основі Python-фреймворку Streamlit) було розширено у трьох напрямках.

По-перше, окрім матриці суміжності  $A$ , Лапласа  $L$  та Зейделя  $S$ , що були розглянуті на попередньому етапі [4], реалізовано побудову беззнакової матриці Лапласа  $Q = D + A$  та нормалізованої матриці Лапласа  $L_{norm} = D^{-\frac{1}{2}} L D^{-\frac{1}{2}}$ , де  $D$  - діагональна матриця степенів вершин графа. Усі п'ять матриць будуються автоматично з єдиного способу задання графа - списком ребер, - що усуває потребу готувати кожну матрицю вручну.

По-друге, реалізовано алгоритм переключення Зейделя. Для регулярного графа  $G$  та довільної підмножини вершин  $U$  виконується інвертування ребер між  $U$  та його доповненням, якщо отриманий граф  $G'$  лишається регулярним того самого степеня, він гарантовано коспектральний  $G$  відносно матриці суміжності. Інструмент виконує повний перебір усіх підмножин  $U$  заданого графа та автоматично перевіряє результат на ізоморфність вихідному графу (за допомогою бібліотеки `networkx`), виокремлюючи знайдені неізоморфні коспектральні (NICS) пари.

По-третє, реалізовано метод Годзіла-Маккея [9]. Граф розбивається на підмножину  $U$  та решту вершин  $W$ , метод застосовний, якщо підграф, індукований на  $U$ , є регулярним, а кожна вершина з  $W$  має  $0, |U|$  або  $\frac{|U|}{2}$  сусідів у межах  $U$ . На відміну від переключення Зейделя, цей метод не вимагає регулярності графа в цілому, що суттєво розширює клас графів, до яких він застосовний.

Коректність обох методів перевірено не лише з заданою в інструменті похибкою порівняння власних значень ( $10^{-8}$ ), а й додатково - точними символічними обчисленнями характеристичного многочлена (без похибки округлення), що підтвердило збереження спектра для всіх знайдених пар.

## РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕННЯ

Нехай  $\Gamma$  - неорієнтований граф без кратних ребер і петель,  $n$  - кількість його вершин,  $D$  - діагональна матриця степенів вершин. У таблиці 1 наведено п'ять асоційованих з графом матриць, реалізованих в оновленому інструменті.

Таблиця 1.

Асоційовані матриці графа, реалізовані в інструменті

| Матриця               | Познач.    | Формула                                                                                                                   |
|-----------------------|------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Суміжності            | $A$        | $a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{якщо ребро з вершини } v_i \text{ у } v_j \\ 0, & \text{якщо ребра немає} \end{cases}$ |
| Лапласа               | $L$        | $D - A$                                                                                                                   |
| Беззнакова Лапласа    | $Q$        | $D + A$                                                                                                                   |
| Нормалізована Лапласа | $L_{norm}$ | $D^{-\frac{1}{2}} L D^{-\frac{1}{2}}$                                                                                     |
| Зейделя               | $S$        | $J - I - 2A$                                                                                                              |

( $J$  - матриця, усі елементи якої рівні 1;  $I$  - одинична матриця.)

Коспектральність показує межі того, що можна визначити через спектр. Спектр визначає деякі властивості графа (наприклад, регулярність, кількість вершин, суму степенів), але не визначає структуру однозначно. При цьому межі визначеності суттєво залежать від обраної матриці: два графи можуть бути некоспектральними відносно однієї матриці, але коспектральними відносно іншої. Показовий приклад - цикл  $C_4$  та зірка  $K_{1,3}$ . Ці графи не є коспектральними відносно матриці суміжності  $A$ , однак мають ідентичний спектр  $\{0, 1, 1, 2\}$  відносно нормалізованої матриці Лапласа  $L_{norm}$  (рис. 1).

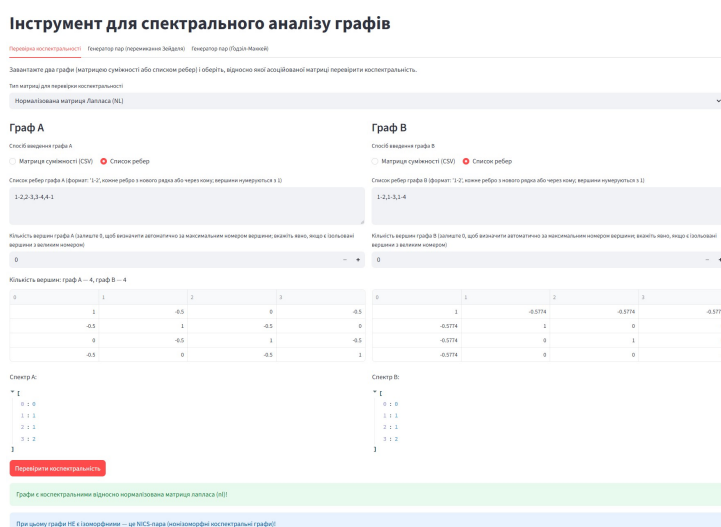


Рис. 1. Перевірка коспектральності графів  $C_4$  та  $K_{1,3}$  відносно нормалізованої матриці Лапласа в інструменті

**Приклад 1 (переключення Зейделя).** Розглянемо лінійний граф повного графа  $K_{4,4}$  - 6-регулярний граф на 16 вершинах. Застосування до нього переключення Зейделя дає 138 підмножин  $U$ , для яких отриманий граф лишається 6-регулярним, з них 120 виявляються неізоморфними вихідному графу (NICS-пари), а 18 - ізоморфними. Серед знайдених NICS-пар - граф Шрикханде, відомий в літературі як сильно регулярний граф, коспектральний до лінійного графа  $K_{4,4}$  (рис. 2).

### Інструмент для спектрального аналізу графів

Генератор коспектральності: [Генератор пар \(перемикання Зейделя\)](#) | [Генератор пар \(Бадін Маней\)](#)

Метод **перемикання Зейделя**: для регулярного графа  $G$  та підмножини вершин  $U$  будемо граф  $G_U$ , інвертуючи ребра між  $U$  та його доповненням. Якщо  $G_U$  виявиться регулярним того самого степеня —  $G$  і  $G_U$  гарантовано коспектральні (відносно матриць сумишності, а через регулярність — і відносно матриць Лапласа та беззнакової Лапласа).

Інструмент перевіряє всі підмножини  $U$  та показує знайдені пари, позначаючи, чи є вони ізоморфними (якщо ізоморфні — це просто той самий граф, якщо ні — це шукана NICS-пара).

Список ребер графа (для перемикання Зейделя):

☐ Матриця сумишності (LSV) ☒ Список ребер

Список ребер графа (для перемикання Зейделя) (формат: 1 2, кінці ребра з нового ребра або через кому, вершини нумеруються з 1):

```
1-2, 1-3, 1-5, 1-6, 1-10, 1-11, 2-3, 2-8, 2-9, 2-10, 2-14, 3-4, 3-10, 3-15,
3-16, 4-5, 4-13, 4-14, 4-15, 4-16, 5-6, 5-11, 5-13, 5-14, 6-7, 6-9, 6-11,
6-15, 7-9, 7-10, 7-12, 7-13, 7-15, 8-9, 8-11, 8-12, 8-15, 9-14, 9-15,
10-14, 10-15, 11-12, 11-13, 11-14, 11-15, 12-13, 12-14, 12-15,
13-14, 13-15, 14-15, 16-17, 16-18, 16-19, 16-20, 17-18, 17-19, 17-20,
18-19, 18-20, 19-20, 21-22, 21-23, 21-24, 21-25, 22-23, 22-24, 22-25,
23-24, 23-25, 24-25, 26-27, 26-28, 26-29, 26-30, 27-28, 27-29, 27-30,
28-29, 28-30, 29-30, 31-32, 31-33, 31-34, 31-35, 32-33, 32-34, 32-35,
33-34, 33-35, 34-35, 36-37, 36-38, 36-39, 36-40, 37-38, 37-39, 37-40,
38-39, 38-40, 39-40, 41-42, 41-43, 41-44, 41-45, 42-43, 42-44, 42-45,
43-44, 43-45, 44-45, 46-47, 46-48, 46-49, 46-50, 47-48, 47-49, 47-50,
48-49, 48-50, 49-50, 51-52, 51-53, 51-54, 51-55, 52-53, 52-54, 52-55,
53-54, 53-55, 54-55, 56-57, 56-58, 56-59, 56-60, 57-58, 57-59, 57-60,
58-59, 58-60, 59-60, 61-62, 61-63, 61-64, 61-65, 62-63, 62-64, 62-65,
63-64, 63-65, 64-65, 66-67, 66-68, 66-69, 66-70, 67-68, 67-69, 67-70,
68-69, 68-70, 69-70, 71-72, 71-73, 71-74, 71-75, 72-73, 72-74, 72-75,
73-74, 73-75, 74-75, 76-77, 76-78, 76-79, 76-80, 77-78, 77-79, 77-80,
78-79, 78-80, 79-80, 81-82, 81-83, 81-84, 81-85, 82-83, 82-84, 82-85,
83-84, 83-85, 84-85, 86-87, 86-88, 86-89, 86-90, 87-88, 87-89, 87-90,
88-89, 88-90, 89-90, 91-92, 91-93, 91-94, 91-95, 92-93, 92-94, 92-95,
93-94, 93-95, 94-95, 96-97, 96-98, 96-99, 96-100, 97-98, 97-99, 97-100,
98-99, 98-100, 99-100, 101-102, 101-103, 101-104, 101-105, 102-103, 102-104, 102-105,
103-104, 103-105, 104-105, 106-107, 106-108, 106-109, 106-110, 107-108, 107-109, 107-110,
108-109, 108-110, 109-110, 111-112, 111-113, 111-114, 111-115, 112-113, 112-114, 112-115,
113-114, 113-115, 114-115, 116-117, 116-118, 116-119, 116-120, 117-118, 117-119, 117-120,
118-119, 118-120, 119-120, 121-122, 121-123, 121-124, 121-125, 122-123, 122-124, 122-125,
123-124, 123-125, 124-125, 126-127, 126-128, 126-129, 126-130, 127-128, 127-129, 127-130,
128-129, 128-130, 129-130, 131-132, 131-133, 131-134, 131-135, 132-133, 132-134, 132-135,
133-134, 133-135, 134-135, 136-137, 136-138, 136-139, 136-140, 137-138, 137-139, 137-140,
138-139, 138-140, 139-140, 141-142, 141-143, 141-144, 141-145, 142-143, 142-144, 142-145,
143-144, 143-145, 144-145, 146-147, 146-148, 146-149, 146-150, 147-148, 147-149, 147-150,
148-149, 148-150, 149-150, 151-152, 151-153, 151-154, 151-155, 152-153, 152-154, 152-155,
153-154, 153-155, 154-155, 156-157, 156-158, 156-159, 156-160, 157-158, 157-159, 157-160,
158-159, 158-160, 159-160, 161-162, 161-163, 161-164, 161-165, 162-163, 162-164, 162-165,
163-164, 163-165, 164-165, 166-167, 166-168, 166-169, 166-170, 167-168, 167-169, 167-170,
168-169, 168-170, 169-170, 171-172, 171-173, 171-174, 171-175, 172-173, 172-174, 172-175,
173-174, 173-175, 174-175, 176-177, 176-178, 176-179, 176-180, 177-178, 177-179, 177-180,
178-179, 178-180, 179-180, 181-182, 181-183, 181-184, 181-185, 182-183, 182-184, 182-185,
183-184, 183-185, 184-185, 186-187, 186-188, 186-189, 186-190, 187-188, 187-189, 187-190,
188-189, 188-190, 189-190, 191-192, 191-193, 191-194, 191-195, 192-193, 192-194, 192-195,
193-194, 193-195, 194-195, 196-197, 196-198, 196-199, 196-200, 197-198, 197-199, 197-200,
198-199, 198-200, 199-200, 201-202, 201-203, 201-204, 201-205, 202-203, 202-204, 202-205,
203-204, 203-205, 204-205, 206-207, 206-208, 206-209, 206-210, 207-208, 207-209, 207-210,
208-209, 208-210, 209-210, 211-212, 211-213, 211-214, 211-215, 212-213, 212-214, 212-215,
213-214, 213-215, 214-215, 216-217, 216-218, 216-219, 216-220, 217-218, 217-219, 217-220,
218-219, 218-220, 219-220, 221-222, 221-223, 221-224, 221-225, 222-223, 222-224, 222-225,
223-224, 223-225, 224-225, 226-227, 226-228, 226-229, 226-230, 227-228, 227-229, 227-230,
228-229, 228-230, 229-230, 231-232, 231-233, 231-234, 231-235, 232-233, 232-234, 232-235,
233-234, 233-235, 234-235, 236-237, 236-238, 236-239, 236-240, 237-238, 237-239, 237-240,
238-239, 238-240, 239-240, 241-242, 241-243, 241-244, 241-245, 242-243, 242-244, 242-245,
243-244, 243-245, 244-245, 246-247, 246-248, 246-249, 246-250, 247-248, 247-249, 247-250,
248-249, 248-250, 249-250, 251-252, 251-253, 251-254, 251-255, 252-253, 252-254, 252-255,
253-254, 253-255, 254-255, 256-257, 256-258, 256-259, 256-260, 257-258, 257-259, 257-260,
258-259, 258-260, 259-260, 261-262, 261-263, 261-264, 261-265, 262-263, 262-264, 262-265,
263-264, 263-265, 264-265, 266-267, 266-268, 266-269, 266-270, 267-268, 267-269, 267-270,
268-269, 268-270, 269-270, 271-272, 271-273, 271-274, 271-275, 272-273, 272-274, 272-275,
273-274, 273-275, 274-275, 276-277, 276-278, 276-279, 276-280, 277-278, 277-279, 277-280,
278-279, 278-280, 279-280, 281-282, 281-283, 281-284, 281-285, 282-283, 282-284, 282-285,
283-284, 283-285, 284-285, 286-287, 286-288, 286-289, 286-290, 287-288, 287-289, 287-290,
288-289, 288-290, 289-290, 291-292, 291-293, 291-294, 291-295, 292-293, 292-294, 292-295,
293-294, 293-295, 294-295, 296-297, 296-298, 296-299, 296-300, 297-298, 297-299, 297-300,
298-299, 298-300, 299-300, 301-302, 301-303, 301-304, 301-305, 302-303, 302-304, 302-305,
303-304, 303-305, 304-305, 306-307, 306-308, 306-309, 306-310, 307-308, 307-309, 307-310,
308-309, 308-310, 309-310, 311-312, 311-313, 311-314, 311-315, 312-313, 312-314, 312-315,
313-314, 313-315, 314-315, 316-317, 316-318, 316-319, 316-320, 317-318, 317-319, 317-320,
318-319, 318-320, 319-320, 321-322, 321-323, 321-324, 321-325, 322-323, 322-324, 322-325,
323-324, 323-325, 324-325, 326-327, 326-328, 326-329, 326-330, 327-328, 327-329, 327-330,
328-329, 328-330, 329-330, 331-332, 331-333, 331-334, 331-335, 332-333, 332-334, 332-335,
333-334, 333-335, 334-335, 336-337, 336-338, 336-339, 336-340, 337-338, 337-339, 337-340,
338-339, 338-340, 339-340, 341-342, 341-343, 341-344, 341-345, 342-343, 342-344, 342-345,
343-344, 343-345, 344-345, 346-347, 346-348, 346-349, 346-350, 347-348, 347-349, 347-350,
348-349, 348-350, 349-350, 351-352, 351-353, 351-354, 351-355, 352-353, 352-354, 352-355,
353-354, 353-355, 354-355, 356-357, 356-358, 356-359, 356-360, 357-358, 357-359, 357-360,
358-359, 358-360, 359-360, 361-362, 361-363, 361-364, 361-365, 362-363, 362-364, 362-365,
363-364, 363-365, 364-365, 366-367, 366-368, 366-369, 366-370, 367-368, 367-369, 367-370,
368-369, 368-370, 369-370, 371-372, 371-373, 371-374, 371-375, 372-373, 372-374, 372-375,
373-374, 373-375, 374-375, 376-377, 376-378, 376-379, 376-380, 377-378, 377-379, 377-380,
378-379, 378-380, 379-380, 381-382, 381-383, 381-384, 381-385, 382-383, 382-384, 382-385,
383-384, 383-385, 384-385, 386-387, 386-388, 386-389, 386-390, 387-388, 387-389, 387-390,
388-389, 388-390, 389-390, 391-392, 391-393, 391-394, 391-395, 392-393, 392-394, 392-395,
393-394, 393-395, 394-395, 396-397, 396-398, 396-399, 396-400, 397-398, 397-399, 397-400,
398-399, 398-400, 399-400, 401-402, 401-403, 401-404, 401-405, 402-403, 402-404, 402-405,
403-404, 403-405, 404-405, 406-407, 406-408, 406-409, 406-410, 407-408, 407-409, 407-410,
408-409, 408-410, 409-410, 411-412, 411-413, 411-414, 411-415, 412-413, 412-414, 412-415,
413-414, 413-415, 414-415, 416-417, 416-418, 416-419, 416-420, 417-418, 417-419, 417-420,
418-419, 418-420, 419-420, 421-422, 421-423, 421-424, 421-425, 422-423, 422-424, 422-425,
423-424, 423-425, 424-425, 426-427, 426-428, 426-429, 426-430, 427-428, 427-429, 427-430,
428-429, 428-430, 429-430, 431-432, 431-433, 431-434, 431-435, 432-433, 432-434, 432-435,
433-434, 433-435, 434-435, 436-437, 436-438, 436-439, 436-440, 437-438, 437-439, 437-440,
438-439, 438-440, 439-440, 441-442, 441-443, 441-444, 441-445, 442-443, 442-444, 442-445,
443-444, 443-445, 444-445, 446-447, 446-448, 446-449, 446-450, 447-448, 447-449, 447-450,
448-449, 448-450, 449-450, 451-452, 451-453, 451-454, 451-455, 452-453, 452-454, 452-455,
453-454, 453-455, 454-455, 456-457, 456-458, 456-459, 456-460, 457-458, 457-459, 457-460,
458-459, 458-460, 459-460, 461-462, 461-463, 461-464, 461-465, 462-463, 462-464, 462-465,
463-464, 463-465, 464-465, 466-467, 466-468, 466-469, 466-470, 467-468, 467-469, 467-470,
468-469, 468-470, 469-470, 471-472, 471-473, 471-474, 471-475, 472-473, 472-474, 472-475,
473-474, 473-475, 474-475, 476-477, 476-478, 476-479, 476-480, 477-478, 477-479, 477-480,
478-479, 478-480, 479-480, 481-482, 481-483, 481-484, 481-485, 482-483, 482-484, 482-485,
483-484, 483-485, 484-485, 486-487, 486-488, 486-489, 486-490, 487-488, 487-489, 487-490,
488-489, 488-490, 489-490, 491-492, 491-493, 491-494, 491-495, 492-493, 492-494, 492-495,
493-494, 493-495, 494-495, 496-497, 496-498, 496-499, 496-500, 497-498, 497-499, 497-500,
498-499, 498-500, 499-500, 501-502, 501-503, 501-504, 501-505, 502-503, 502-504, 502-505,
503-504, 503-505, 504-505, 506-507, 506-508, 506-509, 506-510, 507-508, 507-509, 507-510,
508-509, 508-510, 509-510, 511-512, 511-513, 511-514, 511-515, 512-513, 512-514, 512-515,
513-514, 513-515, 514-515, 516-517, 516-518, 516-519, 516-520, 517-518, 517-519, 517-520,
518-519, 518-520, 519-520, 521-522, 521-523, 521-524, 521-525, 522-523, 522-524, 522-525,
523-524, 523-525, 524-525, 526-527, 526-528, 526-529, 526-530, 527-528, 527-529, 527-530,
528-529, 528-530, 529-530, 531-532, 531-533, 531-534, 531-535, 532-533, 532-534, 532-535,
533-534, 533-535, 534-535, 536-537, 536-538, 536-539, 536-540, 537-538, 537-539, 537-540,
538-539, 538-540, 539-540, 541-542, 541-543, 541-544, 541-545, 542-543, 542-544, 542-545,
543-544, 543-545, 544-545, 546-547, 546-548, 546-549, 546-550, 547-548, 547-549, 547-550,
548-549, 548-550, 549-550, 551-552, 551-553, 551-554, 551-555, 552-553, 552-554, 552-555,
553-554, 553-555, 554-555, 556-557, 556-558, 556-559, 556-560, 557-558, 557-559, 557-560,
558-559, 558-560, 559-560, 561-562, 561-563, 561-564, 561-565, 562-563, 562-564, 562-565,
563-564, 563-565, 564-565, 566-567, 566-568, 566-569, 566-570, 567-568, 567-569, 567-570,
568-569, 568-570, 569-570, 571-572, 571-573, 571-574, 571-575, 572-573, 572-574, 572-575,
573-574, 573-575, 574-575, 576-577, 576-578, 576-579, 576-580, 577-578, 577-579, 577-580,
578-579, 578-580, 579-580, 581-582, 581-583, 581-584, 581-585, 582-583, 582-584, 582-585,
583-584, 583-585, 584-585, 586-587, 586-588, 586-589, 586-590, 587-588, 587-589, 587-590,
588-589, 588-590, 589-590, 591-592, 591-593, 591-594, 591-595, 592-593, 592-594, 592-595,
593-594, 593-595, 594-595, 596-597, 596-598, 596-599, 596-600, 597-598, 597-599, 597-600,
598-599, 598-600, 599-600, 601-602, 601-603, 601-604, 601-605, 602-603, 602-604, 602-605,
603-604, 603-605, 604-605, 606-607, 606-608, 606-609, 606-610, 607-608, 607-609, 607-610,
608-609, 608-610, 609-610, 611-612, 611-613, 611-614, 611-615, 612-613, 612-614, 612-615,
613-614, 613-615, 614-615, 616-617, 616-618, 616-619, 616-620, 617-618, 617-619, 617-620,
618-619, 618-620, 619-620, 621-622, 621-623, 621-624, 621-625, 622-623, 622-624, 622-625,
623-624, 623-625, 624-625, 626-627, 626-628, 626-629, 626-630, 627-628, 627-629, 627-630,
628-629, 628-630, 629-630, 631-632, 631-633, 631-634, 631-635, 632-633, 632-634, 632-635,
633-634, 633-635, 634-635, 636-637, 636-638, 636-639, 636-640, 637-638, 637-639, 637-640,
638-639, 638-640, 639-640, 641-642, 641-643, 641-644, 641-645, 642-643, 642-644, 642-645,
643-644, 643-645, 644-645, 646-647, 646-648, 646-649, 646-650, 647-648, 647-649, 647-650,
648-649, 648-650, 649-650, 651-652, 651-653, 651-654, 651-655, 652-653, 652-654, 652-655,
653-654, 653-655, 654-655, 656-657, 656-658, 656-659, 656-660, 657-658, 657-659, 657-660,
658-659, 658-660, 659-660, 661-662, 661-663, 661-664, 661-665, 662-663, 662-664, 6
```

**Приклад 2 (метод Годзіла-Маккея).** На нерегулярному графі з 10 вершин (степені вершин від 1 до 5) інструмент знайшов 46 підмножин  $U$ , що задовольняють умови методу. З них рівно одна дає неізоморфну коспектральну пару (рис. 3). Цей результат демонструє застосовність методу саме до нерегулярних графів, на відміну від переключення Зейделя.

### Інструмент для спектрального аналізу графів

Перевірка коспектральності    Генератор пар (перемикання Зейделя)    **Генератор пар (Годзіла-Маккея)**

Метод **перемикання Годзіла-Маккея**: граф розбивається на підмножину  $U$  та решту вершин  $W$ . Перемикання застосовується, якщо виконано ОБИДВІ умови:

1. Підграф, індукований на  $U$ , є **регулярним** (усі вершини в  $U$  мають однаковий ступінь у межах  $U$ ).
2. Кожна вершина  $w$  з  $W$  має рівно 0,  $|U|$  або  $|U|/2$  сусідів у межах  $U$ .

Тоді для кожної вершини  $w$ , що має рівно  $|U|/2$  сусідів у  $U$ , усі її зв'язки з вершинами  $U$  інвертуються. Результат гарантовано  $A$ -коспектральний до вихідного графа.

На відміну від перемикання Зейделя, цей метод **не вимагає регулярності всього графа** — лише регулярності підграфа на  $U$ . Через це метод застосовний до значно ширшого класу графів, але й підмножин  $|U|$  для перевірки адячі менше (лише парні розміри), а сама умова регулярності в додатково відсіює переважну більшість з них.

Спосіб введення графа (для перемикання Годзіла-Маккея)

☐ Матриця суміжності (CSV)    ☒ Список ребер

Список ребер графа (для перемикання Годзіла-Маккея) (формат: '1-2', кожне ребро з нового рядка або через кому; вершини нумеруються з 1)

1-6, 1-8, 2-3, 2-8, 2-9, 2-10, 4-5, 4-7, 4-10, 5-6, 5-10, 7-9, 7-10, 8-10

Кількість вершин графа (для перемикання Годзіла-Маккея) (залиште 0, щоб визначити автоматично за максимальним номером вершини; вкажіть явно, якщо є ізольовані вершини з великим номером)

0

Максимальна кількість вершин для повного перебору

14

Кількість вершин: 10 (граф не обов'язково має бути регулярним)

**Запустити пошук перемикання Годзіла-Маккея**

Знайдено 46 придатних підмножин  $U$  (1 дають неізоморфні (NICS) пари, 45 дають ізоморфний тому ж графу результат).

**NICS-пари (неізоморфні коспектральні графи)**

>  $U = \{4, 6, 8, 9\}$

> Показати ізоморфні результати (45)

Рис. 3. Результат пошуку пари методом Годзіла-Маккея для нерегулярного графа на 10 вершинах

## ВИСНОВКИ

У межах цього етапу дослідження програмний інструмент для спектрального аналізу графів було розширено: підтримку отримали п'ять асоційованих матриць графа (матриці суміжності, матриці Лапласа, беззнакової матриці Лапласа, нормалізованої матриці Лапласа, матриці Зейделя), реалізовано побудову графа за списком ребер, а також два алгоритмічні методи автоматичної побудови коспектральних неізоморфних пар - переключення Зейделя та метод Годзіла-Маккея.

Проведені експерименти підтвердили, що здатність розрізняти неізоморфні графи залежить від обраної матриці. Графи, що не є коспектральними відносно матриці суміжності, можуть виявитися коспектральними відносно нормалізованої матриці Лапласа. Це свідчить про доцільність подальшого порівняльного аналізу роздільної здатності різних матричних представлень графа.

Коректність реалізованих методів підтверджено як на класичному прикладі з літератури (граф Шрикханде як результат переключення Зейделя лінійного графа  $K_{4,4}$ ), так і точними символьними обчисленнями характеристичного многочлена.

Подальший розвиток дослідження передбачає систематичний порівняльний аналіз роздільної здатності розглянутих матричних представлень на великих вибірках графів, а також перехід до завдання спектральної кластеризації даних - побудови графів подібності, обчислення власних векторів відповідного Лапласіана та автоматичного розподілу об'єктів на кластери.

### ДЖЕРЕЛА

1. Hołubowski W., Oliynyk B., Solomko V. On the Characterization of the Unitary Cayley Graphs of the Upper Triangular Matrix Rings. *Symmetry*. 2025. 17(12), 2180. URL: <https://doi.org/10.3390/sym17122180>
2. Соболев В., Соломко В. Побудова пари коспектральних 5-регулярних графів, один з яких має досконале парування, а інший – ні. *Могиланський математичний журнал*. 2021. Том 4. С. 24 – 27. URL: <https://doi.org/10.18523/2617-70804202124-27>
3. Brouwer A.E., Haemers W.H. Spectra of Graphs. Springer: New York, NY, USA, 2012. URL: <https://doi.org/10.1007/978-1-4614-1939-6>
4. Леонтьук Н. С., Соломко В. О. Розробка програмного web-інструменту для спектрального аналізу та порівняння графів. *Збірник матеріалів Всеукраїнської конференції молодих учених «Інформаційні технології»*. 2026. № 13. С. 208–215. URL: <https://zcit.kubg.edu.ua/index.php/journal/article/view/98>
5. Von Collatz L., Sinogowitz U. Spektren endlicher grafen. *Abhandlungen aus dem Mathematischen Seminar der Universität Hamburg*. 1957. Vol. 21, no. 1. P. 63–77. URL: <https://doi.org/10.1007/bf02941924>
6. McKay B. D. Computer reconstruction of small graphs. *Journal of Graph Theory*. 1977. Vol. 1, no. 3. P. 281–283. URL: <https://doi.org/10.1002/jgt.3190010309>
7. Грушка Д., Лебідь В. Побудова коспектральних графів відносно узагальненої матриці суміжності. *Могиланський математичний журнал*. 2018. Том 1. С. 11 – 14. URL: <https://doi.org/10.18523/2617-7080i2018p11-14>
8. Sason I., Krupnik N., Hamud S., Berman A. On Spectral Graph Determination. *Mathematics*. 2025. 13(4), 549. URL: <https://doi.org/10.3390/math13040549>
9. Godsil C. D., McKay B. D. Constructing cospectral graphs. *Aequationes Mathematicae*. 1982. Vol. 25. P. 257–268. URL: <https://doi.org/10.1007/BF02189621>
10. Abramov, V., Astafieva, M., Boiko, M., Bodnenko, D., Bushma, A., Vember, V., Hlushak, O., Zhylytsov, O., Ilich, L., Kobets, N., Kovaliuk, T., Kuchakovska, H., Lytvyn, O., Lytvyn, P., Mashkina, I., Morze, N., Nosenko, T., Proshkin, V., Radchenko, S., & Yaskevych, V. (2021). Theoretical and practical aspects of the use of mathematical methods and information technology in education and science. URL: <https://doi.org/10.28925/9720213284km>