РОЗРОБКА ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ЕФЕКТИВНИХ АЛГОРИТМІВ СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛІЗУ ГРАФІВ

Гусак С.Л.
Київський столичний університет імені Бориса Грінченка, м. Київ

ВСТУП

У сучасних умовах стрімкого розвитку інформаційних технологій та зростання обсягів даних особливої актуальності набуває аналіз складних мережевих структур. Використання математичних методів та інформаційних технологій є важливим напрямом сучасних досліджень у галузі освіти та науки та сприяє розвитку методів аналізу складних систем [1]. Теорія графів є одним із ключових інструментів дослідження таких систем, оскільки дозволяє формалізувати взаємозв'язки між елементами та досліджувати їх властивості за допомогою математичних моделей. Зокрема, розріджені графи широко застосовуються при моделюванні соціальних, транспортних, інформаційних та біологічних мереж.

Актуальність і постановка проблеми. Одним із найбільш ефективних підходів до аналізу графів є спектральний метод, який базується на дослідженні власних значень матриць, пов'язаних із графом, зокрема, матриці суміжності та матриці Лапласа. У зв'язку з цим особливої уваги набуває розробка ефективних алгоритмів спектрального аналізу, які забезпечують точне та швидке обчислення спектральних характеристик навіть для великих розріджених графів.

Проблема дослідження полягає у необхідності підвищення ефективності алгоритмів спектрального аналізу графів, а також у визначенні можливостей і обмежень застосування спектральних методів для дослідження структурних властивостей мереж. Зокрема, відомо, що спектр графа не завжди однозначно визначає його структуру, оскільки існують коспектральні графи — різні за будовою графи з однаковими спектрами.

Мета дослідження. Метою даного дослідження є розробка та дослідження ефективних алгоритмів спектрального аналізу графів, а також їх застосування для вивчення структурних властивостей розрідженого графа P_5. Для досягнення поставленої мети необхідно розв'язати такі завдання: сформувати матричні представлення графа P_5, дослідити їх спектральні характеристики, реалізувати алгоритми обчислення власних значень із використанням програмних засобів та проаналізувати отримані результати на прикладі графа-шляху.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Аналіз наукових публікацій свідчить про значний інтерес до спектральної теорії графів та алгоритмів її застосування. У фундаментальних працях [2-4] розглядаються основи спектрального аналізу графів. Дослідження коспектральних графів, зокрема, у роботах [5; 6], демонструють обмеження спектрального підходу щодо однозначного визначення властивостей графів. Сучасні дослідження [7] розширюють застосування спектральних методів для складніших алгебраїчних структур та узагальнених графів.

РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕННЯ

У теорії графів аналіз структури мережі полягає в розумінні того, як розподілені зв'язки між її елементами. У рамках мого дослідження зосередимось на таких поняттях:

Розріджений граф — це граф, у якому кількість ребер $|E|$ є незначною порівняно з максимально можливою кількістю ребер для даної кількості вершин $|V|$ [8].

Для простого неорієнтованого графа з n вершинами максимальна кількість ребер E_{max} обчислюється за формулою:

$$E_{max} = \frac{n(n-1)}{2}$$

Щільність графа — це відношення фактичної кількості ребер до максимальної. Якщо щільність графа прямує до нуля при збільшенні кількості вершин, такий граф називають розрідженим [8].

Матриця суміжності A — це спосіб представлення графа у вигляді квадратної таблиці розміром $n \times n$, де n — кількість вершин графа.

Елементи матриці a_{ij} визначаються наступним чином:

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{якщо між вершинами } v_i \text{ та } v_j \text{ існує ребро,} \\ 0, & \text{якщо ребро відсутнє або } i = j \text{ (для графів без петель).} \end{cases}$$

Матриця суміжності неорієнтованого графа є симетричною відносно головної діагоналі [4].

Матриця Лапласа L — це матричне представлення, яке поєднує інформацію про зв'язки (суміжність) та степені вершин.

Обчислення матриці Лапласа відбувається за формулою:

$L = D - A,$

де D — діагональна матриця степенів, у якій елементи на діагоналі d_{ii} дорівнюють кількості ребер, що входять у вершину v_i [2].

Матриця Лапласа має фундаментальне значення в спектральній теорії, оскільки її спектр (власні значення) відображає такі властивості графа, як кількість компонент зв'язності та структурну міцність мережі.

Для проведення спектрального аналізу було обрано граф-шлях, який позначається як P_n, де n — кількість вершин. У нашому випадку $n = 5$.

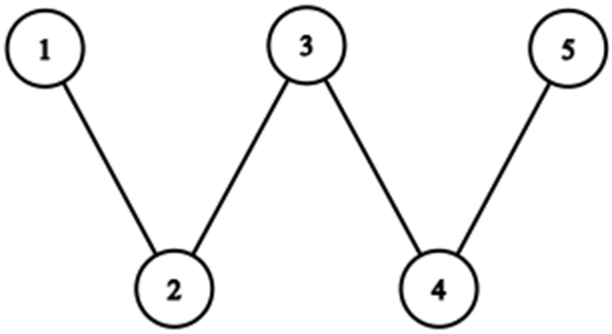

Рис. 1. Графічне представлення досліджуваного графа

Вибір графа P_5 зумовлений його роллю як базового прикладу розрідженого графа. Він дозволяє наочно продемонструвати різницю між спектрами матриці суміжності та матриці Лапласа, а також є зручним для верифікації ручних розрахунків за допомогою програмного коду.

Для проведення спектрального аналізу необхідно сформувати матриці, які описують топологію нашого графа.

Матриця суміжності фіксує всі прямі зв'язки між вершинами . Оскільки наш граф є неорієнтованим і не має петель (вершина не з'єднана сама з собою), головна діагональ матриці складається з нулів, а сама матриця є симетричною.

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

Матриця степенів D відображає кількість ребер, що приєднуються до кожної окремої вершини. Для графа-шляху P_5 ми бачимо, що крайні вершини (1 та 5) мають по одному сусіду, а внутрішні (2, 3, 4) — по два .

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

На основі побудованих матриць D та A отримуємо матрицю Лапласа, яка дозволяє оцінити структурну зв'язність графа. Обчислена матриця має вигляд:

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

Сума елементів у кожному рядку та кожному стовпці дорівнює 0, що є характерною ознакою матриці Лапласа.

Усі діагональні елементи є додатними та відповідають степеням вершин.

Для знаходження спектра кожної матриці розв'язується характеристичне рівняння

$$\det(M - \lambda I) = 0,$$

де M — досліджувана матриця, а I — одинична матриця [2].

Слід зазначити, що спектр графа не завжди однозначно визначає його структуру, оскільки існують коспектральні графи — різні графи з однаковими спектрами [5; 6].

Для графа-шляху P_5 матриця суміжності має тридіагональний вигляд, тому характеристичне рівняння будується як визначник матриці, у якій на головній діагоналі розташовані від'ємні власні значення $(-\lambda)$, а на сусідніх діагоналях – одиниці.

Характеристичний многочлен матриці суміжності A:

$$P_A(\lambda) = -\lambda^5 + 4\lambda^3 - 3\lambda.$$

Спектр матриці суміжності A (власні значення λ_i з точністю до сотих):

$$\mathrm{Sp}(A) = \{-1.73; -1; 0; 1; 1.73\}.$$

Характеристичний многочлен матриці Лапласа L:

$$P_L(\mu) = -\mu^5 + 8\mu^4 - 20\mu^3 + 16\mu^2 - 5\mu$$

Спектр матриці Лапласа L (власні значення μ_i з точністю до сотих):

$$\mathrm{Sp}(L) = \{0; 0.38; 1.38; 2.62; 3.62\}$$

Для підтвердження теоретичних розрахунків та автоматизації пошуку власних значень було розроблено скрипт на мові програмування Python із використанням бібліотеки NumPy.

Використання чисельних методів для обчислення власних значень, зокрема, реалізованих у функціях типу linalg.eigvals, дозволяє ефективно розв’язувати характеристичні рівняння великих степенів. Це є критично важливим для аналізу великих розріджених графів, де аналітичне знаходження спектра є практично неможливим [9].

```python
import numpy as np
# 1. Задаємо матрицю суміжності
A = np.array([
    [0, 1, 0, 0, 0],
    [1, 0, 1, 0, 0],
    [0, 1, 0, 1, 0],
    [0, 0, 1, 0, 1],
    [0, 0, 0, 1, 0]
])
# 2. Розрахунок матриці Лапласа
degrees = np.sum(A, axis=1)
D = np.diag(degrees)
L = D - A
def format_spectrum(matrix):
    # Рахуємо власні значення - основна частина яка розв'язує рівняння
    eigenvalues = np.linalg.eigvals(matrix)
    # Частина оформлення виведення результату
    clean_list = sorted([round(float(val), 2) for val in eigenvalues])
    return ", ".join(map(str, clean_list))
print(f"Матриця D (степені): \n{degrees}")
print("-" * 30)
print(f"Спектр A: [{format_spectrum(A)}]")
print(f"Спектр L: [{format_spectrum(L)}]")
```

Рис. 2. Текст програмного коду

У результаті виконання коду було отримано наступні результати:

```
Матриця D (степені):
[1 2 2 2 1]
------------------------------
Спектр A: [-1.73, -1.0, -0.0, 1.0, 1.73]
Спектр L: [0.0, 0.38, 1.38, 2.62, 3.62]
```

Рис. 3. Результат роботи коду

Програмне обчислення повністю підтвердило результати ручного аналізу:

- **Спектр A:** [-1.73, -1.0, 0.0, 1.0, 1.73] — симетричність значень вказує на двочасткову структуру графа.
- **Спектр L:** [0.0, 0.38, 1.38, 2.62, 3.62] — нульове власне значення підтверджує зв'язність графа.

ВИСНОВКИ

Проведене дослідження підтвердило ефективність спектрального підходу до аналізу розріджених графів. Застосування матриці Лапласа дає змогу не лише описати топологічну структуру мережі, але й оцінити її зв’язність і стійкість за допомогою спектральних характеристик, зокрема числа Фідлера ($\mu_2 = 0.38$).

Використання програмних засобів, зокрема, Python, дозволяє автоматизувати обчислення, забезпечуючи високу точність результатів і можливість масштабування підходу для аналізу складніших графових структур у межах магістерського дослідження.

ДЖЕРЕЛА

1. Abramov, V., Astafieva, M., Boiko, M., Bodnenko, D., Bushma, A., Vember, V., Hlushak, O., Zhyltsov, O., Ilich, L., Kobets, N. and Kovaliuk, T., 2021. Theoretical and practical aspects of the use of mathematical methods and information technology in education and science [online]. URL: https://doi.org/10.28925/9720213284km

2. 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

3. West D. B. Introduction to graph theory. Upper Saddle River, NJ : Prentice Hall, 2001. 588 p.

4. Merris R. Graph theory. Hoboken, NJ : Wiley, 2011. 234 p.

5. Грушка Д., Лебідь В. Побудова коспектральних графів відносно узагальненої матриці суміжності. *Могилянський математичний журнал*. 2018. Том 1. С. 11 – 14. URL: https://doi.org/10.18523/2617-7080i2018p11-14

6. Соболєв В., Соломко В. Побудова пари коспектральних 5-регулярних графів, один з яких має досконале парування, а інший – ні. *Могилянський математичний журнал*. 2021. Том 4. С. 24 – 27. URL: https://doi.org/10.18523/2617-70804202124-27

7. Hołubowski W., Oliynyk B., Solomko V. On the Characterization of the Unitary Cayley Graphs of the Upper Triangular Matrix Rings. *Symmetry*. 17(12), 2180. URL: https://doi.org/10.3390/sym17122180

8. Chung F. R. K., Lu L. Complex graphs and networks. Providence, RI : American Mathematical Society, 2006. 264 p. URL: https://doi.org/10.1090/S0002-9947-05-04023-7

9. Erciyes K. Algebraic graph algorithms. Cham : Springer, 2021. 300 p.