Subpath number v kubičnih grafih: minimizacija in protimeri za grafe L_n

Žiga Obradović, Lovro Levačić

8. december 2025

1. uvod s teorijo (subpath in Konstrukcija Ln) (Oba)
2. Domneva za manjše n do n=18 (število protiprimerov in kakšen protiprimer narisan). Tabela o številu grafov in zakaj sva pognala samo za n = 18 (Žiga)
3. Opis simulated annealing in katere protiprimere najde (za Ln (SA_results)) (Žiga)
4. Domneva za boljše grafe in konstrukcija caterpillar 1 in 2 in drevesa (slike) (Lovro)
5. Primerjava rezultatov za Caterpillar in tree z Ln (tabela za subpath number). Rezultati SA (ni najdel boljših). Za n=20 je Cat2 najboljši (skok med 18, 20 in 22) (Oba)
6. Zaključek

1 Uvod

V projektu obravnavamo problem minimizacije števila preprostih poti v razredu kubičnih grafov, torej grafov, kjer ima vsako vozlišče stopnjo 3. Naj bo $G = (V, E)$ povezan graf. *Subpath number* grafa G, označen s $pn(G)$, definiramo kot število vseh preprostih poti v grafu, pri čemer štejemo tudi trivialne poti (zgolj eno vozlišče).

Preprosta pot je zaporedje različnih vozlišč

$$(v_0, v_1, \ldots, v_\ell),$$

kjer sta vsaki zaporedni vozlišči povezni z robom grafa. Ker je graf neorientiran, poti, ki gredo v nasprotni smeri, štejemo ločeno.

V literaturi je bila postavljena domneva, da za vsako sodo število vozlišč $n \geq 10$ obstaja natanko en kubični graf L_n, ki minimizira subpath number med vsemi kubičnimi grafi na n vozliščih. Znano je, da domneva za dovolj velika n ne drži, ni pa znano, pri katerem najmanjšem n se pojavi prva protimera.

V projektu smo želeli:

- za manjša n domnevo preveriti izčrpno,
- za večja n uporabiti metahevristiko *simulated annealing* in poiskati grafe z manjšim $pn(G)$ od $pn(L_n)$,
- konstruirati naravne družine kubičnih grafov in jih primerjati z L_n.

2 Teoretično ozadje

2.1 Subpath number

Za poljuben povezan graf $G = (V, E)$ definiramo

$$pn(G) = \#\{\text{preprostih poti v } G\},$$

pri čemer kot poti štejemo tudi trivialne poti dolžine 0.

Število poti zelo hitro raste. Za ilustracijo: en sam rob ima $pn(G) = 4$, trikotnik $pn(G) = 15$, kvadrat $pn(G) = 28$, popoln graf K_4 pa $pn(G) = 64$. To nakazuje, da je izračun $pn(G)$ v splošnem eksponenten v številu vozlišč, zato je natančen izračun smiseln predvsem za grafe z zmernim n (nekje do približno 20 vozlišč).

2.2 Družina grafov L_n in domneva

Grafi L_n so definirani za soda $n \geq 10$ in so zgrajeni iz več kopij grafa $K_4 - e$ (popoln graf na štirih vozliščih, iz katerega odstranimo en rob), ki so povezane v linearno verigo. Na koncih verige so dodani t. i. pendant bloki.

Natančneje:

- če je $n = 4q - 2$, je L_n sestavljen iz $(n - 10)/4$ kopij grafa $K_4 - e$, na obeh koncih pa sta pendant bloka na 5 vozlišč;
- če je $n = 4q$, je L_n sestavljen iz $(n - 12)/4$ kopij grafa $K_4 - e$, na koncih pa sta pendant bloka na 5 in 7 vozlišč.

Geometrijsko gledano dobimo verigo blokov $K_4 - e$, ki se na obeh koncih zaključi z nekoliko večjima komponentama (Slika 1).

Domneva, ki jo preverjamo, je:

Domneva 10. *V razredu kubičnih grafov na n vozliščih, kjer je n sodo, je graf L_n edini graf, ki minimizira subpath number.*

Ker je bilo že dokazano, da domneva za dovolj velika n odpove, nas zanima predvsem, pri katerih najmanjših n se to zgodi.

3 Metodologija

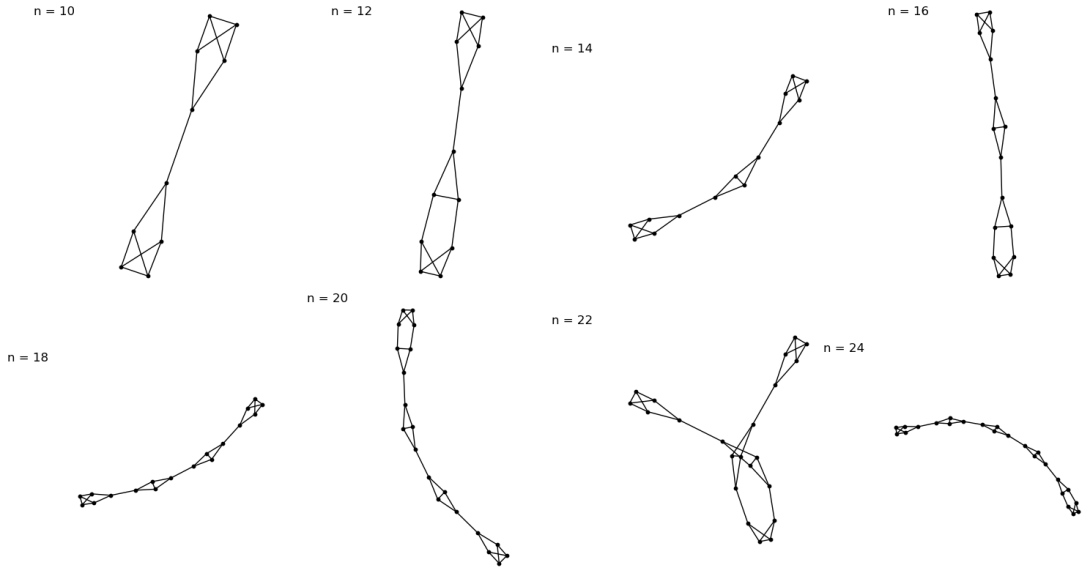
3.1 Konstrukcija družin grafov

Osnovni gradnik v vseh naših konstrukcijah je graf $K_4 - e$, tj. popolni graf na štirih vozliščih, iz katerega odstranimo en rob. V takem grafu imata dve vozlišči stopnjo 2, preostali dve pa stopnjo 3. Ta dva vozlišča stopnje 2 uporabljamo kot "priklopni točki", prek katerih gradnike lepimo skupaj.

V kodi (`funkcije2.py`) smo gradnike poimenovali *levi gradnik*, *srednji gradnik* in *desni gradnik* (ter njihove variante z dvema priklopnima vozliščema). Ideja je vedno ista: na $K_4 - e$ po potrebi dodamo nekaj novih vozlišč, da dobimo pendant blok na 5 ali 7 vozliščih, ki ima eno ali dve priklopni vozlišči. Pomožni funkciji `add_gadget` in `add_gadget2` poskrbita za pravilno oštevilčenje in povezavo gradnikov.

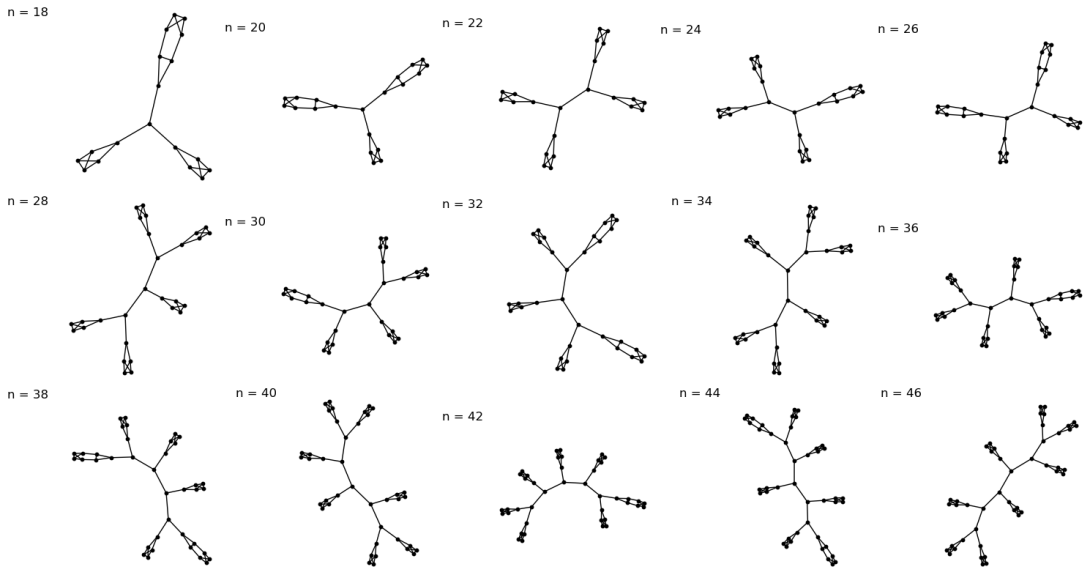
Na tej osnovi definiramo tri družine kubičnih grafov.

Družina L_n. Graf L_n zgradimo v skladu z definicijo: začnemo z levim gradnikom, dodajamo verigo srednjih gradnikov in verigo zaključimo z levim ali desnim gradnikom tako, da dobimo kubični graf na n vozliščih. Za različne ostanke n modulo 4 dobimo različne dolžine verige. Primeri grafov L_n za $n = 10, 12, \ldots, 24$ so na Sliki 1.



Slika 1: Primeri grafov L_n za soda n med 10 in 24.

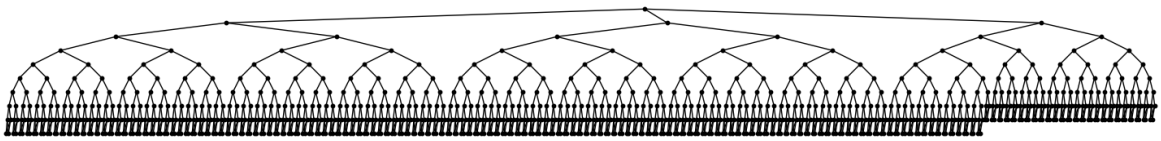
Goseničasta (zvezdasta) družina. Druga konstrukcija (`build_caterpillar`) uporablja iste gradnike, vendar jih ne zložimo v eno verigo, temveč dobimo bolj zvezdasto strukturo. Odvisno od $n \bmod 6$ začnemo z levim ali desnim gradnikom, po potrebi vstavimo še nekaj vmesnih gradnikov, na koncu pa ponovno zaključimo z levim ali desnim gradnikom. Tipičen graf ima nekaj "krakov" z pendant bloki in bolj gosto jedro (Slika 2).



Slika 2: Goseničasti (zvezdasti) grafi za soda n med 18 in 46 (konstrukcija `build_caterpillar`).

Drevesna družina Tree_n**.** Tretja družina izhaja iz dejanskega drevesa. Najprej zgradimo drevo T_k na k vozliščih: v korenu imamo vozlišče stopnje 3, nato pa postopoma razvejamo liste, dokler ne dosežemo želenega števila vozlišč. Na koncu ima drevo veliko listov stopnje 1.

Funkcija `build_tree` potem na vsak list pripne gradnik tipa $K_4 - e$ (z dvema priklopnima vozliščema) in ga z obema priklopnima vozliščema poveže na isti list. S tem dvignemo stopnjo lista iz 1 na 3, novi vrhovi gradnikov pa so prav tako stopnje 3. Tako dobimo kubični graf na n vozliščih, ki ga označimo z Tree_n (Slika 3).



Slika 3: Primer grafa iz družine Tree_n v drevesnem razporedu.

3.2 Izračun subpath number

Za izračun $pn(G)$ smo napisali funkcijo `subpath_number(G)`. Ideja je naslednja:

- vozlišča oštevilčimo z $0, \ldots, n-1$ in množico obiskanih vozlišč predstavimo z bitno masko;
- zgradimo seznam sosedov;
- za vsako vozlišče v zaženemo globinsko iskanje (DFS), ki po grafu sprehaja vse preproste poti, ki se začnejo v v;
- pri vsakem rekurzivnem klicu pot, ki se konča v trenutnem vozlišču, štejemo kot eno (tako dobimo tudi trivialne poti), nadaljujemo pa samo na sosede, ki še niso v maski.

Tako vsako pot preštejemo natanko enkrat. Ker moramo v najslabšem primeru obravnavati ogromno število poti, je časovna zahtevnost eksponentna. V praksi to pomeni, da je izračun še izvedljiv za grafe s približno 20 (oz. kvečjemu 22) vozlišči; za večje grafe ga uporabljamo le v kombinaciji z metahevristiko in omejenim številom korakov.

3.3 Generiranje vseh kubičnih grafov

Za manjša n želimo domnevo preveriti izčrpno, zato potrebujemo generator vseh neizomorfnih povezanih kubičnih grafov na n vozliščih. Uporabimo vgrajeno funkcijo `graphs.nauty_geng` iz SageMath-a (program *geng* iz paketa *nauty*).

V funkciji `cubic_graphs(n)` nastavimo parametre tako, da:

- ima vsak graf natanko n vozlišč,
- je minimalna in maksimalna stopnja vozlišč enaka 3,
- je graf povezan,
- dobimo po en predstavnik iz vsakega izomorfnega razreda.

Za soda n od 4 do 22 smo prešteli, koliko takih grafov dobimo. Rezultati so v Tabeli 1.

Rast je zelo hitra: pri $n = 18$ imamo že več kot 40 000 grafov, pri $n = 20$ več kot pol milijona, pri $n = 22$ pa več milijonov. To je glavni razlog, da smo za $n \geq 20$ prešli na metahevristične metode.

3.4 Metahevristika simulated annealing

Za večja n domneve ne moremo preverjati izčrpno, zato smo uporabili *simulated annealing* (SA). Gre za naključno iskanje, pri katerem na začetku sprejemamo tudi poslabšanja, kasneje pa skoraj samo še izboljšave.

Sosednji graf. Na prostoru povezanih kubičnih grafov definiramo sosesko z eno 2-robno zamenjavo (double-edge swap), implementirano v funkciji `random_cubic_neighbor`. Iz trenutnega grafa G naključno izberemo dva roba $\{u, v\}$ in $\{x, y\}$ s štirimi različnimi vozlišči, oba roba odstranimo in ju nadomestimo z eno od dveh novih paritev ($\{u, x\}, \{v, y\}$ ali $\{u, y\}, \{v, x\}$). Kandidat sprejmemo le, če ne nastanejo zanke ali večrobi in graf ostane povezan ter 3-regularen.

n	# kubičnih grafov
4	1
6	2
8	5
10	19
12	85
14	509
16	4060
18	41301
20	510489
22	7319447

Tabela 1: Število neizomorfnih povezanih kubičnih grafov na n vozliščih.

Energija in temperatura. Energija stanja je $E(G) = pn(G)$. Če ima sosednji graf G' manjšo ali enako energijo, ga vedno sprejmemo. Če je $E' > E$, ga sprejmemo z verjetnostjo

$$\exp\left(-\frac{E' - E}{T}\right),$$

kjer je T trenutna temperatura. Temperaturo znižujemo po eksponentni shemi $T_{k+1} = \alpha T_k$ z $\alpha < 1$. Parameter T_0 izberemo tako, da na začetku razmeroma pogosto sprejemamo poslabšanja, ob koncu pa skoraj nikoli.

SA smo v praksi poganjali z nekaj deset tisoč koraki, kot začetni graf pa smo vzeli bodisi L_n bodisi kak graf iz družine Tree_n.

4 Eksperimentalni rezultati

4.1 Preverjanje domneve za manjša n

Za soda n do 18 smo s funkcijo `cubic_graphs(n)` pridobili vse neizomorfne povezane kubične grafe na n vozliščih in za vsak graf G izračunali $pn(G)$. Za vsak n smo posebej primerjali $pn(G)$ z $pn(L_n)$.

Za $n = 16$ in $n = 18$ smo izračun izvedli v celoti. Pri $n = 16$ smo obdelali vseh 4060 grafov, pri $n = 18$ pa več kot 40 tisoč grafov. V obeh primerih smo našli več kubičnih grafov z manjšim subpath number kot pri L_n. To pomeni, da L_{16} in L_{18} nista minimizatorja, zato domneva v tej obliki že pri teh vrednostih odpove.

4.2 Simulated annealing za večja n

Za $n \geq 20$ izčrpen pregled ni več smiseln, zato smo uporabili SA. Algoritem smo zagnali za več sodih n med 20 in 32, in sicer z različnimi začetnimi grafi (grafi L_n in grafi Tree_n).

Pri nekaterih manjših n (npr. $n = 10, 12, 14$) se je pokazalo, da SA iz L_n ne najde boljšega grafa; energija se v daljših tekih praktično ne spremeni. To je skladno z intuicijo, da so grafi L_n pri majhnih n vsaj lokalno dobri.

Za večja n smo dobili bolj razgibano sliko. Pri nekaterih parametrih je SA precej znižal energijo v prvih fazah in našel grafe z manjšim $pn(G)$ od izbranega začetnega. Kot zanimiv primer izpostavimo $n = 32$, kjer smo začeli v grafu Tree_{32}. V daljšem teku (okoli 20 tisoč korakov) se energija ni znižala, kar kaže, da je Tree_{32} v izbrani soseski zelo dober lokalni minimum. Podobno obnašanje smo opazili tudi pri nekaterih drugih drevesnih konstrukcijah.

Zaradi časovne zahtevnosti izračuna $pn(G)$ pri večjih n rezultatov SA za zdaj razumemo predvsem kot indikativne: dajo nam kandidate za dobre grafe, ne pa nujno globalnih minimizatorjev.

5 Zaključek

V poročilu smo opisali, kako smo pristopili k problemu minimizacije subpath number v razredu kubičnih grafov. Najprej smo implementirali natančen izračun $pn(G)$ in generator vseh kubičnih grafov na danem številu vozlišč. Na tej osnovi smo:

- prešteli vse neizomorfne povezane kubične grafe za soda n do 22,
- za $n = 16$ in $n = 18$ izčrpno primerjali L_n z vsemi kubičnimi grafi in našli več grafov z manjšim subpath number,
- konstruirali dve dodatni družini kubičnih grafov (goseničasto družino in drevesno družino Tree_n),
- za večja n uporabili simulated annealing in preverili, ali lahko iz danega začetnega grafa pridemo do grafa z manjšim $pn(G)$.

Glavno sporočilo je, da grafi L_n že pri razmeroma majhnih n niso minimizatorji subpath number med vsemi kubičnimi grafi. Za večja n se kombinacija konstrukcijskih družin in SA izkaže za uporaben pristop: omogoča nam, da vsaj približno raziskujemo prostor kubičnih grafov, čeprav natančen izračun $pn(G)$ ostaja ozko grlo.

V nadaljevanju bi bilo zanimivo poskusiti še z drugimi metahevristikami (npr. tabu iskanjem ali genetskimi algoritmi) in hkrati poiskati bolj pametne aproksimacije za $pn(G)$, da bi lahko obravnavali tudi grafe z bistveno več vozlišči.