

# $\sigma$ -irregularity vs. total $\sigma$ -irregularity

Nejc Ševerkar & Anja Trobec

6. december 2019

# Kazalo

<b>1</b>	<b>Uvod</b>	<b>2</b>
1.1	Naloge . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Osnovna Teorija</b>	<b>2</b>
2.1	Maksimalna Stopnja Naraščanja . . . . .	2
2.2	Nepovezani Grafi . . . . .	2
<b>3</b>	<b>Ideja Iskanja Optimalnih Grafov</b>	<b>3</b>
3.1	Metahevrstike . . . . .	3
3.2	Simulated Annealing . . . . .	3
<b>4</b>	<b>Reševanje Problema</b>	<b>3</b>
4.1	Majhni grafi . . . . .	3
4.2	Večji grafi . . . . .	3
4.3	Kvadratična stopnja naraščanja . . . . .	4
4.4	Hipoteza o stopnjah vozlišč . . . . .	6
4.5	Distribucija stopenj vozlišč . . . . .	6
<b>5</b>	<b>Opisi Implementiranih Algoritmov</b>	<b>7</b>

# 1 Uvod

V projektni nalogi se bova ukvarjala z meritvijo iregularnosti enostavnih neusmerjenih grafov z dvema na videz podobnima metodama,  $\sigma$ -irregularity in total  $\sigma$ -irregularity, definiranimi kot

$$\sigma(G) = \sum_{(u,v) \in E(G)} (d_u - d_v)^2 \quad \text{in} \quad \sigma_t(G) = \sum_{(u,v) \in V(G)} (d_u - d_v)^2$$

Cilj naloge je maksimizacija razmerja

$$\sigma_r(G) = \frac{\sigma_t(G)}{\sigma(G)}$$

pri danem redu grafa  $n \in \mathbb{N}$ . Ker nas komponentno regularni grafi, za katere to razmerje ni definirano, torej v primeru  $\sigma(G) = 0$ , ne zanimajo, definiramo  $\sigma_r(G) = 0$ .

V nadaljevanju bomo zaradi preprostosti prostor grafov na  $n$  vozliščih označevali z  $\mathcal{G}_n$ .

## 1.1 Naloge

Najina glavna naloga je poiskati maksimalno razmerje  $\sigma_r(G)$  za  $G \in \mathcal{G}_n$ . Najprej bova to počela za majhne grafe, potem pa bova z drugačnimi metodami problem reševala še za grafe višjega reda. Po prvih oprijemljivih ugotovitvah naju čakajo naslednje naloge.

Za optimalne grafe je dana hipoteza, da so krajišča njihovih povezav vedno na absolutni razliki 1.

To bova preverila z izračunom števila vozlišč za katera to ne velja pri vsakem optimalnem grafu in ta grafično prikazala.

Naslednja stvar, ki pa jo bova morala preveriti je ta, da je  $(\max_{G_n \in \mathcal{G}_n} \sigma_r(G_n))_n$  reda  $O(n^2)$ . Poiskati bova morala še ustrezno konstanto  $c$  s katero bo aproksimacija  $cn^2$  najustreznejša.

# 2 Osnovna Teorija

## 2.1 Maksimalna Stopnja Naraščanja

Ker bomo za analizo in primerjavo potrebovali stopnjo naraščanja zaporedja  $(\max_{G_n \in \mathcal{G}_n} \sigma_r(G_n))_n$  bo koristno izračunati zgornjo mejo. Poskušajmo maksimizirati vrednost  $\sigma_t(G)$  za dani graf  $G$ .

Po premisleku se lahko prepričamo, da bo za graf  $G \in \mathcal{G}_n$  največja vrednost  $\sigma_t(G)$  dosežena, če bodo vsa vozlišča stopnje  $n - 1$  ali  $0$ , saj bo tako kvadratična razlika med njimi največja. Zanima nas torej število vozlišč s stopnjo  $n$ ,  $x$ , ki maksimizira funkcijo  $f(x) = x(n - x)$ , saj ta predstavlja število kombinacij parov vozlišč s stopnjo  $n - 1$  in  $0$ . Z odvajanjem poiščemo maksimum, ki je dosežen pri  $n/2$ , zato velja

$$\sigma_r(G) = \frac{\sigma_t(G)}{\sigma(G)} \leq \sigma_t(G) \leq \frac{n}{2} \frac{n}{2} (n - 1)^2 = O(n^4).$$

Sledi, da je zgornja meja naraščanja  $O(n^4)$ .

## 2.2 Nepovezani Grafi

Ker sva opazila, da družina nepovezanih grafov doseže maksimalno stopnjo naraščanja, se lahko po konstrukciji družine takšnih grafov  $G_n$  za  $\forall n \in \mathbb{N}$  osredotočimo samo na povezane grafe.

Konstrukcija grafov  $G_n$ , za katere ima zaporedje  $(\max_{G_n \in \mathcal{G}_n} \sigma_r(G_n))_n$  stopnjo naraščanja  $O(n^4)$  je sledeča. Vzamemo  $n/2$  vozlišč in iz njih konstruiramo poln graf medtem, ko v preostalih  $n/2$  vozliščih povežemo 3 vozlišča z dvema povezavama. Po kratkem premisleku lahko formuliramo naslednjo neenakost.

$$\sigma_r(G_{2n}) = \frac{\sigma_t(G_{2n})}{\sigma(G_{2n})} = \frac{\sigma_t(G_{2n})}{2} > \frac{(n - 3)n(n - 1)^2}{2} = \Theta(n^4)$$

S tem sva zaključila preučevanje nepovezanih grafov.

## 3 Ideja Iskanja Optimalnih Grafov

Problem bova reševala v Pythonu in si občasno pomagala s knjižnjico Networkx, s katerim bodo grafično predstavljeni grafi.

### 3.1 Metahevrstike

Za optimalno vrednost  $\sigma_r$  na grafih reda  $n$  bi morala testirati vse neizomorfne grafe tega reda, kar pa bi zahtevalo testiranje vseh grafov  $G \in \mathcal{G}_n$ , katerih pa je  $\Omega\left(2^{\binom{n}{2}}\right)$ . Če upoštevamo, da izračun  $\sigma_r(G)$  zahteva  $\Omega(n^2)$  operacij, dobimo skupno časovno zahtevnost  $\Omega\left(n^2 2^{\binom{n}{2}}\right)$ . Očitno ta zahtevnost predstavlja problem že za grafe reda 10, torej bova morala poiskati alternativni pristop v obliki metahevrstičnih algoritmov.

Ideja bo torej sistematično postopati po prostoru povezanih enostavnih grafov reda  $n$  in tako iskati aproksimacijo grafa  $G$ , ki maksimizira vrednost  $\sigma_r$  na tem prostoru.

Za učinkovito delovanje teh procesov pa potrebujemo definirati ustrezno topologijo na prostoru, torej podati pojem bližine, saj jo zahteva večina hevrstičnih algoritmov.

To bova naredila med drugim tudi z zaporednim dodajanjem ali odstranjevanjem naključnih povezav v danem grafu, pri čimer morava paziti, da ohranja povezanost grafa. Torej z drugimi besedami ne odstraniva mostov.

Za te namene sva napisala knjižnjico, ki poda podporo za izbiro teh povezav in splošno generiranje naključnih povezanih grafov, skupaj z nekaterimi drugimi orodji.

### 3.2 Simulated Annealing

Eden od algoritmov, ki naj bi rešil ta problem je *Simulated Annealing*, katerega implementacija je končana. Algoritem je uporabljen za iskanje vseh optimalnih grafov v nadaljevanju naloge in parametriziran s skupino parametrov, ki bo opisana kasneje.

## 4 Reševanje Problema

### 4.1 Majhni grafi

Za majhne grafe sva našla že generirane povezane neizomorfne grafe do stopnje 9 in poiskala vrednosti

$$(M_n)_n = \left( \max_{G_n \in \mathcal{G}_n} \sigma_r(G_n) \right)_{n=2}^9,$$

ki so zapisane v naslednji tabeli.

$n$	$M_n$
2	0
3	1
4	3
5	3
6	5
7	13
8	19
9	14.5

Grafov na višjem številu vozlišč je preveč za posamično analizo, torej se lotimo implementacije *Simulated Annealing* algoritma.

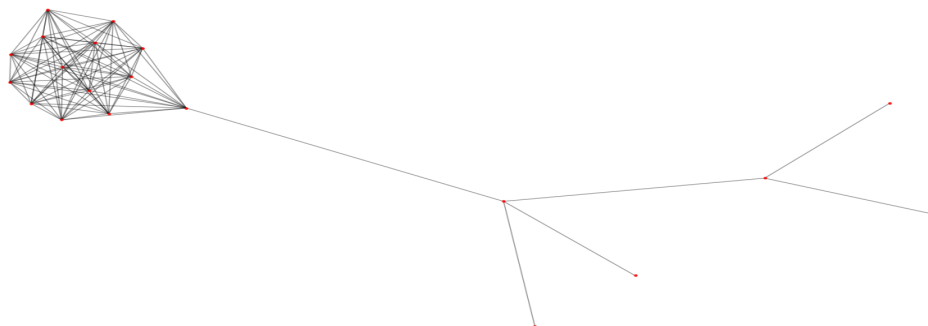
### 4.2 Večji grafi

Med večjimi grafi bomo optimume iskali s pomočjo algoritma SA (*Simulated Annealing*). Ta prejme 3 pomembne argumente: število vozlišč, število simulacij in definicijo okolice grafa.

Okolice so lahko poljubne in se delijo na lokalne in globalne. Lokalne okolice spreminjajo graf po povezavah, globalne pa konstruirajo nov graf, ki ima morda kakšne podobne karakteristike kot prejšnji.

Izkazalo se je, da za velike grafe aplikacija lokalnih okolic ni dovolj. Zato sva iskanje izvedla v dveh delih. Prvi del je klicanje SA na globalni okolici, nakar pa še na lokalni, saj ta naredi na tem male optimizacije, ki jih globalne spremembe niso bile zmožne doseči. Lokalno izboljšavanje nastopi v obliki minimizacije  $\sigma(G)$  z osredotočanjem na povezave, kjer je razlika med  $d_G(u)$  in  $d_G(v)$  za neka  $uv \in E(G)$  največja.

Po nekaj testih je začela biti očitna struktura optimalnih grafov in sicer njihova oblika je sestavljena iz dveh delov. V prvem nastopa polni podgraf, na drugem pa so povezave redke in je zato podgraf blizu drevesu, kot lahko vidimo na spodnji sliki grafa na 20-ih vozliščih.



Ta sestava je primerna, saj razlike med polnim grafom in redkim prispevajo k vrednosti  $\sigma_t$ , medtem ko vrednost  $\sigma$  ostaja enaka, saj so v obeh delih grafa sosednje povezave podobnih stopenj. To je skoraj res, a naletimo na posebno povezavo, ki je prisotna v teh grafih in to je most med polnim in praznim podgrafom. Brez te povezave bi imeli stopnjo naraščanja  $O(n^4)$ , a njena prisotnost znatno povišuje vrednost  $\sigma$ .

Naš problem se po tej analizi prevede v to, kako 'zvezno', torej s čim manjšo razliko stopenj sosednjih povezav, povezati poln podgraf z redkim. Za to potrebujemo veliko vozlišč, ki bodo poskrbeli za 'zvezno' pot med tima podgrafoma, a jih hkrati potrebujemo malo povezane, da maksimizirajo  $\sigma_t$  vrednost, saj se ta primerja z nastalim polnim grafom. Problem nam torej predstavljata tudi spodbijajoči optimizaciji  $\sigma$  ter  $\sigma_t$ .

V nadaljevanju si bomo pogledali katero optimizacijo favorizirajo optimalni grafi.

### 4.3 Kvadratična stopnja naraščanja

Preveriti morava, če je stopnja naraščanja zaporedja  $(\max_{G_n \in \mathcal{G}_n} \sigma_r(G_n))_n$ , za  $n \in \mathbb{N}$  res  $O(n^2)$ . Tedaj pa poiskati ustrezno konstanto  $c \in \mathbb{R}$ , ki se naraščanju najbolj prilega.

Predpostavimo, da smo optimum izračunali za  $n$  grafov in označimo

$$X(n, p) = (1^p, 2^p, \dots, n^p)^T \quad \text{in} \quad a = (a_1, a_2, \dots, a_n)^T$$

vektorja v  $\mathbb{R}^n$ , kjer  $a_i$  predstavlja dobljeni optimalni  $\sigma_r(G_i)$  za graf  $G_i \in \mathcal{G}_i$ . Problem pri danem  $p \in \mathbb{R}^+$  zahteva rešitev linearne sistema

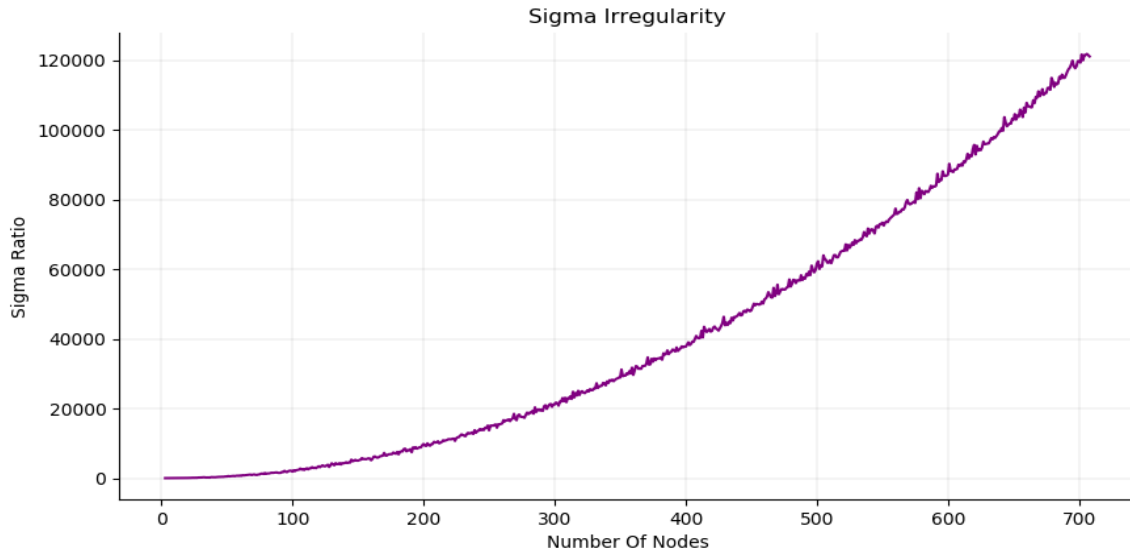
$$X(n, p)c = a.$$

Ta sistem seveda ne bo rešljiv, iskanja aproksimacije pa se bomo lotili z metodo najmanjših kvadratov, torej minimum 2-norme razlike obeh strani bo dosežen pri

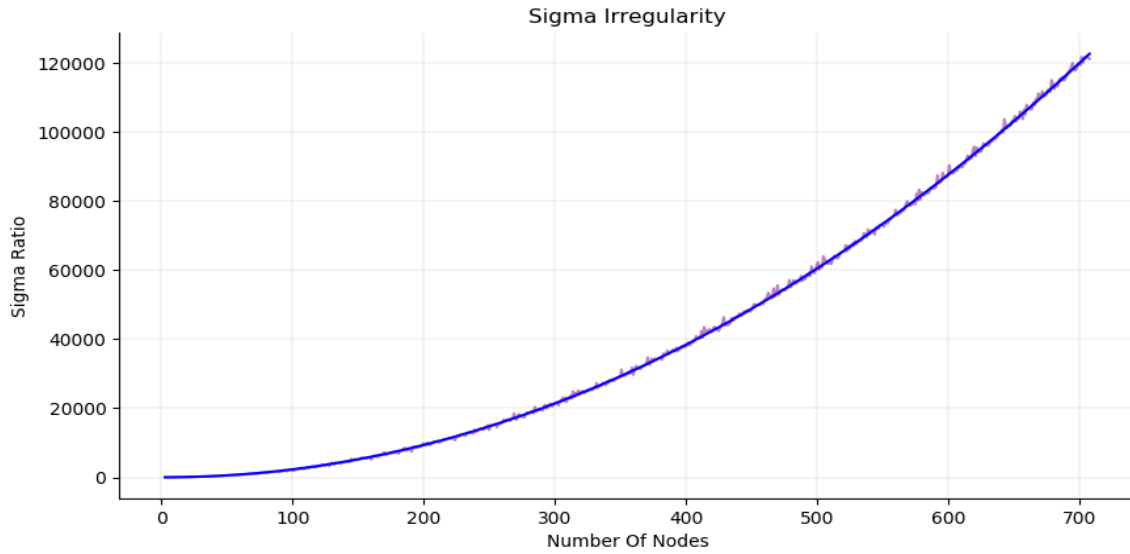
$$c = \frac{\langle a, X(n, p) \rangle}{\|X(n, p)\|_2^2}.$$

Najboljšo aproksimacijo naraščanja  $\sigma_r$  bomo poiskali z diskretizacijo  $D \subset [0, 4]$  in za  $\forall p \in D$  izračunali prej definirani  $c$ , na koncu pa izbrali tisto kombinacijo  $(c, p)$ , za katero je  $\|cX(n, p) - a\|_2$  najmanjši.

Tako dobimo po testiranju na vozliščih od 3 do 700 naslednji graf.



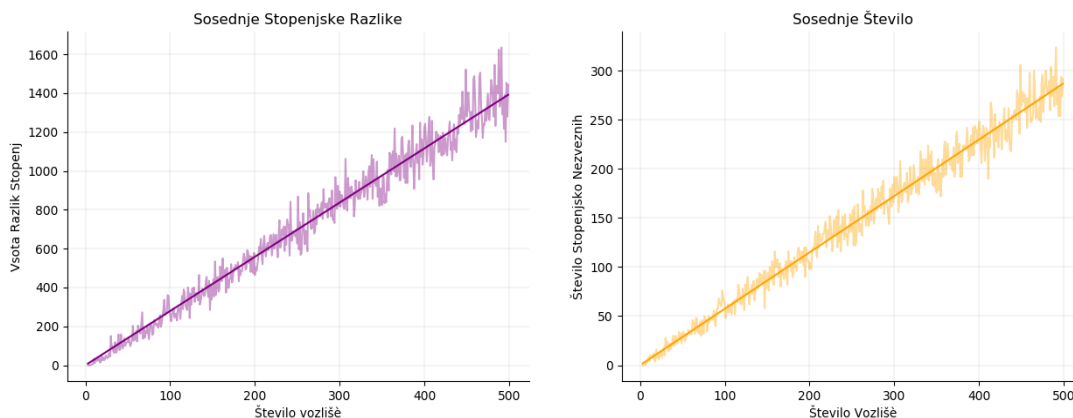
Po prej opisani metodi dobimo par  $(c, p)$ , za katerega  $cn^p$  najbolje opisuje  $\sigma_r$  naraščanje. Ta par je izračunan kot  $(0.1932, 2.0360)$  in njegova aproksimacija naraščanja je prikazana na naslednjem grafu.



Rezultati testiranja močno implicirajo kvadratično naraščanje zaporedja  $\max_{G_n \in \mathcal{G}_n} \sigma_r(G_n)$ , saj pri večjih vzorcih varianca opazno pada, hkrati pa se najboljša polinomska aproksimacija približuje  $n \rightarrow n^2$ .

## 4.4 Hipoteza o stopnjah vozlišč

Hipotezo, ki pravi, da so vsa sosednja vozlišča stopnje, ki se razlikuje za največ 1, bova testirala z izračunom števila parov vozlišč, ki nimajo ustrezne razlike stopenj in seštela še vse njihove razlike. Rezultati, skupaj z linearno aproksimacijo, so opisani na naslednjem grafu.



Naraščanje je predvsem linearno in sicer sta najboljši linearni aproksiciji koeficientov enaki 2.7895 in 0.5749, glede na horizontalno zaporedje slik.

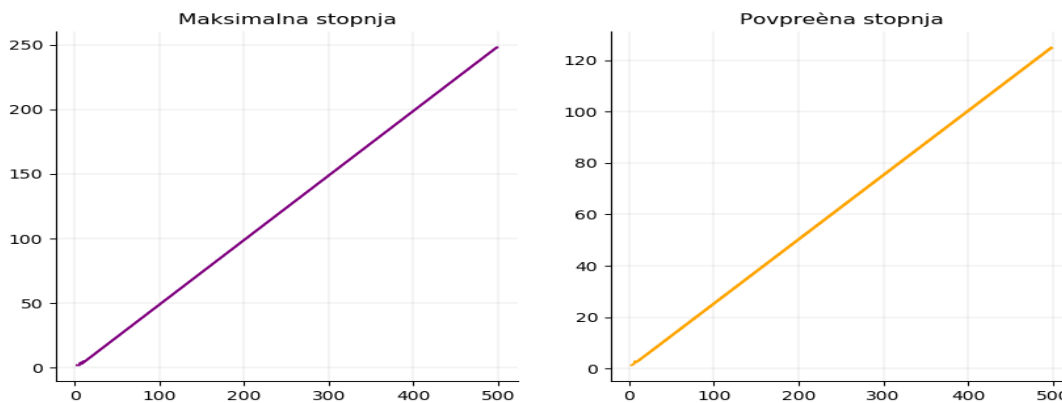
Na levem grafu vidimo, da je vsota stopenj vozišč majhna. Saj je povprečno njena vrednost le trikratnik števila vozlišč, torej se povprečno vozlišči na razliki stopenj večji od 1 razlikujeta v stopnji za 3, kot tudi namiguje koeficient.

Na desnem grafu takoj opazimo, da je naraščanje števila parov vozlišč, ki ne ustrezajo pogoju zelo majhno, saj narašča počasneje kot stopnja vozlišč, čeprav je njeno potencialno naraščanje  $\binom{n}{2}$ . Seveda je rezultat smiseln, saj poskušamo minimizirati  $\sigma$  vrednost, katera pa narašča skupaj z naraščanjem razlik stopenj sosednjih vozlišč.

Vrnimo se nazaj na problem optimalnega povezanja polnega podgrafa s praznim. Sva mnenja, da so rezultati pozitivna indikacija na to, da se ta pot naravno formira na način, ki favorizira minimizacijo  $\sigma$  vrednosti napram maksimizacije  $\sigma_t$  vrednosti. Torej grafi poskušajo poskrbeti za zvezni prehod iz polnega podgrafa k redkemu in za to žrtvujejo nekaj vozlišč, kar pa se na koncu pozna pri majhnih razlikah stopenj.

## 4.5 Distribucija stopenj vozlišč

Ideja bo prikazati minimalne in povprečne stopnje vozlišč pri danem optimalnem grafu na  $n$  vozliščih. Spodaj je prikazan graf, ki prikazuje prej povedano.



Iz slike je razvidno izredno linearno naraščanje maksimalne stopnje vozlišč in sicer za točni faktor  $\frac{1}{2}$ , kar nas spomni na obliko optimalnih grafov, kateri imajo poln podgraf, vpet na  $\frac{n}{2}$  vozliščih.

## 5 Opisi Implementiranih Algoritmov

Podali bomo kratek opis vseh vključenih algoritmov v napisani knjižnici in njihovo časovno zahtevnost. V tabeli bo  $n$  označeval število vozlišč grafa,  $m$  pa število povezav.

Ime	Kratek Opis	T(n, m)
<i>sigma</i>	izračuna vrednost $\sigma(G)$ na danem grafu $G$	$O(n + m)$
<i>sigma_t</i>	izračuna vrednost $\sigma_t(G)$ na danem grafu $G$	$O(n^2)$
<i>sigmaRatio</i>	izračuna vrednost $\sigma_r(G)$ na danem grafu $G$	$O(n^2)$
<i>sigmaUpdate</i>	izračuna razliko $\sigma$ po odstranjeni ali dodani povezavi v $G$	$O(n)$
<i>sigmaArgmax</i>	vrne povezavo, ki maksimizira $\sigma$ vrednost v danem grafu $G$	$O(n + m)$
<i>randomConnectedGraph</i>	konstruira naključni graf na $n$ vozliščih	$O(n^2 \log^*(n))$
<i>randomTree</i>	konstruira naključno drevo na $n$ vozliščih	$O(n)$
<i>randomPath</i>	konstruira naključno pot na $n$ vozliščih	$O(n)$
<i>randomSubtree</i>	poišče naključno poddrevo danega grafa	$O(n)$
<i>randomSigmaOptAprox</i>	konstruira graf, ki naj bi bil grob približek optimalnemu	$O(n^2)$
<i>nonBridges</i>	poišče $k$ povezav, ki niso mostovi v danem grafu	$O(m + n)$
<i>nonEdges</i>	poišče $k$ povezav, ki niso vključene v dani graf	$O(n^2)$
<i>localBasicNeighbor</i>	graf spremeni z dodajanjem in odstranjevanjem povezav	$O(n^2)$
<i>globalBasicNeighbor</i>	uporabi <i>randomConnectedGraph</i> za konstrukcijo okolice	$O(n^2 \log^*(n))$
<i>globalTwoPartNeighbor</i>	uporabi <i>randomSigmaOptAprox</i> za konstrukcijo okolice	$O(n^2)$
<i>maxSigmaRatio_annealing</i>	uporabi Simulated Annealing za iskanje optimalnega grafa	odvisno od argumentov