UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

Finančna matematika

Oskar Težak, Sara Šega

Laplacian integral graphs

Skupinski projekt

Poročilo

Mentorja: doc. dr. Janoš Vidali,
prof. dr. Riste Škrekovski

Ljubljana, december 2024

1 Opis problema

Poiskati želimo čim več enocikličnih in dvocikličnih grafov, katerih Laplaceove lastne vrednosti so cela števila. Za grafe nižjega reda to storimo z izčrpno metodo, za grafe višjega reda moramo uporabiti stohastično metodo. Najti želimo metodo oz. vzorec za generiranje Laplaceovih celoštevilskih grafov.
Naj bo $G(V, E)$ graf z množico vozlišč V, $|V| = n$ in množico povezav E, $|E| = m$.
Definiramo Laplaceovo matriko $L = D - A$, kjer je D $n \times n$ diagonalna matrika, katere diagonalni členi so stopnje vozlišč grafa G, A pa je $n \times n$ matrika sosednosti. Elementi Laplaceove matrike L so torej

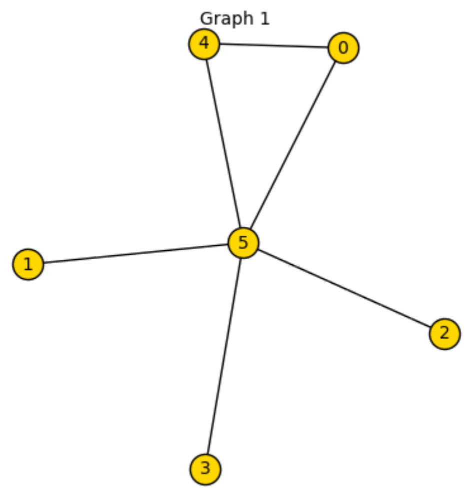
$$l_{i,j} = \begin{cases} \deg(v_i), & \text{če } i = j, \\ -1, & \text{če } i \neq j \text{ in } v_i \text{ je soseden z } v_j, \\ 0, & \text{sicer.} \end{cases}$$

Lastne vrednosti matrike L so $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n$. Če so vse lastne vrednosti pozitivne, pravimo, da je graf G z matriko L Laplaceov celoštevilski.

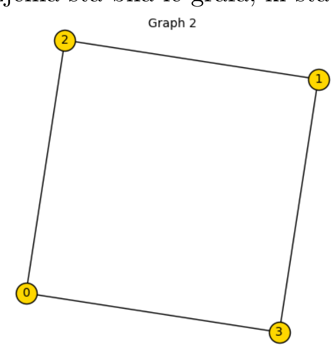
2 Generiranje enocikličnih Laplaceovih celoštevilskih grafov

Za generiranje povezanih enocikličnih grafov sva uporabila funkcijo *nauty geng* in dejstvo, da za povezane enociklične grafe velja, da je njihovo število vozlišč enako številu povezav. S funkcijo $is\_laplacian\_integer\_graph(G)$ sva potem preverjala, kateri izmed enocikličnih grafov imajo celoštevilske Laplaceove lastne vrednosti. To sva uporabila na manjših grafih (do 10 vozlišč) in opazila, da so Laplaceovi tisti, ki imajo eno centralno vozlišče, ki je del cikla, vsa vozlišča, ki niso del cikla, pa so tudi povezana s tem centralnim vozliščem. V splošnem bi njihova Laplaceova matrika bila: $L = \begin{bmatrix} n-k & -1 & -1 & & \cdots & & -1 \\ -1 & 2 & -1 & & & & \\ -1 & -1 & \ddots & \ddots & & & \\ & & \ddots & 2 & & & \\ \vdots & & & & 1 & & \\ & & & & & \ddots & \\ -1 & & & & & & 1 \end{bmatrix}$.

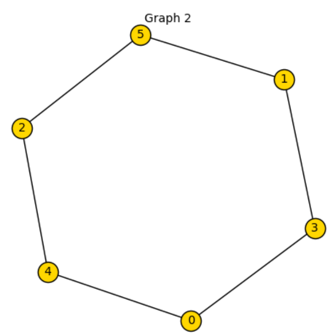
Primer 1. *Enocikličen celoštevilski Laplaceov graf s 6 vozlišči.*



Izjema sta bila le grafa, ki sta imela vsa vozlišča vključena v cikel:



Slika 1: Graf s 4 vozlišči



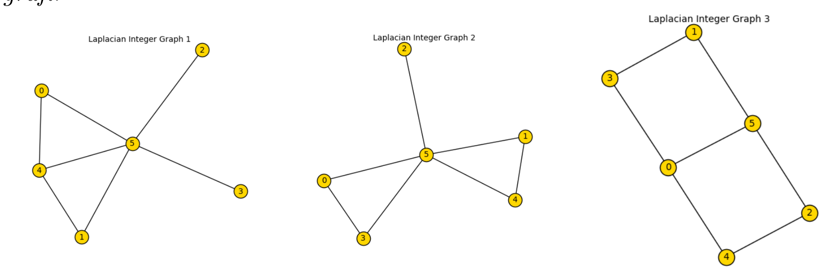
Slika 2: Graf s 6 vozlišči

Opazko glede oblike sva želela preveriti v datoteki *shape_hypotesis.ipynb*. Generirala sva enociklične grafe s centralnim vozliščem, in sicer tako, da sva v poljubnem ciklu izbrala centralno vozlišče, nato pa dodajala vozlišča, ki so bila vsa povezana s centralnim vozliščem. Za generirane grafe sva preverila celoštevilskost lastnih vrednosti in na podlagi najinih testiranj ugotovila, da hipoteza o takšni obliki velja le za enociklične grafe, ki imajo cikel dolžine 3.
Za iskanje enocikličnih Laplaceovih celoštevilskih grafov z večjim številom vozlišč sva uporabila stohastično metodo. Najprej sva napisala funkcijo, ki generira enociklične grafe, nato pa sva s funkcijo *unicyclic_laplacian_integer_graph_stohastic* preverila, kateri izmed njih so Laplaceovi celoštevilski. Funkcijo sva testirala tako, da sva za grafe z 10 do 100 vozlišči generirala največ 10000 enocikličnih grafov in za te preverila, koliko je celoštevilskih Laplaceovih. Izkazalo se je, da ni bil nobeden.

3 Generiranje dvocikličnih Laplaceovih celoštevilskih grafov

Podobno kot pri enocikličnih grafih, sva tudi v tem primeru najprej ustvarila funkcijo, ki generira dvociklične grafe in jih potem testirala, če so celoštevilski Laplaceovi. To funkcijo sva uporabila na grafih z majhnim številom vozlišč.

Primer 2. *Za dvocikličen graf s 6 vozlišči obstajajo trije celoštevilski Laplaceovi grafi.*

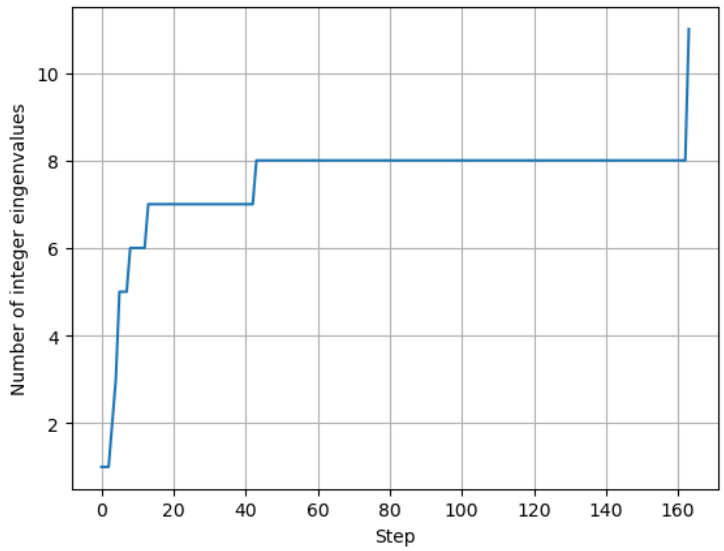


Za večje grafe sva uporabila stohastično metodo, in sicer sva najprej generirala dvociklične grafe (ustvarimo 2 poljubna cikla in ju potem povežemo), potem pa preverjamo, ali imajo celoštevilske lastne vrednosti. Zopet se je po testiranju izkazalo, da so celoštevilski Laplaceovi grafi redki, saj med dvocikličnimi grafi z 10 do 100 vozlišči, ni bilo nobenega.

4 Generiranje grafov, ki imajo čim več celoštevilskih lastnih vrednosti

Kot je jasno razvidno iz iskanja celoštevilskih Laplacovih grafov so le ti precej redki. Ker pa so grafi takšne oblike zaželjeni sva se lotila iskanja grafov s čim večjim številom celoštevilskih lastnih vrednosti. Problema sva se lotila z metodo naključnega dodajanja in odstranjevanja povezav med vozslišči, začenši z nekim naključnim enocikličnim grafom. Ker gre zopet za stohastičen proces algoritem ne konvergira vedno (oz zelo malokrat) k grafu z samimi celoštevilskimi lastnimi vrednostmi. Je pa precej dober prikaz kako lahko konstruiramo grafe željene oblike.

Primer 3. *Konvergenca algoritma na 11 vozliščih.*



5 Rezultati

Celoštevilski Laplacovi grafi so prisotni na mnogih področij od teorije grafov, kemije, fizike do strojnega učenja. V nalogi sva raziskala obnašanja teh grafov, kako in v kakšnih vzorcih se pojavlajjo. Izkaže se, da je grafov, ki bi imeli same celoštevilske lastne vrednosti malo, lahko pa precej enostavno konstruiramo take grafe, ki bi imeli čim več takih lastnih vrednosti. Vse algoritme torej postopke in dokaze zgoraj omenjenih ugotovitev lahko najdemo na https://github.com/oskartezak/Laplacian-integral-graphs/tree/main.