

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

SPEKTRÁLNA TEÓRIA GRAFOV

BAKALÁRSKA PRÁCA

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

SPEKTRÁLNA TEÓRIA GRAFOV

BAKALÁRSKA PRÁCA

Študijný program: Informatika
Študijný odbor: 2508 Informatika
Školiace pracovisko: Katedra informatiky
Vedúci bakalárskej práce: doc. RNDr. Martin Mačaj, PhD.

Bratislava, 2013

Anton Koval'



Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

Meno a priezvisko študenta: Anton Koval'
Študijný program: informatika (Jednoodborové štúdium, bakalársky I. st., denná forma)
Študijný odbor: 9.2.1. informatika
Typ záverečnej práce: bakalárska
Jazyk záverečnej práce: slovenský
Sekundárny jazyk: anglický

Názov: Spektrálna teória grafov

Cieľ: Naštudovať a na konkrétnych príkladoch ilustrovať využite spektrálnych metód pri skúmaní silne regulárnych grafov

Vedúci: doc. RNDr. Martin Mačaj, PhD.

Katedra: FMFI.KAGDM - Katedra algebry, geometrie a didaktiky matematiky

Vedúci katedry: prof. RNDr. Pavol Zlatoš, PhD.

Spôsob sprístupnenia elektronickej verzie práce:
bez obmedzenia

Dátum zadania: 25.10.2012

Dátum schválenia: 30.10.2012

doc. RNDr. Daniel Olejár, PhD.
garant študijného programu

.....
študent

.....
vedúci práce

Pod'akovanie

Chcel by som sa poďakovať môjmu vedúcemu doc. RNDr. Martinovi Mačajovi, PhD. za výber témy, jeho pomoc, inšpiratívne rady a dohľad nad mojou činnosťou.

Abstrakt

Témou bakalárskej práce je využitie spektrálnych metód pri skúmaní silne regulárnych grafov. Prvá časť práce obsahuje úvod do spektrálnej teórie grafov, konkrétne silne regulárnych grafov a ich vlastností. Známe výsledky pre silne regulárne grafy tvoria druhú časť práce. V poslednej časti sme navrhli a implementovali vlastnú metódu hľadania silne regulárnych grafov s konkrétnymi parametrami (25, 12, 5, 6), kde využívame aplikácie výsledkov z druhej časti práce.

KEÚČOVÉ SLOVÁ: spektrálna teória grafov, silne regulárne grafy

Abstract

In this work, application of spectral methods in strongly regular graphs is studied. First part of our work contains introduction to spectra graph theory, specifically strongly regular graphs and their properties. In the second part, we present known examples of strongly regular graphs. In the last part, we propose and use our own method of finding strongly regular graphs with parameters $(25, 12, 5, 6)$.

KEYWORDS: spectral graph theory, strongly regular graph

OBSAH

Úvod	1
1 Základné definície a vety	2
1.1 Teória grafov	2
1.2 Vlastnosti matice susednosti	3
2 Silne regulárne grafy	5
2.1 Definícia	5
2.2 Základné vlastnosti	6
2.2.1 Komplement	6
2.2.2 Závislosť parametrov	7
2.2.3 Integrálne kritérium	9
2.3 Typy	10
3 Výsledok D. de Caena	12
4 Cieľ práce	16
4.1 Popis metódy	17
5 Implementácia a výsledky metódy	20
5.1 Implementácia metódy	20
5.1.1 Generovanie a spracovanie regulárnych grafov	20
5.1.2 De Caenov výsledok	21
5.1.3 Systém lineárnych rovníc matice B	23
5.1.4 Gurobi Optimization	24
5.1.5 Vlastný spôsob riešenia	24
5.1.6 Problém izomorfizmu	27

<i>OBSAH</i>	viii
5.2 Výsledok	28
5.3 Odhad pre silne regulárne grafy s parametrami (37, 18, 8, 9)	28
Záver	29
A Lineárna algebra	30
Literatúra	32

Úvod

Spektrálna teória grafov sa zaoberá vzťahmi medzi vlastnosťami grafov, charakteristickým polynómom, vlastnými číslami a vektormi matice susednosti grafov, je to vlastne využitie lineárnej algebry v teórií grafov. Skúmaním vlastností matice susednosti môžeme určiť nielen štruktúru grafu ale aj chromatické číslo grafu. Spektrálna teória grafov sa využíva v oblastiach fyziky, chémie, informatiky ale aj v geografii a sociálnych vedách. Zaujímavou triedou grafov sú silne regulárne grafy so špecifickými spektrálnymi vlastnosťami, ktoré rozoberáme v prvej časti práce. Druhá časť práce sa zaoberá hľadaním silne regulárnych grafov s konkrétnymi parametrami $(25, 12, 5, 6)$, kde sme navrhli vlastnú metódu hľadania takýchto grafov. Naša metóda využíva výsledky z odborného článku [1], pričom sme navrhli vlastný spôsob hľadania špecifických koreňov systému lineárnych rovníc. Výsledky získané našou metódou sme porovnali s už známymi výsledkami a navrhli sme spôsob hľadania zložitejších silne regulárnych grafov.

Kapitola 1

Základné definície a vety

V tejto kapitole sú zhrnuté základné definície a vety, ktoré v práci používame. Prvá časť obsahuje základnú terminológiu z teórie grafov. V druhej časti sú uvedené základné vlastnosti matice susednosti a tvrdenia z lineárnej algebry, ktoré neskôr v práci využívame.

1.1 Teória grafov

Základná terminológia z teórie grafov je intuitívna, vychádzame zo štandardnej notácie.

Graf je usporiadaná dvojica $G = (V, E)$ množín spĺňajúca $E \subseteq \binom{V}{2}$, prvky z E sú dvojprvkové podmnožiny V . Prvky z množiny V nazývame *vrcholy* grafu G a prvky z množiny E nazývame *hrany*. Pri zakreslení grafu bod predstavuje vrchol a čiara medzi bodmi predstavuje hranu.

Počet vrcholov grafu G určuje *stupeň grafu*. Vrchol v je *incidentný* s hranou e ak $v \in e$. Stupeň vrchola v je počet hrán z E incidentných s v . Ak všetky vrcholy G majú rovnaký stupeň k , potom graf G je k -regulárny. Vrcholy, ktoré sú spojené hranou nazývame *susedné*.

Kompletný graf je graf, v ktorom je každý vrchol grafu spojený hranou s každým iným vrcholom grafu. Kompletný graf s n vrcholmi označujeme K_n .

Nech $G = (V, E)$ a $G' = (V', E')$ sú dva grafy. Grafy G a G' nazývame *izomorfné*, ozn. $G \simeq G'$, ak existuje bijekcia $\varphi : V \rightarrow V'$ s $xy \in E \Leftrightarrow \varphi(x)\varphi(y) \in E'$. Izomorfizmus grafu G na seba nazývame *automorfizmus* grafu G .

Ak $G' \subseteq G$ a zároveň graf G' obsahuje všetky hrany $xy \in E$ s $x, y \in V'$, potom graf G' nazývame *indukovaný podgraf* grafu G . *Komplement* \bar{G} grafu G je graf na V s množinou hrán $\binom{V}{2} - E$.

Sled v grafe G , presnejšie $u - v$ sled je striedavá postupnosť vrcholov a hrán tvaru $u = v_0, e_1, \dots, e_n, v_n = v$, kde $e_i = v_{i-1}v_i$. Dĺžku sledu nám určuje číslo n . Ak vrchol u je totožný s vrcholom v , potom $u - v$ sled nazývame *uzavretým sledom*.

Cesta v grafe G je sled, v ktorom sa neopakujú ani vrcholy, ani hrany. *Vzdialenosť* dvoch vrcholov v grafe G je dĺžka najkratšej cesty medzi nimi. *Súvislý graf* je graf, v ktorom existuje cesta z každého vrcholu do každého vrcholu.

Matica susednosti grafu G s n vrcholmi je štvorcová matica $A = A(G) = (a_{i,j})$ stupňa n , ktorej riadky aj stĺpce sú indexované vrcholmi grafu. Pre prvok matice A platí: $a_{i,j} = 1$ práve vtedy, keď vrcholy v_i a v_j sú susedné v grafe G . V opačnom prípade je $a_{i,j} = 0$.

Matica susednosti A pre jednoduchý neorientovaný graf G je symetrická a na diagonále má samé nuly. V našej práci sa zaoberáme len takýmito grafmi.

Vlastné čísla grafu G sú vlastné čísla matice susednosti A . Ak preusporiadame vrcholy v G (priradíme im čísla $1, 2, 3, \dots, n$ v inom poradí) dostaneme maticu susednosti PAP^{-1} , kde P je nejaká permutačná matica. Z lineárnej algebry vyplýva, že vlastné čísla grafu nezávisia od usporiadania vrcholov, resp. *spektrum matice* (množina vlastných čísel) sa nemení.

Ak G je k -regulárny graf, potom jednoduchou úvahou dostaneme rovnosť:

$$AJ = JA = kJ, \quad (1.1)$$

kde štandardne matica J (all-one matrix) označuje maticu, ktorá obsahuje samé jednotky. Z tejto rovnici vyplýva, že matica A má vlastné číslo k s násobnosťou 1.

Existuje zaujímavý vzťah medzi $u - v$ sledom a maticou susednosti, ktorý sa dá ľahko dokázať pomocou matematickej indukcie.

Lema 1.1. *Nech A je matica susednosti grafu G a nech u, v sú vrcholy grafu G . Potom počet $u - v$ sledov s dĺžkou m je rovný $(A^m)_{u,v}$. Počet uzavretých sledov dĺžky m v grafe G je rovný $Tr(A^m)$.*

1.2 Vlastnosti matice susednosti

V tejto časti sú zhrnuté základné vlastnosti matice susednosti pre jednoduchý neorientovaný graf, ktoré vyplývajú z lineárnej algebry. Plné znenia definícií a tvrdení z lineárnej algebry je možné nájsť v Dodatku A.

Matica susednosti A má práve n vlastných čísel, pričom všetky vlastné čísla sú reálne. Hodnosť $h(A)$ matice susednosti A je rovná počtu nenulových vlastných čísel. Ku každému nenulovému vlastnému číslu existuje vlastný vektor matice A .

Vlastné vektory α a β s rôznymi vlastnými číslami matice susednosti A sú ortogonálne (kolmé). Z vlastných vektorov matice susednosti A vieme zostrojiť ortonormálnu bázu.

Nech $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ sú vlastné čísla matice susednosti A , potom platí:

$$\operatorname{tr}(A) = \sum_i \lambda_i \quad (1.2)$$

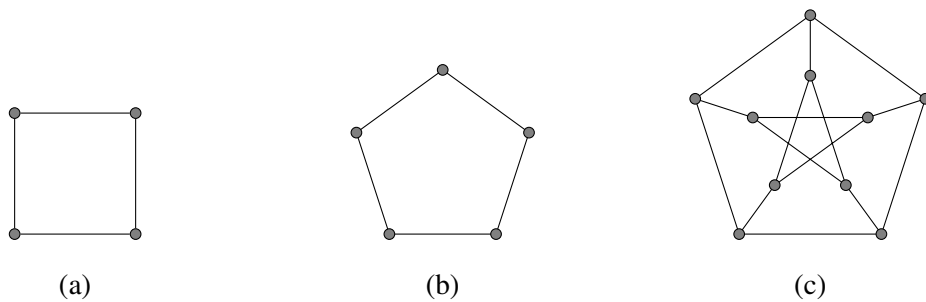
Kapitola 2

Silne regulárne grafy

V tejto kapitole sa zaoberáme silne regulárnymi grafmi, ktoré patria do oblasti spektrálnej teórie grafov, pričom majú zaujímavé algebraické vlastnosti.

2.1 Definícia

Definícia 2.1. *Silne regulárny graf (strongly regular graph) je graf s parametrami (n, k, λ, μ) , kde n je počet vrcholov, k určuje stupeň regulárnosti grafu, ľubovoľné dva susedné vrcholy grafu majú práve λ spoločných vrcholov a ľubovoľné dva nesusedné vrcholy majú práve μ spoločných susedov.*



Obrázok 2.1: Príklady jednoduchých silne regulárnych grafov: a) štvorholník $(4, 2, 0, 2)$, b) pentagon $(5, 2, 0, 1)$, c) Petersonov graf $(10, 3, 0, 1)$

2.2 Základné vlastnosti

V tejto časti sú uvedené základné vlastnosti silne regulárnych grafov: komplement, vzťahy medzi parametrami a dôkaz spektrálnej vlastnosti silne regulárnych grafov, tzv. *integrálne kritérium*.

2.2.1 Komplement

Zaujímavou vlastnosťou silne regulárnych grafov je, že ich komplementy sú tiež silne regulárne grafy.

Veta 2.2. *Nech G je silne regulárny graf s parametrami (n, k, λ, μ) . Potom komplementárny graf \overline{G} (komplement) ku grafu G je tiež silne regulárny graf s parametrami $(n, \overline{k}, \overline{\lambda}, \overline{\mu})$, kde:*

$$\overline{k} = n - k - 1$$

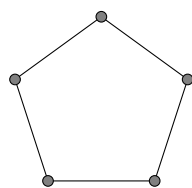
$$\overline{\lambda} = n - 2 - 2k + \mu$$

$$\overline{\mu} = n - 2k + \lambda$$

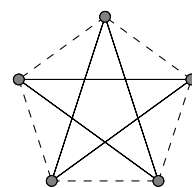
Dôkaz. Z definície komplementu grafu G vyplýva, že \overline{G} je regulárny graf stupňa $\overline{k} = n - k - 1$. Predpokladajme, že x a y sú vrcholy, ktoré sú susedné v grafe \overline{G} a teda nie sú susedné v grafe G . Potom x a y majú práve μ susedov, pričom každý sused má $k - \mu$ iných susedov. Počet všetkých vrcholov v grafe $G \setminus \{x, y\}$, ktoré nesusedia s x ani s y je $n - \mu - 2(k - \mu) - 2$. Po úprave dostaneme: $\overline{\lambda} = n - 2 - 2k + \mu$.

Ak vrcholy x a y sú nesusedné v grafe \overline{G} , potom sú susedné v grafe G a z definície silne regulárneho grafu vyplýva, že majú λ susedov. Použitím podobnej úvahy ako v predchádzajúcom prípade dostaneme, že vrcholy x a y majú $n - 2k + \lambda$ spoločných susedov v grafe \overline{G} a teda $\overline{\mu} = n - 2k + \lambda$. \square

Príklad 2.1. *Pre silne regulárny graf pentagon s parametrami $(5, 2, 0, 1)$ je komplement grafu silne regulárny graf s rovnakými parametrami $(5, 2, 0, 1)$.*



Pentagon $(5, 2, 0, 1)$



Komplement grafu $(5, 2, 0, 1)$

Silne regulárny graf G nazývame *primitívnym* (*primitive*), ak on aj jeho komplement sú súvislé grafy. V opačnom prípade nazývame silne regulárny graf G *neprimitívnym* (*imprimitive*). Nasledujúca lema dokazuje, že existuje iba jedna trieda neprimitívnych silne regulárnych grafov.

Lema 2.3. *Nech G je silne regulárny graf s parametrami (n, k, λ, μ) . Potom nasledujúce tvrdenia sú ekvivalentné:*

- *graf G nie je súvislý graf*
- $\mu = 0$
- $\lambda = k - 1$
- *graf G je izomorfný s grafom mK_{k+1} , pre nejaké $m > 1$*

Dôkaz. Predpokladajme, že graf G je nesúvislý a nech G_1 je jeho komponent. Pre vrchol z G_1 platí, že nemá žiadneho suseda s vrcholom, ktorý nepatrí v G_1 , a preto $\mu = 0$. Ak $\mu = 0$, potom neexistujú nesusedia v grafe G_1 , resp. každý vrchol v grafe G_1 je susedný s každým iným vrcholom v grafe G_1 . Dostávame $\lambda = k - 1$. Z toho potom ľahko vidieť, že graf G je složený z komponentov, ktorými sú kompletne grafy K_{k+1} . \square

Ďalej v našej práci sa zaoberáme iba primitívnymi silne regulárnymi grafmi, pre ktoré platia ďalšie vlastnosti.

2.2.2 Závislosť parametrov

Ďalšou záujímavou vlastnosťou silne regulárneho grafu je závislosť jeho parametrov medzi sebou.

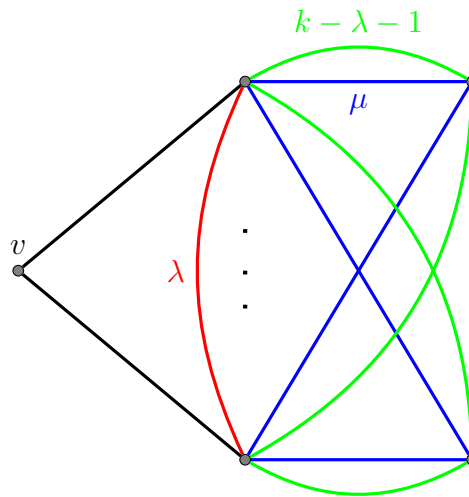
Veta 2.4. *Nech graf je silne regulárny graf s parametrami $G = (n, k, \lambda, \mu)$. Ak $\mu \neq 0$, potom $k(k - \lambda - 1) = (n - k - 1)\mu$.*

Dôkaz. Množinu vrcholov grafu G si rozdelíme do 3 disjunktných skupín nasledujúcim spôsobom. V grafe G si zvolíme jeden ľubovoľný vrchol, ozn. v , ktorý zaradíme do prvej skupiny. Do druhej skupiny zaradíme vrcholy susedné s vrcholom v a v tretej skupine nám ostatnú zvyšné vrcholy grafu G . Je zrejmé, že počet vrcholov v prvej skupine je 1 a v druhej skupine k , pretože graf G je k -regulárny. Stačí nám už len určiť počet prvkov tretej skupiny.

Ak si za dva susedné vrcholy zvolíme vrchol v a ľubovoľný vrchol z druhej skupiny, potom podľa definície silnej regulárnosti grafu musia mať λ spoločných susedov. Spoloční susedia sú vrcholy z druhej skupiny. Počet hrán vychádzajúcich z vrchola druhej skupiny do tretej skupiny je $k - \lambda - 1$, potom počet hrán spolu je $k(k - \lambda - 1)$.

Ak si za dva nesusedné vrcholy grafu G zvolíme vrchol v a ľubovoľný vrchol z tretej skupiny, potom podľa definície musia mať μ spoločných susedov, pričom títo susedia musia byť vrcholy z druhej skupiny.

Celkový počet vrcholov v tretej skupine je $\frac{k(k-1-\lambda)}{\mu}$ a teda všetkých vrcholov $n = 1 + k + \frac{k(k-1-\lambda)}{\mu}$. Jednoduchou úpravou dostaneme vzťah $k(k - \lambda - 1) = (n - k - 1)\mu$. \square



Obrázok 2.2: Zakreslenie silne regulárneho grafu, kde sú vrcholy rozdelené do troch skupín.

Definícia 2.5. Nech G je silne regulárny graf s parametrami (n, k, λ, μ) , v ktorom si vyberieme ľubovoľný vrchol $v \in V(G)$. Potom matica susednosti A grafu G sa dá zapísať takto:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1}^T & 0 \\ \mathbf{1} & A_1 & B^T \\ 0 & B & A_2 \end{pmatrix},$$

kde matica A_1 je matica susednosti podgrafu grafu G indukovaná susedmi vrchola v a matica A_2 je matica susednosti podgrafu grafu G indukovaná nesusedmi (vrcholy s dĺžkou 2) vrchola v .

2.2.3 Integrálne kritérium

Základná spektrálna vlastnosť silne regulárnych grafov hovorí o vlastných číslach a ich násobnostiach.

Veta 2.6 (Integrálne kritérium). *Ak existuje silne regulárny graf s parametrami $G = (n, k, \lambda, \mu)$, potom $\frac{2k+(n-1)(\lambda-\mu)}{\sqrt{(\lambda-\mu)^2+4(k-\mu)}}$ je celé číslo s rovnakou paritou ako $n - 1$.*

Dôkaz. Nech matica A je matica susednosti grafu G . Z definície silne regulárneho grafu a vety (1.1) vieme, že matica A má vlastné číslo k s násobnosťou 1. Ukážeme, že matica A má 2 ďalšie vlastné čísla.

Predpokladajme, že $u - v$ je sled dĺžky 2 v grafe G , pre maticu A to znamená A^2 . V silne regulárnom grafe G to znamená, že vrcholy u a v sú buď rovnaké, susedné alebo nesusedné. Z lemy 1.1 vyplýva, že $u - v$ sled v matica A^2 určuje počet spoločných susedov vrcholov u a v . Ak $u = v$, potom počet spoločných susedov je stupeň vrchola u . Matica, ktorá je komplementom ku matici A (matica nemá hrany, kde matica A hrany má) je rovná $J - I - A$. Potom dostávame vzťah, kde matica A^2 je lineárnou kombináciou matíc J, I, A :

$$A^2 = kI + \lambda A + \mu(J - I - A)$$

Po úprave dostaneme:

$$A^2 = (\lambda - \mu)A + (k - \mu)I + \mu J \quad (2.1)$$

Podľa vety o ortogonálnosti vlastných vektorov 1.2 vyplýva, že ostatné vlastné vektory matice A musia byť ortogonálne s $\mathbf{1}$.

Pre každý vlastný vektor v s vlastným číslom, ozn. θ , ktorý je ortogonálny s $\mathbf{1}$, dostávame $\mu Jv = 0$ a teda platí:

$$A^2v = (\lambda - \mu)Av + (k - \mu)Iv$$

Potom pre každé vlastné číslo $\theta \neq k$ platí:

$$\theta^2 = (\lambda - \mu)\theta + k - \mu$$

Dostali sme kvadratickú rovnicu, ktorá má 2 reálne riešenia (z vety o reálnosti vlastných čísel symetrickej matice 1.2), ozn. r a s :

$$r, s = \frac{\lambda - \mu \pm \sqrt{(\lambda - \mu)^2 + 4(k - \mu)}}{2}$$

Väčšinou predpokladáme, že $r > 0$ a $s \leq 0$. V primitívnych silne regulárnych grafoch vlastné číslo nemôže byť nulové a teda s je záporné číslo. Ako môžeme vidieť tieto 2 vlastné čísla sú závislé na parametroch silne regulárneho grafu.

Ďalej určíme násobnosti vlastných čísel r a s . Násobnosť vlastného čísla r budeme označovať f a násobnosť vlastného čísla s budeme označovať g .

Z vety o báze z vlastných vektorov 1.2 a rovnosti (1.2) vyplývajú 2 rovnice:

$$f + g + 1 = n$$

$$rf + sg + 1k = 0$$

Po úprave:

$$f = -\frac{(n-1)s + k}{r-s} \quad g = \frac{(n-1)r + k}{r-s}$$

Po dosadení hodnôt r a s dostaneme:

$$f = \frac{1}{2} \left((n-1) - \frac{2k + (n-1)(\lambda - \mu)}{\sqrt{(\lambda - \mu)^2 + 4(k - \mu)}} \right)$$

$$g = \frac{1}{2} \left((n-1) + \frac{2k + (n-1)(\lambda - \mu)}{\sqrt{(\lambda - \mu)^2 + 4(k - \mu)}} \right)$$

Násobnosti vlastných čísel sú tiež závislé na parametroch silne regulárneho grafu. Sú to prirodzené čísla, z čoho vyplýva, že druhý výraz v zátvorke je tiež celé číslo s paritou ako $n - 1$. □

Príklad 2.2. Pre Petersenov graf, ktorý má parametre $(10, 3, 0, 1)$ sú vlastné čísla a ich násobnosti:

$$r, s = \frac{-1 \pm \sqrt{9}}{2} = 1, -2 \quad f, g = \frac{1}{2} \left(9 \pm \frac{-3}{\sqrt{9}} \right) = 5, 4$$

Petersenov graf spĺňa integrálne kritérium. Jeho maticové spektrum je: $(-2)^4, 1^5, 3$.

2.3 Typy

Na základe vlastností silne regulárnych grafov môžeme vyjadriť vzťah medzi f a g , pomocou ktorého rozdelíme grafy do dvoch typov:

$$g - f = \frac{2k + (n-1)(\lambda - \mu)}{\sqrt{(\lambda - \mu)^2 + 4(k - \mu)}}$$

- *Konferenčné (conference) grafy* sú také silne regulárne grafy s parametrami (n, k, λ, μ) , pre ktoré platí: $f = g$. Z toho vyplýva, že:

$$2k + (n - 1)(\lambda - \mu) = 0$$

Sú to tiež také silne regulárne grafy, ktoré majú rovnaké parametre ako ich komplementy. Z vlastností 2.4 a 2.2 vyplýva, že sú to silne regulárne grafy s parametrami $\left(n, \frac{(n-1)}{2}, \frac{(n-5)}{4}, \frac{(n-1)}{4}\right)$.

Nekonečná trieda konferenčných grafov sú napríklad *Paley grafy* $P(q)$, kde množina vrcholov je konečné pole $GF(q)$, q je prvočíselná mocnina (prime power) kongruentná s $1 \pmod{4}$. Vrcholy u a v sú susedné práve vtedy, keď ak $u - v$ je nenulový štvorec v $GF(q)$ [2].

Konferenčný graf je prepojený so tzv. *symetrickou konferenčnou maticou* (conference matrix) a preto veľkosť grafu musí byť $1 \pmod{4}$ a zároveň súčet dvoch štvorcov.

Vlastné čísla konferenčnej matice nemusia byť celé čísla narozdiel od druhého typu silne regulárnych grafov. Vlastné čísla r a s s násobnosťami f a g v konferenčných grafov majú tvar:

$$r, s = \frac{-1 \pm \sqrt{n}}{2} \quad f, g = \frac{n-1}{2}$$

Konferenčné grafy sú úplne známe pre malé $n < 30$, konkr. $n = 5, 9, 13, 17, 25, 29$. Pre $n = 21$ a 33 je dokázané, že neexistujú. Pre $n = 37$ je dokázaná existencia takýchto grafov, ale ich počet je neznámy.

- Druhú skupinu tvoria všetky ostatné (primitívne) silne regulárne grafy, pre ktoré platí $f \neq g$. Z toho vyplýva, že $2k + (n - 1)(\lambda - \mu) \neq 0$ a zároveň $\sqrt{(\lambda - \mu)^2 + 4(k - \mu)}$ musí byť perfektný štvorec. *Perfektný štvorec* je číslo, ktorý vznikne druhou mocninou nejakého celého čísla. Kvocient týchto dvoch vzťahov musí byť kongruentný s $n - 1 \pmod{2}$. Z týchto vlastností vyplýva, že vlastné čísla r a s sú celé čísla.

Kapitola 3

Výsledok D. de Caena

V tejto kapitole vychádzame hlavne z odborného článku [1], kde obširnejšie dokážeme tvrdenie a dôsledok tvrdenia.

Definícia 3.1. *Nech M je matica $n \times n$, ktorej riadky a stĺpce sú indexované $[n] = \{1, 2, \dots, n\}$. Nech $T \subseteq [n]$, potom $M[T]$ nám určuje podmaticu matice M , ktorej riadky a stĺpce sú indexované množinou T . Pre úplnosť predpokladáme $M[\emptyset] = 1$. Komplement množiny T budeme označovať $\bar{T} = [n] \setminus T$. Determinant matice M budeme označovať $|M|$.*

Lema 3.2 (Jacobiho identita). *Ak k matici M existuje inverzná matica, ozn. M^{-1} , potom pre ľubovoľné $T \subseteq [n]$ platí:*

$$|M[\bar{T}]| = |M| |M^{-1}[T]| \quad (3.1)$$

Dôkaz. Dôkaz lemy nebudeme uvádzať, pretože vyžaduje vyššie znalosti z teórie matíc (matrix theory). Podrobný dôkaz sa nachádza v [3, str. 52].

Charakteristická matica C ku matici A je $C = xI - A$. V dôkaze nasledujúcej vety sa budeme zaoberať inverznými maticami k maticiam, ktorých koeficienty sú polynómy v neurčitej x . Tieto inverzné matice existujú, ak predpokladáme, že koeficienty sú z poľa $\mathbb{Q}\mathbb{C}[x]$, tj. podielového poľa okruhu polynómov.

Veta 3.3. *Nech G je silne regulárny graf s parametrami (n, k, λ, μ) s maticou susednosti A a nech C je charakteristická matica matice A , tj. $C = xI - A$. Potom pre ľubovoľnú podmnožinu vrcholov T , kde $|T| = t$ platí:*

$$|C[\bar{T}]| = q(x)^{-t} |C| \left| A[T] + (x + \mu - \lambda)I_t + \frac{\mu}{x - k} J_t \right|,$$

kde $q(x) = x^2 + (\mu - \lambda)x + \mu - k$.

Dôkaz. Dosadením charakteristickej matice C do (3.1) dostaneme:

$$|xI_{n-t} - A[\bar{T}]| = |xI_n - A| |(xI_n - A)^{-1} [T]| \quad (3.2)$$

Z rovnice (2.1) vyplýva:

$$A^2 + (\mu - \lambda)A + (\mu - k)I = \mu J \quad (3.3)$$

Umocnením a úpravou charakteristickej matice $C = xI - A$ dostávame:

$$A^2 = C^2 - x^2I + 2xA \quad (3.4)$$

Dosadením (3.4) a vzťahu $A = xI - C$ do (3.3) dostávame:

$$C[C - (2x + \mu - \lambda)I] = (-x^2 - (\mu - \lambda)x - \mu + k)I + \mu J$$

Ak si polynóm $x^2 + (\mu - \lambda)x + \mu - k$ označíme ako $q(x)$, potom môžeme si všimnúť, že korene polynómu nám predstavujú vlastné čísla r, s matice A . Po úprave dostaneme:

$$C[C - (2x + \mu - \lambda)I] = -q(x)I + \mu J,$$

Potom úpravami dostaneme:

$$C^{-1} = [-q(x)I + \mu J]^{-1} [C - (2x + \mu - \lambda)I]$$

Ak ku matici $[-q(x)I + \mu J]$ existuje inverzná matica, potom jej vyrátaním pomocou *Gauss-Jordanovou metódou* dostávame vzťah:

$$-\frac{1}{q(x)}I + \frac{\mu}{q(x)(-q(x) + \mu n)}J$$

Dosadením tohto vzťahu a $C = xI - A$ dostaneme:

$$C^{-1} = \left[-\frac{1}{q(x)}I + \frac{\mu}{q(x)(-q(x) + \mu n)}J \right] [-(x + \mu - \lambda)I + A]$$

Ďalšími úpravami dostaneme:

$$\begin{aligned} q(x)C^{-1} &= \left[I + \frac{\mu}{q(x) - \mu n}J \right] [(x + \mu - \lambda)I + A] \\ &= A + (x + \mu - \lambda)I + \frac{\mu(x + k + \mu - \lambda)}{q(x) - \mu n}J \end{aligned}$$

Z vety 2.4 máme vzťah: $k(k - \lambda - 1) = \mu(n - k - 1)$ a jednoduchými úpravami vieme z neho vyjadriť vzťah:

$$q(x) - \mu n = (x - k)(x + k + \mu - \lambda)$$

Dosadením daného vzťahu do rovnice dostávame:

$$q(x)C^{-1} = A + (x + \mu - \lambda)I + \frac{\mu}{x - k}J$$

Zlúčením danej rovnice s rovnicou (3.2) dostaneme vzťah, ktorý sme chceli dokázať. \square

Toto tvrdenie nám v praxi nedáva veľa výsledkov, pretože vyžaduje znalosti celej matice A . Ku zjednodušeniu vzťahu stačí predpoklad, aby matica $A[T]$ komutovala s maticou J a to sú regulárne grafy.

Dôsledok 3.4. *Ak graf $G[T]$ je d -regulárny, potom komplement indukovaného podgrafu $G[T]$ má charakteristický polynóm:*

$$|C[\bar{T}]| = [(x - k)(x + \mu - \lambda + d) + \mu t](x - r)^{f-t}(x - s)^{g-t} \prod_{\omega} (x + \mu - \lambda + \omega), \quad (3.5)$$

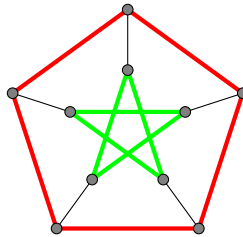
kde súčin cez všetky vlastné čísla matice $A[T]$ s pravidlom “omitted once” (vynechaný jeden člen s $\omega = d$).

Dôkaz. Z označenia $q(x)$ vyplýva, že ho môžeme prepísať ako: $q(x) = (x - r)(x - s)$. Potom vzťah $q(x)^{-t}|C|$ môžeme prepísať ako: $(x - k)(x - r)^{f-t}(x - s)^{g-t}$. Keďže graf $G[T]$ je d -regulárny, potom matica $A[T]$ komutuje s maticou J , platí vzťah (1.1). Potom najväčšie vlastné číslo grafu $G[T]$ s maticou $A[T] + (x + \mu + \lambda)I_t + \frac{\mu}{x-k}J_t$ sa rovná číslu $d + (x + \mu - \lambda) + \frac{\mu t}{x-k}$. Po úprave dostaneme: $[(x - k)(x + \mu - \lambda + d) + \mu t] / (x - k)$. Ostatné vlastné čísla grafu $G[T]$ sú $x + \mu - \lambda + \omega$, kde ω prechádza všetkými vlastnými číslami matice $A[T]$, raz musí vynechať $\omega = d$. Po dosadení vzťahov do pôvodného tvrdenia dostaneme rovnicu, ktorú sme chceli dokázať. \square

Z toho vyplýva, že nemusíme poznať celú maticu A . Stačí nám predpoklad, že graf $G[T]$ je regulárny graf a potom z neho vieme potom vyrátať komplement. Tento dôležitý fakt využijeme ďalej v práci pri hľadaní silne regulárnych grafov.

Príklad 3.1. Petersenov graf, ktorý má parametre $(10, 3, 0, 1)$ spĺňa všetky požadované podmienky. Jeho vlastné čísla a násobnosti sú: $r = 1, f = 5, s = -2, g = 4$ Obsahuje ako podgraf 2-regulárny graf na 5 vrcholoch ($d = 2, t = 5$), ktorého charakteristický polynóm je $x^5 - 5x^3 + 5x - 2$. Podľa dôsledku, potom charakteristický polynóm komplementu podgrafu je:

$$\begin{aligned} |C[\bar{T}]| &= (x^2 - 9 + 5)(x - 1)^{5-5}(x - (-2))^{4-5}(x^4 + 2x^3 - x^2 - 2x + 1) \\ &= x^5 - 5x^3 + 5x - 2 \end{aligned}$$



Obrázok 3.1: Petersenov graf, červenou farbou je označený 2-regulárny podgraf na 5 vrcholov a zelenou farbou je komplementárny graf k nemu. Zhodou okolností je tiež 2-regulárny graf na 5 vrcholov

Kapitola 4

Cieľ práce

V tejto kapitole rozoberáme cieľ práce a to hľadanie silne regulárnych grafov. Z definície rozkladu silne regulárneho grafu vieme vrcholy rozdeliť do troch skupín: ľubovoľný vrchol v , susedia vrchola v a nesusedia vrchola v . Pri hľadaní silne regulárnych grafov s určitými parametrami nás pri rozklade zaujíma počet možných podgrafov susedov vrchola v a zároveň počet možných podgrafov nesusedov vrchola v . Naším cieľom bolo nájsť typy silne regulárnych grafov s určitými parametrami, s ktorými by sme vedeli generovať všetky podgrafy susedov a nesusedov vrchola v a zároveň, aby stupeň podgrafov susedov vrchola v bol podobný so stupňom podgrafov nesusedov vrchola v . Takými silne regulárne grafy sú *konferenčné grafy*.

Z definície konferenčné grafy sú silne regulárne grafy s parametrami $\left(n, \frac{(n-1)}{2}, \frac{(n-5)}{4}, \frac{(n-1)}{4}\right)$. Z pozorovania vieme, že v konferenčných grafoch vzniknú 2 podgrafy, ktoré sú regulárne a zároveň majú komplementárny stupeň medzi sebou. Možností takýchto dvojíc regulárnych grafov je veľmi veľa. Vďaka De Caenovmu výsledku 3 sa nám podarilo radikálne zúžiť výber takýchto dvojíc. Potom už stačí dopočítať maticu susednosti silne regulárneho grafu pomocou spektrálnych metód.

Prvýkrát vymenoval a publikoval všetkých 15 silne regulárnych grafov s parametrami $(25, 12, 5, 6)$ Paulus v roku 1973. Program, ktorý bol napísaný v Algole využíval backtracking a ďalšie znalosti z kombinatorických štruktúr [4].

Na otestovanie našej metódy sme si vybrali práve silne regulárny graf s parametrami $(25, 12, 5, 6)$. Dôvod výberu tohto grafu je taký, že počet podgrafov susedov a nesusedov v , čo sú 5-regulárne grafy a 6-regulárne grafy, je relatívne malý (okolo 8000). Ďalším dôvodom je aj počet takýchto grafov. Výsledky našej metódy a jej implementácia sa nachádza v ďalšej

kapitole.

4.1 Popis metódy

Matica susednosti silne regulárneho grafu s parametrami (25, 12, 5, 6) po rozklade (2.5) vyzerá nasledovne:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1}^T & 0 \\ \mathbf{1} & A_1 & B^T \\ 0 & B & A_2 \end{pmatrix},$$

kde podgraf A_1 je 5-regulárny graf na 12 vrcholoch a A_2 je 6-regulárny graf na 12 vrcholoch.

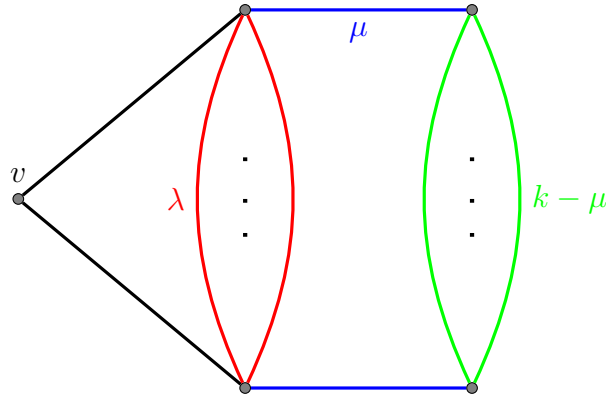
Prvým krokom našej metódy je nájsť všetky 5 a 6-regulárne grafy na 12 vrcholoch. Na to sme použili program *Genreg* [5], ktorý generuje všetky regulárne grafy s rôznymi parametrami. Súvislých 5-regulárnych grafov na 12 vrcholov je 7848 a súvislých 6-regulárnych grafov na 12 vrcholov je 7849. Súvislých 6-regulárnych grafov je viac o jeden špecifický prípad: komplement nesúvislého 5-regulárneho grafu na 12 vrcholov, ktorý je zložený z dvoch kompletných grafov na 6 vrcholov. Komplement je súvislý a 6-regulárny na 12 vrcholov.

Ďalším krokom je vypočítať charakteristické polynómy k jednotlivým vygenerovaným grafom. Tu sme využili sadu programov *GAP - Groups, Algorithms, Programming - a System for Computational Discrete Algebra* [6]. Naším cieľom je ku každému 5-regulárnemu grafu De Caenovým výsledkom (dôsledok 3.4) vypočítať charakteristický polynóm komplementu a z neho dostať 6-regulárny graf. Komplement 5-regulárneho grafu na 12 vrcholoch, ktorý je podgrafom silne regulárneho grafu s parametrami (25, 12, 5, 6) nie je súvislý. Konkrétne je to 6-regulárny graf na 12 vrcholov s izolovaným vrcholom v .

Nech $ch_{A_1}(x)$ je charakteristický polynóm 5-regulárneho grafu a nech $ch_{A_2}(x)$ je charakteristický polynóm 6-regulárneho grafu. Potom charakteristický polynóm komplementu je:

$$ch_{\overline{A_1}}(x) = x ch_{A_2}(x)$$

Ľahko vidieť, že potom vieme porovnať charakteristické polynómy každého komplementu 5-regulárneho grafu s 6-regulárnym grafom. Všetky možné rovnosti spĺňajú *De Caenov výsledok* a teda môžu tvoriť silne regulárny graf. Týmto spôsobom vyrátame matice A_1 a A_2 zo silne regulárneho grafu s parametrom (25, 12, 5, 6).



Obrázok 4.1: Zakreslenie silne regulárneho grafu s parametrom $(25, 12, 5, 6)$. Červenou farbou sú pospájané vrcholy 5-regulárneho grafu, zelenou farbou sú pospájané vrcholy 6-regulárneho grafu

Najťažším krokom metódy je dopočítanie zvyšku matice susednosti – maticu B .

Pre vrcholový rozklad silne regulárneho grafu platia nutné podmienky, z ktorých vyrátame maticu B .

Z rovnice (2.1) vyplýva:

$$A^2 = (\lambda - \mu)A + (k - \mu)I + \mu J$$

Z matice susednosti A grafu G dostaneme:

$$A^2 = \begin{pmatrix} k & \mathbf{1}^T A_1 & \mathbf{1}^T B^T \\ A_1 \mathbf{1} & J + A_1^2 + B^T B & A_1 B^T + B^T A_2 \\ B \mathbf{1} & B A_1 + A_2 B & A_2^2 + B B^T \end{pmatrix}$$

Z týchto 2 rovníc dostaneme 3 rovnice, ktoré sú nutnými podmienkami pre silne regulárny graf:

$$A_1^2 - (\lambda - \mu)A_1 - (k - \mu)I + B^T B = (\mu - 1)J \quad (4.1)$$

$$A_2^2 - (\lambda - \mu)A_2 - (k - \mu)I + B B^T = \mu J \quad (4.2)$$

$$B A_1 + A_2 B = (\lambda - \mu)B + \mu J \quad (4.3)$$

Tieto podmienky musí spĺňať každý silne regulárny graf. Posledná rovnica (4.3) dáva lineárny vzťah matice B k maticiam A_1 a A_2 . Z tejto rovnice vyjadríme maticu B . Dostaneme:

$$B A_1 + (A_2 - (\lambda - \mu)I) B = \mu J$$

Dostali sme maticovú rovnicu v tvare $AX + BX = C$, ktorú vieme prepísať do tvaru lineárnych rovníc pomocou algoritmu 5.1.3. Dostávame sústavu 144 lineárnych rovníc o 144 neznámych. Neznáme môžu nadobúdať hodnoty 0 alebo 1. Hodnota systému lineárnych rovníc je vo všeobecnosti menší ako 144, a preto nie vždy existuje práve jedno riešenie. V tom spočíva veľký problém, ktorý riešime v implementácii. Vyskúšali sme viacero možností od komerčného softvéru *Gurobi* [7] až po vlastný spôsob hľadania riešení lineárnych rovníc, ktorý je založený na tipovaní výsledku a využití ďalších dvoch kvadratických podmienok.

Posledným krokom metódy je vylúčiť riešenia grafov, ktoré sú izomorfné medzi sebou. Využili sme program *Nauty (No AUTomorphisms, Yes?)* [8], ktorý rieši problém izomorfizmu veľmi rýchlo.

Kapitola 5

Implementácia a výsledky metódy

V tejto kapitole sa zaoberáme výsledkami a implementáciou metódy popísanej v kapitole 4.1. K práci je priložený CD so zdrojovým kódom program napísaný v programovacom jazyku *Java*, v práci popíšeme základné algoritmy formou pseudokódu. Pri implementácii budeme udávať čas trvania behu programu a využitú pamäť pri výpočte. Kód bol spúšťaný na notebooku s konfiguračnou zostavou *Intel Core i3 350M, RAM 4GB, HDD 500GB 7200 otáčok*.

Na záver podľa výsledkov našej metódy sme urobili odhad pre možné hľadanie silne regulárnych grafov s parametrami (37, 18, 8, 9) našou metódou, kde počet grafov je zatiaľ neznámy.

5.1 Implementácia metódy

V tejto časti práce popíšeme podrobne implementáciu metódy hľadania silne regulárnych grafov.

5.1.1 Generovanie a spracovanie regulárnych grafov

Ako už je spomenuté v popise metódy, pri generovaní regulárnych grafov sme využili program *genreg*. Program *genreg* je napísaný v programovacom jazyku *C*, pričom výstup programu je v nemčine. Vďaka manuálu, ktorý je v angličtine sa nám podarilo program pochopiť. Výstup programu obsahuje grafy a informácie o nich. Graf v programe je reprezentovaný ako zoznam susedov. Ľahkým sparsovaním sa nám podarilo vytvoriť pole matíc susedností grafov, ktoré sme neskôr využili. Ako sme už spomenuli, súvislých 5-regulárnych grafov na 12 vrcholov

je 7848 a súvislých 6-regulárnych grafov na 12 vrcholov je 7849.

Generovanie týchto grafov trvalo 0.554s a ich nasledovné spracovanie 1.259s. Výstupný súbor mal veľkosť 2.2 MB. V zdrojovom kóde k tejto časti prislúcha trieda s názvom *Parse-ASCFormat.java*.

5.1.2 De Caenov výsledok

Aby sme mohli využiť De Caenov výsledok (dôsledok 3.4), musíme ku každému grafu, resp. matici susednosti vypočítať charakteristický polynóm. Využili sme program *GAP*, ktorý obsahuje balík funkcií. Z neho sme použili funkciu *CharacteristicPolynomial*, ktorá má jeden parameter a to maticu. Výstupom funkcie je polynóm s jednou neznámou, ozn. v programe x_1 .

Ako sme už spomínali, naším cieľom je ku každému 5-regulárnemu grafu De Caenovým výsledkom vypočítať charakteristický polynóm komplementu, čiže 6-regulárny graf. Potom porovnáme charakteristické polynómy komplementu 5-regulárneho grafu s charakteristickým polynómom 6-regulárneho grafu.

Problém implementácie De Caenovho výsledku je v rovnici (3.5), kde sa využívajú znalosti vlastných čísel ω matice $A[T]$:

$$\prod_{\omega} (x + \mu - \lambda + \omega), \text{ kde } \omega = d \text{ "omitted once"} \quad (5.1)$$

Zistiť vlastné čísla z matice je vo všeobecnosti netriviálny problém, kde môžu nastať numerické problémy.

Implementácia De Caenovho výsledku bez znalosti vlastných čísel je založená na základnej vete algebry a posúvaní koreňov charakteristického polynómu matice $A[T]$.

Postup:

- V predpokladoch máme charakteristický polynóm matice $A[T]$, ktorý vieme prepísať vďaka základnej vete algebry do tvaru:

$$\prod_{\omega} (x - \omega),$$

kde ω prechádza cez všetky vlastné čísla matice $A[T]$.

- polynóm predelíme výrazom $(x - d)$, aby spĺňal pravidlo "omitted once"

- na polynóm aplikujeme inverznú operáciu na korene, resp. na premennú ω . To znamená, že v polynóme pre násobíme -1 každú nepárnu mocninu polynómu. Polynóm potom nadobudne tvar:

$$\prod_{\omega} (x + \omega), \text{ kde } \omega = d \text{ "omitted once"}$$

- korene polynómu nakoniec posunieme o $\mu - \lambda$. Úpravou sme dostali rovnaký vzťah ako (5.1)

Tento postup sa ľahko dá naprogramovať. Na úpravu výrazov polynómov (násobenie a delenie) sme si pomohli programom *GAP*. V zdrojovom kóde prislúcha k tejto časti trieda s názvom *CharacteristicPolynomial.java*.

Druhý spôsob ako sa dá získať vzťah (5.1) je pomocou *Taylorovho rozvoja*, ktorý sa dá ľahko implementovať v *GAP* cez funkciu *Value*.

V našom prípade ako komplement 5-regulárneho grafu na 12 vrcholoch, ktorý je podgrafom silne regulárneho grafu s parametrami (25, 12, 5, 6) vznikne graf, ktorý je nesúvislý. Je to 6-regulárny graf na 12 vrcholoch s izolovaným vrcholom v , stupeň charakteristického polynómu je 13. Ak chceme z neho dostať charakteristický polynóm 6-regulárneho grafu, musíme odstrániť vrchol v z charakteristického polynómu. To urobíme tak, že predelíme charakteristický polynóm výrazom x . Takto dostaneme charakteristický polynóm 6-regulárneho grafu.

Teraz môžeme porovnávať charakteristické polynómy komplementu 5-regulárneho grafu s polynómami 6-regulárneho grafu. Počet zhôd je: 11 766, rozdelenie výskytov môžeme vidieť v tabuľke. Ako môžeme vidieť ku každému 5-regulárnemu grafu sme našli aspoň jeden výskyt.

Počet výskytov	1	2	3	4	5	6	7	8
Počet grafov	5159	1998	393	184	25	60	21	8

Tabuľka 5.1: Počet výskytov

V zdrojovom kóde prislúcha k tejto časti trieda s názvom *CompareCharacPolynomial.java*. Vyrátanie komplementov charakteristických polynómov 5-regulárnych grafov a ich nasledovné porovnanie s charakteristickými polynómami 6-regulárneho grafu trvalo 9.182s.

5.1.3 Systém lineárnych rovníc matice B

V tejto časti je uvedený algoritmus na zostrojenie systému lineárnych rovníc z lineárnej nutnej podmienky (4.3)

Algoritmus 1 Vytvorenia lineárnych rovníc matice B z matíc A_1 a A_2

Predpoklady: int [] [] a1, int [] [] a2

Výsledok: int [] [] solution

```

1: for  $i = 1 \rightarrow 12$  do
2:    $a2[i][i] \leftarrow a2[i][i] + 1$  {v našom prípade  $-(\lambda - \mu)$  je rovný +1}
3: end for
4: for  $i = 1 \rightarrow 12$  do
5:   for  $j = 1 \rightarrow 12$  do
6:     for  $k = 1 \rightarrow 12$  do
7:        $solution[i * 12 + j][i * 12 + k] \leftarrow solution[i * 12 + j][i * 12 + k] + a1[k][j]$ 
8:        $solution[i * 12 + j][k * 12 + j] \leftarrow solution[i * 12 + j][k * 12 + j] + a2[i][k]$ 
9:     end for
10:  end for
11: end for

```

Riešením nehomogenného systému rovníc (solution) dostaneme hľadanú maticu B .

Hodnosť nehomogenného systému rovníc je rôzny pre matice A_1 a A_2 ako môžeme vidieť v tabuľke:

Hodnosť	75 – 100	101 – 110	111 – 120	121 – 130	131 – 140	141 – 144
Počet systémov	9	18	67	489	5342	5841

Tabuľka 5.2: Tabuľka hodností

Hľadaním riešením nehomogenného systému lineárnych rovníc pomocou *GEM* (Gaussova eliminačná metóda) v programe *GAP* funkciami *SolutionMat* a *NullSpaceMat* sme dostali riešenie rovníc, ktoré boli v racionálne. Rátanie systému lineárnych rovníc trvalo vyše dňa. Ani po úprave na celé čísla sme nedostali hľadaný tvar koreňov 0 a 1 a preto sme hľadali ďalšie alternatívy.

5.1.4 Gurobi Optimization

Pre konkrétne požiadavky hľadaných koreňov sme vyskúšali komerčný program *Gurobi Optimization*. Program ponúka pre akademické účely bezplatnú akademickú licenciu na rok. Po preštudovaní manuálu a inštalácie API do javy sme implementovali problém hľadania riešení rovníc. Využili sme *LP (linear program)* model, kde premenné sme nastavili na *Boolean*. Použitím príkazu *Optimize* nám program zrátal lineárne rovnice s požadovanými parametrami.

Z 11766 sústav rovníc našiel 5159 riešení, ktoré spĺňajú rovnicu (4.3). Po otestovaní ďalších dvoch nutných podmienok (4.1) a (4.2) zostali nám už iba 4. Tieto riešenia sú už hľadané silne regulárne grafy s parametrami (25, 12, 5, 6). V zdrojovom kóde prislúcha k tejto časti triedy s názvami *Gurobi.java* a *Multiplication.java*. Riešenie lineárnych rovníc trvalo 1837.5s (31m).

Dôvody, prečo sme našli iba 4 riešenia z 15 sú také, že program *Gurobi* hľadá iba jedno optimálne riešenie lineárnych rovníc. Ak sústava rovníc obsahuje viac riešení vyberie iba jedno z nich. S kombináciou *QP (quadratic program)* nám model správne nefungoval, rátal príliš dlho a nakoniec prišiel k zlému výsledku. Po komunikácii na oficiálnom fóre a s autormi programu sme prišli k záveru, že program *Gurobi* nie je stavaný na riešenie nášho problému (je to hlavne optimalizačný softvér). Preto sme navrhli vlastný spôsob hľadania riešení lineárnych rovníc.

5.1.5 Vlastný spôsob riešenia

Keďže program *Gurobi* nebol úspešný pri hľadaní riešení, navrhli sme vlastný spôsob hľadania riešení lineárnych rovníc. Jeho základnou myšlienkou je rozumne vyskúšať všetky možnosti, pričom už pri generovaní budeme kontrolovať kvadratické podmienky.

Aby bolo možné generovať možnosti, je nutné previesť maticu lineárnych rovníc na *trojuholníkový tvar*. Tu sme využili program *GAP*, ktorý má na to funkciu *TriangulizedMat*. Ako vstupom do programu bola matica s rozmermi 144×145 , pretože systém lineárnych rovníc je nehomogénna sústava. Posledný stĺpec v matici pozostával zo samých 6 ($\mu = 6$). Výpočet trval celý deň (pre väčšie vstupy *GEM* nie je príliš efektívny). Ako výstup sme dostali súbor s veľkosťou 779.2 MB, ktorý obsahoval 11766 trojuholníkových matíc v tvare zlomku. Úpravou na celé čísla sme dostali matice na požadovaný tvar. Upravenú trojuholníkovú maticu budeme označovať *tr*.

Ďalej je nutné upraviť rovnice (4.1) a (4.2) na tvar:

$$B^T B = (\mu - 1)J - A_1^2 + (\lambda - \mu)A_1 + (k - \mu)I$$

$$B B^T = \mu J - A_2^2 + (\lambda - \mu)A_2 + (k - \mu)I$$

Pravé strany rovníc si vypočítame, v našom prípade dostaneme:

$$B^T B = 5J - A_1^2 - A_1 + 6I \quad (5.2)$$

$$B B^T = 6J - A_2^2 - A_2 + 6I \quad (5.3)$$

Výslednú maticu z (5.2) budeme označovať q_1 a výslednú maticu z (5.3) budeme označovať q_2 . V zdrojovom kóde prislúcha k tejto časti trieda s názvom *Graph.java*.

Základná myšlienka algoritmu je založená na postupnom generovaní riadkov matice B , pričom odhadovať budeme od konca. Na začiatku si vygenerujeme všetky možnosti 0 a 1 na 12 miest, pričom vieme, že počet 1 a 0 je rovný 6 (vyplýva to z 2.5). Z kombinatoriky vieme, že počet možností je $\binom{12}{6} = 924$. Potom postupne otestujeme všetky nutné podmienky (najprv lineárne a potom kvadratické) a zahodíme tie riešenia, ktoré ich nespĺňajú. Takto postupne generujeme ďalšie riadky, pričom si pamätáme všetky možné riešenia predtým. Výsledok nakoniec bude pole riešení, ktoré spĺňajú nutné podmienky silne regulárneho grafu.

V popise algoritmu budeme používať dynamickú štruktúru *ArrayList*, ktorý predstavuje dynamické pole s metódami: *add(prvok)* pridá *prvok* na koniec poľa, *get(int i)* vráti *i*-ty prvok v poli, *size()* vráti dĺžku poľa.

Algoritmus 2 Hľadanie matice B skúšaním všetkých možností**Predpoklady:** $\text{int}[][] \text{tr}$, $\text{int}[][] \text{q1}$, $\text{int}[][] \text{q2}$ **Výsledok:** $\text{ArrayList} <\text{int}[][]> \text{solution}$

```

1:  $\text{int}[144] \text{solution} \leftarrow 2$  {2 nám predstavuje, že na danom mieste môže byť 1 alebo 0}
2:  $\text{ArrayList} <\text{int}[] > \text{gen} \leftarrow \text{generuj}()$  {vygeneruje 924 možností}
3: for  $i = 1 \rightarrow 12$  do
4:    $\text{ArrayList} <\text{int}[] > \text{newSolution} \leftarrow$  inicializácia
5:   for  $j = 1 \rightarrow \text{solution.size}()$  do
6:     for  $k = 1 \rightarrow \text{gen.size}()$  do
7:        $\text{int}[] \text{tmp} \leftarrow \text{solution.get}(j)$ 
8:       for  $l = 144 - i * 12 \rightarrow 144 - ((i - 1) * 12)$  do
9:          $\text{tmp}[l] \leftarrow \text{gen.get}(k)[l - (144 - i * 12)]$ 
10:      end for
11:       $\text{newSolution.add}(\text{tmp})$ 
12:    end for
13:  end for
14:   $\text{newSolution} \leftarrow$  otestuje lineárne rovnice,  $\text{tr}$ 
15:   $\text{newSolution} \leftarrow$  otestuje kvadratické rovnice,  $q_1$  a  $q_2$ 
16:   $\text{solution} \leftarrow \text{newSolution}$ 
17: end for

```

V zdrojovom kóde prislúcha k tejto časti triedy s názvami *BruteForce.java* a *Solver.java*. Trieda *Solver.java* využíva iné poradie generovania možností, ktoré v niektorých prípadoch je rýchlejšie ako už v spomínanom algoritme.

Hľadanie matice B vo všetkých systémoch lineárnych rovníc, ktorých je 11766 trvalo týždeň (kód bol spustený na viacerých počítačoch). Ak by bol kód spustený len na jednom trvalo mohlo by to trvať aj mesiac. Pre niektoré špecifické príklady nám program dokonca (8 prípadov) kvôli nedostatku pamäte, pretože hodnosť týchto matíc je príliš nízka (menej ako 100 z 144) a potrebovali sme pamätať veľa možností. Preto sme navrhli lepší spôsob hľadania, ktorý využíva prehľadávanie do hĺbky. Jej pamäťová zložitosť je oveľa menšia oproti predchádzajúcemu spôsobu, ale časová zložitosť je väčšia. Po týždni rátania sme nakoniec doriešili zvyšné prípady. V zdrojovom kóde prislúcha k tejto časti trieda s názvom *BruteForce2.java*. Tabuľku počtov silne regulárnych grafov sme rozdelili do dvoch častí.

Číslo systému	8270	8980	10964	10993	11131	11383
Počet grafov	4	2	2	4	4	8

Číslo systému	9668	9691	9712	9714	11130	11735
Počet grafov	84	552	96	128	16	12

Tabuľka 5.3: Počet silne regulárnych grafov

Spolu silne regulárnych grafov je 912. Po teste izomorfizmu medzi sebou nám ostalo všetkých 15 silne regulárnych grafov. Výsledky boli totožné s už známymi grafmi.

5.1.6 Problém izomorfizmu

Vo všeobecnosti problém izomorfizmu grafov je veľmi ťažkým problémom. Na jeho riešenie sme využili program *Nauty*. Je to program, ktorý je napísaný v programovacom jazyku *C* a pre nekomerčné účely je zadarmo. Po preštudovaní manuálu sme sa rozhodli použiť podprogram *Dreadnaut*, ktorý je na problém izomorfizmu určený. Ako vstup sú dané dva grafy reprezentované zoznamami susedov a ako výstup program vracia informáciu o tom, či sú izomorfné alebo nie.

Na začiatku bolo nutné grafy preformátovať na zoznam susedov a vytvoriť vstup pre program, kde vyskúšame každé rôzne dvojice grafov. Potom nám stačí výstup programu sparsovať a zistiť koľko je medzi sebou neizomorfných grafov. Výstup programu sme sparsovali do tabuľky, kde pre daný riadok grafu nám určuje, s ktorým grafom je izomorfný. Potom ľahkým prehládavaním po stĺpcoch sa dá zistiť koľko grafov je neizomorfným so všetkými grafmi.

V zdrojovom kóde prislúcha k tejto časti triedy s názvami *Isomorphism.java* a *MySRGI-somorphism.java*. Veľkosť súboru pre vstup je 352.4 MB. Spracovanie *Nauty* trvalo 77.749s. Výsledný súbor má veľkosť 39.4 MB.

5.2 Výsledok

Aplikáciou našej metódy sme našli všetky 15 silne regulárnych grafov s parametrami (25, 12, 5, 6). Na niektoré špecifické prípady sme museli využiť inú metódu hľadania riešenia. Ako sme pozorovali, vo väčšine prípadov systému lineárnych rovníc sme nedostali žiadne riešenie matice B , resp. žiadne silne regulárne grafy. Tento a ďalšie fakty nám v budúcnosti môžu pomôcť pri hľadaní silne regulárnych grafov s parametrami (37, 18, 8, 9).

5.3 Odhad pre silne regulárne grafy s parametrami (37, 18, 8, 9)

V tejto časti sa budeme zaoberať možnosťou hľadania silne regulárnych grafov s parametrami (37, 18, 8, 9) našou metódou. Ako vyplýva z tabuľky sú to najmenšie konferenčné grafy, ktorých počet je neznámy, ale je dokázaná ich existencia.

SRG s parametrami	(25, 12, 5, 6)	(29, 14, 6, 7)	(33, 16, 7, 8)	(37, 18, 8, 9)
Počet grafov	15	41	0	?

Tabuľka 5.4: Počet konferenčných grafov

Prvým a zároveň najťažším krokom by bolo vygenerovanie všetkých regulárnych podgrafov silne regulárneho grafu. Presný počet súvislých 8-regulárnych grafov na 18 vrcholoch, resp. 9-regulárnych grafov na 18 vrcholoch nie je známy, známe sú len odhady. Z tabuľky zo stránky programu *Genreg* [9] môžeme len odhadnúť, že počet takýchto grafov má 17 cifier. Ak by sa nám podarilo vygenerovať tieto grafy nejakým sofistikovaným spôsobom (nájsť ďalšie nutné podmienky), potom by sme vedeli aplikovať *De Caenov výsledok* a hľadali zvyšok matice susednosti – maticu B . Aplikácia *De Caenového výsledku* nie je časovo zložitá. Dostali by sme sústavu 324 lineárnych rovníc o 324 neznámych, ktorú by sme riešili vylepšeným algoritmom hľadania koreňov. Tu môže byť časová aj pamäťová zložitosť veľká, ale bolo by možné ju optimalizovať. Náročnosť problému izomorfizmu grafov nie je veľká vďaka programu *Nauty*.

Takýmto spôsobom by sme vedeli zistiť počet silne regulárnych grafov s parametrami (37, 18, 8, 9) našou metódou.

Záver

V práci sme sa venovali vlastnostiam a hľadaniu silne regulárnych grafov. Navrhli sme vlastnú metódu ich hľadania, v ktorej sme využili výsledok z odborného článku [1]. Po implementácii našej metódy sme pre silne regulárny graf s parametrami (25, 12, 5, 6) našli všetkých 15 neizomorfných grafov. Motiváciou použitia našej metódy na už známe grafy je jej možné použitie na hľadanie zložitejších silne regulárnych grafov, ktorých celkový počet je zatiaľ neznámy. V budúcnosti by sme preto chceli optimalizovať pamäťovú a časovú zložitosť algoritmu a implementovať našu metódu na triedu silne regulárnych grafov s parametrami (37, 18, 8, 9).

Dodatok A

Lineárna algebra

V dodatku si zhrnieme základné vedomosti z lineárnej algebry. Vychádzame zo základných definícií a tvrdení skrípt [10] a [11]. Dôkazy ku tvrdeniam nebudeme uvádzať.

Definície

Regulárna matica je štvorcová matica, ktorej determinant je rôzny od 0. Riadky aj stĺpce sú lineárne nezávislé. *Hodnosť matice* (rank) A je číslo, ktoré určuje maximálny počet lineárne nezávislých riadkov matice A , ozn. $h(A)$. Ak matica A je štvorcová $n \times n$, potom súčet diagonálnych prvkov matice sa nazýva *stopa matice* (*trace*), ozn. $Tr(A)$.

Dve štvorcové matice A, B $n \times n$ sú *podobné*, ak existuje regulárna matica P taká, že $B = PAP^{-1}$.

$c \in F$ sa nazýva *vlastné číslo* (eigenvalue) matice A , ak $\exists \alpha \neq (0, \dots, 0)$, taký, že $\alpha A = c\alpha$. Ak matica A je štvorcová, potom *spektrum matice* A nazývame množinu jej všetkých vlastných čísel. Polynóm $ch_A(x) = |xI - A|$ sa nazýva *charakteristický polynóm* matice A , kde nám matica I predstavuje jednotkovú maticu (identity matrix).

Vektor $\alpha \neq (0, \dots, 0) \in F^n$ sa nazýva *vlastný vektor* (eigenvector) matice A , ak $\exists c \in F$ také, že $\alpha A = c\alpha$. Množina všetkých vlastných vektorov s rovnakým vlastným číslom c sa nazýva *priestor vlastných vektorov*, ozn. $\varepsilon(\mu)$.

Vety

Veta A.1. *Nech A je reálna symetrická matica, potom je ortogonálne podobná s (reálne) diagonálnou maticou*

Z tejto hlavnej vety vyplývajú nasledovné dôsledky:

Nech A je štvorcová matica typu $n \times n$ nad poľom F . Potom A je podobná s diagonálnou maticou práve vtedy, keď spomedzi vlastných vektorov vieme vybrať bázu.

Nech A, B sú štvorcové matice typu $n \times n$ nad poľom v . Ak A a B sú podobné, tak $ch_A(x) = ch_B(x)$.

Hodnosť $h(A)$ symetrickej matice A je rovná počtu nenulových vlastných čísel. Dôkaz tvrdenia:

Ak A je symetrická matica nad \mathbb{R} . Potom sú všetky jej vlastné čísla reálne.

Ak matica A je reálna symetrická matica a α a β sú vlastné vektory matice A s rôznymi vlastnými číslami matice A , tak α a β sú ortogonálne (kolmé).

Dôkazy k týmto tvrdeniam sa nájdu v [10, str. 32–42]

Ak A je štvorcová matica $n \times n$ s reálnymi alebo komplexnými prvkami a ak $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ sú vlastné čísla matice A , potom platí:

$$tr(A) = \sum_i \lambda_i$$

Dôkaz tvrdenia: [11, str. 395].

Literatúra

- [1] D. de Caen. The spectra of complementary subgraphs in a strongly regular graph. *European Journal of Combinatorics*, 19:559–565, 1998.
- [2] R.E.A.C. Paley. On orthogonal matrices. *J. Math. Phys.*, 12:311–320, 1933.
- [3] C. D. Godsil. *Algebraic Combinatorics*. Chapman & Hall, 1993.
- [4] A. J. L. Paulus. Conference matrices and graphs of order 26. *Technische Hogeschool Eindhoven, report WSK 73/06, Eindhoven*, 1973.
- [5] M. Meringer. Fast generation of regular graphs and construction of cages. *Journal of Graph Theory*, 30:137–146.
- [6] The GAP Group. *GAP – Groups, Algorithms, and Programming, Version 4.6.4*, 2013.
- [7] Inc. Gurobi Optimization. Gurobi optimizer reference manual. <http://www.gurobi.com>, 2013.
- [8] B.D.McKay and A.Piperno. Nauty and traces user’s guide (version 2.5). <http://pallini.di.uniroma1.it/Guide.html>, 2013.
- [9] M. Meringer. Regular graphs page. <http://www.mathe2.uni-bayreuth.de/markus/reggraphs.html>, 2013.
- [10] Martin Sleziak. Poznámky k prednáške algebra 3. <http://thales.doa.fmph.uniba.sk/sleziak/vyuka/2010/alg3/alg3.pdf>, 2011.
- [11] Pavol Zlatoš. Lineárna algebra a geometria. http://thales.doa.fmph.uniba.sk/zlatos/la/LAG_A4.pdf, 2011.