ОЦЕНИВАНИЕ МЕРЫ ИРРЕГУЛЯРНОСТИ ГРАФА

И. М. Воронкина

*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4,
220030, г. Минск, Беларусь, irishavoronkina@gmail.com
Научный руководитель — В. И. Бенедиктович,
кандидат физико-математических наук, доцент*

В данной работе исследуется мера иррегулярности графа, которую используют для определения неоднородности группы. С помощью меры иррегулярности можно выявлять влиятельных пользователей, группы схожих интересов и другие важные структуры, способствующие пониманию социальной динамики и поведения.

Ключевые слова: связный граф; регулярный граф; нерегулярный граф; спектральный радиус; минимальная и максимальная степени графа; максимальное собственное значение; мера иррегулярности графа.

Графовые нейронные сети (ГНС) являются особым типом нейронных сетей, основанным на графовой теории. Они представляют собой мощный инструмент для анализа и обработки данных, организованных в виде графовых структур. В отличие от классических нейронных сетей, которые оперируют с векторами или матрицами, ГНС могут учитывать взаимосвязи между элементами данных, моделируя их в виде графов.

Графовые нейронные сети можно оптимизировать, зная меру иррегулярности графа, поскольку иррегулярность графа может влиять на эффективность обучения и производительность сети. Выделяют несколько способов оптимизации графовой нейронной сети:

1. Регуляризация: Иррегулярность графа можно учесть в процессе регуляризации для контроля сложности модели и избегания переобучения. Добавление регуляризации к модели GNN может помочь улучшить обобщающую способность модели на иррегулярных графах и предотвратить переобучение.

2. Отбор признаков: Если граф имеет высокую степень иррегулярности, то можно использовать методы выбора признаков для снижения размерности и иррегулярности.

3. Подвыборка: Могут использоваться техники подвыборки, чтобы генерировать подграфы, которые более регулярны, что могло бы упростить процесс обучения. Иррегулярные графы могут иметь различные структуры и характеристики, поэтому важно выбирать архитектуру GNN, которая лучше всего подходит для конкретного типа графа.

4. Обучение с подкреплением: Может использоваться оптимизация на основе обучения с подкреплением для адаптации архитектуры GNN к конкретной структуре графа и его мере иррегулярности. Использование эффективных методов оптимизации, таких как Adam, SGD или RMSprop, может существенно улучшить процесс обучения GNN на иррегулярных графах.

5. Агрегация на уровне узлов: Можно использовать различные стратегии агрегации на уровне узлов, чтобы справиться с иррегулярностью графа. Использование методов адаптивного сэмплинга при обучении GNN на иррегулярных графах позволяет эффективно выбирать узлы или ребра для обновления в процессе обучения.

Эти методы требуют экспериментирования и подбора параметров, чтобы найти оптимальное решение для конкретной задачи и графа. Таким образом, оптимизация графовых нейронных сетей на иррегулярных графах требует учета особенностей структуры графа и применения соответствующих методов и стратегий для достижения лучших результатов.

Одним из основных вопросов в теории экстремальных графов является необходимость максимизировать или минимизировать граф, инвариантный к фиксированному семейству графов. Этот вопрос крайне широк и разветвляется на несколько областей математики.

Основным примером теоремы в теории экстремальных графов является теорема Мантеля (граф порядка $n \geq 3$ с числом ребер $m > \left\lfloor \frac{n^2}{4} \right\rfloor$ содержит треугольник). Обобщением теоремы Мантеля в теории является теорема Турана: максимальный размер графа порядка $n \geq 3$, не содержащего полного подграфа K_k порядка k, равен $\left\lfloor \frac{k-2}{k-1} * \frac{n^2-r^2}{2} + \binom{r}{2} \right\rfloor$, где r – остаток от деления n на $k-1$; теорема о четырех цветах стремится максимизировать хроматическое число в семействе плоских графов; вопросы о максимальных разрезах по различным семействам графов; задача о различном расстоянии Эрдеша (минимизация расстояний между n точками на плоскости).

Одним из основных характеристик графа является алгебраический параметр графа – разность между его максимальной степенью и спектральным радиусом. Этот графовый параметр является всегда неотрицательным и представляет собой некоторую меру отклонения графа от регулярности. В последние два десятилетия множество статей было посвящено изучению этого параметра. В частности, в 2007 г. американским математиком S. M. Cioabă [2] получена его нижняя оценка, зависящая от порядка и диаметра графа.

В 2017 г. при изучении верхней и нижней оценок для этого параметра M.R. Oboudi [5] выдвинул гипотезу о том, что нижней оценкой данного параметра для произвольного графа является разность между максимальной степенью и спектральным радиусом цепи. Это очень похоже на аналогичное утверждение для спектрального радиуса произвольного графа, нижней границей которого тоже является спектральный радиус цепи. Здесь вышеуказанная гипотеза подтверждается для некоторых классов графов. В статье [6] исследуется проблема о максимизации меры иррегулярности $\lambda_1(G) - d$, а в статье [5] – проблема максимизации меры иррегулярности $\Delta - \lambda_1(G)$. Обе проблемы относятся к экстремальной спектральной теории графов.

Сформулируем несколько теорем для нерегулярных графов с максимальной степенью вершин, имеющих практическое применение при программной реализации (с помощью программы Python) оценивания меры иррегулярности графа.

Теорема 1. Пусть G – связный нерегулярный граф порядка n с максимальной степенью вершин Δ и диаметром D. Тогда справедливо неравенство: $D \le \frac{3n+\Delta-5}{\Delta+1}$. Причем равенство достигается тогда и только тогда, когда G – путь.

Теорема 2. Граф G – неориентированный граф с максимальной степенью вершин Δ, чьи ребра могут быть ориентированы так, что максимальная входящая степень вершин d не превосходит $\frac{\Delta}{2}$. Тогда справедливо неравенство: $\rho(G) \le 2\sqrt{d(\Delta - d)}$.

Теорема 3. Для всех нерегулярных графов G одного и того же порядка n параметр $\beta(G)$ достигает максимальное значение на звезде и для деревьев порядка n минимальное значение достигается на цепи. $\beta(S_n) = n - 1 - \sqrt{n-1}$; $\beta(P_n) = 4\sin^2(\frac{\pi}{2n+2})$.

Графовые нейронные сети представляют собой мощный инструмент в сфере искусственного интеллекта и машинного обучения. Их способность учитывать сложные взаимосвязи и структуру данных делает их неотъемлемой частью современных алгоритмов анализа и обработки информации. Внедрение графовых нейронных сетей в различные области, такие как рекомендательные системы, анализ социальных сетей и биоинформатика, открывает новые возможности для решения сложных задач и достижения более точных результатов.

Библиографические ссылки

1. *Brouwer A.* Spectra of graphs: Monograph / A. Brouwer, W. Haemers. – 2011. – 255 p.

2. *Cioaba S.M.* The spectral radius and the maximum degree of irregular graphs / Sebastian M. Cioaba // The Electronic Journal of Combinatorics. 2007. Volume 14. P. 1–10. https://doi.org/10.37236/956.

3. *Hayes T.A.* Simple condition implying rapid mixing of singlesite dynamics on spin systems / T. Hayes // Proc. 47th Annual IEEE Symposium on Foundation of Computer Science FOCS, 2006. P. 39–46. https://doi.org/10.1109/focs.2006.6.

4. *Liu B.* A note on the largest eigenvalue of non-regular graphs / Bolian Liu, Gang Li // International Linear Algebra Society. 2008. Vol. 17, №1. P.54–61. https://doi.org/10.13001/10813810.1249.

5. *Oboudi M.R.* On the difference between the spectral radius and the maximum degree of graphs / Mohammad Reza Oboudi // Algebra and Discrete Mathematics. 2017. Vol. 24. № 2. P. 302–307.

6. *Tait, M.* Three conjectures in extremal spectral graph theory / M. Tait, J. Tobin // Journal of Combinatorial Theory. 2017. Vol. 126. P. 137–161.

7. *Бенедиктович В.И.* О разности между максимальной степенью и индексом графа / В.И. Бенедиктович // Весці Нацыянальная Акадэміі Навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук. 2018. Том 54, №4. С. 34–41.

8. *Бенедиктович В.И.* Спектральные условия существования максимального цикла в графе / В.И. Бенедиктович // Весці Нацыянальная Акадэміі Навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук. 2019. Том 55, №2. С. 169–175. org/10.29235/1561-2430-2019-55-2-169-175.

9. *Бенедиктович В.И.* Главные собственные значения графа и его гамильтоновость/ В.И. Бенедиктович // Весці Нацыянальная Акадэміі Навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук. 2020. Том 56, №4. С. 398–407.

10. *Гантмахер Ф.Р.* Теория матриц: учебное пособие / Ф. Р. Гантмахер. – 5-е изд. – Москва : Физматлит, 2010. 560 с.