

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
МЕХАНИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И КОМПЬЮТЕРНОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ

В.Н. Берцун

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ
НА ГРАФАХ**

Часть II



Издательство Томского университета
2013

УДК 519.17
ББК 22.174
Б 527

Рецензенты:

Доктор техн. наук, профессор ТГУ

А. Ю. Матросова

Кандидат техн. наук, доцент ТГУ

В. А. Беляев

Берцун В.Н.

Б 527 Математическое моделирование на графах. Часть 2: Томск:
Изд-во Том. ун-та, 2013. – 88 с.

ISBN 978–5–7511–2211–9

Описывается математическое моделирование прикладных задач и оптимизация вычислительных алгоритмов для высокопроизводительных компьютеров (кластеров).

В книге содержатся три раздела теории графов: матрицы, связанные с графами, характеристические числа графов и параллельные алгоритмы на графах.

Для специалистов, занимающихся математическим моделированием прикладных задач, и студентов математических и физико-математических факультетов.

УДК 519.17
ББК 22.174

ISBN 978–5–7511–2211–9

© В. Н. Берцун, 2013

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
1. МАТРИЦЫ, СВЯЗАННЫЕ С ГРАФАМИ	5
1.1. Матрица смежности и инцидентности	5
1.2. Матрица достижимости, расстояний и примыканий	11
1.3. Матрица Кирхгофа и точки Штейнера	15
1.4. Информационный граф	19
2. ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЕ ЧИСЛА ГРАФОВ	23
2.1. Цикломатическое число	23
2.2. Хроматическое число и хроматический индекс	26
2.3. Хроматический многочлен	29
2.4. Спектры графов	35
2.5. Число внутренней устойчивости графа	42
2.6. Число внешней устойчивости графа	45
3. ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ НА ГРАФАХ	48
3.1. Алгоритм Дейкстры	48
3.2. Алгоритм Флойда и его модификация	55
3.4. Параллельный алгоритм Флойда	60
3.5. Параллельный алгоритм нахождения коэффициентов характеристического многочлена графа	63
3.6. О разделении графа на домены	66
3.7. Математическое моделирование теплообмена в стержневых системах	69
ЛИТЕРАТУРА	75
ПРИЛОЖЕНИЕ 1	77
ПРИЛОЖЕНИЕ 2	84

ВВЕДЕНИЕ

Граф – это наглядный образ, который дает максимум пространственных и структурных представлений, является одним из гибких математических объектов, способных легко приспосабливаться под любую конкретную модель [1–5].

Графами представляются схемы авиалиний и схемы метро, нейронные сети, а на географических картах – реки и железные дороги. В виде графов можно изображать химические молекулы и отношения между людьми, электронные схемы и информационную структуру алгоритмов. Свойства и алгоритмы теории графов используются в поисковых системах, обработке изображений, а также при решении задач логистики, гемодинамики, управления рисками и динамики механических систем.

Большинство численных методов решения краевых задач основаны на моделировании непрерывной области изменения независимых переменных связным графом (регулярной или нерегулярной сеткой). Значительный интерес представляет решение прикладных задач по расчету, например, стержневых систем, характеристик течения в системах трубопроводов, теплового состояния электрических сетей, область определения которых является связным графом.

При создании экономичных параллельных вычислительных алгоритмов на графах большой размерности часто требуется обеспечить сбалансированную загрузку процессоров кластера на основе рационального разбиения многомерного сеточного графа на домены с учетом минимизации обменов.

2. ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЕ ЧИСЛА ГРАФОВ

2.1. Цикломатическое число

Рассмотрим мультиграф G , у которого n – вершин, m – ребер, p – компонент связности. Число $\lambda(G) = m - n + p$ называется *цикломатическим числом* мультиграфа G . На рис.2.1 представлены графы и их цикломатические числа [1].

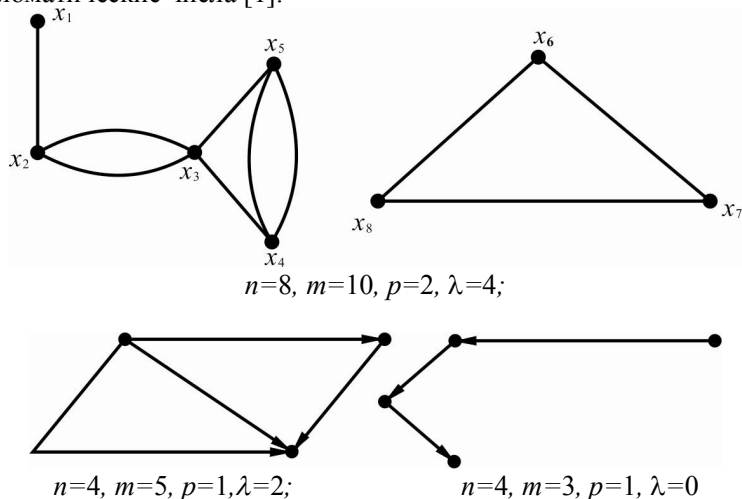


Рис. 2.1. Цикломатические числа графов

Утверждение 2. Цикломатическое число графа не может быть отрицательным.

Доказательство. Для простого графа с n вершинами и p компонентами рассмотрим неравенство $m \geq n - p$. Докажем его справедливость методом индукции. Для графа с числом ребер $m=0$ (n изолированных вершин) неравенство очевидно. В связном графе удаление ребра из каждого цикла не нарушает связности полученного графа, а число удаленных ребер совпадает с числом циклов. Минимальное число ребер m_0 , при котором каждая компонента графа будет еще оставаться связной, соответствует остовному лесу. Удаление ребра из такого леса приводит к увеличению компонент связности на единицу. Поэтому, пусть верно неравенство

$$m_0 - 1 \geq n - (p+1), \text{ тогда } m_0 \geq n - p \Rightarrow \lambda \geq 0.$$

Пример. На острове имеются рисовые поля, окруженные плотинами (см. рис. 2.2). В каком минимальном количестве плотин (ребер графа) необходимо сделать отверстия для орошения всех полей.

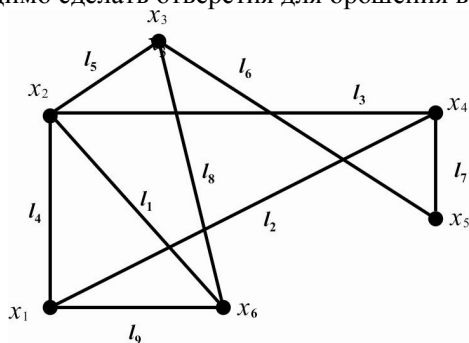


Рис. 2.2. Граф полей

Задача будет решена, если разомкнуть все циклы, а минимальное число ребер, которое при этом придется удалить, совпадает с цикломатическим числом $\lambda=4$. Удалив 4 ребра, например l_2, l_6, l_8, l_9 , превратим граф G в остовное дерево, изображенное на рис 2.3

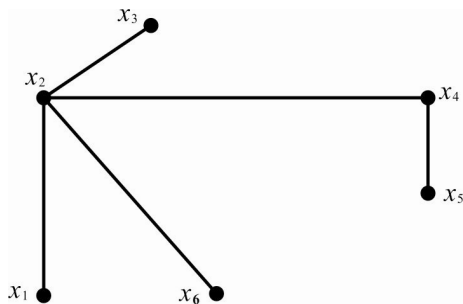


Рис. 2.3. Остовное дерево графа 2.2

Если удалить ребер больше $\lambda=4$, то из графа G получится лес. Задача имеет столько решений, сколько существует каркасов у графа.

Рассмотрим теперь граф на рис. 2.4а, для которого $\lambda=2$. Придадим каждому ребру графа (e_1, e_2, e_3, e_4, e_5) произвольную ориентацию, тогда получим соответствующий орграф 2.4б.

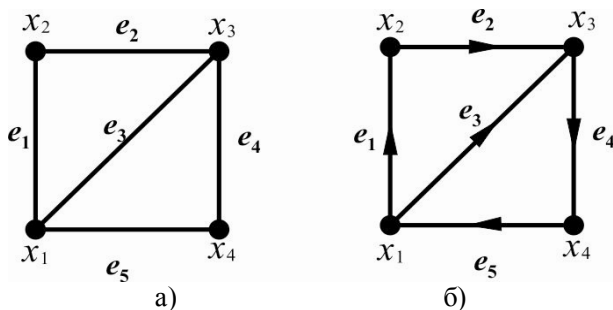


Рис. 2.4. Граф и его ориентация

У графа 2.4а имеются, например, циклы

$$d_1=(x_1, x_2, x_3, x_1), d_2=(x_1, x_2, x_3, x_4, x_1), d_3=(x_3, x_1, x_4, x_3).$$

Говорят, что цикл $d_1=(x_1, x_2, x_3, x_1)$ проходит дугу e_1 и e_2 в прямом направлении (по ориентации), а e_3 в обратном направлении (против ориентации). *Вектор-циклом* $C(d)$ называется вектор размерности m с компонентами

$$c_i(d)=r_i(d)-s_i(d),$$

где $r_i(d)$, $s_i(d)$ – число проходов цикла d по дуге e_i в прямом и обратном направлении соответственно [18]. Например,

$$C(d_1)=[1, 1, -1, 0, 0], C(d_2)=[1, 1, 0, 1, 1], \\ C(d_3)=[0, 0, -1, -1, -1].$$

Циклы d_i называются *линейно независимыми*, если соответствующие им вектор - циклы $C(d_i)$, $(i=1, \dots, \lambda)$ линейно независимы. Очевидно, что цикл $C(d_2)$ является линейно зависимым, так как

$$C(d_2)=1 C(d_1)+(-1) \cdot C(d_3).$$

Любой непростой цикл всегда можно представить как линейную комбинацию простых циклов.

Независимое максимальное множество простых циклов называется *фундаментальными циклами (базисом циклов)*. В каждом базисном цикле есть одно ребро, не содержащееся в других циклах базисного множества. Базис циклов связного графа, например, на рис. 2.2 может быть получен добавлением к его каркасу на рис. 2.3 ребер (хорд) графа, образующих независимые простые циклы (каждый из них содержит ребро, не принадлежащее ни одному из остальных циклов). Оче-

видно, что количество таких циклов в графе совпадает с цикломатическим числом λ , но определяется неоднозначно, так как зависит от выбранного каркаса (остовного дерева).

Матрица $\zeta(C)$ размерности $\lambda(G) \times t$, составленная из векторов базиса, называется *циклматической матрицей*. Для графа из рис.2.4 она имеет вид

$$\zeta(C) = \begin{vmatrix} 1, 1, -1, 0, 0 \\ 0, 0, -1, -1, -1 \end{vmatrix}.$$

2.2. Хроматическое число и хроматический индекс

Говорят, что граф G является P -хроматическим, если его вершины можно раскрасить P различными цветами таким образом, чтобы никакие две смежные вершины не были окрашены одинаково. Наименьшее из чисел P называется *хроматическим числом* $\chi(G)$. На рис.2.5 номера вершин соответствуют правильным раскраскам графов.

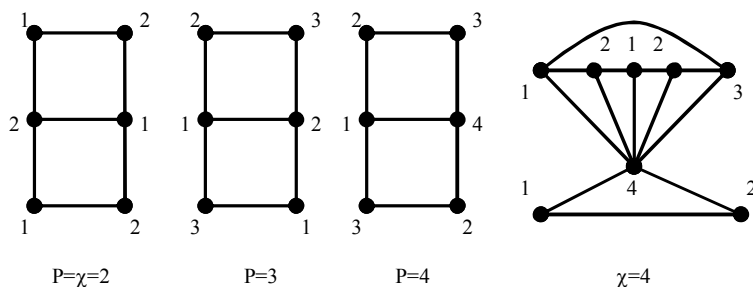


Рис. 2.5. Правильные раскраски графов

Утверждение 3. (Теорема Кенига, 1936 г.). Граф двучетен (бихроматический) тогда и только тогда, когда он не содержит нечетных простых циклов.

Доказательство. Будем рассматривать связный граф. Если он не связный, то можно рассмотреть все его компоненты связности отдельно.

1. Вершины цикла нечетной длины нельзя окрасить в два цвета. Значит, если у графа есть циклы нечетной длины, то он не может быть бихроматическим.

2. Пусть граф не имеет циклов нечетной длины. Начинаем с любой вершины графа и окрашиваем её в красный цвет. Все смежные

с ней – в желтый, смежные с желтой вершиной – в красный цвет и так далее. Так как циклов нечетной длины нет, то, если этот процесс на каком-то шаге приводит к уже окрашенной вершине, для которой цвета старой и новой окраски совпадут. □

Задача нахождения χ для произвольного графа не может быть решена только по информации о числе вершин и ребер графа. Например, на рис. 2.6 представлены два графа с одинаковым числом вершин и ребер ($n=12, m=16$), но с разными χ .

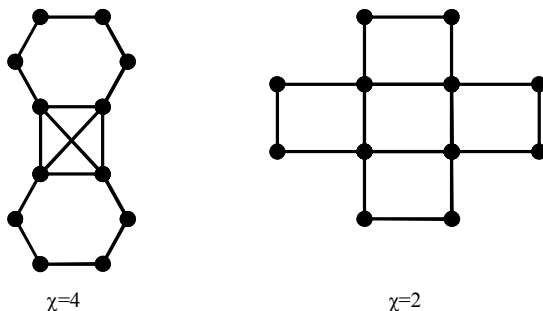


Рис. 2.6. Графы с различными хроматическими числами

Для хроматического числа графа известна оценка [9]

$$\chi(G) \leq v_m + 1,$$

где v_m – максимальная степень вершин графа G .

Например, для одного из графов на рис. 2.7 $\chi = v_m + 1$.

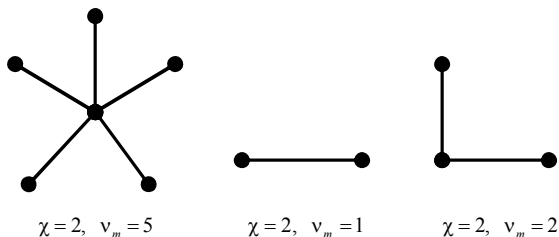


Рис. 2.7. Хроматические числа деревьев

Говорят, что граф G является реберно P -раскрашиваемым, если его ребра можно раскрасить P различными цветами таким образом, чтобы никакие два смежных ребра не были окрашены одинаково. Наименьшее из чисел P , при котором граф является реберно P -рас-

крашиваемым, называется хроматическим индексом (хроматическим классом) $\chi_r(G)$ этого графа.

Для хроматического индекса графа существует оценка Визинга [9]

$$v_m \leq \chi_r(G) \leq v_m + 1,$$

где v_m – максимальная степень вершин графа G . Например,

$$\chi_r(C_{2n})=2, \chi_r(C_{2n+1})=3, \chi_r(K_{2n})=2n-1.$$

При правильной реберной раскраске графа множество ребер одинакового цвета является паросочетанием [14], а $\chi_r(G)$ является наименьшим числом паросочетаний для ребер графа.

Реберным графом $L(G)$ графа G называется граф, вершины которого соответствуют ребрам G , и две вершины являются смежными в $L(G)$ тогда и только тогда, когда соответствующие им ребра графа G смежны. На рис. 2.8 приведен пример графа G и соответствующего реберного графа $L(G)$.

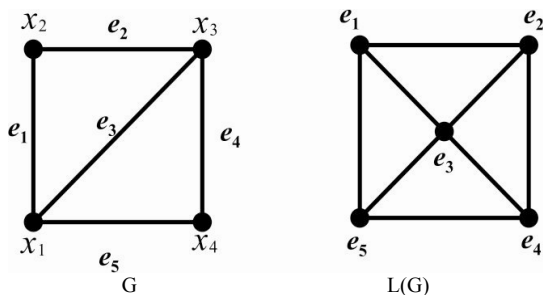


Рис. 2.8. Граф G и его реберный граф $L(G)$

Очевидно, что $\chi_r(G) = \chi(L(G))$ по определению.

Реберная раскраска часто используется при создании сложных электротехнических устройств, где монтажные провода, соединяющиеся в одной вершине, должны (для удобства сборки и контроля) иметь разные цвета.

Исторически понятие хроматического числа и хроматического индекса возникло в середине XIX века в связи с проблемой правильной оптимальной раскраски географической карты на глобусе или плоскости [21]. Если на плоской карте в качестве вершин графа выбрать столицы стран и соединить ребрами те из них, соответствующие государства которых имеют общий участок границы, то

получим плоский граф. Таким образом, задача о раскраске плоской карты сводится к раскраске плоского графа. В 1852 г. Ф. Гутри впервые выдвинул предположение, что для этих целей достаточно четырех красок. Только в 1878 г. в трудах Лондонского географического общества математик Кэли опубликовал точную формулировку гипотезы четырех красок: *каждый плоский (планарный) граф 4 раскрашиваем.*

Гипотеза была доказана А. Кемпе в 1879 г., но в 1890 г. П. Хивуд обнаружил ошибку в доказательстве А. Кемпе и доказал теорему о том, что любая карта на сфере может быть правильно раскрашена пятью красками. В 1977 г. доказательство гипотезы четырех красок было получено К. Аппелем и В. Хакеном, но при этом для раскраски неустраиваемых конфигураций использовался компьютер.

2.3. Хроматический многочлен

Рассмотрим помеченный граф G . Раскраской графа t цветами называется раскраска G , использующая t или меньше цветов. Две раскраски t цветами различны, если хотя бы одной вершине приписаны разные цвета.

Пусть целочисленная функция $f(G, t)$ – число раскрасок графа t цветами. Если $\chi(G) > t$, то $f(G, t) = 0$ по определению $\chi(G)$. Тогда очевидно, что наименьшее количество красок t , для которых $f(G, t) > 0$, совпадает с $\chi(G)$.

Примеры

1. Рассмотрим полный граф K_3 на рис. 2.9. Любую выбранную его вершину можно окрасить t способами, но тогда для второй вершины остается $(t - 1)$ цветов, для третьей – $(t - 2)$.

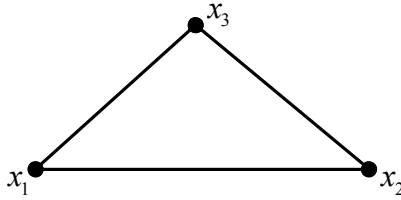


Рис. 2.9. Полный граф K_3

Поэтому

$$f(K_3, t) = t(t-1)(t-2),$$

$$f(K_n, t) = t(t-1)(t-2)\cdots(t-n+1), \text{ если } t \geq n.$$

2. Для двудольного графа $K_{l,4}$ на рис 2.10 центральную вершину x_0 можно окрасить t цветами, а любую висячую $(t-1)$ способами.

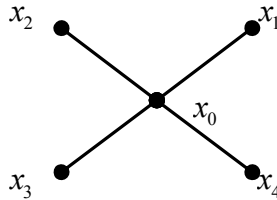


Рис. 2.10. Двудольный граф $K_{l,4}$

Тогда

$$f(K_{1,4}, t) = t(t-1)^4, \quad f(K_{1,n}, t) = t(t-1)^n, \quad t \geq 2.$$

Поэтому с графом можно связать хроматический многочлен (хроматическую функцию) $f(G, t)$, который задан на множестве натуральных чисел со значением в том же множестве ($f: N \rightarrow N$) [22-25]. Очевидно, что не всякий многочлен является хроматическим многочленом некоторого графа.

Важный практический интерес имеет задача построения хроматического многочлена для любого связного графа. С этой целью введем понятие стягивания двух несмежных вершин u и w графа G (см. рис. 2.11). Будем считать, что стягивание приводит к построению нового

графа G_c , у которого вершину w со всеми приходящими в нее ребрами как бы приклеивают к вершине u , растягивая при этом некоторые ребра. Например,

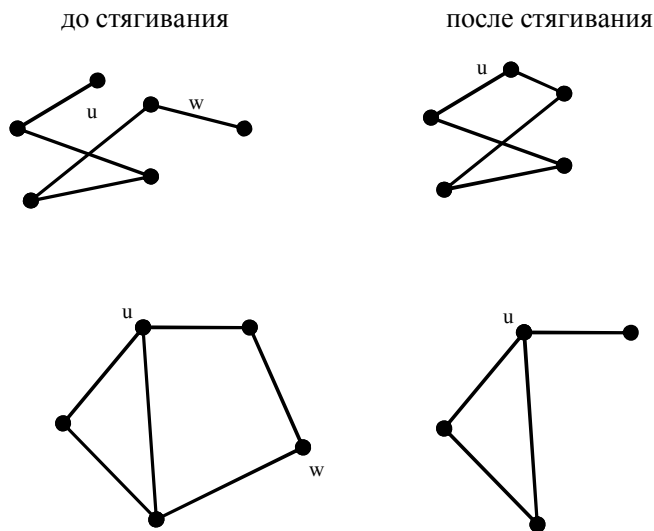


Рис. 2.11. Геометрическая интерпретация стягивания двух вершин графа

Таким образом, стягивание графа $G(V, E)$ приводит к построению нового графа $G_c(V', E')$, в котором $V' = V \setminus \{w\}$, а множество ребер E' состоит из двух подмножеств: первое подмножество - это все ребра из E , не инцидентные ни u , ни w ; второе подмножество состоит из всех ребер, инцидентных u , и всех пар (u, x) таких, что $(w, x) \in E$.

Утверждение 4. Пусть u и w - две несмежные вершины графа G . Если граф G_1 получен добавлением к G ребра (u, w) , а граф G_c соответствует стягиванию вершин $(w \rightarrow u)$, то

$$f(G, t) = f(G_1, t) + f(G_c, t). \quad (2.1)$$

Доказательство. Все правильные раскраски графа G состоят из раскрасок, в которых цвета вершин u и w различны, и раскрасок, в которых цвета в этих несмежных вершинах совпадают. В первом случае добавление ребра (u, w) не изменит количества раскрасок гра-

фа t цветами, и оно будет определяться функцией $f(G, t)$. Во втором случае количество раскрасок графа совпадает с функцией $f(G_c, t)$. Тогда общее число раскрасок определяется формулой (2.1). □

Для простого графа можно получить приведённый хроматический многочлен

$$f(G, t) = t^n + a_{n-1}t^{n-1} + \dots + a_2t^2 + a_1t, \quad (2.2)$$

сводя его нахождение к определению линейной комбинации хроматических многочленов полных графов. При этом в (2.2) знаки коэффициентов чередуются и $a_{n-1} = -m$, где m – число ребер графа.

При построении хроматического многочлена будем использовать графическую интерпретацию записи формулы (2.1) $G = G_1 + G_c$, т.е. рисовать соответствующие ей графы. На рис. 2.12 приведен пример построения $f(G, t)$ для графа с $n=4$ и $m=5$

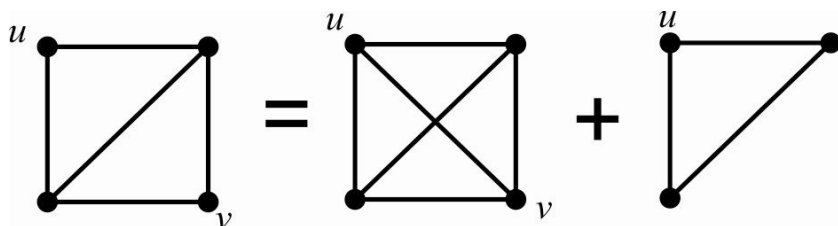


Рис. 2.12. Графы: G, G_1, G_c

$$f(G, t) = f(K_4, t) + f(K_3, t) = t(t-1)(t-2)(t-3) + t(t-1)(t-2) = t^4 - 5t^3 + 8t^2 - 4t.$$

Если граф состоит из n изолированных вершин, то $f(G, t) = t^n$.

Хроматический многочлен можно вычислить сразу по степеням переменной t , если (2.1) переписать в виде [26]

$$f(G_1, t) = f(G, t) - f(G_c, t). \quad (2.3)$$

Например,

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{ccccccc}
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 | & & | & & | & & | \\
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 | & & | & & | & & | \\
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 \end{array} \\
 = \\
 \begin{array}{ccccccc}
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 | & & | & & | & & | \\
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 | & & | & & | & & | \\
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 \end{array} - \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} = \\
 \begin{array}{ccccccc}
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 | & & | & & | & & | \\
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 | & & | & & | & & | \\
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 \end{array} - 2 \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} = \\
 = \\
 \begin{array}{ccccccc}
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 | & & | & & | & & | \\
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 | & & | & & | & & | \\
 \bullet & & \bullet & & \bullet & & \bullet \\
 \end{array} - 3 \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} + 2 \bullet
 \end{array}$$

Тогда

$$f(K_3, t) = t^3 - 3t^2 + 2t.$$

Задача составления расписания занятий является одним из примеров практического применения раскраски графов [11].

Пример

Четыре лекции, каждая из которых длится час, можно прочитать или в первую смену за 3 часа с 9.00 до 12.00, или во вторую смену за 4 часа с 14.00 до 18.00. Невозможность одновременного чтения лекций задана табл. 2.1.

Таблица 2.1

Таблица несовместимости лекций

Дисциплины	Алгебра	Информатика	Физика	Геометрия
Алгебра		+	+	
Информатика	+		+	+
Физика	+	+		
Геометрия		+		

Найти число вариантов распределения лекций по промежуткам времени в первую и во вторую смену.

Решение. Пользуясь табл. 2.1, построим граф H несовместимости лекций, изображенный на рис.2.13.

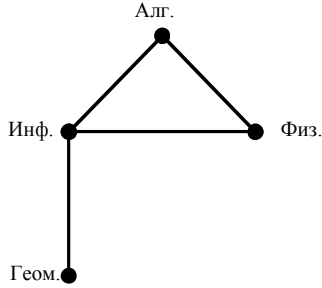


Рис. 2.13. Граф H несовместимости лекций

Каждому часовому промежутку времени поставим в соответствие свой цвет. Тогда число вариантов распределения лекций по временным промежуткам в первую смену будет равно числу различных способов правильной раскраски графа H тремя цветами, а во вторую смену – четырьмя цветами.

Найдем хроматическую функцию построенного графа G , пользуясь графическими преобразованиями из рис. 2.14

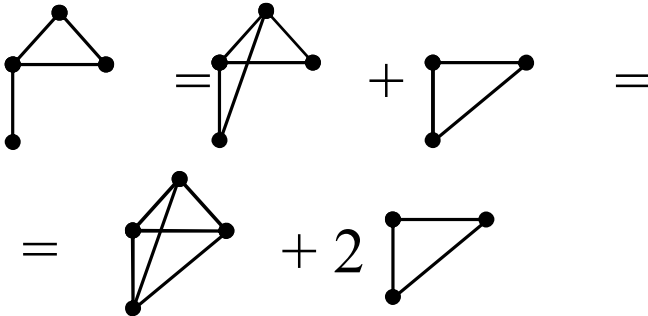


Рис. 2.14. Представление $f(G, t)$ в виде линейной комбинации хроматических многочленов полных графов

Таким образом,

$$\begin{aligned}
 f(H, t) &= f(K_4, t) + 2 \cdot f(K_3, t) = \\
 &= t(t-1)(t-2)(t-3) + 2 \cdot t(t-1)(t-2) = \\
 &= t^4 - 4t^3 + 5t^2 - 2t.
 \end{aligned}$$

Тогда $f(H, 3)=12$, а $f(H, 4)=72$. Следовательно, есть 12 вариантов чтения лекций в первую смену и 72 варианта расписания для второй смены.

2.4. Спектры графов

Спектральная теория графов исследует один из инвариантов изоморфных графов [9, 27].

Известно, что умножение квадратной матрицы A на вектор \bar{x} преобразует его в некоторый вектор \bar{b} . Если этот преобразованный вектор имеет то же самое направление, что и исходный, то его компоненты пропорциональны компонентам вектора \bar{x} . В этом случае получим условие

$$A\bar{x} = \lambda\bar{x} . \quad (2.4)$$

Такая однородная система имеет ненулевое решение, если

$$\det(A - \lambda E) = 0.$$

Значения λ называют собственными значениями матрицы A , а соответствующие ненулевые решения системы (2.4) - собственными векторами. Если A - матрица смежности графа, то ее собственные значения называют *собственными значениями* графа G .

Спектром графа G называется совокупность корней характеристического многочлена $P_G(\lambda)$ его матрицы смежности A размерности n с учетом их кратности

$$P_G(\lambda) = \det(A - \lambda E) = (-1)^n [\lambda^n + c_1\lambda^{n-1} + \dots + c_n].$$

Если $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ - собственные значения графа G , то его *спектр*

$$S_n(G) = [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n].$$

Из определения спектра следует, что изоморфные графы имеют один и тот же спектр. Рассмотрим примеры вычисления спектра графа.

1. Для графа на рис. 2.15

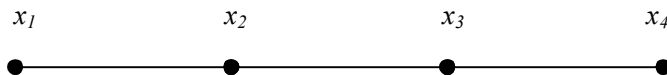


Рис. 2.15. Связный граф для $n=4$

матрица смежности и характеристический многочлен и спектр имеют вид

$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, P_G(\lambda) = \lambda^4 - 4 \cdot \lambda^2 + 1,$$

$$S_4(G) = \left[\sqrt{2+\sqrt{3}}, -\sqrt{2+\sqrt{3}}, \sqrt{2-\sqrt{3}}, -\sqrt{2-\sqrt{3}} \right].$$

2. Для графа K_5 на рис. 2.16

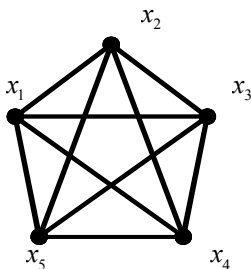


Рис. 2.16 Полный граф K_5

$$A(K_5) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}, P_{K_5}(\lambda) = \lambda^5 - 10\lambda^3 - 20\lambda^2 - 15\lambda - 4,$$

$$S_5(K_5) = [4, -1, -1, -1, -1].$$

Характеристический многочлен содержит дополнительную информацию о графе. Так как матрица смежности графов всегда неотрицательна ($a_{ij} \geq 0$), то ее спектр обладает свойствами спектра неотрицательных матриц.

Для собственных чисел простых неориентированных графов имеют место следующие свойства [28]:

1) собственные числа $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ — действительные числа и $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n = 0$;

2) для графа из n изолированных вершин $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_n = 0$;

3) $\det(A) = (-1)^n \prod \lambda_i$.

По спектру графа G можно определять различные его характеристики, а в [29] содержится обширный каталог спектров различных графов.

Отметим, что матрицы смежности изоморфных графов подобны, а вещественная симметрическая матрица (матрица смежности) определяется своим спектром с точностью до подобия. Однако из совпадения характеристических полиномов графов не следует изоморфизм этих графов, так как матрицы, имеющие одинаковые собственные значения, не обязательно подобны.

Такие неизоморфные графы с равными характеристическими многочленами называются *коспектральными*. Например, на рис. 2.17 приведено два таких графа, спектры которых совпадают.

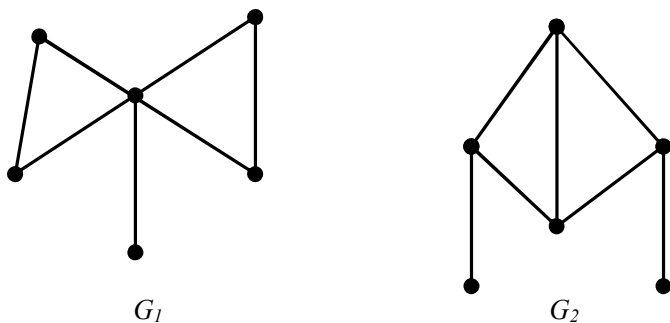


Рис. 2.17. Коспектральные графы

$$P_{G_1}(\lambda) = P_{G_2}(\lambda) = \lambda^6 - 7\lambda^4 - 4\lambda^3 + 7\lambda^2 + 4\lambda - 1,$$

$$S_6(G_1) = S_6(G_2) = [2.709, 1, 0.194, -1, -1, -1.903].$$

Спектральная теория графов получает все более широкое распространение при решении важных задач практики, например, при анализе основных параметров новых компьютерных систем. В квантовой химии при исследовании устойчивости молекул применяется модель сильной связи [30], что приводит к необходимости использовать матрицу смежности графа, содержащую информацию о геометрической конфигурации молекулярного или кластерного соединения атомов вещества. Устойчивость молекулы, а также другие важные химические свойства получаются на основе анализа спектра графа и соответствующих собственных векторов.

Одним из крупных научных открытий конца XX века в области химии являются фуллерены (1985 г.) - новая аллотропная форма углерода [31-32]. Фуллеренами называют замкнутые молекулы углерода, в которых все атомы расположены в вершинах правильных шестиугольников или пятиугольников, покрывающих поверхность сферы или сфероида. Такое название новые искусственные молекулы получили в честь американского архитектора Бакминстера Фуллера, который использовал такие структуры при конструировании куполов зданий. Наиболее устойчивой из фуллеренов является молекула C_{60} , регулярный граф которой представлен на рис. 2.18.

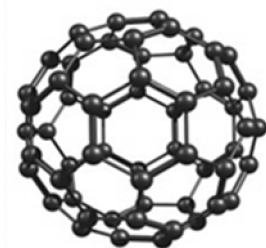
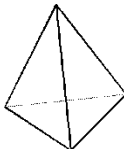
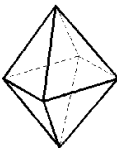
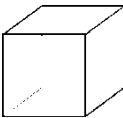
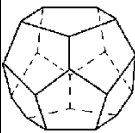
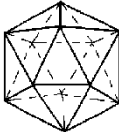


Рис. 2.18. Фуллерен C_{60}

Диаметр такой молекулы порядка одного нанометра. По своей форме выпуклый многогранник C_{60} (Архимедов усеченный икосаэдр) изоморфен крышке футбольного мяча, стандарт которого был принят в 1948 г. Пусть R_0 – радиус сферы, на поверхности которой лежат все вершины икосаэдра, тогда $R_0 \approx 0.951 \cdot L$, где $L = a$ – длина ребра икосаэдра из табл. 2.2.

Таблица 2.2

Основные характеристики пяти правильных многогранников

	Тетраэдр	Октаэдр	Гексаэдр	Додекаэдр	Икосаэдр
<i>m</i>	6	12	12	30	30
<i>n</i>	4	6	8	20	12
<i>f</i>	4	8	6	12	20
<i>n-m+f</i>	2	2	2	2	2
<i>R</i>	$\frac{a}{4}\sqrt{6}$	$\frac{a}{2}\sqrt{2}$	$\frac{a}{2}\sqrt{3}$	$\frac{a}{4}(1+\sqrt{5})\sqrt{3}$	$\frac{a}{4}\sqrt{2(5-\sqrt{3})}$
<i>r</i>	$\frac{a}{12}\sqrt{6}$	$\frac{a}{6}\sqrt{6}$	$\frac{a}{2}$	$\frac{a}{4}\sqrt{10+\frac{22}{\sqrt{5}}}$	$\frac{a}{4\sqrt{3}}(3+\sqrt{5})$
<i>S</i>	$a^2\sqrt{3}$	$2a^2\sqrt{3}$	$6a^2$	$3a^2\sqrt{5(5+2\sqrt{5})}$	$5a^2\sqrt{3}$
<i>V</i>	$\frac{a^3}{12}\sqrt{2}$	$\frac{a^3}{3}\sqrt{2}$	a^3	$\frac{a^3}{4}(15+7\sqrt{5})$	$\frac{5a^3}{12}(3+\sqrt{5})$
					

Здесь *m* – число ребер многогранника, *n* – число вершин,
f – число граней, *R* – радиус описанной сферы, *r* – радиус вписанной сферы, *S* – площадь поверхности, *V* – объем, *a* – ребро.

Если на расстоянии $L/3$ от некоторой вершины икосаэдра *x* на пяти инцидентных ей ребрах ввести новые вершины графа и провести через них плоскость, то она отсечет правильную пятиугольную пирамиду со стороной основания $a=L/3$, как показано на рис. 2.19



Рис. 2.19. Икосаэдр и усеченный икосаэдр

Осуществив такую операцию для каждой из 12 вершин икосаэдра, получим усеченный икосаэдр ($n=60$, $m=90$, $f=32$), содержащий 12 пятиугольных и 20 шестиугольных граней. Очевидно, что число «золотых пропорций» в усеченном икосаэдре увеличивается, поскольку на его поверхности появляется 12 плоских правильных пятиугольников, диагонали которых пересекаются в точках золотого сечения.

Граф C_{60} является регулярным степени три, а каждая его вершина принадлежит одновременно двум шестиугольным и одной пятиугольной граням. Каждая правильная пятиугольная грань в такой структуре граничит с правильными шестиугольными гранями. При этом имеют место следующие соотношения:

$$R_0 \approx 2,853 \cdot a, \quad R_1 \approx 2,478 \cdot a, \quad h_6 \approx 2,267 \cdot a, \quad h_5 \approx 2,327 \cdot a,$$

где a – длина ребра графа C_{60} , R_0 – радиус сферы икосаэдра, R_1 – радиус сферы усеченного икосаэдра, h_6 – расстояние от центра сферы до центра шестиугольной грани, h_5 – расстояние от центра сферы до центра пятиугольной грани, $L=3a$. Для вычисления площади S и объема V усеченного икосаэдра, с длиной ребра a , можно использовать формулы:

$$S \approx 72.607a^2, \quad V \approx 55.288a^3.$$

Самая неустойчивая с наименьшим числом вершин замкнутая фуллереновая структура C_{20} соответствует графу додекаэдра.

Известно, что для любого выпуклого многогранника эйлера характеристика $n-m+f=2$. Для фуллерена, содержащего f_5 пятиугольных граней и f_6 шестиугольных, $f=f_5+f_6$. Но каждая вершина принадлежит трем соседним граням, а каждое ребро – только двум. Поэтому $3n=5f_5+6f_6$, $2m=5f_5+6f_6$. Тогда $6(n-m+f)=f_5$, а это означает, что в любом фуллерене всегда 12 пятиугольных граней.

В 1991 г. были открыты нанотрубки, молекулы которых содержат более миллиона атомов углерода и представляют собой полую структуру цилиндрической формы диаметра от одного до десятков нанометров. Поверхность такой трубки состоит из шестиугольников, в вершинах которых находятся атомы углерода, а ее прочность превышает прочность стали. Верхние концы трубок (см. рис. 2.20) могут быть закрыты полусферическими крышечками, состоящими из шести- и пятиугольников, напоминающих структуру половины молекулы фуллерена.

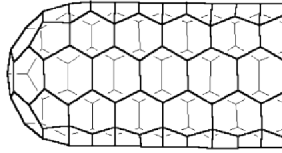


Рис. 2.20. Граф закрытой слева нанотрубки

В 2004 г. был получен материал *графен*, который является двумерным кристаллом, состоящим из одиночного слоя атомов углерода, собранных в гексагональную решетку. Это перспективный материал нанoeлектроники, граф которого представлен на рис. 2.21.

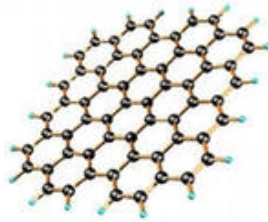


Рис. 2.21. Фрагмент графена

Спектры графов естественным образом возникают и при численном решении некоторых краевых задач математической физики. Рассмотрим, например, задачу на отыскание собственных функций и собственных значений для дифференциального уравнения

$$u''(x) + \mu \cdot u(x) = 0, \quad 0 < x < L, \quad u(0) = u(L) = 0, \quad (2.5)$$

которая имеет решение [33, 34]:

$$\mu_i = \left(\frac{\pi i}{L}\right)^2, \quad u_i(x) = \sqrt{2/L} \cdot \sin\left(\frac{\pi i x}{L}\right), \quad i = 1, 2, \dots$$

Введем на $[0, L]$ вершины связного графа G (сетку)

$$\omega: \{x_i = i \cdot h, \quad h = L/N, \quad i = 0, 1, \dots, N\}.$$

Задаче (2.5) поставим в соответствие разностную схему

$$(w_{i+1} - 2w_i + w_{i-1})/h^2 + \nu \cdot w_i = 0, \quad w_0 = w_N = 0, \quad i = \overline{1, N-1}. \quad (2.6)$$

Из (2.6), обозначив $\lambda=(2-\nu \cdot h^2)$, получим

$$\lambda w_i = w_{i+1} + w_{i-1}, i = \overline{1, N-1}, w_0 = w_N = 0.$$

Таким образом, λ являются собственными числами матрицы смежности A сеточного графа G

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Определив спектр сетки ω , найдем искомые собственные значения

$$\nu_i = (2 - \lambda_i) / h^2, i = \overline{1, N-1}$$

и соответствующие им собственные функции:

$$\nu_i = \frac{4}{h^2} \sin^2\left(\frac{\pi i h}{2L}\right), i = \overline{1, N-1}, hN = L,$$

$$w_i(x) = \sqrt{2/L} \cdot \sin\left(\frac{\pi i x}{L}\right), 0/L^2 \leq \nu_i < 4/h^2, N > 2.$$

Очевидно, что

$$\lim_{h \rightarrow 0} \nu_i = \left(\frac{\pi i}{L}\right)^2 = \mu_i.$$

2.5. Число внутренней устойчивости графа

Для графа $G=(X,\Gamma)$ подмножество вершин $S \subset X$ называется *внутренне устойчивым (независимым)*, если никакие две его вершины не смежные

$$\Gamma S \cap S = \emptyset.$$

Например, на рис.2.22 внутренне устойчивыми подмножествами являются:

$$S_1 = \{x_1, x_3\}, S_2 = \{x_5\}, S_3 = \{x_2, x_4\}, S_4 = \{x_1, x_4\}.$$

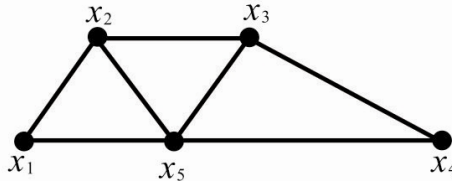


Рис. 2.22. Граф для $n=5, m=7$

Число внутренней устойчивости (вершинным числом независимости) графа G называется

$$\beta_0(G) = \max\{|S_i| \}, S_i \subset X,$$

где S_i - всевозможные внутренне устойчивые подмножества, а $|S_i|$ - количество элементов в S_i .

Примеры

1. Граф с n изолированными вершинами имеет $\beta_0(G_n) = n$.
2. Задача К. Гаусса о восьми ферзях.

Можно ли на шахматной доске (граф из 64 вершин) расставить 8 ферзей так, чтобы ни один из них не находился под ударом другого (не находился на одной вертикали, горизонтали или диагонали). Задача сводится к нахождению наибольшего внутренне устойчивого подмножества. Очевидно, что β_0 для шахматной доски не превосходит 8. Задача имеет 92 решения, один из вариантов которого представлен на рис. 2.23.

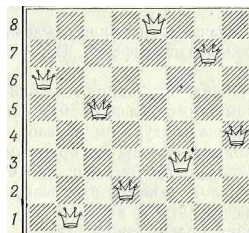


Рис. 2.23. Вариант расстановки ферзей

3. В пунктах x_1, \dots, x_6 (см. рис. 2.24) расположены источники излучения, где ребра обозначают их влияние друг на друга.

Определить максимальное количество источников, которые не влияют друг на друга.

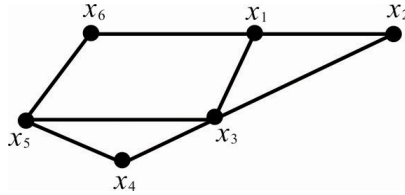


Рис. 2.24. Граф влияния источников излучения

Решение: $\beta_0=3$, $S=\{x_2, x_4, x_6\}$.

Зная β_0 , можно определить наименьшее число вершин в вершинных покрытиях α_0 из соотношения $\alpha_0 + \beta_0 = n$.

Утверждение 5. Для связного графа G верно неравенство

$$\beta_0(G) \leq m / v_0(G),$$

где m – число ребер графа, а $v_0(G)$ – минимальная степень его вершин.

Доказательство. Степень любой вершины наибольшего внутренне устойчивого подмножества не меньше чем v_0 . Так как в этом подмножестве все ребра различны и их количество не превосходит m , то $m \geq \beta_0 \cdot v_0$. □

Утверждение 6. Для связного графа G верно неравенство

$$\beta_0(G) \cdot \chi(G) \geq n,$$

где n – число вершин графа, а $\chi(G)$ – его хроматическое число.

Доказательство. Хроматическое число графа определяет количество внутренне устойчивых подмножеств, каждое из которых содержит вершины одинакового цвета. Пусть в этих множествах содержится соответственно n_1, n_2, \dots, n_χ несмежных вершин, тогда

$$n = n_1 + n_2 + \dots + n_\chi \leq \beta_0(G) \cdot \chi(G). \quad \square$$

В неориентированном графе G задачу нахождения максимально внутреннего устойчивого подмножества S можно заменить задачей о поиске в дополнении графа G максимально полного подграфа (клики) по алгоритму Брон-Кербоша со сложностью $O(3^{n/3})$ [7]. Так, например, размер максимальной клики для дополнения графа на рис.2.24 совпадает с $\beta_0=3$.

2.6. Число внешней устойчивости графа

Для графа $G=(X,\Gamma)$ подмножество $R \subset X$ называется *внешне устойчивым* (доминирующим), если для каждой вершины графа $x \notin R$ существует такая вершина $y \in R$, что

$$y = \Gamma x, \quad (\Gamma x \cap R \neq \emptyset).$$

Например, на рис. 2.25: $R_1 = \{x_1, x_3\}$, $R_2 = \{x_1, x_3, x_4\}$, $R_3 = \{x_3\}$ – внешне устойчивые подмножества, а $R_4 = \{x_1, x_4\}$ – нет.

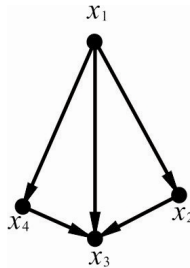


Рис. 2.25. Орграф для $n=4$

Внешне устойчивое подмножество называется *минимальным*, если оно не содержит внутри себя другого внешне устойчивого подмножества. В графе может быть несколько минимальных доминирующих подмножеств, содержащих разное количество вершин. Наименьшее из количеств вершин в подмножествах R_i , $i=1,2,\dots$ называется *числом внешней устойчивости* $\delta(G)$ (числом доминирования) графа G .

Примеры

1. Какое минимальное количество ферзей достаточно поставить на шахматной доске так, чтобы каждая клетка была под ударом хотя бы одного из них?

Считая, что вершина графа, в которой находится фигура, тоже находится под ее ударом, задача сводится к нахождению на графе с 64 вершинами наименьшего внешне устойчивого подмножества. Для ферзей $\delta=5$, а один из вариантов их расстановки представлен на рис. 2.26.

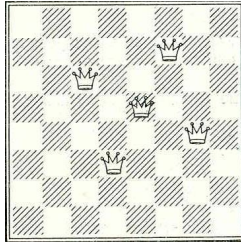


Рис. 2.26. Один из вариантов расстановки пяти ферзей

2. Какое минимальное количество видеокамер необходимо установить, чтобы держать под наблюдением 10 объектов, соответствующих графу из рис.2.27?

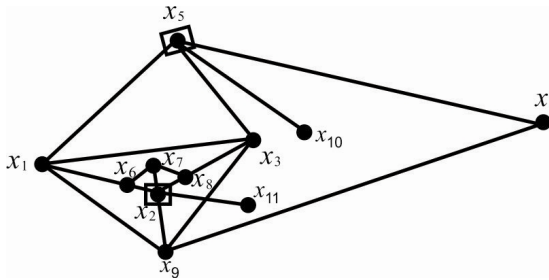


Рис. 2.27. Граф и его минимальное внешне устойчивое множество

Отметим, что при правильной раскраске графа подмножество его вершин одного цвета является внутренне устойчивым (независимым). Из определения внешне устойчивого (доминирующего) подмножества R следует, что каждая вершина простого графа $x \notin R$ находится на расстоянии единица от этого множества.

Ядром орграфа называется подмножество его вершин, являющихся одновременно и независимыми и доминирующими ($\beta_0 = \delta$). Очевидно, что ядро не может содержать петель или смежных вершин. Известно [9], что каждый орграф, не имеющий контуров нечетной длины, обладает ядром. Например, орграф G_1 на рис.2.28 не содержит ядра, а орграф G_2 имеет два ядра

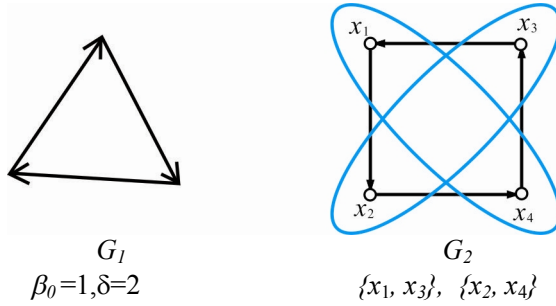


Рис. 2.28. Графы с контурами четной и нечетной длины

Задача нахождения ядер графа возникает, например, в теории игр для определения стратегии игры, теории управления, радиоэлектронике и других науках. Для нахождения ядер графа можно применять *алгоритм Магу*, использующий булеву алгебру для анализа матрицы смежности графа [35].

Научное издание

Владимир Николаевич БЕРЦУН

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
НА ГРАФАХ

Часть II

Редактор В.С. Сумарокова
Компьютерная верстка Т.В. Дьяковой

Подписано в печать 11.11.2013.
Формат 60x84¹/₁₆. Бумага офсетная № 1. Печать офсетная.
Печ. л.5,25; усл. печ. л.4,9; уч.-изд. л.4,5. Тираж 500. Заказ

ООО «Издательство ТГУ», 634029, г. Томск, ул. Никитина, 4
ООО «Интегральный переплет», 634040, г. Томск, ул. Высоцкого, 28, стр. 1