

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. – 86 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	83

ВВЕДЕНИЕ

Граф – это наглядный образ, который дает максимум пространственных и структурных представлений, является одним из гибких математических объектов, способных легко приспособливаться 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.

1. МАТРИЦЫ, СВЯЗАННЫЕ С ГРАФАМИ

1.1. Матрица смежности и инцидентности

При большом числе вершин и ребер анализ графа $G(V, E)$ усложняется и его геометрическое представление не всегда удобно. В этом случае для исследования графа применяют один из аналитических способов представления его структурных свойств – граф моделируют матрицами, связанными с ним [1, 6, 7]. Это позволяет эффективно применять методы компьютерной алгебры для анализа графов.

Матрицей смежности вершин помеченного графа G называется матрица $A = [a_{ij}]^n$, где элемент a_{ij} есть число ребер, соединяющих вершины x_i и x_j , при этом петля означает одно ребро. На рис.1.1 приведены матрицы смежности для простого графа, мультиграфа и графа с петлями.

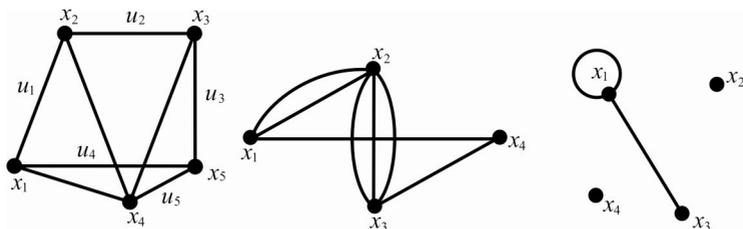


Рис. 1.1. Различные типы графов

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Можно получить несколько вариантов матриц смежности одного и того же графа, меняя обозначения его вершин. Это приведет к изменению порядка строк и столбцов матрицы A .

Матрица смежности особенно удобна для представления *плотных* графов с множеством вершин V и множеством ребер E , для которых $|E| \approx (|V|^2 / 2)$.

Для представления разреженных графов ($|E| \ll |V|^2$) более экономичным (с точки зрения объема памяти) является представление графа списками смежности [8].

Отметим, что матрица A для графа с p компонентами связности, при соответствующей нумерации вершин, является блочно-диагональной.

Матрицей смежности ребер графа G называется симметричная матрица $B = [b_{ij}]_l^m$, где

$$b_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если ребро } u_i \text{ смежно с ребром } u_j; \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Матрица B неориентированного графа обладает теми же свойствами, что и матрица смежности A .

Матрицей инцидентности графа G называется матрица $R = [r_{ij}]$, $i = 1, 2, \dots, n$; $j = 1, 2, \dots, m$; у которой

$$r_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если ребро } u_j \text{ инцидентно вершине } x_i; \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Например, граф на рис.1.2 содержит 5 вершин и 6 ребер.

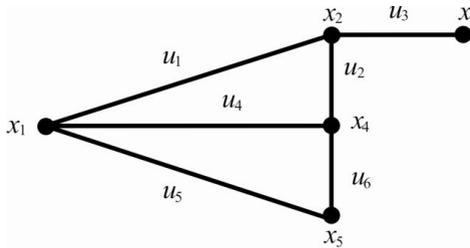


Рис. 1.2. Простой граф

Для такого графа матрицы A , B и R имеют вид

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

У простых графов G матрицы A и B – бинарные и симметричные.

Запишем для бинарной матрицы A ее верхнюю треугольную часть в строчку по строкам подряд для заданной нумерации вершин $(a_{12}, a_{13}, \dots, a_{1n}, a_{23}, \dots, a_{2n}, a_{34}, \dots, a_{n-1n})$, что можно интерпретировать как некоторое двоичное число. Меняя нумерацию вершин графа, будем получать различные двоичные числа. Наибольшее из этих чисел (полный инвариант графа) называется кодом Харари. Для изоморфных графов их полные инварианты совпадают. Нумерация вершин (и матрица смежности), соответствующая коду Харари, называется *канонической*.

Матрицей смежности вершин орграфа \bar{G} называется матрица

$$A = [a_{ij}]_i^n \text{ с элементами } a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } x_i x_j \text{ – дуга графа} \\ 0 & \text{– в остальных случаях.} \end{cases}$$

Например, такая матрица для графа на рис.1.3

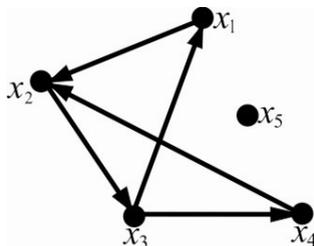


Рис. 1.3. Орграф с изолированной вершиной

имеет вид

$$A(\bar{G}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Очевидно, что сумма элементов по строкам этой матрицы равна сумме степеней выхода вершин графа, а сумма по столбцам равна сумме степеней входа. Сумма элементов этой целочисленной матрицы совпадает с числом дуг орграфа.

Матрица смежности не является инвариантом (зависит от нумерации вершин), но (ор)граф по ней восстанавливается однозначно, с точностью до изоморфизма. Для изоморфных (ор)графов их матрицы смежности получаются друг из друга одинаковыми перестановками строк и столбцов (являются подобными). Заметим, что проверка двух графов на изоморфизм с помощью перестановки строк и столбцов одной из матриц смежности имеет сложность $O(n!)$.

Рангом графа называется ранг (наивысший порядок отличных от нуля миноров матрицы) его матрицы смежности [8, 9]. Граф называется *симметричным*, если его матрица смежности симметрична.

Рассмотрим для ациклического графа на рис.1.4, который не имеет контуров, степени его матрицы смежности A

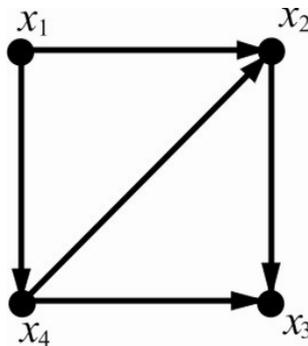


Рис. 1.4. Ациклический орграф

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad A^2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad A^3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad A^4 = 0.$$

Заметим, что у этого графа существует только один путь длины 3 из x_1 в x_3 и нет путей длины больше трех.

Утверждение 1[9]. Пусть $A = [a_{ij}]_i^n$ – матрица смежности орграфа. Элемент $a_{ij}^{(k)}$, состоящий на пересечении i -той строки и j -го столбца матрицы A^k , равен числу различных путей длины k , идущих из x_i в x_j . Диагональный элемент $a_{ii}^{(k)}$ матрицы A^k равен числу различных контуров (ориентированных циклов) длины k , содержащих вершину x_i .

Доказательство. Если a_{ik} – число дуг, соединяющих x_i с x_k , a_{kj} – число дуг, соединяющих x_k с x_j , то $a_{ik}a_{kj}$ – число различных маршрутов (путей), каждый из которых состоит из двух дуг, соединяющих x_i с x_j и проходящих через вершину x_k . Если теперь просуммировать попарные произведения $a_{ik}a_{kj}$ по всем промежуточным вершинам x_k , то получим общее число ориентированных маршрутов длины 2 от x_i до x_j . С другой стороны, это будет элемент $a_{ij}^{(2)}$ матрицы A^2 .

$$a_{ij}^{(2)} = \sum_{k=1}^n a_{ik}a_{kj}, \quad i, j = 1, \dots, n.$$

Пусть теперь $a_{ij}^{(2)}$ – число маршрутов длины 2 из $x_i \rightarrow x_j$, a_{jm} – число маршрутов из одной дуги (x_j, x_m) . Тогда число маршрутов длины 3, проходящих через x_j , будет $a_{ij}^{(2)}a_{jm}$. Если теперь $a_{ij}^{(2)}a_{jm}$ просуммировать по всем j , то получим элементы матрицы $A^3 = A^2A = [a_{ij}^{(3)}]_i^n$.

Допустим, что теорема верна для A^{k-1} тогда $A^k = A^{k-1}A$. \square

Замечание 1. Если $A^{k+1} = A^{k+2} = \dots = 0$, то граф не имеет путей длины больше k и не имеет контуров.

Замечание 2. Расстояние между вершинами x_i и x_j равно наименьшему из целых k , для которых элемент $a_{ij}^{(k)}$ соответствующей матрицы A^k становится не равным нулю.

Замечание 3. Для неориентированных графов элемент $a_{ij}^{(k)}$ совпадает с количеством путей длины k из вершины x_i в x_j .

Замечание 4. Граф \bar{G} на n вершинах имеет хотя бы один контур, если матрица $Q = A + A^2 + A^3 + \dots + A^n$ имеет ненулевые элементы на главной диагонали.

Рассмотрим, например, граф на рис.1.5.

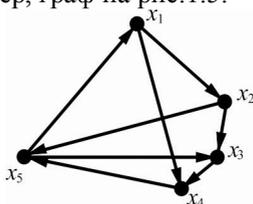


Рис. 1.5. Орграф для $n=5$

Его матрицы A, A^2, A^3 имеют вид

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad A^2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}, \quad A^3 = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 3 \end{bmatrix}.$$

Граф имеет три контура длины 3, проходящие через вершину x_5 , и не имеет путей длины 3 из x_1 в x_5 . В графе есть гамильтонов контур $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_1)$, что соответствует элементам $a_{ii}=1$ в матрице A^5 .

Свойства степеней матрицы A используются, например, в социологии при решении вопроса о лидере в некоторых группах людей. Матрица смежности в этом случае интерпретируется как социограмма (*социограмма* – способ представления межличностных и межгрупповых отношений симпатий/антипатий в виде матрицы смежности орграфа) [10, 11].

Матрицей инцидентности для орграфа \bar{G} называется матрица R с элементами

$$r_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если дуга } u_j \text{ выходит из вершины } x_i, \\ -1, & \text{если дуга } u_j \text{ входит в вершину } x_i, \\ 0, & \text{если дуга } u_j \text{ не инцидентна вершине } x_i, \end{cases}$$

$$i = \overline{1, n}, \quad j = \overline{1, m}.$$

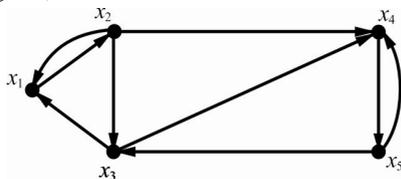


Рис. 1.6. Орграф для $n=5, m=9$

Матрица инцидентности для орграфа \bar{G} из рис 1.6

	U_{12}	U_{21}	U_{23}	U_{24}	U_{31}	U_{34}	U_{35}	U_{45}	U_{54}
x_1	1	-1	0	0	-1	0	0	0	0
x_2	-1	1	1	1	0	0	0	0	0
x_3	0	0	-1	0	1	1	1	0	0
x_4	0	0	0	-1	0	-1	0	1	-1
x_5	0	0	0	0	0	0	-1	-1	1

Так как всякая дуга U_{ij} выходит из вершины x_i и заходит в вершину x_j , то каждый столбец матрицы R всегда имеет два ненулевых элемента (+1 и -1).

1.2. Матрица достижимости, расстояний и примыканий

Матрицей достижимости $D = [d_{ij}]_l^n$ графа G называется матрица, для которой

$$d_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } x_j \text{ достижима из } x_i; \\ 1, & \text{если } i = j; \\ 0, & \text{если } x_j \text{ не достижима из } x_i. \end{cases}$$

Для неориентированного связного графа G матрица D бинарная и всегда симметричная с элементами $d_{ij} = 1$. Такую матрицу можно использовать для определения числа компонент связности p графа G и соответствующих множеств вершин S_p связных компонент. Например, для графа на рис.1.7

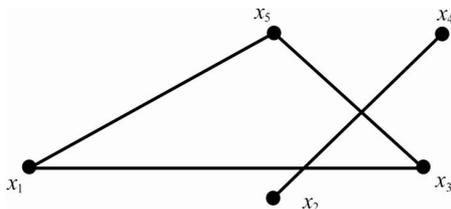


Рис. 1.7. Простой граф, для которого $p=2$

матрица D имеет вид

x	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
x_1	1	0	1	0	1
x_2	0	1	0	1	0
x_3	1	0	1	0	1
x_4	0	1	0	1	0
x_5	1	0	1	0	1

Положим $p=1$ и из D вычеркнем столбцы, содержащие единичные элементы в первой строке этой матрицы, и строки с теми же номерами, что и столбцы. Тогда получим множество $S_1 = \{x_1, x_3, x_5\}$ и новую матрицу D_1

x	x_2	x_4
x_2	1	1
x_4	1	1

Если D_1 не нулевая матрица, то $p=p+1$ и вычеркиваем столбцы с ненулевыми элементами в матрице D_1 и т. д. Таким образом, для рассматриваемого графа из рис.1.7

$$p=2, S_1=\{x_1, x_3, x_5\}, S_2=\{x_2, x_4\}.$$

Для определения компонент сильно связанных вершин орграфа описанный выше алгоритм можно применить к матрице контрдостижимости [7, 13]. Для сильно связанного орграфа все элементы матрицы достижимости $d_{ij}=1$. Для одностороннего орграфа

$$d_{ii}=1; d_{ij} + d_{ji}=1 \text{ и } d_{ij} \cdot d_{ji}=0 \text{ для всех } i \neq j; i, j=1, 2, \dots, n.$$

Если для вещественной матрицы C размерности $(n \times n)$ выбрать на плоскости n различных точек p_1, p_2, \dots, p_n , а каждому ненулевому элементу матрицы c_{ij} поставить в соответствие дугу (p_i, p_j) , то получим орграф матрицы C и соответствующую матрицу достижимости D .

При доказательстве теоремы существования обратной матрицы у системы линейных уравнений $Cx=b$ часто используется теорема Гаусси: *если матрица C неразложима* (не может быть приведена к блочно-треугольному виду

$$C = \begin{bmatrix} C_1 & O \\ B & C_2 \end{bmatrix},$$

где C_1, C_2 – квадратные матрицы, O – нулевая матрица) и обладает свойством диагонального преобладания, то она не вырождена [12].

Отметим, что матрица C неразложима, если ее орграф сильно связный.

Матрицей расстояний графа \bar{G} называют матрицу S такую, что элемент s_{ij} есть минимальное расстояние от x_i к x_j . Если вершина x_j не достижима из x_i , то $s_{ij}=\infty$. При хранении этой матрицы в компьютере вместо знака ∞ можно использовать любое отрицательное число. Для орграфов из рис.1.8

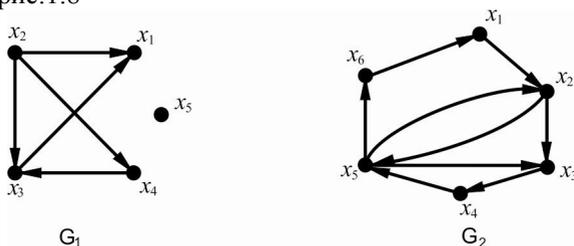


Рис. 1.8. Орграфы G_1 и G_2

матрицы D и S имеют соответственно вид

$$D_1 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad S_1 = \begin{vmatrix} 0 & \infty & \infty & \infty & \infty \\ 1 & 0 & 1 & 1 & \infty \\ 1 & \infty & 0 & \infty & \infty \\ 2 & \infty & 1 & 0 & \infty \\ \infty & \infty & \infty & \infty & 0 \end{vmatrix};$$

$$D_2 = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{vmatrix}, \quad S_2 = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 2 & 3 \\ 3 & 0 & 1 & 2 & 1 & 2 \\ 4 & 3 & 0 & 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 2 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 1 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 3 & 0 \end{vmatrix}.$$

Зная элементы матрицы S , можно определить диаметр и радиус графа.

Граф $G(V, E)$ называется *взвешенным*, если каждому его ребру (x_i, x_j) поставлено в соответствие некоторое неотрицательное число w_{ij} — вес ребра.

Элементы *матрицы примыканий* $A = [a_{ij}]_l^m$ такого графа определяются следующим образом [14 – 16]:

$$a_{ij} = \begin{cases} w_{ij}, & \text{для } (x_i, x_j) \in E \\ 0, & \text{для } i = j \\ \infty - & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Тогда, например, для графа на рис. 1.9

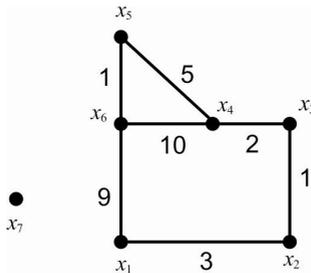


Рис. 1.9. Граф для $n=6$

матрица примыканий имеет вид

$$A_p = \begin{pmatrix} 0 & 3 & \infty & \infty & \infty & 9 & \infty \\ 3 & 0 & 1 & \infty & \infty & \infty & \infty \\ \infty & 1 & 0 & 2 & \infty & \infty & \infty \\ \infty & \infty & 2 & 0 & 5 & 10 & \infty \\ \infty & \infty & \infty & 5 & 0 & 1 & \infty \\ 9 & \infty & \infty & 10 & 1 & 0 & \infty \\ \infty & \infty & \infty & \infty & \infty & \infty & 0 \end{pmatrix} .$$

1.3. Матрица Кирхгофа и точки Штейнера

Матрицей Кирхгофа [9] простого помеченного графа G называется матрица $M_k = [m_{ij}]_1^n$ с элементами

$$m_{i,j} = \begin{cases} -1, & \text{если вершины } x_i \text{ и } x_j \text{ смежны,} \\ 0, & \text{если } i \neq j \text{ и вершины } x_i \text{ и } x_j \text{ не смежны,} \\ v_i, & \text{если } i = j. \end{cases}$$

где v_i – степень вершины x_i графа G .

Отметим, что в такой матрице сумма элементов в каждой строке и в каждом столбце равна нулю и $\det(M_k) = 0$. Матрица M_k связана с матрицей смежности A соотношением $M_k = V - A$, где V – нулевая матрица, содержащая на главной диагонали степени вершин графа. Матрицу M_k иногда называют матрицей Лапласа L , так как аналогичная матрица возникает при разностной аппроксимации оператора Лапласа Δ на регулярном сеточном графе.

Известно [9, 13, 14], что число остовных деревьев в связном графе G на $n \geq 2$ вершинах равно алгебраическому дополнению любого элемента матрицы Кирхгофа (Кирхгоф, 1847 г.). Все алгебраические дополнения симметричной матрицы M_k равны между собой и $\text{rank}(M_k) = n - 1$. Например, для графа G из рис.1.10 алгебраическое дополнение Δ_{13} элемента m_{13} равно трем, что соответствует количеству каркасов, представленных на рис.1.11

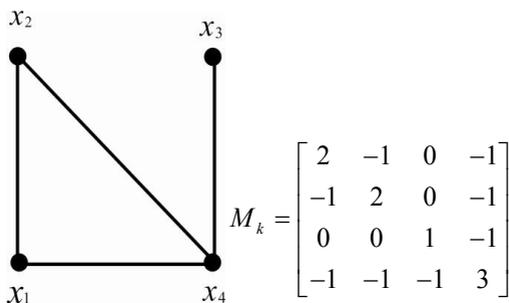


Рис. 1.10. Граф и его матрица Кирхгофа

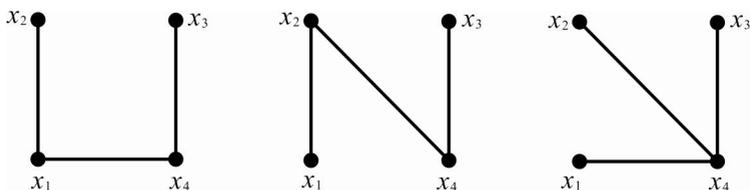


Рис. 1.11. Каркасы графа из рис 1.10

Если простому графу G поставить в соответствие орграф H некоторой его ориентации с матрицей инцидентности $R(H)$, то матрица Кирхгофа $M_k = R(H) R'(H)$, где $R'(H)$ – транспонированная к $R(H)$ матрица.

В орграфе для некоторой вершины x_i можно определить соответственно количество каркасов (остовных деревьев), выходящих из этой вершины, и количество каркасов, входящих в эту вершину [14].

Для полного графа K_n количество остовных деревьев является максимальным и совпадает с числом помеченных деревьев на n вершинах n^{n-2} [15]. Отметим, что в связном графе на n вершинах любое остовное дерево содержит $n - 1$ ребро.

Обход графа – это метод систематического перечисления его вершин или ребер, который используется при решении различных задач на графах. Для осуществления обходов в графе применяются алгоритмы поиска *в глубину* или *в ширину* [6, 13]. В связном графе G_n с весами (взвешенными ребрами), соответствующими, например, стоимости строительства дорог между городами или длине печатных

проводников между контактами на плате, часто возникает необходимость определения остова минимального веса (сумма весов ребер выбранного остова минимальна) [7].

Для этих целей можно использовать, например, алгоритм Краскала (алгоритм О. Борувки – Д. Краскала, 1926 г.).

Пусть T – несвязный граф из n вершин.

1. Отсортировать ребра G_n в порядке возрастания их весов.

2. Начиная с первого ребра в этом списке, добавляются ребра в граф T при условии, что такое добавление не приводит к возникновению цикла в графе T .

3. Осуществляется переход на метку 2, пока T не станет деревом с $n-1$ ребром.

Алгоритм использует «жадный» подход (на каждом шаге добавляет к лесу ребро с минимально возможным весом), который решает поставленную задачу со сложностью $O(m \cdot \log_2 m)$.

Алгоритм Краскала можно использовать для сегментации (обработки) изображений. При этом каждый пиксель ассоциируется с вершиной графа, ребро соединяет соседние пиксели, а вес ребра w_{ij} определяется через «разницу цветов» [17–19].

В отличие от алгоритма Краскала, алгоритм Прима (алгоритм В. Ярника – Р. Прима – Э. Дейкстры, 1930 г.), или алгоритм ближайшего соседа, строит растущее дерево минимального остова. Сначала выбирается произвольная вершина графа, которая включается в остов. Затем на каждой итерации к текущему остову добавляется наиболее дешевое ребро (u, v) с минимальным весом, соединяющее какую-либо вершину u из остова с какой-либо вершиной v не из остова. Если вершине u инцидентны два ребра одинакового веса, то выбирается любое из них. Сложность алгоритма $O(V^2)$.

На рис.1.12 показаны последовательные этапы построения минимального остовного дерева (МОД) для графа G , где в качестве стартовой выбрана вершина x_1 .

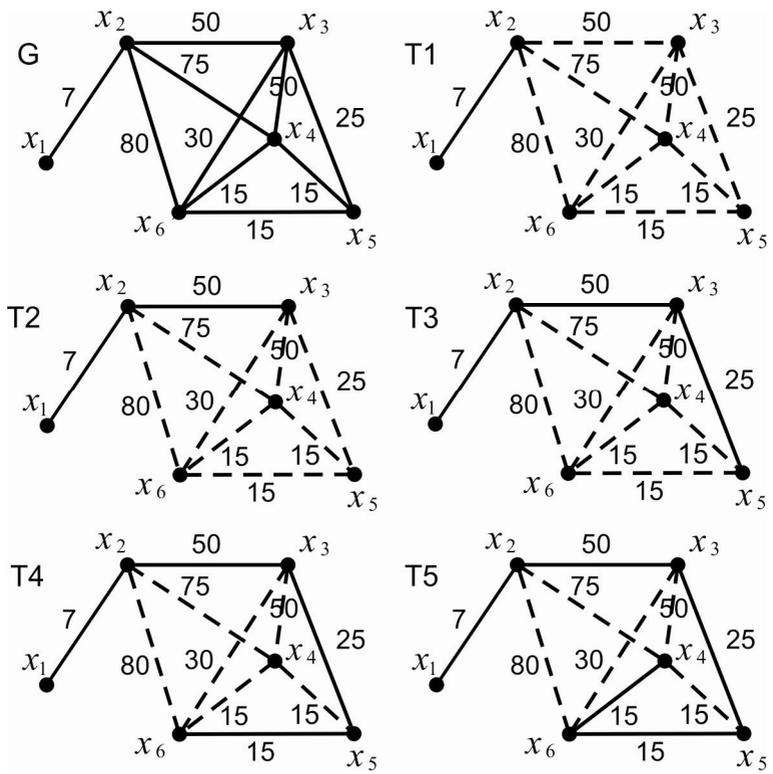


Рис. 1.12. Этапы построения МОД для графа G

Примером задачи о минимизации суммы расстояний между вершинами графа является *задача Торричелли – Ферма* [16]: в треугольнике ABC (см. рис.1.13) найти точку P , такую, чтобы сумма расстояний $S=AP+BP+CP$ была минимальной.

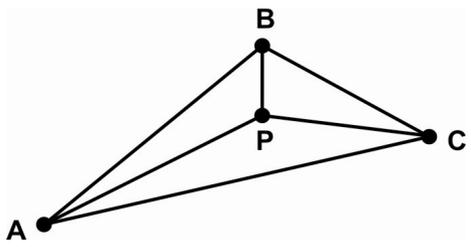


Рис. 1.13. Точка Штейнера в треугольнике

Если наибольший угол в треугольнике меньше $2\pi/3$, то точка P является единственной и лежит внутри треугольника, а все три угла при ней равны $2\pi/3$. Если, например, при вершине B угол $ABC \geq 2\pi/3$, то $S=AB+BC$.

Эта задача относится к классу задач Штейнера, когда для минимизации суммы расстояний между заданными точками на плоскости допускается введение дополнительных точек (точек Штейнера). Сеть Штейнера является деревом, а каждая дополнительная вершина имеет степень три с углами $2\pi/3$ между ребрами. В таком дереве число точек Штейнера на две меньше заданного исходного числа точек [20].

На рис.1.14 приведена одна из сетей Штейнера для вершин единичного квадрата с четырьмя исходными точками, которая содержит две дополнительные точки A и B .

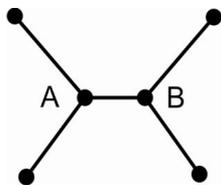


Рис. 1.14. Сеть Штейнера для $n=4$

Как следует из этого рисунка, для сети Штейнера $S=2.73$, а для алгоритма Прима – Краскала $S=3$.

При $n>3$ существует конечное число сетей Штейнера, из которых можно выбрать минимальную.

Для конструирования интегральных электронных схем, когда допускается использование укладки проводников лишь в горизонтальном и вертикальном направлении на слое схемы, минимизация длины сети сводится к нахождению прямоугольной сети Штейнера. *Эволюционное дерево Штейнера* активно используется в биологии при исследовании происхождения видов.

1.4. Информационный граф

В управляющих системах, системах обработки информации и компьютерных программах после ввода исходных данных идет их преобразование в некоторые промежуточные и затем в окончательные результаты [17].

Последовательность движения информации можно представить в виде информационного графа: его вершины – исходные данные, промежуточные и окончательные результаты обработки информации. Дуги графа указывают на взаимодействие вершин в направлении передачи информации. Пример такого ациклического графа представлен на рис. 1.15.

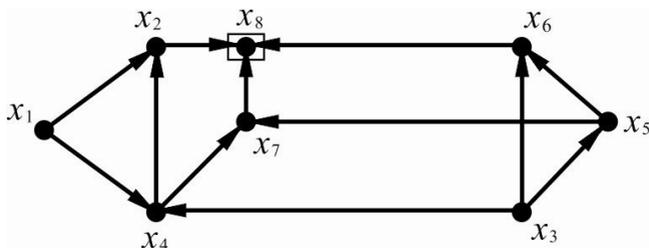


Рис. 1.15. Информационный граф

Здесь x_1, x_3 – исходные данные, x_8 – окончательный результат, x_2, x_4, x_5, x_6, x_7 – промежуточные данные, причем эти вершины сами являются исходными данными и результатами, в зависимости от того, по отношению к каким вершинам они рассматриваются. Так, например, вершина x_6 является исходной для x_8 и результативной для x_3 и x_5 . Будем считать, что процесс движения информации условно разбивается на такты, в результате которых формируются вершины.

Порядком вершины x_i информационного графа называется число, равное максимальной из длин путей в графе, ведущих в x_i из любого из исходных данных. Например, порядок вершин x_4 и x_5 равен 1, а x_2, x_6 и x_7 равен 2. Таким образом, промежуточные данные x_4 и x_5 образуются на первом такте, x_2, x_6, x_7 – на втором, x_8 – на третьем.

Порядком информационного графа k называется максимальное число тактов движения информации, необходимое для получения конечного результата.

Рассмотрим некоторые свойства информационного графа, представленного на рис.1.15.

1. Запишем матрицу смежности и вычислим степени этой матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad A^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$A^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad A^4 = 0.$$

Так как для этого графа $A^4 = 0$, то он трехтактный ($k=3$). Порядок вершин информационного графа позволяет установить, после какого такта обработки информации ту или иную информацию хранить не обязательно. Следовательно, номер такта l , после которого результат x_i не нужен, равен максимальному из порядков вершин, отвечающих отличным от нуля элементам i -той строки матрицы A^l .

Например, для x_3 порядок вершины x_6 , равен 2.

2. Сформируем матрицу Q для рис.1.15

$$Q = [q_{ij}]_i^n, \quad Q = A + A^2 + A^3,$$

$$Q = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 2 & 2 & 5 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

где ее элементы q_{ij} – число всевозможных путей из x_i в x_j . Такая матрица содержит интегральную информацию о количестве путей в орграфе. Например, $q_{18} = 3$ соответствует тому, что в графе есть всего 3 пути из x_1 в x_8 , длина которых не больше трех

$$(x_1, x_2, x_8; x_1, x_4, x_2, x_8; x_1, x_4, x_7, x_8).$$

3. Порядковые номера отличных от нуля элементов j -го столбца матрицы Q равны номерам результатов, из которых формируется результат x_j . Эта информация важна для надежности работы системы. Например, в формировании результата x_6 участвуют результаты x_3, x_5 . Таким образом, в случае потери результата x_6 , например, может быть восстановлен по x_3 и x_5 .

4. Отличные от нуля элементы матрицы Q , стоящие в i -той строке, перечисляют все результаты, при формировании которых использован результат x_i . Например, x_4 участвует в формировании результатов x_2, x_7, x_8 .

Таким образом, использование свойств матрицы смежности информационного графа повышает надежность компьютерной обработки потоков информации в системах связи, экономики и управления.

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].

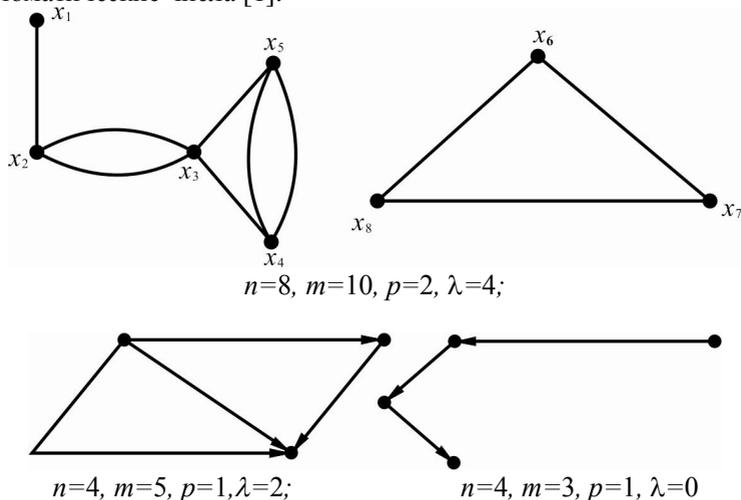


Рис. 2.1. Цикломатические числа графов

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.

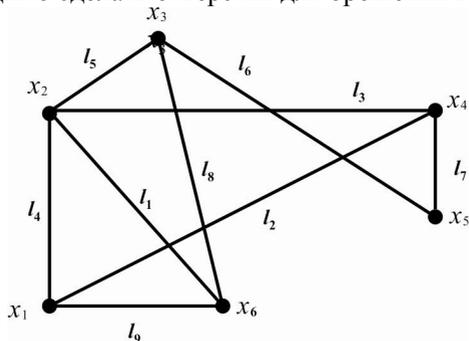


Рис. 2.2. Граф полей

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

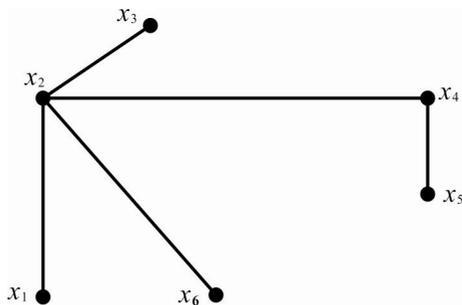


Рис. 2.3. Остовное дерево графа 2.2

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.

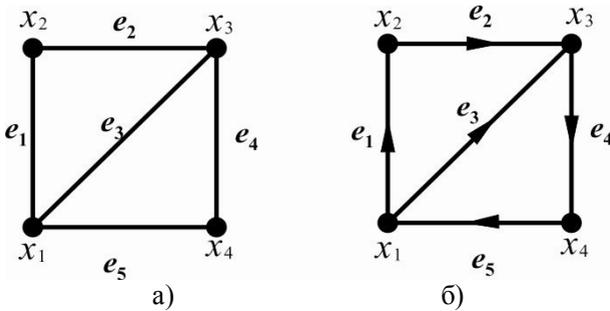


Рис. 2.4. Граф и его ориентация

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.

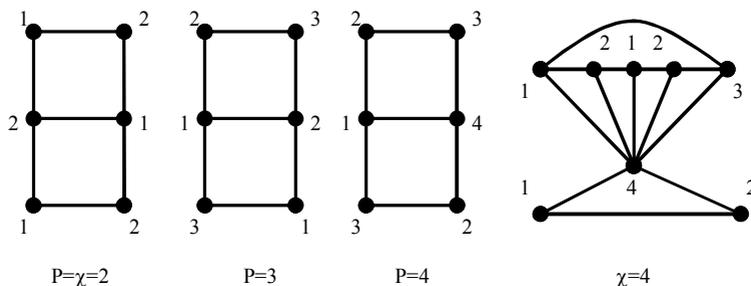


Рис. 2.5. Правильные раскраски графов

Утверждение 3. (Теорема Кенига, 1936 г.). Граф двучетвен (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 .

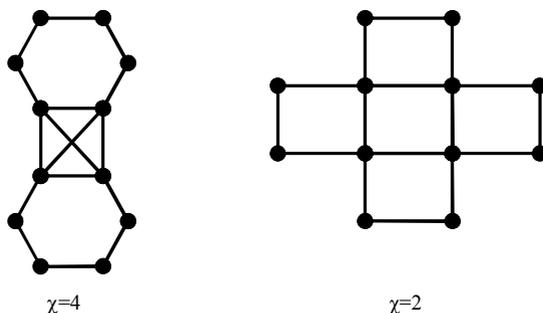


Рис. 2.6. Графы с различными хроматическими числами

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 $\chi = v_m + 1$.

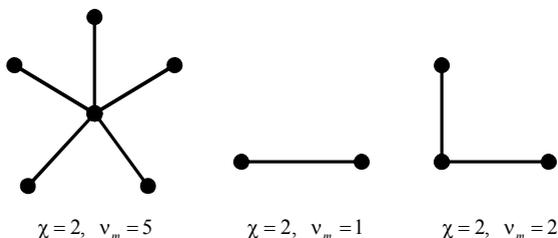


Рис. 2.7. Хроматические числа деревьев

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 $L(G)$.

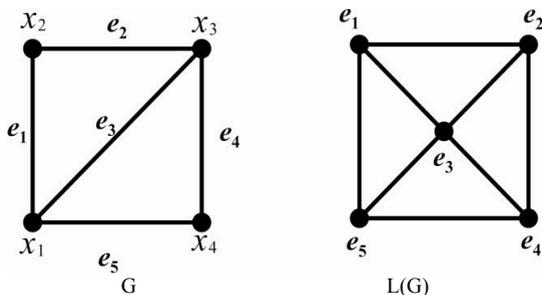


Рис. 2.8. Граф G и его реберный граф $L(G)$

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 неустраимых 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 – $(t - 2)$.

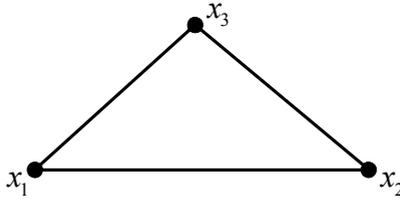


Рис. 2.9. Полный граф K_3

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.

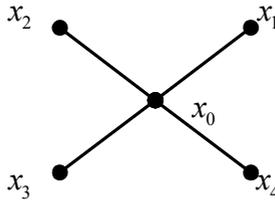


Рис. 2.10. Двудольный граф $K_{l,4}$

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,

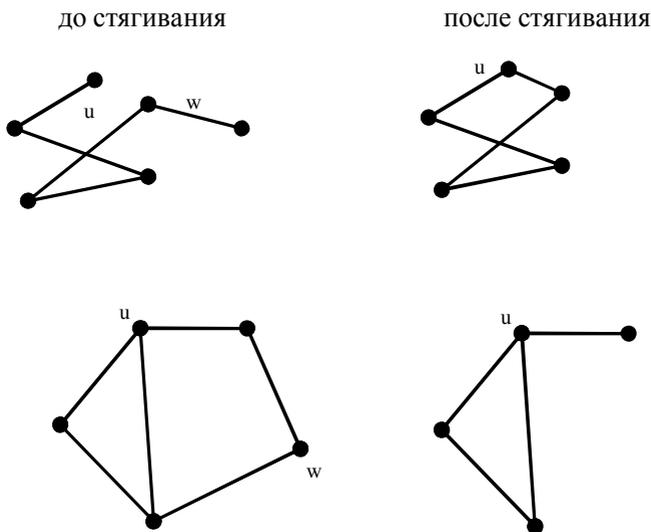


Рис. 2.11. Геометрическая интерпретация стягивания двух вершин графа

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 $f(G_1, t)$. 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 $m=5$

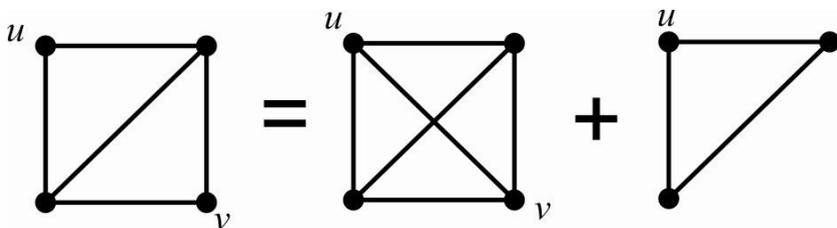


Рис. 2.12. Графы: G, G_1, G_c

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

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,

The diagram shows the expansion of a triangle graph (3 vertices, 3 edges) into paths and vertices. It starts with a triangle, which is equal to a path of length 2 (3 vertices, 2 edges) minus a single edge (2 vertices, 1 edge). This is then equal to a path of length 1 (2 vertices, 1 edge) minus 2 single vertices (1 vertex, 0 edges). Finally, it is equal to 3 single vertices (3 vertices, 0 edges) minus 3 pairs of vertices (2 vertices, 0 edges) plus 2 single vertices (1 vertex, 0 edges).

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.

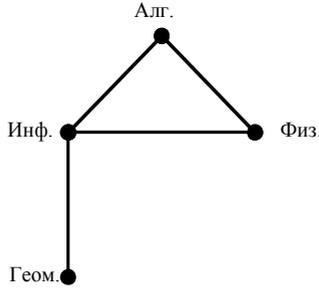


Рис. 2.13. Граф H несовместимости лекций

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

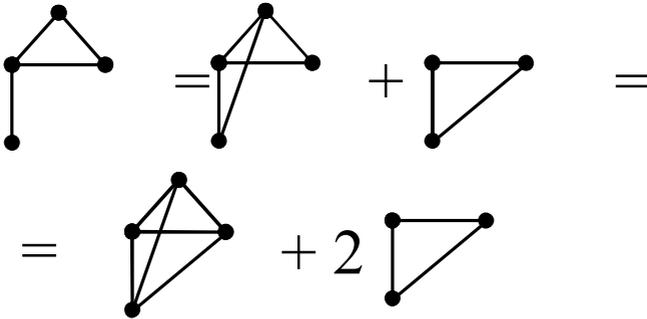


Рис. 2.14. Представление $f(G, t)$ в виде линейной комбинации хроматических многочленов полных графов

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

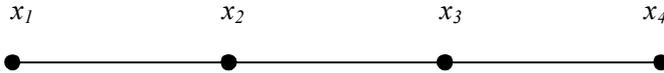


Рис. 2.15. Связный граф для $n=4$

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

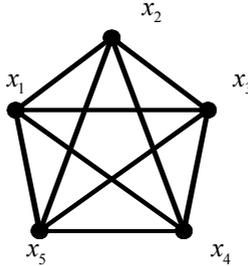


Рис. 2.16 Полный граф K_5

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

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

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.

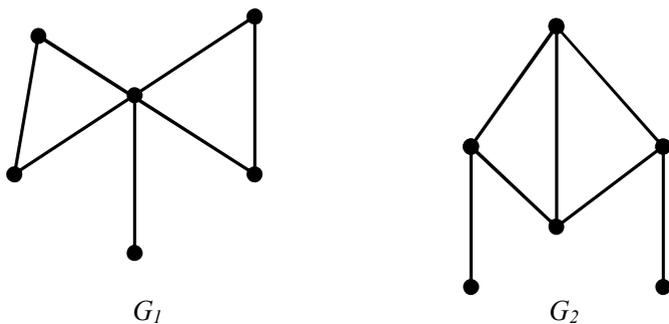


Рис. 2.17. Коспектральные графы

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

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

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.

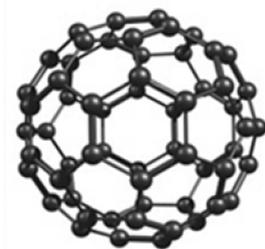
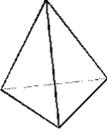
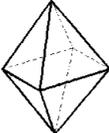
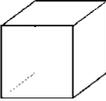
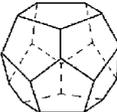
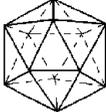


Рис. 2.18. Фуллерен C_{60}

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
m	6	12	12	30	30
n	4	6	8	20	12
f	4	8	6	12	20
$n-m+f$	2	2	2	2	2
R	$\frac{a}{4}\sqrt{6}$	$\frac{a}{2}\sqrt{2}$	$\frac{a}{2}\sqrt{3}$	$\frac{a}{4}(1+\sqrt{5})\sqrt{3}$	$\frac{a}{4}\sqrt{2(5-\sqrt{5})}$
r	$\frac{a}{12}\sqrt{6}$	$\frac{a}{6}\sqrt{6}$	$\frac{a}{2}$	$\frac{a}{4}\sqrt{10+\frac{22}{\sqrt{5}}}$	$\frac{a}{4\sqrt{3}}(3+\sqrt{5})$
S	$a^2\sqrt{3}$	$2a^2\sqrt{3}$	$6a^2$	$3a^2\sqrt{5(5+2\sqrt{5})}$	$5a^2\sqrt{3}$
V	$\frac{a^3}{12}\sqrt{2}$	$\frac{a^3}{3}\sqrt{2}$	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.

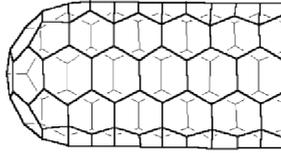


Рис. 2.20. Граф закрытой слева нанотрубки

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.

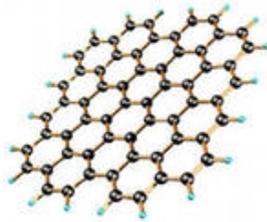


Рис. 2.21. Фрагмент графена

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:

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

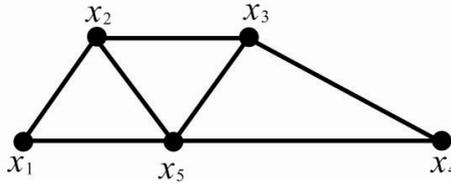


Рис. 2.22. Граф для $n=5, m=7$

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.

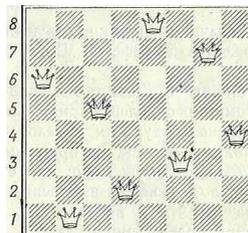


Рис. 2.23. Вариант расстановки ферзей

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.

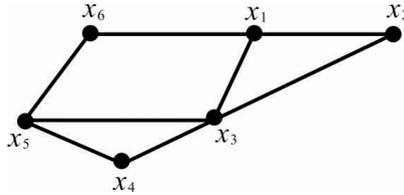


Рис. 2.24. Граф влияния источников излучения

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 максимального внутренне 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.

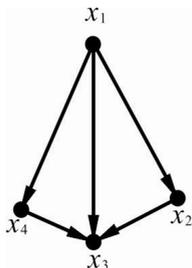


Рис. 2.25. Орграф для $n=4$

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.

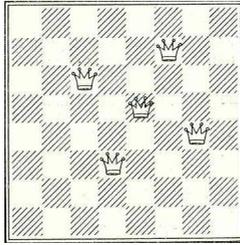


Рис. 2.26. Один из вариантов расстановки пяти ферзей

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

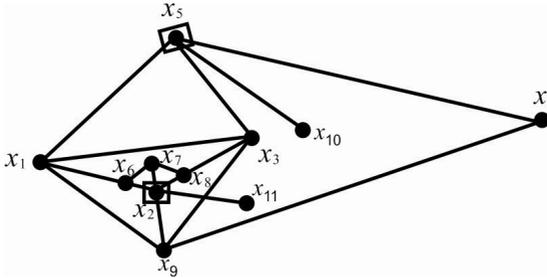


Рис. 2.27. Граф и его минимальное внешне устойчивое множество

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

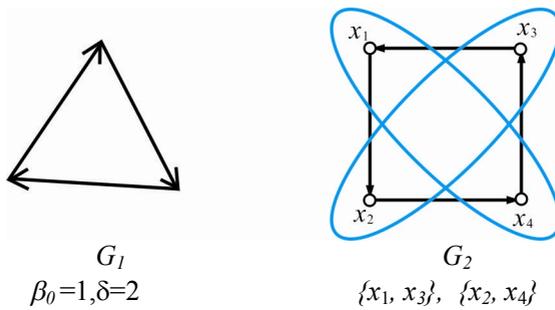


Рис. 2.28. Графы с контурами четной и нечетной длины

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].

3. ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ НА ГРАФАХ

Решение значительного числа прикладных задач может быть сведено к анализу соответствующих им графов.

3.1. Алгоритм Дейкстры

В большинстве алгоритмов поиска кратчайших путей используется тот факт, что любой кратчайший путь сам состоит из кратчайших путей. Наиболее эффективный алгоритм решения задачи о поиске кратчайшего пути между двумя любыми фиксированными вершинами в связном графе (например, между вершинами s и t) с неотрицательными весами предложил в 1959 г. Дейкстра [7, 9]. В основе этого алгоритма лежит принцип «жадности» (на каждом шаге выбирается локально лучший вариант). Это позволяет последовательно вычислять расстояния сначала до ближайшей к s вершине, а затем до следующей ближайшей и т. д. Метод основан на приписывании вершинам временных пометок, причем пометка вершины дает верхнюю границу длины пути от s к этой вершине. Величины этих пометок постепенно уменьшаются с помощью некоторой итерационной процедуры. На каждом шаге итерации только одна из временных пометок становится постоянной и соответствует точной длине кратчайшего пути от s к соответствующей вершине. Последовательность вершин, через которые проходит кратчайший путь, определяется с помощью последовательного вычитания из длины пути длин ребер, лежащих на кратчайшем пути (метод последовательного возвращения, внешний способ [36, 37]).

Рассмотрим этапы этого алгоритма.

Пусть $l(s)$ обозначает пометку вершины x_i (текущее расстояние от s до x_i).

Присвоение начальных значений.

Шаг 1. Положить $l(s)=0$ и считать эту пометку постоянной. Положить $l(x_i)=\infty$ для всех $x_i \neq s$ и считать эти пометки временными. Положить $p=s$.

Обновление пометок

Шаг 2. Для всех $x_i \in \Gamma(p)$, пометки которых временные, изменить их в соответствии со следующим выражением:

$$l(x_i) = \min[l(x_i), l(p) + c(p, x_i)], \quad (3.1)$$

где $c(p, x_i)$ - длина пути из p в x_i , $\Gamma(p)$ – множество смежных с p вершин графа.

Превращение временной пометки в постоянную

Шаг 3. Среди всех вершин $x_i \in \Gamma(p)$ с временными пометками найти такую вершину x_i^* , для которой

$$l(x_i^*) = \min[l(x_i)].$$

Шаг 4. Считать пометку вершины x_i^* постоянной и положить $p = x_i^*$.

Шаг 5. Если $p = t$, то $l(p)$ является длиной кратчайшего пути, если $p \neq t$, перейти к шагу 2.

В качестве примера рассмотрим граф, изображенный на рис. 3.1.

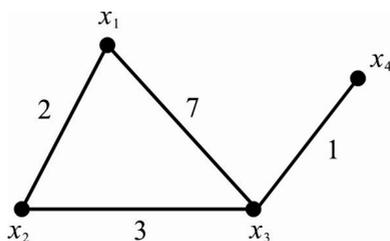
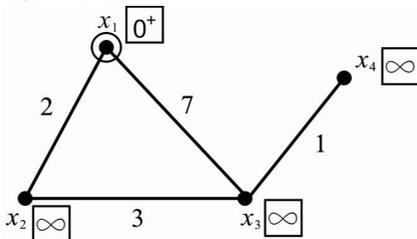


Рис. 3.1. Взвешенный граф для $n=4$

Пусть требуется найти кратчайший путь от вершины $x_1 = s$ до вершины $x_4 = t$. Используем алгоритм Дейкстры.

Шаг 1. Положим $l(s) = 0$ и будем считать эту пометку постоянной. Положим $l(x_2) = l(x_3) = l(x_4) = \infty$.



Первая итерация

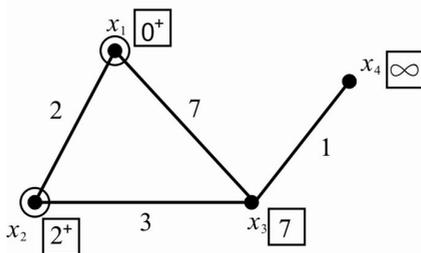
Шаг 2. $\Gamma(x_1) = \{x_2, x_3\}$,

$$l(x_2) = \min(\infty, 0 + 2) = 2,$$

$$l(x_3) = \min(\infty, 0 + 7) = 7.$$

Шаг 3. $\min(2, 7) = 2$, поэтому x_2 получает постоянную пометку 2^+

Шаг 4. $p = x_2$.



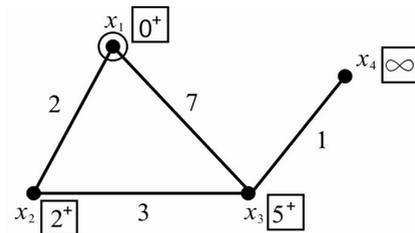
Вторая итерация

Шаг 2. $\Gamma(x_2) = \{x_1, x_3\}$, но x_1 имеет постоянную пометку. Тогда

$$l(x_3) = \min(7, 2+3) = 5.$$

Шаг 3. $\min(5) = 5$. Вершина x_3 получает постоянную пометку 5^+ .

Шаг 4. $p = x_3$.

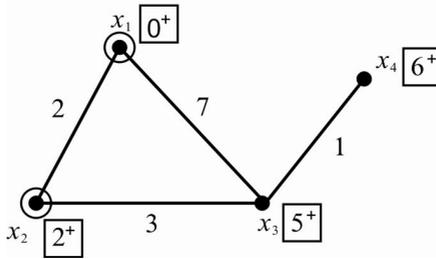


Третья итерация

Шаг 2. $\Gamma(x_3) = \{x_1, x_2, x_4\}$

$$l(x_4) = \min(\infty, 5+1) = 6.$$

Шаг 3. $\min(6) = 6$. Так как все вершины, кроме x_4 , помечены, то x_4 получает постоянную пометку 6^+ .



Шаг 4. Полагаем $p = x_4 = t$. Все вершины имеют постоянные метки. Кратчайший путь от x_1 до x_4 проходит через вершины (x_2, x_3) , а его длина равна 6.

Для получения верхней оценки $\Delta(n)$ вычислительной сложности алгоритма Дейкстры заметим, что на первой итерации этого алгоритма должна быть просмотрена $(n-1)$ вершина. Поскольку при этом необходимо вычислять выражение (3.1), то на первой итерации выполняется $(n-1)$ операция сложения, $(n-1)$ операция сравнения, а также производится выбор наименьшего из $(n-1)$ чисел. Таким образом, первая итерация реализуется за $3(n-1)$ операций. Вторая итерация выполняется за $3(n-2)$ операций, третья – за $3(n-3)$ операций и т. д. Поэтому

$$\Delta(n) = \sum_{i=1}^{n-1} 3(n-i) = 3n(n-1)/2.$$

Приведем теперь пример применения алгоритма Дейкстры для ориентированного графа из рис. 3.2.

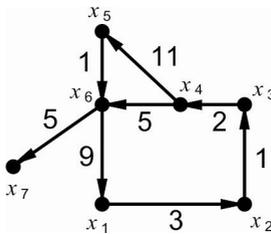


Рис. 3.2. Взвешенный орграф ($n=7$)

Определим расстояния от вершины x_1 до всех остальных вершин связного графа и сами эти пути, для нахождения которых будем ис-

пользовать встроенный способ [16, 37]. Матрица примыканий для рассматриваемого графа имеет вид

$$A_p = \begin{pmatrix} 0 & 3 & \infty & \infty & \infty & \infty & \infty \\ \infty & 0 & 1 & \infty & \infty & \infty & \infty \\ \infty & \infty & 0 & 2 & \infty & \infty & \infty \\ \infty & \infty & \infty & 0 & 11 & 5 & \infty \\ \infty & \infty & \infty & \infty & 0 & 1 & \infty \\ 9 & \infty & \infty & \infty & \infty & 0 & 5 \\ \infty & \infty & \infty & \infty & \infty & \infty & 0 \end{pmatrix}.$$

Введем в рассмотрение:

1. Вектор M с компонентами

$$m_i = \left\{ \begin{array}{l} 0, \text{ если вершина } x_i \text{ еще не рассмотрена,} \\ 1, \text{ если вершина } x_i \text{ уже рассмотрена} \end{array} \right\};$$

2. Вектор B , каждая компонента b_k которого соответствует текущему кратчайшему расстоянию от исходной вершины x_i до вершины x_k ;

3. Вектор C , каждая компонента c_k которого на данной итерации есть индекс номера предпоследней вершины на кратчайшем пути от вершины x_i до вершины x_k .

Шаг 1. В цикле от 1 до 7 заполнить нулями массив M ; заполнить числом i массив C ; перенести i -тую строку матрицы A_p в массив B ;

$$M[i]:=1; C[i]:=0; \{i=1 - \text{номер стартовой вершины}\}.$$

Шаг 2. Найти минимальную компоненту вектора B для неотмеченных вершин (т.е. тех k , для которых $M[k] = 0$);

пусть минимум достигается на индексе j , т.е. $b_j \leq b_k$. Затем выполняются следующие операции:

$$\begin{aligned} &M[j]:=1; \\ &\text{если } b_k > b_j + w_{jk}, \text{ то } (b_k := b_j + w_{jk}; c_k := j). \end{aligned} \quad (3.2)$$

Условие (3.2) означает, что путь (x_i, \dots, x_k) длиннее, чем путь для последовательности вершин (x_i, \dots, x_j, x_k) .

Если все $M[k]$ отмечены, то длина кратчайшего пути от x_i до x_k соответствует компоненте $B[k]$.

Шаг 3. Путь от x_i до x_k определяется в обратном порядке следующей процедурой:

$$1. z := C[k];$$

2. Выдать z ;
3. $z := C[z]$. Если $z = 0$, то конец, иначе перейти к 2.

Пусть, например, требуется найти кратчайшие пути из вершины x_1 во все остальные для орграфа из рис.3.2. Содержимое массивов M , B и C после шага 1 имеет следующий вид:

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
M	1	0	0	0	0	0	0
B	0	3	∞	∞	∞	∞	∞
C	0	1	1	1	1	1	1

Содержание массивов меняется по мере выполнения шага 2 и представлено в табл.3.1.

Таблица 3.1

Этапы вычисления векторов B и C

$\min b_k = 3$	<table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th></th> <th>x_1</th> <th>x_2</th> <th>x_3</th> <th>x_4</th> <th>x_5</th> <th>x_6</th> <th>x_7</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>M</td> <td>1</td> <td>1</td> <td>0</td> <td>0</td> <td>0</td> <td>0</td> <td>0</td> </tr> <tr> <td>B</td> <td>0</td> <td>3</td> <td>4</td> <td>∞</td> <td>∞</td> <td>∞</td> <td>∞</td> </tr> <tr> <td>C</td> <td>0</td> <td>1</td> <td>2</td> <td>2</td> <td>2</td> <td>2</td> <td>2</td> </tr> </tbody> </table>		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	M	1	1	0	0	0	0	0	B	0	3	4	∞	∞	∞	∞	C	0	1	2	2	2	2	2
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7																										
M	1	1	0	0	0	0	0																										
B	0	3	4	∞	∞	∞	∞																										
C	0	1	2	2	2	2	2																										
$\min b_k = 4$	<table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th></th> <th>x_1</th> <th>x_2</th> <th>x_3</th> <th>x_4</th> <th>x_5</th> <th>x_6</th> <th>x_7</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>M</td> <td>1</td> <td>1</td> <td>1</td> <td>0</td> <td>0</td> <td>0</td> <td>0</td> </tr> <tr> <td>B</td> <td>0</td> <td>3</td> <td>4</td> <td>6</td> <td>∞</td> <td>∞</td> <td>∞</td> </tr> <tr> <td>C</td> <td>0</td> <td>1</td> <td>2</td> <td>3</td> <td>3</td> <td>3</td> <td>3</td> </tr> </tbody> </table>		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	M	1	1	1	0	0	0	0	B	0	3	4	6	∞	∞	∞	C	0	1	2	3	3	3	3
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7																										
M	1	1	1	0	0	0	0																										
B	0	3	4	6	∞	∞	∞																										
C	0	1	2	3	3	3	3																										
$\min b_k = 6$	<table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th></th> <th>x_1</th> <th>x_2</th> <th>x_3</th> <th>x_4</th> <th>x_5</th> <th>x_6</th> <th>x_7</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>M</td> <td>1</td> <td>1</td> <td>1</td> <td>1</td> <td>0</td> <td>0</td> <td>0</td> </tr> <tr> <td>B</td> <td>0</td> <td>3</td> <td>4</td> <td>6</td> <td>17</td> <td>11</td> <td>∞</td> </tr> <tr> <td>C</td> <td>0</td> <td>1</td> <td>2</td> <td>3</td> <td>4</td> <td>4</td> <td>4</td> </tr> </tbody> </table>		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	M	1	1	1	1	0	0	0	B	0	3	4	6	17	11	∞	C	0	1	2	3	4	4	4
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7																										
M	1	1	1	1	0	0	0																										
B	0	3	4	6	17	11	∞																										
C	0	1	2	3	4	4	4																										
$\min b_k = 11$	<table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th></th> <th>x_1</th> <th>x_2</th> <th>x_3</th> <th>x_4</th> <th>x_5</th> <th>x_6</th> <th>x_7</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>M</td> <td>1</td> <td>1</td> <td>1</td> <td>1</td> <td>0</td> <td>1</td> <td>0</td> </tr> <tr> <td>B</td> <td>0</td> <td>3</td> <td>4</td> <td>6</td> <td>17</td> <td>11</td> <td>16</td> </tr> <tr> <td>C</td> <td>0</td> <td>1</td> <td>2</td> <td>3</td> <td>4</td> <td>4</td> <td>6</td> </tr> </tbody> </table>		x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	M	1	1	1	1	0	1	0	B	0	3	4	6	17	11	16	C	0	1	2	3	4	4	6
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7																										
M	1	1	1	1	0	1	0																										
B	0	3	4	6	17	11	16																										
C	0	1	2	3	4	4	6																										

$\min b_k = 16$	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	
	M	1	1	1	0	1	1	
	B	0	3	4	6	17	11	16
	C	0	1	2	3	4	4	6
$\min b_k = 17$	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	
	M	1	1	1	1	1	1	
	B	0	3	4	6	17	11	16
	C	0	1	2	3	4	4	6

Таким образом, получены результирующие массивы M , B и C , в которых содержатся длины кратчайших путей из x_1 до всех остальных вершин графа, а также последовательность индексов вершин, через которые эти пути проходят. Например, кратчайший путь из x_1 в x_7 содержит следующие промежуточные вершины (x_2, x_3, x_4, x_6).

Отметим, что решение задачи об определении кратчайшего расстояния от вершины x_1 до всех остальных вершин связного графа фактически привело к построению *покрывающего ориентированного дерева* с корнем в вершине x_1 .

Если граф путей содержит дуги и ребра, то, заменив каждое ребро на две противоположно направленные дуги равного веса, исходную задачу об определении кратчайшего пути можно свести к аналогичной задаче для ориентированного графа.

Важный практический интерес представляет задача определения в графе не только кратчайшего пути, но и второго, третьего и т. д. по длине пути. Например, если пассажир опоздал на минимальный по времени автобусный маршрут между городами, то возникает задача выбора второго по оптимальности маршрута. Для решения такой задачи можно воспользоваться *алгоритмом двойного поиска*.

Когда некоторые из дуг графа имеют отрицательные веса, кратчайший путь из одной вершины можно определить по *алгоритму Флойда – Уоршелла* или *Беллмана-Форда*.

Отметим, что всего в графе из n вершин порядка $O(n^2)$ путей, поэтому применение алгоритма Дейкстры для всех пар вершин ($i=1, \dots, n-1$) имеет сложность $O(n^3)$.

В задачах сетевого планирования и управления (СПУ) для топологически отсортированного ациклического орграфа возникает необ-

ходимость определения максимального (критического) пути между источником s и стоком t в сети. Такую задачу можно решить, например, с помощью алгоритма Дейкстры, если на шаге 3 этого алгоритма выбирается вершина x_i^* , для которой

$$l(x_i^*) = \max[l(x_i)].$$

3.2. Алгоритм Флойда и его модификация

Алгоритм Флойда (1962 г.) позволяет найти кратчайшие расстояния между всеми парами вершин (ор)графа. Он основан на систематическом анализе *треугольного оператора* из рис. 3.3 с вершинами x_i , x_k , x_j и расстояниями a_{ij} , a_{ik} , a_{kj} .

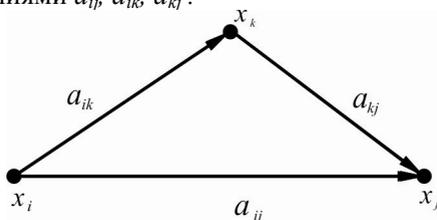


Рис. 3.3. Ациклический оргграф для $n=3$

Если $a_{ij} > a_{ik} + a_{kj}$, то путь $x_i \rightarrow x_k \rightarrow x_j$ короче пути $x_i \rightarrow x_j$. Рассмотрим граф, изображенный на рис. 3.4.

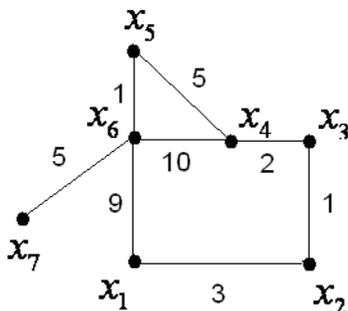


Рис. 3.4 Взвешенный граф

Матрица примыканий для этого графа имеет вид

$$A_p^{(1)} = \begin{matrix} & x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & x_6 & x_7 \\ \begin{matrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 3 & \infty & \infty & \infty & 9 & \infty \\ 3 & 0 & 1 & \infty & \infty & \infty & \infty \\ \infty & 1 & 0 & 2 & \infty & \infty & \infty \\ \infty & \infty & 2 & 0 & 5 & 10 & \infty \\ \infty & \infty & \infty & 5 & 0 & 1 & \infty \\ 9 & \infty & \infty & 10 & 1 & 0 & 5 \\ \infty & \infty & \infty & \infty & \infty & 5 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix}.$$

Такая матрица соответствует кратчайшим путям, содержащим только одно ребро.

Отметим, что кратчайший путь из двух ребер между вершинами графа u и w проходит еще в точности через одну вершину. Например, на рис. 3.4 всякий путь из двух ребер между вершинами x_1 и x_5 может проходить через одну из вершин x_2, x_3, x_4, x_6, x_7 . Если проанализировать сумму весов ребер (x_1, x_k) и (x_k, x_5) , где $k=2,3,4,6,7$, то минимальное значение суммы весов соответствует длине кратчайшего пути из двух ребер (x_1, x_6) и (x_6, x_5) . Поэтому элементы матрицы $A_p^{(2)}$, позволяющие определить длину кратчайшего пути из двух или менее ребер для графа из n вершин, можно определить по формуле

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(2)} &= \min(a_{ij}^{(1)}, a_{ik}^{(1)} + a_{kj}^{(1)}), \quad k = 1, \dots, n, \\ i \neq j, a_{ii}^{(2)} &= 0. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Таким образом, для графа на рис.3.4 получим

$$A_p^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 4 & 19 & 10 & 9 & 14 \\ 3 & 0 & 1 & \infty & \infty & \infty & \infty \\ 4 & 1 & 0 & 2 & 7 & 12 & \infty \\ 19 & \infty & 2 & 0 & 5 & 6 & 15 \\ 10 & \infty & 7 & 5 & 0 & 1 & 6 \\ 9 & \infty & 12 & 6 & 1 & 0 & 5 \\ 14 & \infty & \infty & 15 & 6 & 5 & 0 \end{pmatrix}.$$

Пусть теперь $A_p^{(k)}$ - матрица кратчайших путей, содержащих не более k ребер графа. Обобщая формулу (3.1), для вычисления элементов матрицы кратчайших путей получим итерационную формулу

$$A_p^{(k+1)}[i, j] = \min(A_p^{(k)}[i, j], A_p^{(k)}[i, k] + A_p^{(k)}[k, j]), \quad (3.2)$$

$$k = \overline{1, n-1}, i \neq j, A_p^{(k+1)}[i, i] = 0, i, j = \overline{1, n}.$$

По формуле (3.2) осуществляется выбор меньшего из двух путей: содержащего вершину с индексом k и не содержащего ее.

В рассмотренном алгоритме необходимо вычислить $n-1$ матрицу $A_p^{(2)}, \dots, A_p^{(n)}$, каждая из которых состоит из n^2 элементов, требующих для своего вычисления двух операций (сложение и сравнение). Поэтому алгоритм Флойда реализуется за $O(n^3)$ операций, а используя матрицу $A_p^{(1)}$, итерационную формулу (3.2) можно реализовать тремя вложенными циклами :

```

for  $k = 1$  to  $n-1$ 
  for  $i = 1$  to  $n$ 
    for  $j = 1$  to  $n$ 
       $A[i, j] = \min(A[i, j], A[i, k] + A[k, j]).$ 

```

При увеличении количества вершин графа G_n в два раза время расчетов по алгоритму Флойда возрастает в восемь раз.

Известно, что если $A = \begin{bmatrix} a_{ij}^1 \end{bmatrix}_l^n$ - квадратная матрица, то элементы матрицы A^2 находятся по формуле

$$a_{ij}^{(2)} = \sum_{k=1}^n a_{ik}^{(1)} a_{kj}^{(1)}, \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (3.3)$$

Заменяем в этом алгоритме умножения матриц операцию сложения операцией взятия минимума, а операцию умножения сложением. Тогда из (3.3) получим формулы (3.1), вычисляющие кратчайшие пути, содержащие не более двух ребер. Поэтому матрицу $A_p^{(3)}$ можно построить по матрицам $A_p^{(2)}$ и $A_p^{(1)}$, так как кратчайший путь из трех или менее ребер должен состоять из кратчайшего пути из двух или менее ребер, за которыми следует кратчайший путь из одного или менее ребер. Матрицу $A_p^{(4)}$ можно получить либо по матрицам $A_p^{(3)}$ и $A_p^{(1)}$, либо только по матрице $A_p^{(2)}$. Тогда очевидно, что последовательность вычисления степеней матриц $A_p^{(k)}, k=2, \dots, n$ можно заменить вычислением матриц четных степеней: $A_p^{(2)}, A_p^{(4)}, A_p^{(8)}, \dots, A_p^{(N)}$, где N - наи-

меньшее 2^S , которое превышает $n-1$, учитывая, что у графа с n вершинами кратчайший путь может содержать не более $n-1$ ребра. Поэтому все кратчайшие расстояния в графе являются элементами матрицы $A_p^{(N)}$. Использование вычисления только четных степеней матриц $A_p^{(2)}, A_p^{(4)}, A_p^{(8)}, \dots, A_p^{(N)}$ позволяет в алгоритме Флойда почти в два раза уменьшить количество операций, которые требуются при применении соответствующего алгоритма Дейкстры.

Для неориентированного графа матрицы $A_p^{(i)}$ являются симметричными, поэтому достаточно вычислять либо верхнюю либо нижнюю треугольную часть этих матриц.

Приведенный выше алгоритм находит только длины кратчайших путей, но не позволяет определить последовательность вершин, через которые они проходят.

Однако эти вершины можно найти с помощью записи информации о самих путях (наряду с информацией о длинах путей). В этой модификации алгоритма в дополнение к матрицам $A_p^{(k)}$ хранится и обновляется вспомогательная матрица $B^{(k)}[b_{ij}]$. Элемент b_{ij} указывает индекс вершины, непосредственно предшествующей вершине x_j в кратчайшем пути от x_i к x_j . Если вершины графа обозначены целыми числами, то элемент b_{ij} является просто номером предшествующей вершины в кратчайшем пути от вершины i к вершине с номером j .

Элементам матрицы $B^{(1)}$ присваиваются начальные значения $b_{ij} = i$ для всех i и j . Обновление матрицы $B^{(k)}$ происходит одновременно с вычислением матриц $A_p^{(k)}$ следующим образом :

$$b_{ij} = \begin{cases} b_{kj}, & \text{если } (a_{ik} + a_{kj}) < a_{ij}, \\ \text{не изменяется,} & \text{если } (a_{ik} + a_{kj}) \geq a_{ij}. \end{cases}$$

Вершины кратчайших путей определяются непосредственно из заключительной матрицы $B^{(N)}$ после вычисления $A_p^{(N)}$. Тогда кратчайший путь между двумя вершинами x_i и x_j соответствует следующей последовательности индексов вершин:

$$i, v_n, \dots, v_2, v_1, j,$$

где $v_1 = b_{ij}, v_2 = b_{iv_1}, v_3 = b_{iv_2}, \dots, i = b_{iv_n}$.

В качестве примера рассмотрим граф, изображенный на рис. 3.4. В результате расчетов по алгоритму Флойда получим матрицу кратчайших путей ($s=3$) и вспомогательную матрицу:

$$A_p^{(8)} = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 4 & 6 & 10 & 9 & 14 \\ 3 & 0 & 1 & 3 & 8 & 9 & 14 \\ 4 & 1 & 0 & 2 & 7 & 8 & 13 \\ 6 & 3 & 2 & 0 & 5 & 6 & 11 \\ 10 & 8 & 7 & 5 & 0 & 1 & 6 \\ 9 & 9 & 8 & 6 & 1 & 0 & 5 \\ 14 & 14 & 13 & 11 & 6 & 5 & 0 \end{pmatrix} \quad B^{(8)} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 & 3 & 6 & 1 & 6 \\ 1 & 2 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 2 & 3 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 5 & 6 \\ 1 & 3 & 3 & 4 & 5 & 6 & 6 \\ 1 & 1 & 4 & 4 & 5 & 6 & 7 \end{pmatrix}.$$

Используя эти матрицы, определим, например, последовательность вершин кратчайшего пути длины 6 из вершины x_1 в вершину x_4 . Из матрицы $B^{(8)}$ восстановим индексы вершин этого кратчайшего пути по алгоритму, описанному выше:

$$v_1 = b_{14} = 3, \quad v_2 = b_{1v_1} = b_{13} = 2, \quad v_3 = b_{1v_2} = b_{12} = 1.$$

Таким образом, этот путь проходит через вершины x_2 и x_3 .

Медиана - это вершина графа, у которой сумма кратчайших расстояний от неё до остальных вершин графа минимально возможная. Поиск медианы графа связан с задачами оптимального размещения пунктов обслуживания. Для рассматриваемого графа, как это следует из анализа суммы строк матрицы $A_p^{(8)}$, медианой является вершина x_4 .

Рассмотрим теперь оргграф из рис.3.5.

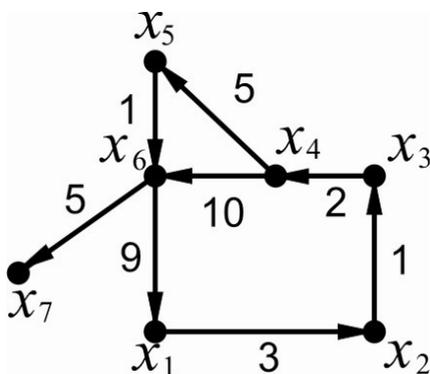


Рис. 3.5. Взвешенный оргграф для $n=7$

Для этого графа искомые матрицы имеют вид:

$$A_p^{(8)} = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 4 & 6 & 11 & 12 & 17 \\ 18 & 0 & 1 & 3 & 8 & 9 & 14 \\ 17 & 20 & 0 & 2 & 7 & 8 & 13 \\ 15 & 18 & 19 & 0 & 5 & 6 & 11 \\ 10 & 13 & 14 & 16 & 0 & 1 & 6 \\ 9 & 12 & 13 & 15 & 20 & 0 & 5 \\ \infty & \infty & \infty & \infty & \infty & \infty & 0 \end{pmatrix} B^{(8)} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 6 & 2 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 6 & 1 & 3 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 6 & 1 & 2 & 4 & 4 & 5 & 6 \\ 6 & 1 & 2 & 3 & 5 & 5 & 6 \\ 6 & 1 & 2 & 3 & 4 & 6 & 6 \\ 7 & 7 & 7 & 7 & 7 & 7 & 7 \end{pmatrix} .,$$

Например, кратчайший путь из вершины x_1 в вершину x_7 длины 17 соответствует индексам промежуточных вершин:

$$v_1 = b_{17} = 6, v_2 = 5, v_3 = 4, v_4 = 3, v_5 = 2, v_6 = 1.$$

Таким образом, кратчайший путь содержит промежуточные вершины x_2, x_3, x_4, x_5, x_6 . Отметим, что элементы $B^{(8)}[7,j]=7$, так как вершина x_7 является стоком (пути из x_7 не существует).

Заметим, что у графа с n вершинами $O(n^2)$ путей, каждый из которых содержит $O(n)$ вершин. Вычисление вспомогательной матрицы $B^{(N)}$ позволяет на порядок сократить объем хранимой о путях информации [13].

3.4. Параллельный алгоритм Флойда

Как следует из общей схемы алгоритма Флойда, основная вычислительная нагрузка при решении задачи поиска кратчайших путей состоит в выполнении операции выбора минимальных значений и номеров предшествующих вершин. Очевидно, что алгоритм умножения матриц (3.4) легко модифицируется в алгоритм подсчета кратчайших расстояний, соответствующих матрице $A_p^{(N)}$. Поэтому для $N \gg 1$ подсчет кратчайших расстояний в графе можно реализовать на основе известных параллельных алгоритмов вычисления произведения двух матриц [38–40]. В качестве фундаментальной подзадачи на k -той итерации можно выбрать вычисление элементов a_{ij} матрицы путей из (3.2), так как для любой пары индексов (i,j) на k -той итера-

ции элементы $a_{ik}^{(k+1)}$ и $a_{kj}^{(k+1)}$ не изменяются. Поэтому если для q процессоров выделить n^2/q укрупненных подзадач, то за n итераций потребуется выполнить n^3/q операций. Тогда для ускорения и эффективности алгоритма Флойда получим

$$S_q = \frac{n^3}{(n^3/q)} = q, \quad E_q = \frac{E_q}{q} = 1.$$

Известен параллельный алгоритм, основанный на использовании блочной схемы разбиения матрицы примыканий $A_p^{(k)}$ и вспомогательной матрицы $B^{(k)}$. Такой подход предполагает горизонтальное или вертикальное разбиение матриц на ленты (блоки) одинаковой размерности. Рассмотрим вариант разбиения матриц на вертикальные полосы, что соответствует алгоритмическим языкам, у которых элементы матриц хранятся по столбцам. При таком способе разбиения данных на каждой итерации алгоритма Флойда потребуется передавать между процессорными элементами (ПЭ) только элементы одного из блоков матриц $A_p^{(k)}$ и $B^{(k)}$. Параллельный алгоритм для графа из n вершин состоит из следующих этапов:

1. Определение целого N , где N – наименьшее 2^s , которое превышает $n-1$. Величина s соответствует количеству произведений матриц из последовательности

$$A_p^{(1)} \cdot A_p^{(1)}, A_p^{(2)} \cdot A_p^{(2)}, \dots, A_p^{(N/2)} \cdot A_p^{(N/2)}.$$

2. Задание размерности n , элементов матрицы примыканий $A_p^{(1)}$, вспомогательной матрицы $B^{(1)}$. Задание номеров и числа ПЭ: ПЭ₀, ..., ПЭ_{q-1}; $n=L \cdot q$, L – количество полос.

3. ПЭ₀ пересылает всем остальным матрицу $A_p^{(1)}$ и вспомогательную матрицу $B^{(1)}$.

4. Вычисление элементов соответствующей вертикальной полосы матрицы $A_p^{(2i)}$ и обновление вертикальной полосы вспомогательной матрицы $B^{(2i)}$.

5. Каждый ПЭ отправляет свою рассчитанную полосу матриц $A_p^{(2i)}$ и $B^{(2i)}$ всем остальным ПЭ и заполняет недостающие полосы данными, поступающими от других процессоров.

6. Выполняются пункты 4–5, пока количество итераций не превысит рассчитанное число s .

По закону Амдаля [22] для ускорения алгоритма, полученного при выполнении на идеальной параллельной машине из q процессоров (без учета обменов), имеет место формула

$$S_q = \frac{1}{r + (1-r)/q},$$

где r – доля операций последовательной части алгоритма.

Реальное ускорение на практике можно определить как отношение процессорного времени на выполнение последовательной программы к времени выполнения вычислений параллельной программой на q -процессорной машине. При этом предполагается, что обе программы реализуют один и тот же алгоритм.

В табл. 3.2 приведено время вычисления по параллельному алгоритму Флойда для различных значений числа вершин и используемых процессоров для кластера *СКИФ Cyberia* [41].

Таблица 3.2

Зависимость времени расчета от числа вершин графа и числа процессоров

n	Время работы алгоритма					
	q=10	S_q	q=50	S_q	q=100	S_q
500	0,44	8,5	0,26	14,4	0,32	12,5
1000	6,34	8,6	2,78	19,7	1,89	28,9
3000	268,61	9,6	59,06	43,8	32,25	80,2

Как следует из табл. 3.2, при больших n с ростом числа процессоров время расчетов существенно сокращается.

Следовательно, коэффициенты $c_i, i = \overline{1, n}$ характеристического многочлена (3.4) можно определить, если известны следы степеней матрицы A (суммы: S_1, S_2, \dots, S_n). Вычисление степеней и следов матрицы смежности A можно осуществить в параллельном режиме.

Возведение матрицы A размерности n в степень n выполняется за $2n^4$ арифметических операций, нахождение следов матриц требует еще $n^2 - 1$ операций, вычисление коэффициентов характеристического многочлена по методу Леверье осуществляется за n^2 операций. Таким образом, сложность этого алгоритма $O(n^4)$.

По рассмотренному параллельному алгоритму получим характеристический многочлен замкнутой фуллереновой структуры C_{20} . Она соответствует графу додекаэдра, плоское представление которого (диаграмма Шлегеля) представлено на рис. 3.7

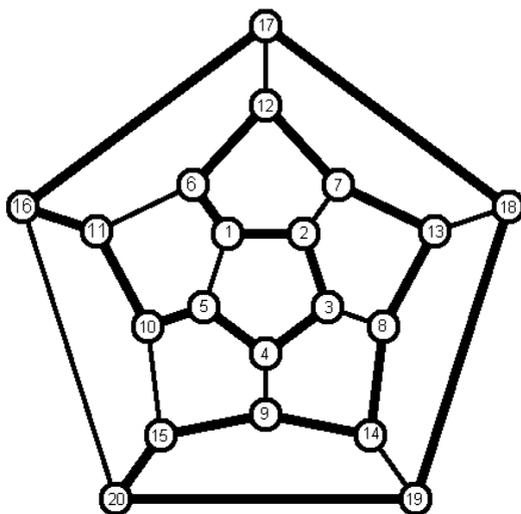


Рис. 3.7 Плоский граф додекаэдра

Матрица смежности этого графа

$$A_p(C_{20}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Характеристический многочлен графа, вычисленный по параллельному методу Левере, имеет вид

$$P_{C_{20}}(\lambda) = \lambda^{20} - 29\lambda^{18} - \lambda^{17} + 349\lambda^{16} + \lambda^{15} - 2267\lambda^{14} + 208\lambda^{13} + 8623\lambda^{12} - 2126\lambda^{11} - 19299\lambda^{10} + 8775\lambda^9 + 23439\lambda^8 - 16699\lambda^7 - 10965\lambda^6 + 12490\lambda^5 - 1900\lambda^4 - 600\lambda^3$$

Коэффициент многочлена $c_1=0$, так как след матрицы смежности всегда равен нулю.

Замечание 1. По теореме Гамильтона – Кэли невырожденная матрица A удовлетворяет своему характеристическому многочлену, поэтому из (3.4)

$$A^{-1} = -\frac{1}{c_n} (A^{n-1} + c_1 A^{n-2} + \dots + c_{n-1} E), \quad (3.6)$$

где E – единичная матрица.

Вычисляя правую часть (3.6) по уже найденным степеням матрицы A по описанному выше параллельному алгоритму, можно определить элементы обратной матрицы.

Замечание 2. Одной из важных характеристик матрицы является число обусловленности $cond(A)$, которое характеризует влияние погрешности в коэффициентах матрицы A на погрешность решения системы линейных уравнений $A\bar{x} = \bar{b}$. Для симметричных матриц его можно определить по формуле

$$cond(A) = \frac{\max_i |\lambda_i|}{\min_i |\lambda_i|} \geq 1.$$

Для этих целей можно воспользоваться теоремой Гершгорина и параллельным алгоритмом сплайновой интерполяции при нахождении собственных чисел [42, 43].

Замечание 3. Нахождение спектра матрицы существенно зависит от точности определения коэффициентов характеристического многочлена из (3.4).

3.6. О разделении графа на домены

Для решения задач на сеточных графах большой размерности с помощью многопроцессорных вычислительных систем часто используют декомпозицию расчетной области, в результате которой сеточный граф большой размерности разделяется на домены (подграфы, части сетки). Это связано с необходимостью сбалансирования нагрузки для выделенных q процессоров.

Объем передачи данных между процессорами зависит от числа ребер (веса сечения), соединяющих вершины, принадлежащие разным доменам, распределенным по процессорам. Для разделения графов используются следующие геометрические методы [45, 46]: покоординатное разбиение, рекурсивный инерционный метод деления пополам, деление сети с использованием кривых Пеано. Эти методы основываются на координатной информации об узлах графа.

Разделение графа методом спектральной бисекции предполагает, что каждой I – той вершине графа ставится в соответствие компонента x_i вектора \bar{x} , равная +1 или -1, таким образом, что

$$\sum_{i=1}^n x_i = 0, \quad \sum_{i=1}^n x_i^n = n.$$

При этих ограничениях минимизируется квадратичная форма

$$(L(G)\bar{x}, \bar{x}) = \sum_{(i,k) \in E} (x_i - x_k)^2.$$

Приближенное решение этой задачи сводится к определению собственного вектора, соответствующего максимальному ненулевому собственному значению спектральной матрицы Лапласа L , которое Фидлер назвал индексом связности графа [47–49]. Этот метод минимизирует суммарный вес ребер, соединяющих вершины из двух разных доменов V_1, V_2 . При этом для четных n

$$V_1 \cup V_2 = \emptyset, n_1 + n_2 = n, |V_1| = |V_2|.$$

Метод спектральной бисекции позволяет, используя алгоритм рекурсивной бисекции (*Recursive Spectral Bisection, RSB*), разделить граф на произвольное число частей.

Рассмотрим основные этапы этого метода, например, для графа из рис. 3.8

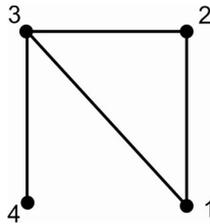


Рис. 3.8 Связный граф для $n=4$

1. Сформируем матрицу Лапласа для этого графа

$$L = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & -3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Эта матрица отрицательно полуопределенная, имеет наибольшее собственное значение $\lambda_1 = 0$, симметричная с действительными собственными числами.

2. Решение системы $L\bar{x} = \lambda\bar{x}$ дает собственные значения этой матрицы $\lambda_{1..4} = \{0, -1, -3, -4\}$. Собственный вектор Фидлера \bar{x}_2 , соответствующий максимальному ненулевому собственному значению λ_2 матрицы L , состоит из весовых множителей, связанных с вершинами графа. В данном случае $\lambda_2 = -1$, $\bar{x}_2 = (-0.408, -0.408, 0, 0.816)$.

3. Осуществляется сортировка множества номеров вершин графа по не убыванию значений компонент вектора Фидлера. В рассматриваемом примере порядок номеров вершин соответствует компонентам вектора $S = (1, 2, 3, 4)$.

4. Используя вектор S , можно распределить вершины графа в два домена V_1, V_2 так, что

$$d = n_1 / n_2, V_1 \cap V_2 = \emptyset, n_1 + n_2 = n.$$

Для $d=1$ в первый домен попадают вершины (1,2), а во второй – (3,4), что соответствует оптимальному разбиению графа на две равные части, представленному на рис.3.9.

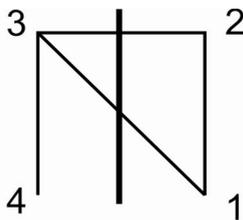


Рис. 3.9 Разделение графа на два домена

Рассмотрим теперь граф из рис. 3.10

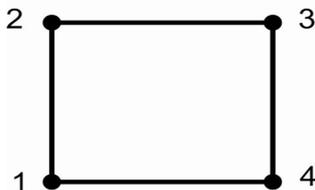


Рис. 3.10 Граф C_4

Собственные значения его матрицы Лапласа $\lambda_{1..4} = \{0, -2, -2, -4\}$. Рассмотрим два случая разделения этого графа. На рис. 3.10а показано разделение графа для $\lambda_2 = -2$, $S = \{4, 1, 3, 2\}$, а на рис.3.10б для $\lambda_4 = -4$, $S = \{2, 4, 1, 3\}$

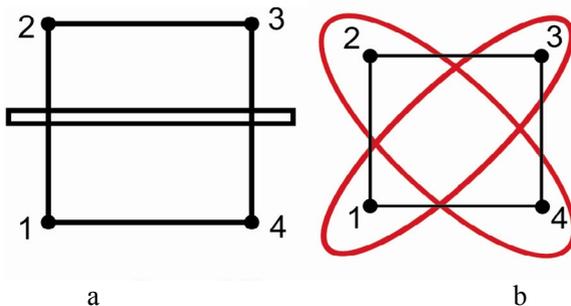


Рис. 3.10 Разделение графа на домены (а : $\lambda_2 = -2$, б: $\lambda_4 = -4$)

Как следует из этих рисунков, во втором случае два домена связаны уже не двумя, а четырьмя ребрами. Таким образом, вектор Фидлера действительно минимизирует связи между доменами.

3.7. Математическое моделирование теплообмена в стержневых системах

При проектировании различных сетевых объектов часто возникает задача оценки влияния отдельных элементов оборудования на тепловое состояние всей системы. Рассмотрим звездный граф $K_{1,4}$ из рис. 3.11а, соответствующий конструкционному элементу из четырёх тонких стержней с изолированной боковой поверхностью и различными теплофизическими свойствами [50–52].

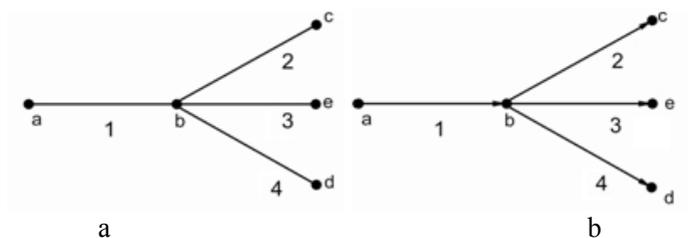


Рис. 3.11 Конструкционный элемент $K_{1,4}$

Требуется определить тепловое состояние системы в различные моменты времени t при условиях:

- 1) в точке b идеальный тепловой контакт;
- 2) в точках a, c, d, e осуществляется теплообмен по закону Ньютона с соответствующими коэффициентами теплоотдачи $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$;
- 3) начальная температура элемента T_n , а температура внешней среды T_e .

Неориентированному графу из рис 3.11а поставим в соответствие ориентированный граф из рис. 3.11b. Тогда с математической точки зрения необходимо решить следующую краевую задачу:

$$\frac{\partial u_m}{\partial t} = \beta_m^2 \frac{\partial^2 u_m}{\partial x_m^2}, \quad m = \overline{1, 4};$$

$$\lambda_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Big|_{x_1=a} = \alpha_1 (u_1 \Big|_{x_1=a} - T_e), \quad \lambda_2 \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \Big|_{x_2=c} = \alpha_2 (T_e - u_2 \Big|_{x_2=c});$$

$$\lambda_3 \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \Big|_{x_3=d} = \alpha_3 (T_e - u_3 \Big|_{x_3=d}), \quad \lambda_4 \frac{\partial u_4}{\partial x_4} \Big|_{x_4=e} = \alpha_4 (T_e - u_4 \Big|_{x_4=e});$$

$$\lambda_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Big|_{x_1=b} = \lambda_2 \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \Big|_{x_2=b} + \lambda_3 \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \Big|_{x_3=b} + \lambda_4 \frac{\partial u_4}{\partial x_4} \Big|_{x_4=b} \quad (3.7)$$

$$u_1(b, t) = u_2(b, t) = u_3(b, t) = u_4(b, t);$$

$$u_m(x, t) \Big|_{t=0} = T_n, \quad m = \overline{1, 4},$$

$$x_1 \in [a, b], \quad x_2 \in [b, c], \quad x_3 \in [b, d], \quad x_4 \in [b, e], \quad t \in (0, T],$$

где m - номер стержня, t - время, $\beta_m^2 = \lambda_m / (\rho_m c_m)$, $\lambda_m, \rho_m, c_m, \alpha_m$ - заданные параметры.

Введём в рассмотрение сеточный граф ω :

$$\omega_m = \{x_{mi} = i \cdot h_m, i = \overline{0, N_m}\}, m = \overline{1, 4};$$

$$h_1 = (b-a)/N_1, \quad h_2 = (c-b)/N_2, \quad h_3 = (e-b)/N_3,$$

$$h_4 = (d-b)/N_4, \quad \omega = \omega_1 \cup \omega_2 \cup \omega_3 \cup \omega_4$$

и сквозную нумерацию узлов сетки, представленную на рис. 3.13,

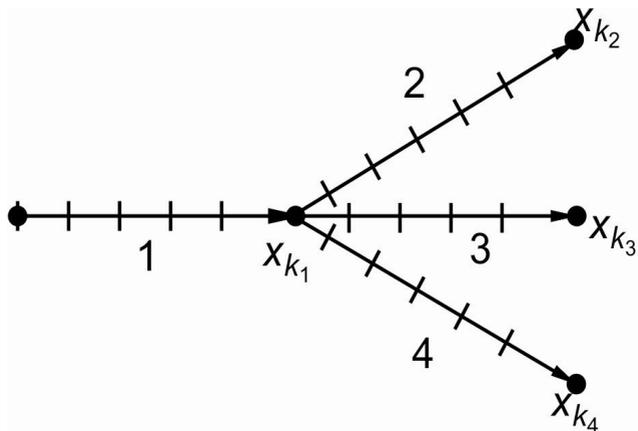


Рис. 3.13 Сеточный граф вторичной топологии

где

$$K_1 = N_1, \quad K_2 = K_1 + N_2, \quad K_3 = K_2 + N_3, \quad K_4 = K_3 + N_4.$$

Тогда для рис. 3.11 получим разностную схему на графе вторичной топологии:

$$\begin{aligned}
\lambda_1 \frac{\hat{u}_1 - \hat{u}_0}{h_1} &= \alpha_1 (\hat{u}_0 - T_e); \\
\lambda_1 \frac{\hat{v} - \hat{u}_{N-1}}{h_1} &= \lambda_2 \frac{\hat{u}_{K_1+1} - \hat{v}}{h_2} + \lambda_3 \frac{\hat{u}_{K_2+1} - \hat{v}}{h_3} + \lambda_4 \frac{\hat{u}_{K_3+1} - \hat{v}}{h_4}; \\
\frac{\hat{u}_i - u_i}{\tau} &= a_1^2 \Lambda \hat{u}_i, i = \overline{1, K_1 - 1}, \quad \hat{v} = \hat{u}_{1N} = \hat{u}_{20} = \hat{u}_{30} = \hat{u}_{40}; \\
\lambda_2 \frac{\hat{u}_{K_2} - \hat{u}_{K_2-1}}{h_2} &= \alpha_2 (T_e - \hat{u}_{K_2}); \\
\frac{\hat{u}_i - u_i}{\tau} &= a_2^2 \Lambda \hat{u}_i, i = \overline{K_1 + 1, K_2 - 1}, \quad \lambda_3 \frac{\hat{u}_{K_3} - \hat{u}_{K_3-1}}{h_3} = \alpha_3 (T_e - \hat{u}_{K_3}); \\
\frac{\hat{u}_i - u_i}{\tau} &= a_3^2 \Lambda \hat{u}_i, i = \overline{K_2 + 1, K_3 - 1}, \\
\lambda_4 \frac{\hat{u}_{K_4} - \hat{u}_{K_4-1}}{h_4} &= \alpha_4 (T_e - \hat{u}_{K_4}), \\
\frac{\hat{u}_i - u_i}{\tau} &= a_4^2 \Lambda \hat{u}_i, i = \overline{K_3 + 1, K_4 - 1},
\end{aligned} \tag{3.8}$$

где $\Lambda \hat{u}_i = \frac{u_i^{n+1} - 2u_i^{n+1} - u_{i+1}^{n+1}}{h_k^2}$, $u_i^n = u(x_i, n \cdot \tau)$, $k = \overline{1, 4}$;

$\hat{u} = u^{n+1}$, $u = u^n$, n - номер слоя, τ - шаг по времени, $t_n = n\tau$.

Система неявных разностных уравнений (3.8) аппроксимирует задачу (3.7) с порядком $O(\tau, h)$ и имеет матрицу при неизвестных следующей структуры:

$$\begin{pmatrix} \times & \times & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \times & \times & \times & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \times & \times & \times & 0 & \dots & 0 & \times & 0 & \dots & 0 & \times & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \times & \times & \times & \ddots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \times & \times & \times & 0 & 0 & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & 0 & \times & \times & 0 & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \times & \times & \times & 0 & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \times & \times & \times & 0 \\ \vdots & \ddots & 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \times & \times \end{pmatrix}$$

Эта матрица имеет обратную, но не является трёхдиагональной из-за уравнения, стоящего на строчке N_1 .

Для решения системы (3.8) на каждом ребре графа воспользуемся формулами метода левой или правой прогонки [43]:

$$\begin{aligned} \hat{u}_i &= P_{1i} \cdot \hat{u}_{i+1} + Q_{1i}, \quad i = \overline{0, K_1 - 1}, \\ \hat{u}_i &= P_{2i} \cdot \hat{u}_{i+1} + Q_{2i}, \quad i = K_2 - 1, \dots, K_1, \\ \hat{u}_i &= P_{2i} \cdot \hat{u}_{i+1} + Q_{2i}, \quad i = K_3 - 1, \dots, K_2 + 1, \\ \hat{u}_i &= P_{3i} \cdot \hat{u}_{i+1} + Q_{3i}, \quad i = K_4 - 1, \dots, K_3 + 1, \end{aligned} \quad (3.9)$$

где P_{mi} , Q_{mi} – прогоночные коэффициенты.

Определив необходимое количество прогоночных коэффициентов, из разностного уравнения в точке b , получим формулу для вычисления температуры \hat{v} на слое $n+1$. Зная решение в этой точке, по формулам (3.9) определяется решение во всех узлах сеточного графа для $t=n\tau$, $n=1, \dots, M$, $\tau M=T$.

Если число ребер графа $m \gg 1$ и $K_4 \gg 1$, то для решения соответствующей системы неявных разностных уравнений можно использовать разделение графа на домены и параллельные варианты метода прогонки или итерационные методы решения системы (3.8) на каждом слое по времени.

ЛИТЕРАТУРА

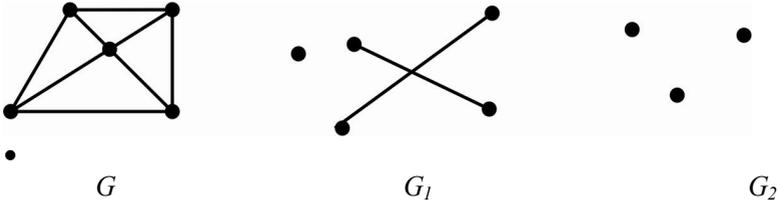
1. Берж К. Теория графов и ее применения. М., 1962. 319 с.
2. Оре О. Графы и их применение. М., 2002. 171 с.
3. Харари Ф. Теория графов. М., 2003. 300 с.
4. Татт У. Теория графов. М., 1988. 424 с.
5. Берцун В. Н. Математическое моделирование на графах. Томск, 2006. Ч. I. 88 с.
6. Евстигнеев В.А., Касьянов В.Н. Толковый словарь по теории графов. Новосибирск, 1996. Ч. II. 84 с.
7. Кристофидес Н. Теория графов: алгоритмический подход. М., 1978. 432 с.
8. Дистель Р. Теория графов. Новосибирск: Изд-во Ин-та математики, 2002. 336 с.
9. Емеличев В.А., Мельников О.И. и др. Лекции по теории графов. М., 1990. 384 с.
10. Дж. Кемени, Дж. Снелл, Дж. Томпсон. Введение в конечную математику. М.: Изд. ИЛ, 1963. 486 с.
11. Мельников О. И. Теория графов в занимательных задачах. М., 2009. 232 с.
12. Воеводин В. В., Кузнецов Ю. А. Матрицы и вычисления. М.: Наука, 1984. 320 с.
13. Новиков Ф.А. Дискретная математика для программистов. СПб.: Питер, 2001. 304 с.
14. Костокова Н. И. Графы и их применение. Комбинаторные алгоритмы для программистов. М., 2007. 311 с.
15. Колягин Ю. М., Саркисян А. А. Познакомьтесь с топологией: На подступах к топологии. М., 2009. 136 с.
16. Бондарев В. М., Рублинецкий В. И., Качко Е. Г. Основы программирования. Ростов н/Д: Феникс, 1997. 368 с.
17. Березина Л. Ю. Графы и их применение. М., 1979. 143 с.
18. Пермякова Н. В. Спецглавы математики. Ч. 2: Теория графов. Томск, 2000. 125 с.
19. Pedro F. Felzenszwalb and Daniel P. Huttenlocher. Efficient Graph-Based Image Segmentation // International Journal of Computer Vision, 2004. Vol. 59, № 2, p. 167-181.
20. Маршалл У. Берн, Рональд Л. Грэм. Поиск кратчайших сетей // В мире науки. 1989. № 3. С. 64-70.
21. Самохин А. В. Проблема четырех красок: неоконченная история доказательства // Соросовский образовательный журнал, 2000. Т. 6, № 7. С. 91-96.
22. Макконелл Дж. Анализ алгоритмов. Вводный курс. М.: Техносфера, 2002. 304 с.
23. Воеводин В.В., Воеводин В.В. Параллельные вычисления. Серия Научное издание. СПб.: BHV, 2002. 608 с.
24. Зыков А. А. Основы теории графов. М.: Наука, 1987. 384 с.
25. Уилсон Р. Введение в теорию графов. М., 1977. 207 с.
26. Асанов М. О., Баранский В. А., Расин В. В. Дискретная математика: графы, матроиды, алгоритмы. Ижевск, 2001, 288 с.
27. Акимов О. Е. Дискретная математика: логика, группы, графы, фракталы. М., 2005. 656 с.
28. Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. М., 1959. Т. 2. 620 с.
29. Цветкович Д., Дуб М., Захс Х. Спектры графов: теория и применение. Киев, 1984. 383 с.
30. Акимов О. Е. Конструктивная математика. М., 2005. 294 с
31. Елецкий А. В., Смирнов Б. М. Фуллерены и структуры углерода. УФН. 1995. Т. 165, № 9. С. 977-1009.
32. Робертс. Дж. Расчеты по методу молекулярных орбит. М.: ИЛ, 1963.
33. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. М.: Физматлит, 2001, 320 с.
34. Самарский А. А., Гулин А. В. Устойчивость разностных схем. М.: Наука, 1973. 386 с.
35. Прокушев Л. А. Дискретная математика. СПб.: СПбГУАП, 2000. 82 с.
36. Майника Э. Алгоритмы оптимизации на сетях и графах. М.: Мир, 1981. 323 с.

37. Рейнгольд Э., Нивергельт Ю., Део Н. Комбинаторные алгоритмы. Теория и практика. М.: Мир, 1980. 476 с.
38. Гергель В.П. Высокопроизводительные вычисления для многопроцессорных многоядерных систем. М.: Изд-во МГУ, 2010. 544 с.
39. Старченко А. В., Данилкин Е. А., Лаева В. И., Проханов С.А. Практикум по методам параллельных вычислений. М.: Изд-во МГУ, 2010. 200 с.
40. Старченко А. В., Берцун В. Н. Методы параллельных вычислений. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2013. 223 с.
41. Берцун В. Н., Бородин А. В. Параллельные алгоритмы на графах // Пятая Сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2010. С. 82-86.
42. Курош А. Г. Курс высшей алгебры. М., 2007. 440 с.
43. Берцун В. Н. Сплайны сеточных функций. Томск: ТМЛ-Пресс, 2007. 136 с.
44. Годунов С. К. Лекции по современным аспектам линейной алгебры. Новосибирск: Научная книга, 2002. 216 с.
45. Якобовский М. В. Обработка сеточных данных на распределенных вычислительных системах. Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 2. С. 40-53.
46. Борзунов Г. И., Войнов А. Е., Петрова Т. В. Анализ методов повышения эффективности распределенных вычислений при решении задач безопасности информационных технологий // Безопасность информационных технологий. 2009. N. 4. С. 57-60.
47. Волков К.Н. Балансировка нагрузки процессоров при решении краевых задач механики жидкости и газа сеточными методами. Применение средств параллельного программирования для решения задач механики жидкости и газа на многопроцессорных вычислительных системах // Вычислительные методы и программирование. 2012. Т.13. С. 107-129.
48. Fiedler M. Eigenvectors of acyclic matrices // Czechoslovak Mathematical Journal. 1975, 25(100). P. 607-618.
49. Скиена С. Алгоритмы. Руководство по разработке. СПб.: БХВ - Петербург, 2011. 720 с.
50. Берцун В. Н., Минакова Е. А.. Математическое моделирование теплообмена в элементах, имеющих графовую структуру // Исследования по баллистике и смежным вопросам. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2002. С. 69-70.
51. Фрязинов И.В. Алгоритм решения разностных задач на графах // ЖВМиМФ. 1970.Т. 10, №2. С. 474-477.
52. Воеводин А. Ф., Шугрин С. М. Методы решения одномерных эволюционных систем. Новосибирск: Наука, 1993. 367 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Задачи

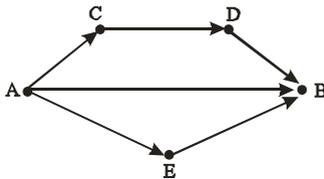
1. Записать матрицы R , A и D для графов



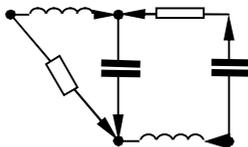
2. По матрице смежности A восстановить граф и его матрицу расстояний

$$A = \begin{vmatrix} 0 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}$$

3. Определить порядок информационного графа и его путевую матрицу Q

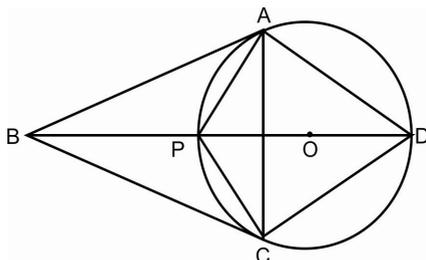


4. Для электрической цепи с сосредоточенными параметрами, где стрелка указывает опорное направление тока (+ → -),



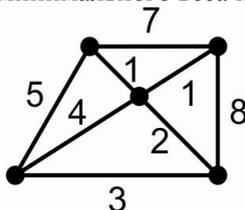
нарисовать соответствующий ориентированный граф и записать его матрицы A , R и $C(C)$.

5. Доказать, что если ABC является наибольшим углом остроугольного треугольника ABC , а ACD – правильный треугольник, с радиусом описанной окружности OD , то длина кратчайшей сети Штейнера равна отрезку BD и P -точка Штейнера.



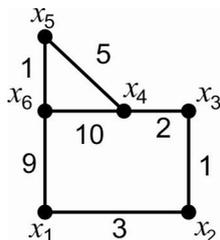
6. Паук связал паутину, соединяющую все вершины правильного тетраэдра. Чему равна наименьшая длина паутины, если ребро тетраэдра равно 1?

7. Определить остов минимального веса по алгоритму Прима.



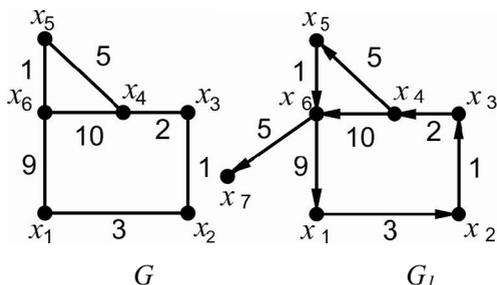
8. Определить барицентрические координаты точки Торичелли для равнобедренного треугольника с заданными координатами вершин.

9. Найти длину минимального остовного дерева из вершины x_1 в вершину x_5 по алгоритму Прима и кратчайший путь из x_1 в x_5 .



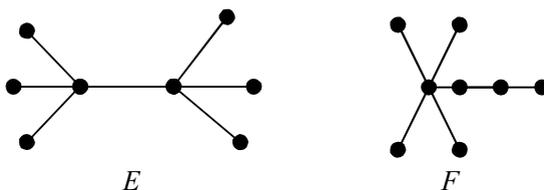
10. Как можно модифицировать алгоритм Дейкстры для нахождения всех путей из одной вершины в другую в порядке возрастания их длин.

11. Определить кратчайшие расстояния от вершины x_4 до всех вершин графа G и G_1 . В графе G найти две точки с наибольшим расстоянием между ними.

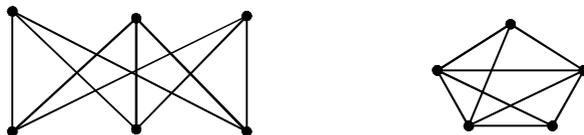


12. Существуют ли гамильтоновы циклы шахматного коня на шахматной доске (5×5)?

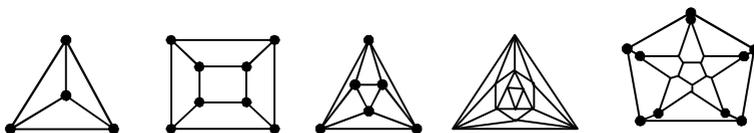
13. Проверить являются ли графы E и F коспектральными, и найти их спектр.



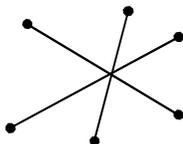
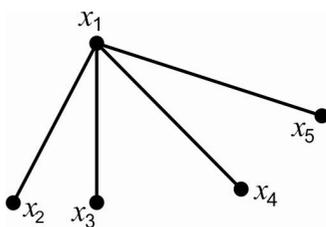
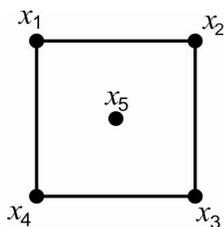
14. Найти хроматические многочлены графов



15. Определить хроматическое число одного из пяти правильных многогранников.



16. Найти характеристические многочлены и спектры графов



17. Записать матрицу смежности додекаэдра, пользуясь диаграммой Шлегеля. Найти спектр этого графа.

18. Для краевой задачи на собственные значения

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \mu \cdot u = 0, \Omega = \{0 < x, y < 1\}; u = 0, (x, y) \in \Omega$$

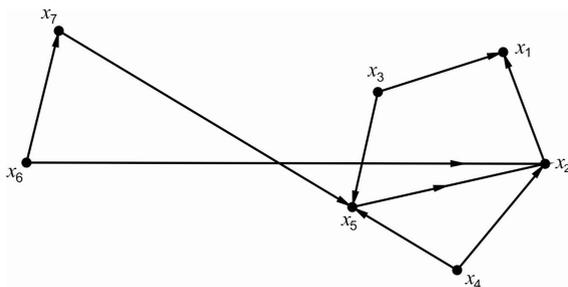
записать матрицу смежности сеточного графа на квадратной сетке для $h=0,25$.

19. Найти число внешней и внутренней устойчивости октаэдра и додекаэдра.

20. Из какого минимального количества кусков проволоки одинакового сечения можно спаять каркас куба?

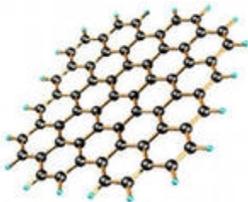
21. Пусть у гибкой шахматной доски из рис.2.23 склеен левый край с правым. Существует ли для такой цилиндрической доски решение задачи о 8 ферзях?

22. Существует ли ядро у орграфа

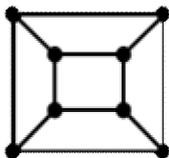


23. На плоскости в узлах регулярной сетки задано N точек p_1, \dots, p_N . Определить приближенно точку p_0 на плоскости, для которой суммарная длина до заданных точек минимальна. Сравнить ее положение с медианой сеточного графа.

24. Найти характеристический многочлен фрагмента графена, содержащего 22 шестиугольные ячейки, с помощью параллельного алгоритма, использующего степени матрицы смежности.



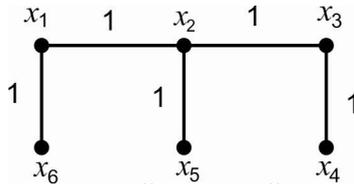
25. Используя вектор Фидлера, разделить граф на четыре домена.



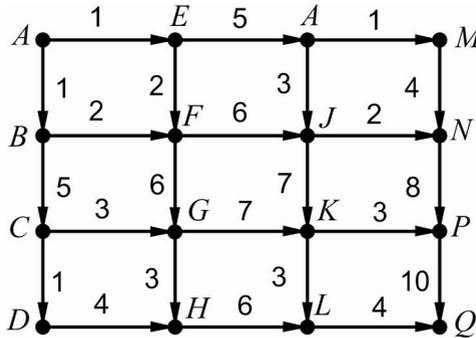
26. *Задача о пяти стаканах*: на столе сверху дном стоят 5 стаканов. Разрешается одновременно перевернуть любые 2 стакана. Можно ли добиться того, чтобы все стаканы встали на доньшки? Для решения использовать граф изменения состояния системы.



27. Построить одну из сетей Штейнера для графа G , у которого длина каждого ребра равна 1.

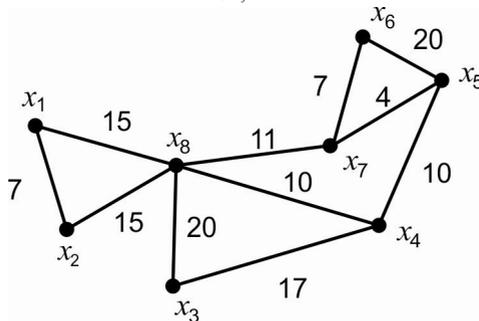


28. Нарисовать дерево кратчайших путей от вершины A до всех остальных вершин орграфа.



29. На графе G изображена система связи предприятий. Вероятность утечки информации при передаче (в процентах) соответствует весу p_{ij} ребра (x_i, x_j) . Найти такое остовное дерево T , которое минимизирует величину утечки информации F при ее передаче между всеми предприятиями

$$F = 1 - \prod_{(x_i, x_j) \in T} (1 - p_{ij}).$$



ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Эдсгер Вйбе Дейкстра (*Edsger Wybe Dijkstra*, 1930-2002) Нидерландский ученый, родился в Роттердаме. С 1952 г. работал программистом в Математическом центре Амстердама под руководством профессора Ван Вейнгаардена. Известность Дейкстре принесли его работы в области применения математической логики при разработке компьютерных программ. Он активно участвовал в разработке языка программирования Алгол и написал первый компилятор Алгол-60. Будучи одним из авторов концепции структурного программирования, Дейкстра проповедовал отказ от использования инструкции GOTO. Он предложил алгоритм нахождения кратчайшего пути на ориентированном графе с неотрицательными весами рёбер. В 1972 году Дейкстра стал лауреатом премии Тьюринга. В последние годы жизни преподавал в Техасском университете (США).



Ричард Бакминстер Фуллер (*Richard Buckminster Fuller*, 1895-1983) Американский архитектор, дизайнер, инженер и изобретатель. Фуллер написал двадцать восемь книг, ввел такие термины, как «космический корабль «Земля», «эфимеризация» и «синергетика». Он также сделал большое число изобретений, в основном в сфере дизайна и архитектуры, наиболее известным из которых является лёгкий и прочный «геодезический купол» - пространственная стальная сетчатая оболочка из прямых стержней



Открытая в 1985 г. новая *аллотропная форма углерода* была названа в честь Фуллера фуллеренами. В 1970 г. Фуллер получил Золотую медаль от Американского института архитекторов.



Роберт В. Флойд (*Robert W Floyd*, 1936-2001)

Американский учёный в области теории вычислительных систем. В 27 лет Флойд стал адъюнкт-профессором при университете Карнеги - Меллон, а ещё через шесть лет - профессором в Стэнфорде. К известным достижениям Флойда относятся эффективный алгоритм поиска кратчайшего пути в ориентированных графах (алгоритм Флойда - Уоршелла) и алгоритм размывания (алгоритм Флойда - Стейнберга). В Стэнфорде Флойд тесно сотрудничал с Дональдом Кнутом и был главным редактором серии его знаменитых книг «Искусство программирования» ставших фундаментальным источником информации о разработке алгоритмов. Лауреат премии Тьюринга (1978 г.), награжден медалью «Пионер компьютерной техники» (1991 г.).



Якоб Штейнер (*Jakob Steiner*, 1796–1863)

Швейцарский математик, основатель синтетической геометрии кривых линий и поверхностей 2-го и высших порядков. В 1814 г. Якоб был принят для обучения в школу-интернат, руководимую И. Песталоцци, выдающимся швейцарским педагогом-гуманистом, одним из основоположников концепции развивающего образования. В 1821 г. Штейнер окончил Гейдельбергский университет и работал учителем математики. С 1835 г. он начал преподавание в Берлинском университете в качестве экстраординарного профессора математики, а в 1834 г. был избран членом Берлинской академии наук. Одно из исследований Штейнера было посвящено поиску точки, сумма расстояний от которой до всех точек заданного множества минимальна. Его работы по геометрии, а также его лекции в Берлинском университете послужили основанием для издания в 1867 г. книги под заглавием: «*Jacob Steiner's Vorlesungen über Syntetische Geometrie, bearbeitet von Geiser und Schröter*». Все его сочинения («*Gesammelte Werke von Jacob Steiner*») были изданы Вейерштрассом в Берлине (1881–1882 гг.). Научные достижения Штейнера явились крупным вкладом в геометрию и находят различные применения в решении ряда актуальных проблем современной науки и техники.

Густав Роберт Кирхгоф (*Gustav Robert Kirchhoff*, 1824-1687) Немецкий физик, родился в Кёнигсберге. В 1846 г. окончил Кёнигсбергский университет. Кирхгоф был профессором университетов в Бреслау (1850 г.), Гейдельберге (1854 г.) и Берлине (1875 г.), возглавлял кафедру математической физики в Берлинском университете. Научную работу Кирхгоф начал ещё в студенческие годы. В 1845–1847 гг., занимаясь исследованием электрических цепей и представляя их в виде ориентированных графов, он открыл закономерности протекания тока в разветвлённых цепях (правила Кирхгофа). В 1857 г. Кирхгоф опубликовал статью о распространении переменного тока по проводам. В 1859 г. он заинтересовался анализом связи между процессами испускания и поглощения света. Совместно с Р. В. Бунзеном заложил основы спектрального анализа (1859 г.), открыл цезий (1860 г.) и рубидий (1861 г.). В 1859 г. на заседании Прусской академии наук Кирхгоф сделал сообщение об открытии закона теплового излучения, согласно которому отношение испускательной способности тела к поглощательной одинаково для всех тел при одной и той же температуре (закон Кирхгофа). В 1862 г. он ввел понятие «абсолютно чёрного тела» и предложил его модель – полость с небольшим отверстием. Его основные труды – «Исследования спектра Солнца и спектров химических элементов» (1861–1862 гг.) и «Лекции по математической физике» (в четырёх томах, 1874-1894 гг.) сыграли большую роль в развитии теоретической и прикладной физики.



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