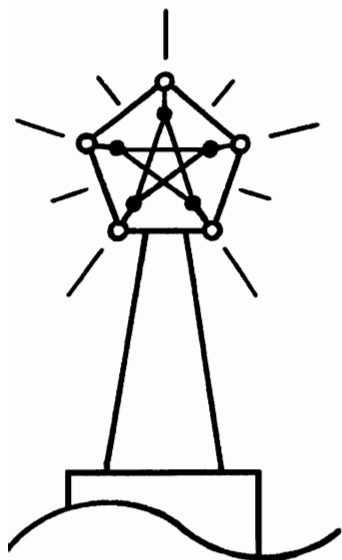


МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ УКРАИНЫ
Национальная Академия наук Украины



Южный научный центр НАН и МОН Украины



ДОКЛАДЫ ОДЕССКОГО СЕМИНАРА

по дискретной
математике

2

Июль 2005

Одесса
«Астропринт»
2005

Этот второй номер ДОСДМ (Доклады Одесского Семинара по дискретной математике) посвящается светлой памяти Фрэнка Харари, одного из ведущих специалистов мира по теории графов, выдающегося ученого и замечательного человека.

Начиная с 1969 г. циклы расширенных заседаний Семинара проходят во вторую (иногда третью) неделю сентября. 26-й цикл состоялся 6—10 сентября 2004 г., 27-й цикл пройдет 5—9 сентября 2005 г., дальнейшие намечены на 11—15 сентября 2006 г., 10—14 сентября 2007 г. и т. д.

ДОСДМ — не периодический, но систематический сборник, выходящий по мере накопления материала; примерный объем каждого номера — 3 печатных листа (48 страниц). В сборник помещаются статьи, доложенные и обсужденные на Семинаре, или тезисы доклада (если полный текст публикуется в другом месте). Основная тематика: теория графов и гиперграфов, задачи дискретной оптимизации, приложения к структурной химии; рассматриваются также вопросы обоснования теории множеств, алгебры, математической логики и специальной теории относительности.

От автора статьи (или тезисов объемом более 1 страницы) требуется оплата (примерно 4 доллара за страницу), но этот «отрицательный гонорар» будет постепенно снижаться благодаря привлечению спонсоров и за счет выручки от продажи.

Редакционный совет сборника ДОСДМ:

Визинг Вадим Георгиевич — научный редактор;

Зыков Александр Александрович — литературный редактор;

Зыкова Таисия Ефимовна — организационно-технический редактор;

Кузьмин Виктор Евгеньевич — научный редактор;

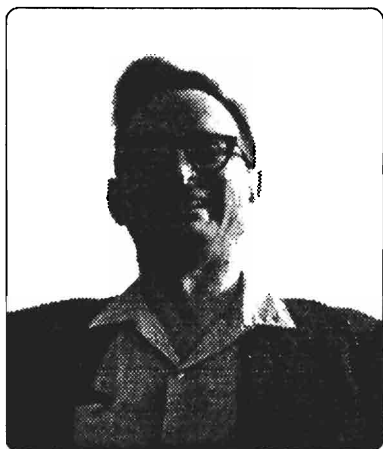
Любота Владимир Николаевич — научный редактор

Адрес e-mail: aldr@zykov.odessa.ua

Телефоны: (38/0482) 44-46-02 (А. А. и Т. Е. Зыковы),

61-19-38 (В. Г. Визинг), 63-19-89 (В. Е. Кузьмин),

66-91-19 (В. Н. Любота)



ФРЭНК ХАРАРИ
(1921—2005)

Далеко не каждый математик обладает одновременно такими выдающимися способностями и творческой активностью, такой широтой интересов и такими общечеловеческими качествами, какие были присущи этому замечательному Ученому и Человеку.

Фрэнк Харари (Frank Harary) родился 11 марта 1921 года в Нью-Йорке в семье еврейских эмигрантов с Ближнего Востока. С детства отличался способностями, тягой к знанию и искусству, добрым сердцем и мягким характером. Жизнерадостность и юмор били из него ключом, естественно и непринужденно; всю жизнь, как о нем говорили, «он возникал в нужном месте в нужное время». Как «человек свободной души», он «ходил в бой под разные барабаны», а о его отношении к политике красноречиво свидетельствует хотя бы такой эпизод: пропев нам весь «Интернационал», Фрэнк добавил, что одно время сам увлекался идеей «не хотим быть богатыми, а хотим быть бедными», но потом охладел. Он не был расистом, но анекдот про негра (как, впрочем, и про своего «соплеменника») мог его развеселить «просто потому, что смешно». Любил музыку, сам играл на кларнете.

Получив в Бруклинском колледже степени бакалавра и магистра, а в Калифорнийском университете — докторскую, Ф. Харари с 1948 по 1985 гг. занимает должность профессора Мичиганского университета и в 1950—1982 гг. является также сотрудником Института социальных

исследований. С 1987 г. — экстраординарный (впоследствии почетный) профессор университета в Лас Крусес (штат Нью Мексико).

Ф. Харари — новатор и популяризатор, автор многочисленных научных книг и статей в особо любимой им области: его «Теория графов» (1969, русский перевод 1973) — классика XX века — стала настольной книгой всех специалистов этого направления. Он основал «Journal of Combinatorial Theory» (включив в число редакторов А. А. Зыкова), «Journal of Graph Theory», получившие широкое распространение, и входил в редакционные советы многих других журналов.

В продолжение своей долгой и плодотворной карьеры Ф. Харари был автором или соавтором более 700 учебных пособий в столь разнообразных областях, как антропология, биология, география, компьютерные науки, лингвистика, политология, психология, социология, физика, химия, не говоря уже о математике. Он воспитал 16 докторов, из которых многие стали выдающимися учеными.

Харари любил путешествовать по всему миру, распространяя и пропагандируя любимую им с детства теорию графов, выступал более чем на тысяче конференций, а как приглашенный лектор — в 87 странах, на четырех языках. Он удостоился многих национальных и международных степеней — в Бруклинском колледже и Луисвилльском университете, в университетах Эксетера, Оксфорда и Кембриджа (Англия), Эбердина (Шотландия), Лунда (Швеция), в Греции и Македонии, был почетным членом Индийской академии наук и вице-президентом математического общества в Калькутте. Побывал в Таллинне (Эстония); мечтал посетить Самарканд, но не успел.

Мы несколько раз встречались с Фрэнком на международных конференциях и переписывались. Однажды получили от него письмо с обращением к канадскому математику Ричарду Гаю (а Ричард — письмо с обращением к нам): рассеянность — отличительная черта многих крупных ученых. До сих пор пользуемся книгами по теории графов и словарем Вебстера, которые Фрэнк любезно нам прислал, а на его рабочем столе в рамке красовались изображения трех львов — спящего, просыпающегося и рычащего, — символизирующих три стадии развития теории графов. Наши открытки со знаменитыми львами Воронцовского дворца (в Крыму) дошли, а вот книгу о Самарканде, к сожалению, затеряла (или присвоила) почта.

Фрэнк Харари умер в Лас Крусес 4 января 2005 года. Он был нашим другом, территориально далеким, но душевно близким. Мы всегда будем его помнить.

Т. Е. Зыкова

(использован некролог <http://www.oakland.edu/enp/obit.html> от 10.01.2005).

ОБ ОДНОЙ ПРОБЛЕМЕ, СВЯЗАННОЙ С ЦИКЛИЧЕСКИМ ОБХОДОМ НЕОРИЕНТИРОВАННОГО МУЛЬТИГРАФА ¹

В работе [1] для сильно связного ориентированного мультиграфа рассматривалась задача построения циклического ормаршрута наименьшей длины, проходящего через все ребра. Полученные результаты применялись к оценке длины эксперимента по распознаванию функции выходов конечного автомата. Аналогичная задача для неориентированного мультиграфа называется задачей о китайском почтальоне [2], [3], которую рассмотрим в такой постановке.

Пусть $G = (V, E)$ — конечный связный неориентированный мультиграф без петель, с множеством вершин V и множеством ребер E . Циклический маршрут, проходящий через все ребра мультиграфа, будем называть обходом мультиграфа. Обход минимальной длины называется кратчайшим. Длину кратчайшего обхода мультиграфа G будем обозначать через $c(G)$. Задача состоит в отыскании кратчайшего обхода.

Известен алгоритм полиномиальной сложности [3], точно решающий эту задачу. Укажем один простой приближенный метод решения.

Теорема 1. Пусть $G = (V, E)$ — связный n -вершинный мультиграф с m ребрами. Тогда $c(G) \leq m + n - 1$.

Доказательство. Построим лес T следующим образом. Выберем какой-либо цикл в мультиграфе G и удалим все его ребра. В полученном мультиграфе снова выберем цикл и удалим его ребра и т.д. Так продолжаем до тех пор, пока не получится лес, который и обозначим через $T = (V, E')$, считая, что $E' \cap E = \emptyset$. Лес T имеет те же вершины четной степени и те же вершины нечетной степени, что и мультиграф G . Рассмотрим мультиграф $H = (V, E \cup E')$; он связан и все его вершины имеют четную степень, т.е. H является эйлеровым мультиграфом, содержащим не более $m + n - 1$ ребер. Построим эйлеров обход мультиграфа H . Заменив в этом обходе каждое ребро из E' параллельным ему ребром из E , получим такой обход мультиграфа G , длина которого не больше $m + n - 1$. Следовательно, $c(G) \leq m + n - 1$. Теорема 1 доказана.

¹ Исследование выполнено при финансовой поддержке INTAS (проект INTAS 04-77-7173).

Будем называть квазициклом мультиграфа G суграф, все вершины которого имеют четную степень. Рассмотрим мультиграфе квазицикл с наибольшим числом $q(G)$ ребер.

Теорема 2. Пусть $G = (V, E)$ — связный n -вершинный мультиграф с m ребрами. Тогда $c(G) = 2m - q(G)$.

Доказательство. Утверждение справедливо, если G является эйлеровым мультиграфом, так как в этом случае $c(G) = q(G) = m$. Будем предполагать, что G имеет вершины нечетной степени.

Рассмотрим в G квазицикл с наибольшим числом ребер; пусть W — множество ребер такого квазицикла, $|W| = q(G)$. Обозначив $U = E \setminus W$; имеем $|U| = m - q(G)$. Заменим каждое ребро множества U двумя ребрами с теми же концами. Получим эйлеров мультиграф G' с $m + |U| = 2m - q(G)$ ребрами. Поэтому $c(G') = 2m - q(G)$. Но кратчайшему обходу мультиграфа G' соответствует такой обход мультиграфа G , при котором каждое ребро множества U проходится дважды, а все остальные ребра — по одному разу. Следовательно, $c(G) \leq m + |U| = 2m - q(G)$.

Докажем теперь обратное неравенство $c(G) \geq 2m - q(G)$. Рассмотрим кратчайший обход мультиграфа G . Пусть W' — множество тех ребер, каждое из которых при этом обходе проходится нечетное число раз. Суграф $K = (V, W')$ является квазициклом мультиграфа G ; поэтому $|W'| \leq q(G)$. Обозначив $U' = E \setminus W'$; имеем $|U'| \geq m - q(G)$. Так как каждое из ребер множества U' проходится не менее двух раз, то $c(G) \geq |W'| + 2|U'| = 2m - q(G)$. Теорема 2 доказана.

Из доказательства теоремы 2 видно, что алгоритм для решения задачи о китайском почтальоне позволяет отыскивать квазицикл мультиграфа с наибольшим числом ребер. Любой квазицикл принадлежит пространству циклов мультиграфа. Введем обобщение понятия пространства циклов — линейное булево пространство.

Линейное булево пространство B_k над полем коэффициентов $\{0, 1\}$ определяется следующим образом. Элементами пространства B_k являются все последовательности длины k , составленные из 0 и 1. Будем называть нормой элемента число единиц в последовательности. Операция сложения двух элементов определяется так:

$$(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) + (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k) = (\alpha_1 + \beta_1, \alpha_2 + \beta_2, \dots, \alpha_k + \beta_k),$$

где все суммы $\alpha_i + \beta_i$ берутся по модулю 2. Умножение элементов пространства на 0 и 1 определяется обычным образом. Пространство B_k представляет собой относительно сложения абелеву группу.

Проблема. Дано подпространство пространства B_k , порожденное некоторыми последовательностями длины k из нулей и единиц. Указать алгоритм для отыскания в подпространстве элемента с наибольшей нормой.

Не исключено, что эта задача является NP -трудной.

Литература

1. Визинг В. Г., Гольдберг М. К. О длине обхода сильно связного графа // Кибернетика. — 1969. — № 1. — С. 79—82.
2. Зыков А. А. Основы теории графов. — М.: Вузовская книга, 2004.
3. Кристофидес П. Теория графов. Алгоритмический подход. — М.: Мир, 1978.

Электронный адрес автора: vizing@paco.net

О СТРУКТУРЕ УПАКОВКИ ШАРОВ

Предложен краткий сопоставительный обзор исследования локальной структуры упаковок компактных выпуклых тел в евклидовом пространстве заданной размерности. Критерием локальной структуры принимается диаграмма Дирихле—Вороного. Показаны метрические и комбинаторные изменения этой диаграммы при малых изменениях структуры упаковки.

Пусть множество точек $\{P\}$ в n -мерном евклидовом пространстве E удовлетворяет условию дискретности: количество точек $\{P\}$, находящихся внутри произвольной сферы, пропорционально радиусу сферы в степени, равной размерности пространства [HCV, стр. 64]. Говорят, что точечная система $\{P\}$ является правильной, если точки множества $\{P\}$ имеют одинаковое расположение по отношению к любой из своих точек. Это означает, что каждая точка системы может быть так переведена определенным движением или преобразованием симметрии (не меняющим расстояний между всеми точками) пространства в любую другую точку, чтобы в каждом месте, где раньше находилась точка системы, и после движения находилась бы точка системы, и обратно. О таком движении говорят, что оно оставляет точечную систему неизменной, или инвариантной, а всякое движение подобного рода называют совмещением системы. При помощи этого понятия можно сказать, что всякая точка правильной точечной системы может быть переведена во всякую другую точку путем совмещения системы (каждые две точки $\{P\}$ системы гомологичны [DPA, стр. 8]).

Из определения правильной точечной системы следует, что точечные решетки, которые определяются путем построения из элементарного параллелепипеда, принадлежат к правильным точечным системам. Примером правильной точечной системы, которая не является точечной решеткой, служит модель кристалла алмаза [HCV]. Обобщением определения правильной точечной системы является определение кристаллического пространства Делоне—Александрова [DPA, стр. 8] следующими условиями:

¹ Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины. GURIN@ilt.kharkov.ua

1. Не все точки $\{P\}$ составляют гомологические пары.

2. Существует шар достаточно большого радиуса R такой, что где бы его ни поместить, внутри него всегда найдется хоть одна точка, гомологичная любой наперед заданной точке («шар однородности»).

3. Существует по крайней мере одна такая точка из $\{P\}$, что вокруг нее можно описать шар определенного радиуса r , внутри которого не будет точек, ей гомологичных («шар дискретности»).

Соединив произвольную точку $p(i)$ из $\{P\}$ прямолинейными отрезками $l(i)$ со всеми точками $\{P\}$, получим фигуру $L(i)$. Через середины отрезков $l(j)$ проведем плоскости $T(j)$, перпендикулярные прямым $l(j)$. Общую часть полупространств $T(j)$, содержащих точку $p(i)$, называют областью Дирихле—Вороного $V(i)$ или диаграммой Дирихле—Вороного [Е, стр. 230]. Области $V(i)$ образуют нормальное разбиение пространства E .

Если система точек $\{P\}$ является правильной, то все фигуры $L(i)$ конгруэнтны. В кристаллическом пространстве количество различных типов фигур $L(i)$ ограничивается отношением объема шара однородности к объему шара дискретности. Если точки $\{P\}$ расположены произвольно и, может быть, не дискретно, то изучаются вероятностные модели разбиения Пуассона—Вороного [ChWS] неевклидова, вообще говоря, пространства, которые могут не быть диаграммами Дирихле—Вороного. А диаграмма Дирихле—Вороного может быть не многогранником, но выпуклым замкнутым множеством [Мо, ch. 2.1].

Приведем пример дискретной вероятностной модели. Пусть $\{B\}$ — множество компактных выпуклых тел, вложенных в n -мерное евклидово пространство E . Если пересечение любых двух тел из $\{B\}$ имеет объем меры нуль, то говорят, что задана упаковка пространства E телами из множества $\{B\}$. Зафиксируем положение в пространстве тел, составляющих упаковку. Если при этом ее нельзя пополнить хотя бы одним телом из $\{B\}$, то такую упаковку В. А. Залгаллер называет непополнимой (см. [Gu1]); в каждом теле $\{B\}$ он отмечает произвольную точку и для множества отмеченных точек находит области $V(i)$, образующие индуцированное разбиение пространства E .

Найдем проекцию $A(i)$ вершин, ребер и граней области $V(i)$ на сферу радиуса r центром $p(i)$ при помощи прямых, исходящих из $p(i)$. Такая проекция устанавливает взаимно однозначное соответствие между точками сферы и точками поверхности области $V(i)$, поскольку поверхность этой области является звездной относительно точки $p(i)$. Таким способом на сфере радиуса r получим сеть $A(i)$, комбинаторно эквивалентную сети вершин, ребер и граней области $A(i)$.

Две сети $A(1)$ и $A(2)$ на сфере назовем комбинаторно эквивалентными, если существует топологическое преобразование сферы, переводящее $A(1)$ в $A(2)$; так же назовем и области $V(1)$, $V(2)$, если комбинаторно эквивалентны соответствующие им сети $A(1)$ и $A(2)$. Справедливо предложение:

Число N комбинаторно различных областей $V(i)$ того индуцированного разбиения пространства E , которое соответствует множеству $\{P\}$ точек, отмеченных по одной в каждом теле $\{B\}$ и составляющих неполную упаковку пространства, — конечно.

Определим систему точек $P(r, R)$ Делоне—Александрова аналогично определению дискретности в [НСV, стр. 64]:

1. Вокруг каждой точки $\{P\}$ можно описать шар определенного радиуса r , внутри которого не будет других точек $\{P\}$.

2. Радиус наибольшего шара, не содержащего точек $\{P\}$ внутри, но содержащего такие точки на границе, ограничен числом R .

Из определения диаграммы Дирихле—Вороного следует, что число R находится из множества радиусов шаров, центры которых расположены в вершинах этих диаграмм.

Число N не найдено для системы точек $P(r, R)$ как центров шаров произвольной упаковки равных шаров в трехмерном евклидовом пространстве. Но для порядка числа N существует оценка 8 000 000 — количество так называемых локальных форм — ограничение множества областей $V(i)$ на случай, когда все плоскости $T(j)$ проведены через точки касания соседних шаров [Gu2]; она является оценкой [Fe] числа комбинаторных типов сетей на сфере с количеством узлов не более 12, так как не больше двенадцати шаров могут касаться данного шара.

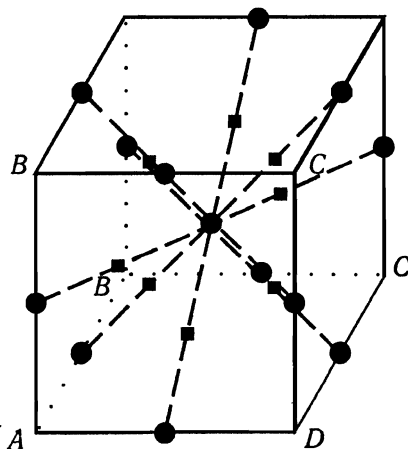
Возможно, предложенная оценка поясняет, почему не ответа на следующее предложение из 18-й проблемы Гильберта [Hi]: как можно плотнее расположить в пространстве бесконечное множество одинаковых тел заданной формы, например шаров данного радиуса или правильных тетраэдров с данным ребром (либо в предписанном положении), т. е. расположить так, чтобы отношение заполненной части пространства к незаполненной было по возможности наибольшим. Перечень размерностей евклидовых пространств, где проблема Гильберта полностью решена для упаковки равных шаров или найдена максимальная плотность заполнения пространства равными шарами, приведен в [CS].

Целью данной статьи является изучение вариации плотности упаковки равных шаров в трехмерном евклидовом пространстве при малых вероятностных изменениях структуры плотнейшей решетчатой упаковки равных шаров.

Обратимся к плотнейшей упаковке равных кругов на плоскости [CS]. Каждый круг имеет шесть соседних. Заменим круги шарами

и образовавшийся слой шаров зафиксируем на плоскости (x, y) . В углубления между шарами этого слоя можно так поместить шары следующего, чтобы они образовали второй слой, подобный первому, с плоскостью центров, параллельной (x, y) . Процедура надстройки слоев шара, вообще говоря, не является периодичной, но плоскости слоев всегда параллельны (x, y) . Всё множество полученных таким образом упаковок равных шаров образуют так называемые жесткие упаковки [Gu3] равных шаров в трехмерном евклидовом пространстве. Все жесткие упаковки имеют плотность, наибольшую из плотностей всех известных упаковок равных шаров в трехмерном евклидовом пространстве — плотность решетчатой упаковки, которая является одним из элементов множества жестких упаковок [Gu3]. Для областей жесткой упаковки число $N=2$, за исключением решетчатой упаковки, где $N=1$.

Пусть задан алгоритм уплотнения АА [Gu4] упаковки шаров, согласно которому отмеченные точки $\{P\}$ выбираются в малых наперед заданных ε -окрестностях центров шаров жесткой упаковки (на рисунке ε -окрестности изображены черными кругами с центрами в серединах ребер куба), и создается новая упаковка шаров, где каждая точка $\{P\}$ является центром шара новой упаковки.



Теорема 1. *Какой бы ни был алгоритм АА выбора точек $\{P\}$ в ε -окрестностях центров шаров жесткой упаковки шаров радиуса r в трехмерном евклидовом пространстве E , найдется такая ε -окрестность, что каждая новая упаковка шаров имеет плотность не больше, чем плотность жесткой упаковки.*

Доказательство проводится при помощи вычисления вариации объемов тетраэдров [Sa, фор. 1], вершины которых расположены в центрах шаров, а сами тетраэдры нормальным образом разбивают пространство упаковки. Количество метрических изменений в тетраэдрах исходной жесткой упаковки, которые следует учесть, показывает следующая комбинаторная

Теорема 2. *Для любой сколь угодно малой отличной от нуля ε -окрестности центров шаров жесткой упаковки равных шаров в трехмерном евклидовом пространстве E и произвольного алгоритма AA число N комбинаторно различных областей $V(i)$ не превосходит 3865.*

Доказательство. Не уменьшая общности, положим, что алгоритм AA применен к центрам шаров решетчатой упаковки, где областями $V(i)$ являются ромбододекаэдры. Грани такого многогранника образованы плоскостями, проходящими через точки касания соседних шаров (в условном изображении на рисунке они проходят через середины прямых, соединяющих центры шаров). Остальные плоскости $T(j)$ подразделяются на группу плоскостей $b(j)$, проходящих через четырехгранные вершины ромбододекаэдра (на рисунке это грани куба), и группу плоскостей $c(j)$, расстояние от которых до поверхности ромбододекаэдра превосходит легко вычисляемую константу D . Следовательно, алгоритм AA оставляет комбинаторно неизменными трехгранные вершины области $V(i)$, а четырехгранные вершины либо оставляет комбинаторно неизменными, либо преобразует в один из следующих комбинаторных типов: 1) четырехугольник; 2) треугольник; 3) треугольник с ребром, прикрепленным к одной из вершин; 4) ребро. Формальный перебор сочетаний комбинаторных изменений четырехгранных вершин исходного ромбододекаэдра $V(i)$ дает число 1865.

Заключение. Рассмотренные в теореме 2 изменения решетчатой плотнейшей (гранецентрированной кубической) упаковки равных шаров при помощи алгоритма уплотнения AA показывают локальную структурную неустойчивость упаковки, обнаруженную при помощи диаграмм Дирихле—Вороного. Обратная гранецентрированной кубической упаковке объемно центрированная кубическая упаковка равных шаров обладает диаграммой Дирихле—Вороного, которая комбинаторно не изменяется при том же алгоритме AA и обладает устойчивостью локальной структуры при действии уплотняющего алгоритма AA .

Основываясь на этом факте, а также помня о давно поставленной задаче исследования структуры неупорядоченной упаковки равных шаров [Hi] и на множестве различных компьютерных генераций

упаковок равных шаров [Sp], введем следующую классификацию точек $\{P\}$.

Пусть отмеченная точка $p(i)$ из множества $\{P\}$ обладает диаграммой Дирихле—Вороного $V(i)$. Применим к точкам $\{P\}$ алгоритм уплотнения АА. Тогда множество плоскостей $T(j)$ разделится на три группы: $a(j)$, $b(j)$, $c(j)$. Назовем соответствующие им пары точек из $\{P\}$ контактными, виртуально контактными, неконтактными. Согласно [А], при малых ε -окрестностях учет плоскостей группы $b(j)$ дает изменение объема области $V(i)$ на два поорядка меньше объема $V(i)$, что свидетельствует об устойчивости этого объема. Возможно, сопоставление устойчивости одной характеристики области $V(i)$ — объема и неустойчивости другой — комбинаторной будет полезным при теоретическом обобщении выводов обзора [Sp]. Заметим также, что приведенные здесь наблюдения допускают естественное распространение на неевклидовы пространства [Gu5].

The research described in this publication was made possible in part by Grant NO.U2000 from the International Science Foundation.

Литература

[HCV] *Hilbert D., Cohn-Vossen S.* Anschauliche Geometrie. Berlin, 1932 (Русск. перевод: Д. Гильберт, С. кон-Фоссен. Наглядная геометрия. — М.: Наука, 1981. — С. 344.).

[DPA] *Делоне Б., Падуров Н., Александров А.* Математические основы структурного анализа кристаллов // ОНТИ. — Л.; М., 1934. — С. 328.

[Е] *Енгель П.* Від квадратичних форм до діаграм Діріхле—Вороного // Вплив наукового доробку Г. Вороного на сучасну науку; Ред. Г. Сита, А. Юрачківський. — Київ: Інститут математики, 2003. — С. 235.

[ChWS] *Chiu S. N., Weygaert R. van de, Stoyan D.* The sectional Poisson—Voronoy tessellation is not a Voronoy tessellation // Adv. Appl. Prob., 28(1996), pp. 356—376.

[Mo] *Moller J.* Lectures on random Voronoi tessellations // Lecture notes in Statistics // Springer-Verlag: New York, 1994.

[Gu1] *Гурин А. М.* Одно свойство индуцированного упаковкой компактных тел нормального разбиения пространства на многогранники // Геометрия и топология. 8 (Зап. научн. сем. ПОМИ, том 299). — СПб., 2003. — С. 38—41.

[Gu2] *Гурин А. М.* Геометрическая вероятность воспроизводимости неупорядоченной упаковки шаров — модели металлического стекла // Физика и химия стекла. — 1995, 21, №5, 524-526.

- [Fe] *Federico P. J.* The number of polyhedra // *Philips Res. Repts.*, 30(1975), 220-231.
- [ScWa] *Schütte K., Waerden B. L.* Das Problem der dreizehn Kugeln // *Math. Annalen*, 125 (1953), 325-334.
- [Gu3] *Gurin A. M.* Rigid packing of balls // *Mat.-Phys., Anal., Geom.*, 2(1995), №2, 195-196.
- [CS] *Conway J. H., Sloane N. J. A.* Sphere Packings: Lattices and Groups // *New York: Springer*, 1(1988), 792.
- [Gu4] *Гурин А. М.* Два свойства автоморфизмов упаковок компактных тел. Труды участников междунар. школы-семинара по геометрии и анализу, посвященной Н. В. Ефимову. Абрау-Дюрсо, 5—11 сент. 2004.
- [Sa] *Сабитов И. Х.* Объемы многогранников. Изд-во Московского центра непрерывного математического образования. — М., 2002, 32.
- [Hi] *Hilbert D.* Gesammelte Abhandlungen 3(1935), 290-329.
- [Sp] *Speady Robin.* On the reproducibility of glasses // *J. Chem. Phys.*, 100(1994). №9, 6684-6691.
- [A] *Александров А. Д.* Выпуклые многогранники. — М.; Л.: ГТТИ, 1950. — С. 378.
- [Gu5] *Gurin A. M.* The Voronoi invariant of a noncompletable packing of compact bodies // *Voronoi conference on analitic number theory and spatial tessellations.* — Kyiv, September 22—28, 2003, p. 34.

ОБ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЛОГИЧЕСКИХ И МАТЕМАТИЧЕСКИХ ОШИБКАХ И ИХ ПОСЛЕДСТВИЯХ В СПЕЦИАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ

Формальная логика — не только средство для более точного выражения одних и тех же мыслей и фактов. Ее законы, записанные в виде логических тождеств и основанных на них правил дедукции, не сводятся к тавтологическим перефразировкам, а отражают определенные отношения реального мира, именно структурно-логические (как арифметика — количественные), которые играют существенную роль в природе, науке, производстве и общественной жизни независимо от того, кому это выгодно или приятно (см. [1]). И если все попытки вывести строго логически некоторый тезис из не вызывающих сомнения посылок оказываются тщетными, то это свидетельствует скорее всего о том, что сам тезис либо объективно неверен, либо хоть и соответствует действительности, но не является следствием исходных посылок. К числу таких тезисов относится догма «Преобразования пространственно-временных координат (декартовых) точечного события при переходе от одной инерциальной системы отсчета к другой в СТО выражаются линейными соотношениями».

Как видно из работ В. Фогта, Х. А. Лоренца, Дж. Лармора, А. Пуанкаре и Г. Минковского (см. [2]), никто из них даже не ставил вопроса о возможности нелинейной зависимости этих координат: физики, обнаружив интересующие их преобразования среди линейных, ни к каким другим уже не обращались, а математикам, воспитанным на классической алгебре, сама мысль о какой-то нелинейной замене переменных в квадратичной форме показалась бы кошмарной. На необходимость доказательства линейности, видимо, первым обратил внимание А. Эйнштейн. Но в основополагающей работе «К электродинамике движущихся тел» 1905 года (см. [2]) он лишь декларирует, что линейность является следствием однородности пространства и времени, а 11 лет спустя в дополнении к статье «О специальной и общей теории относительности» (см. [3]) заключает о линейности на основании элементарной логической ошибки — смешении прямой теоремы с обратной: «Пространственно-временные точки (события), удовлетворяющие уравнению $x - ct = 0$, должны

удовлетворять также уравнению $x' - ct' = 0$. Это, очевидно, будет иметь место, если вообще выполняется соотношение $x' - ct' = \lambda(x - ct)$, где λ — некоторая постоянная. В самом деле, обращение в нуль выражения $x - ct$ означает обращение в нуль и $x' - ct'$.

Последующие апологеты и популяризаторы, стремясь во что бы то ни стало убедить читателя в обязательной линейности преобразований Лоренца, либо просто перефразируют (иногда в «смягченном» виде) декларации и ошибки корифеев:

«Все точки пространства и времени должны быть эквивалентны с точки зрения преобразования. Поэтому уравнения преобразования должны быть линейными» (П. Г. Бергман [4], стр. 55),

«Требование линейности связано с однородностью пространства, в котором не существует каких-либо точек, выделенных по своим свойствам. <...> Следовательно, можно написать $x' = \alpha(v)(x - vt)$, где коэффициент $\alpha(v)$ может зависеть только от скорости относительного движения» (В. Г. Левич [5], стр. 197),

«В одной и той же точке пространства обращаются в нуль величины x' и $x - vt$, поэтому естественно предположить, что x' и $x - vt$ для любых моментов времени отличаются друг от друга лишь постоянным множителем» ([6], стр. 122),

либо добавляют к ним столь же грубые свои:

«Обе величины ds^2 и ds'^2 — бесконечно малые одного порядка и поэтому должны быть пропорциональны друг другу»¹. (В. А. Угаров [7], стр. 57 — заимствовано дословно у Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица [8], стр. 130),

«Пока мы потребовали только, чтобы формулы преобразования были линейны, потому что событие, описываемое в одной системе отсчета, должно преобразовываться в одно событие, наблюдаемое в другой системе. (Если бы формулы преобразований давались квадратичными соотношениями, то, обращая эти формулы, мы получили бы два решения, что означало бы, что одно событие в одной системе интерпретируется как два события во второй системе — невозможная ситуация.)» — своеобразный рекорд трех авторов ([9], стр. 46), опирающихся в трех строках «нестрогого рассуждения» (по робкой оценке редакторов перевода) на три неверных посылки!²

Не имея физической возможности продолжать цитирование бесчисленных ошибок и нелепостей, мы сообщаем заранее, что в случае

¹ Отсюда благодаря первому замечательному пределу следовало бы, что синус угла равен самому углу (в радианной мере); зачем же тогда таблицы тригонометрических функций?

² (1) «если формулы не линейны, то они квадратичны»; (2) «обращение квадратичного соотношения обязательно дает два решения»; (3) «если преобразование взаимно однозначно, то оно линейно».

двух или трех пространственных измерений предположение о линейности преобразования пространственно-временных координат приводит к противоречию, а в одномерном случае не вытекает из двух постулатов Эйнштейна и лишь может быть принято в качестве дополнительной аксиомы. Поэтому всякое «доказательство» линейности, чьему бы перу (от корифея до копировщика) оно ни принадлежало, неизбежно содержит хотя бы одну неустранимую ошибку, аннулирующую весь результат; в частности, отсюда уже явствует, что из двух нижеследующих тезисов, нередко используемых для оправдания линейности, по крайней мере один неверен. Но более поучительно будет выявить ошибки в «обосновании» обоих тезисов!

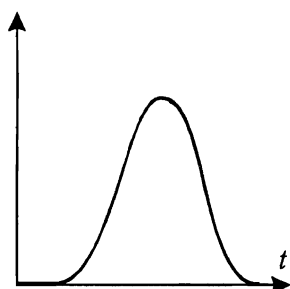
I. Как утверждается, например, в книге В. А. Фока ([10], стр. 33) и Берклеевском курсе физики ([11], стр. 343), в силу принципа относительности уравнение волнового фронта от источника O' , испустившего мгновенный световой импульс в точке $O(0, 0, 0)$ в момент $t = 0$, имеет вид $x^2 + y^2 + z^2 = t^2$ (мы полагаем $c = 1$) независимо от того, был ли источник закреплен в O или находился в состоянии равномерного прямолинейного движения, «иначе на основании формы волнового фронта мы могли бы установить, что источник движется». Эта банальная путаница не дотягивает даже до логической ошибки! Ведь согласно принципу относительности, в движущейся системе (t', x', y', z') процесс распространения фронта от источника O' , закрепленного в ее начале координат, должен быть таким же, как и в неподвижной системе (t, x, y, z) от источника O в ее начале; но ни Галилею, ни Эйнштейну и не снился «принцип», согласно которому неразличимы процессы распространения фронтов от двух разных источников в одной и той же системе отсчета: ведь мы видим, идет мимо нас человек с фонарем или стоит на месте! Следующее математическое рассуждение у В. А. Фока и А. А. Логунова (см. [12]) лишь маскирует это заблуждение (здесь кавычки не означают дословного цитирования).

«Уравнение волнового фронта можно найти из дифференциального уравнения вида

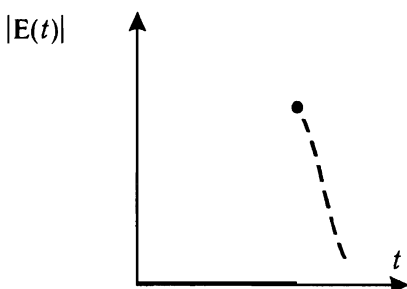
$$(\dots) \frac{\partial E}{\partial t} = \dots, \quad (1)$$

полученного из уравнений Максвелла (инвариантных относительно преобразований Лоренца). Поскольку впереди фронта ничего нет ($E = 0$), решение $E = E(t)$ уравнения (1) должно терпеть разрыв в каждой точке (x, y, z) , принадлежащей фронту; поэтому $(\dots) = 0$, что в расшифрованном виде представляет собой уравнение в частных производных первого порядка, решение которого и дает уравнение фронта».

Но на самом деле решение уравнения (1) непрерывно, разрыв же возникает потом, как результат идеализации полученной функции $E(t)$. Когда вы покупаете в магазине готовое платье и затем дома подгоняете его под свою фигуру, это ведь не означает, что вы перестраиваете швейную фабрику, изготовившую платье!



первоначально



идеализировано

II. Утверждается (в [10], [11] и др.), что преобразование

$$\begin{aligned} t &= t(t', x', y', z'), \\ x &= x(t', x', y', z'), \\ y &= y(t', x', y', z'), \\ z &= z(t', x', y', z'), \end{aligned}$$

при котором $t^2 - x^2 - y^2 - z^2 = t'^2 - x'^2 - y'^2 - z'^2$, должно быть линейным. Но это не так уже в одномерном случае ($y = y' = z = z' = 0$): если

$$t' = \frac{1}{2} \left(\frac{t+x}{h} + \frac{t-x}{h} \right), \quad x' = \frac{1}{2} \left(\frac{t+x}{h} - \frac{t-x}{h} \right),$$

где $h = h(t, x)$ — произвольная функция, нигде не обращающаяся в нуль, то $t'^2 - x'^2 = t^2 - x^2$. Функция¹

$$h = \begin{cases} (1 + tx/(t^2 + x^2))^v & \text{при } t^2 + x^2 \neq 0, \\ 1 & \text{при } t = x = 0, \end{cases}$$

сохраняющая нелинейность преобразования, удовлетворяет и всем требуемым физическим условиям ([12], стр. 31).

¹ Ее предложил устно Ги Аларкон (Guy Alarcon, Paris 1997).

Переходим к анонсированным выводам.

В одномерном случае противоречие не получено (пока), а дополнительную аксиому можно выразить в трех формах:

- (1) преобразование $t = t(t', x')$, $x = x(t', x')$ линейно,
- (2) скорости складываются по закону

$$u = \frac{u' + v}{1 + u'v}, \text{ или } u' = \frac{u - v}{1 - uv},$$

- (3) если $u = v$, то $u' = 0$,

где скорость c света (в вакууме) принята за безразмерную единицу, v — скорость системы отсчета (t', x') относительно системы (t, x) , а u, u' — скорости движущейся точки, измеренные (с помощью часов и световых или радиолокационных сигналов) в этих системах; в [12] (стр. 14—19) доказывается равносильность всех трех высказываний. Из постулатов Эйнштейна вместе с дополнительной аксиомой строго выводятся такие результаты традиционной СТО, как преобразования Лоренца, сокращения времени и длины, инвариантность интервала Минковского; независимость же этой аксиомы (не доказанную на уровне строгости математической логики) целесообразно считать рабочей гипотезой: ведь не исключена в принципе возможность того, что эффект «расширяющейся вселенной» обусловлен не «фактическим разбеганием» космических объектов, а особенностями световой метрики, в силу чего вариант (3) аксиомы, значит и вся она, теряют силу. Заметим также, что результаты опыта Майкельсона—Морли, наблюдения за сроком жизни быстрых π^+ -мезонов и многие другие экспериментальные факты, подтверждающие (с доступной сейчас точностью) выводы традиционной СТО, являются по своей сути одномерными.

Выходя в пространство, «одномерную аксиому» применяют к проекциям векторов на вектор скорости $\mathbf{v}$ и получают формулы преобразований пространственно-временных координат при переходе от инерциальной системы отсчета $(t, \mathbf{r})$ к другой инерциальной системе $(t', \mathbf{r}')$ (два разных вывода, в иных обозначениях, имеются в [10] (§12 главы 1) и в начале книги [13]):

$$\begin{aligned} t' &= \frac{t - \mathbf{v}\mathbf{r}}{\lambda}, \quad \mathbf{r}' = \frac{\mathbf{r} - \mathbf{v}t}{\lambda} + \frac{\mathbf{v} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{r})}{\lambda(1 + \lambda)}; \\ t &= \frac{t' + \mathbf{v}\mathbf{r}'}{\lambda}, \quad \mathbf{r} = \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{v}t'}{\lambda} + \frac{\mathbf{v} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{r}')}{\lambda(1 + \lambda)}, \end{aligned} \tag{2}$$

где $\lambda = \sqrt{1 - v^2}$, $\mathbf{v}$ — вектор скорости системы $(t', \mathbf{r}')$ относительно $(t, \mathbf{r})$, $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$ — радиусы-векторы одной и той же точки M в соответствующих системах. При выводе этих формул не предполагается заранее не только их линейность, но и компланарность вектора $\mathbf{r}'$ с $\mathbf{v}$ и $\mathbf{r}$ — всё это выявляется само собой, однако молчаливо допускается, что метрика физического пространства — евклидова, или, подробно: если измерить (часами и сигналами) катеты и гипотенузу прямоугольного треугольника, то соотношение теоремы Пифагора будет в точности выполняться. В одномерном случае (2) превращаются в формулы преобразований Лоренца традиционной СТО:

$$\begin{aligned} t' &= \frac{t - vx}{\lambda}, & x' &= \frac{x - vt}{\lambda}; \\ t &= \frac{t' + vx'}{\lambda}, & x &= \frac{x' - vt'}{\lambda}, \end{aligned} \quad (3)$$

к которым для случаев плоскости и пространства добавляют равенства $y' = y$ и $z' = z$, предполагая (без нарушения общности), что вектор скорости $\mathbf{v}$ направлен по оси абсцисс. Добавочные равенства сами по себе верны (иначе можно было бы в системе $(t', \mathbf{r}')$ внутренними средствами узнать, движется она относительно $(t, \mathbf{r})$ или нет), но неправомерно считать, что прежние (3) остаются при этом в силе — так, как будто на оси абсцисс по-прежнему находится сама точка M , а не ее проекция M_x ; покажем, что уже в плоском случае ($z = z' = 0$) допущение о справедливости системы соотношений

$$t' = \frac{t - vx}{\lambda}, \quad x' = \frac{x - vt}{\lambda}, \quad y' = y \quad (4)$$

приводит к противоречию.

Именно, предположим, что в плоскости xOy источник света O' равномерно движется по оси Ox , снабжен часами, идентичными закрепленным в O , и в момент совмещения оба хронометра показывают время $t = t' = 0$; в этот момент источник O' испускает мгновенный импульс. Спрашивается, где волновой фронт от этого импульса коснется «потолка» $y = y' = h > 0$? С одной стороны, в движущейся системе (t', x', y') в момент t' фронт имеет уравнение

$$x'^2 + y'^2 = t'^2, \quad (5')$$

и в точке касания должно быть $x' = 0$ ($t' = y' = h$); из формул (4) находим тогда абсциссу точки касания в неподвижной системе: $x = vh/\lambda > 0$. С другой стороны, подставляя выражения (4) в (5'), получаем уравнение того же волнового фронта в неподвижной системе:

$$x^2 + y^2 = t^2, \quad (5)$$

и в точке касания должно быть $x=0$ ($t=y=h$).

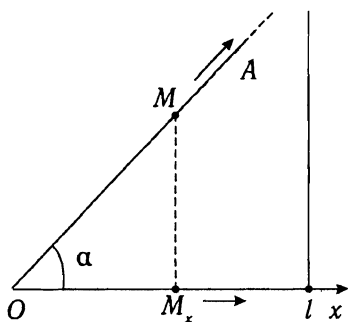
Итак, первые два равенства системы (4) неверны (если $v \neq 0$ и $y \neq 0$). Более того, в общем предположении о линейности:

$$t' = at + bx + cy, \quad x' = dt + ex + fy,$$

где коэффициенты $a, \dots, f$ могут зависеть только от v , ввиду симметрии относительно осей Ox и $O'x'$ должно быть $c=f=0$, и рассматривая в плоскости xOy только точки на оси абсцисс, мы возвращаемся к (3), а значит, и к (4)¹.

Из всего вышеизложенного мы, будучи убеждены в незыблемости принципа относительности и за пределами одномерного пространства, можем сделать пока единственный вывод: световая метрика не является евклидовой, а инвариант ds^2 имеет более сложный вид, чем $dt^2 - (dr)^2$ ². В отсутствие полей тяготения этот вывод не тривиален. Покажем, в чем состоит спасительная роль неевклидовости.

Пусть угол $\alpha < \pi/2$, а точка M равномерно движется по лучу OA . В евклидовой кинематике проекция M_x этой точки на ось Ox тоже движется равномерно и может быть принята за систему отсчета; применяя тогда формулу (3) к M_x , мы выведем (4) и очутимся в прежнем тупике.



Но в неевклидовом случае движение точки M_x по оси абсцисс не является равномерным, и из-за неинерциальности неправомерно рассматривать M_x как систему отсчета. Это очевидно, например, в геометрии Лобачевского, если $\alpha = \Pi(l)$ — угол параллельности для стрелки l : проекция M_x точки M никогда не достигнет l , поэтому движение «системы отсчета» M_x должно «в среднем» быть замедленным.

Красивый и полезный четырехмерный мир Эйнштейна-Минковского можно освободить от логических противоречий, видимо, только заменив его трехмерное евклидово сечение неевклидовым пространством. Независимо от типа геометрии последнего и от конкретного

¹ В [12] показано, что и «ломано-линейная» зависимость $t' = at + bx + c|y|$, $x' = dt + ex + f|y|$ тоже не может иметь места.

² Но при $y=y'=z=z'=0$ выражение ds^2 переходит в $dt^2 - dx^2$ и равенства (3) выполняются.

числового выражения метрики, мы можем утверждать, что в ситуации, рассмотренной выше, точка касания волнового фронта с «потолком» $y = h$ должна иметь абсциссу $x = vh/2\lambda$, поскольку точка-то одна, а не две, в то время как движения O и O' по отношению друг к другу симметричны. Было бы интересно проверить справедливость этого утверждения непосредственно на опыте. Единственная техническая трудность — нахождение такого управляемого источника, который бы, двигаясь с субсветовой скоростью, испустил импульс в нужный момент; для регистрации же первого касания волнового фронта с «потолком» можно заранее разместить на нем неподвижных наблюдателей и синхронизировать их часы друг с другом. Сам «потолок», очевидно, — не прямая линия, а эквидистанта.

В заключение отметим, что кроме логико-математических требований есть и одно физико-философское, которому традиционные преобразования (2) не удовлетворяют.

Пусть A — лаборатория в инерциальном состоянии, содержащая часы с радиолокационным прибором и окруженная прозрачной сферой, на которую нанесена координатная сетка. Наблюдая из A объект M , равномерно удаляющийся в постоянном направлении (т. е. с неизменными угловыми координатами), и измеряя его расстояния от центра A в различные моменты времени (по часам A), можно вычислить скорость u этого объекта относительно системы отсчета A в ее сферических координатах. Вектор u , очевидно, не зависит от того, следит ли кто-нибудь еще за поведением A и M из своей лаборатории O .

Инерциальный наблюдатель O может установить законы движения A и M в своей системе отсчета и путем вычислений определить вектор u по релятивистскому правилу сложения (и вычитания) скоростей; то же самое может проделать и другой инерциальный наблюдатель O' , и в результате должен получиться тот же вектор $u' = u$: ведь если оба они правильно вычислили величину скорости M относительно A и ту точку координатной сферы, которую получил (и собственноручно записал в свой дневник) наблюдатель A , то «двух мнений» быть не может. В [10] (§16) доказывается, что $|u'| = |u|$, но вопрос о том, равны ли сами векторы скорости, а не только их модули, там даже не ставится.

Как показано в [12], если найти u и u' с помощью формул (2), то получится только $|u'| = |u|$, но не $u' = u$, что с объективно-материалистической точки зрения просто нелепо. Однородность и изотропность физического пространства означает не отсутствие вообще какой-то протяженности и ориентации тела, а лишь невозможность выразить эти атрибуты при помощи длин и углов по отношению к «самому пространству», без предварительной фиксации других тел.

Пускай идеалист считает слова «протяженность» и «ориентация» бессмысленными, пока не указана система отсчета («наблюдатель»), но признавать первое, отвергая в то же время второе, — это уж, извините, явная эклектика. По крайней мере о двух соприкасающихся сосисках имеет смысл говорить, одинаково они ориентированы или образуют ненулевой угол, независимо от выбора системы отсчета.

Литература

1. *Зыков А. А.* Логико-философское введение в высшую математику. — Одесса: Астропринт, 1997, 1999, 2003.
2. *Принцип относительности* (сборник оригинальных статей по СТО, составитель А. А. Тяпкин). — М.: Атомиздат, 1973.
3. *Эйнштейн А.* Физика и реальность (сборник статей). — М.: Наука, 1965.
4. *Бергман П. Г.* Введение в теорию относительности. — М.: ИЛ, 1947.
5. *Левич В. Г.* Курс теоретической физики. — М.: Физматгиз, 1962. — Т. 1.
6. *Фриш С. Э., Тиморева А. В.* Курс общей физики. — М.: ГТТИ, 1957. — Т. 3.
7. *Угаров В. А.* Специальная теория относительности. — М.: Наука, 1977.
8. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Краткий курс теоретической физики // Книга I: механика, электродинамика. — М.: Наука, 1969.
9. *Акоста В., Кован К., Грэм Б.* Основы современной физики. — М.: Просвещение, 1981.
10. *Фок В. А.* Теория пространства, времени и тяготения. — М.: Физматгиз, 1981.
11. *Киттель Ч., Найт В., Рудерман М.* Механика (Берклеевский курс физики, том I). — М.: Наука, 1983.
12. *Зыков А. А.* Специальная теория относительности без эталонов длины. — Одесса: Астропринт, 2003.
13. *Pathria R. K.* The theory of relativity. Dehly: Hindu pbl.; Pergamon Press, 1974.

ЗАДАЧА СБАЛАНСИРОВАНИЯ МАТРИЦЫ ПЛАНА

Дана вещественная 2-мерная матрица A размерности $(n+1) \times (m+1)$ с элементами a_{ij} ($i=0, \dots, n; j=0, \dots, m$), для которой выполнены условия баланса:

$$a_{00} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_{ij}, \quad a_{i0} = \sum_{j=1}^m a_{ij} (i=1, \dots, n), \quad a_{0j} = \sum_{i=1}^n a_{ij} (j=1, \dots, m).$$

Если элементы матрицы A округлить до целых значений, то условия баланса, как правило, нарушатся. В этом случае ищется «ближайшая» целочисленная матрица, для которой выполнены условия баланса. Точнее, целочисленная матрица C той же размерности называется сбалансированной, если для нее выполнены условия:

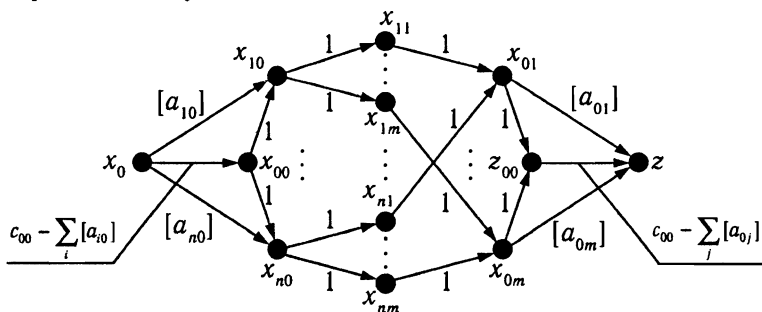
$$c_{00} = [a_{00} + 0,5], \quad c_{ij} \in [a_{ij}], \quad [a_{ij}] \} (i=0, \dots, n; j=0, \dots, m),$$
$$c_{00} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m c_{ij}, \quad c_{i0} = \sum_{j=1}^m c_{ij} (i=1, \dots, n), \quad c_{0j} = \sum_{i=1}^n c_{ij} (j=1, \dots, m).$$

Подобная задача часто возникает при планировании, когда, например, необходимо месячный план по выпуску разных изделий (строки матрицы), состоящих из различных деталей (столбцы матрицы, а на пересечении — количество деталей одного типа в изделиях одного вида) разложить на однодневные планы, но так, чтобы детали не накапливались и изделия равномерно комплектовались.

Всегда ли существует сбалансированная матрица? Как построить такую матрицу, причем ближайшую? В [1] дан положительный ответ на первый вопрос и получен алгоритм решения задачи сведением ее к некоторой задаче о наибольшем потоке (см., например, [2]). Кратко приведем основные результаты из [1].

Данная задача сводится к задаче сбалансирования такой матрицы A , для которой элемент a_{ij} ($i=1, \dots, n; j=1, \dots, m$) принадлежит полуинтервалу $[0, 1)$. Эта в свою очередь сводится к задаче о наибольшем потоке для следующей транспортной сети, показанной на рисунке. Поток величины c_{00} по этой сети определяет сбалансированную матрицу C , для которой значение элемента c_{ij} ($i \neq 0$ или $j \neq 0$) равно потоку, проходящему через соответствующую вершину x_{ij} сети. Показывается, что минимальная пропускная способность разреза сети равна c_{00} , откуда по теореме Форда—Фалкерсона следует,

что величина наибольшего потока равна c_{00} . Следовательно, сбалансированная матрица C всегда существует и ее элементы можно определить, решив задачу о наибольшем потоке.



Определим для каждой дуги (x_{i0}, x_{0j}) ($i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, m$) сети стоимость единицы потока равную $1 - a_{ij}$, а для всех остальных дуг сети определим нулевые стоимости. Пусть C^0 — сбалансированная матрица, соответствующая наибольшему потоку минимальной стоимости. Показывается, что она является ближайшей сбалансированной к матрице A в евклидовой метрике.

На основе сведения данной задачи к задаче о наибольшем потоке минимальной стоимости строится эффективный алгоритм решения задачи для 2-мерной матрицы.

Продолжение работы в настоящее время ведется в направлении исследования задачи сбалансирования k -мерной матрицы, где $k > 2$. Приведем постановку задачи для $k = 3$. Дана вещественная 3-мерная матрица размерности $(n+1) \times (m+1) \times (l+1)$ с элементами a_{ijk} ($i = 0, \dots, n; j = 0, \dots, m; k = 0, \dots, l$), для которой выполнены условия баланса:

$$a_{000} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^l a_{ijk}, \quad a_{i00} = \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^l a_{ijk} \quad (i = 1, \dots, n),$$

$$a_{i00} = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^l a_{ijk} \quad (j = 1, \dots, m), \quad a_{00k} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_{ijk} \quad (k = 1, \dots, l),$$

$$a_{0jk} = \sum_{i=1}^n a_{ijk} \quad (j = 1, \dots, m; k = 1, \dots, l),$$

$$a_{i0k} = \sum_{j=1}^m a_{ijk} \quad (i = 1, \dots, n; k = 1, \dots, l),$$

$$a_{ij0} = \sum_{k=1}^l a_{ijk} \quad (i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, m).$$

Ищется сбалансированная матрица C , для которой выполнены условия:

$$c_{000} = [a_{000} + 0,5], \quad c_{ijk} \in \{[a_{ijk}], a_{ijk}[1]\} \quad (i = 0, \dots, n; j = 0, \dots, m; k = 0, \dots, l),$$

$$c_{000} = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=1}^l c_{ijk}, \quad c_{i00} = \sum_{j=0}^m \sum_{k=1}^l c_{ijk} \quad (i = 1, \dots, n), \quad c_{0j0} = \sum_{i=0}^n \sum_{k=1}^l c_{ijk} \quad (j = 1, \dots, m),$$

$$c_{00k} = \sum_{i=0}^n \sum_{j=1}^m c_{ijk} \quad (k = 1, \dots, l), \quad c_{0jk} = \sum_{i=0}^n c_{ijk} \quad (j = 1, \dots, m; k = 1, \dots, l),$$

$$c_{i0k} = \sum_{j=1}^m c_{ijk} \quad (i = 1, \dots, n; k = 1, \dots, l), \quad c_{ij0} = \sum_{k=1}^l c_{ijk} \quad (i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, m).$$

В отличие от 2-мерного случая в этом 3-мерном случае уже не удастся построить транспортную сеть и свести задачу к потоковой. Однако если рассмотреть обобщенную сеть, на некоторых дугах (*кратные дуги*) которой задаются кратные потоки (величина потока кратна $k-1$), а на других дугах, инцидентных кратной дуге (*мультидуга*), поток одинаков, то для такой обобщенной сети можно определить задачу о наибольшем кратном потоке, которая эквивалентна задаче о сбалансировании k -мерной матрицы. Но для нахождения наибольшего кратного потока в обобщенной сети алгоритм пометок Форда—Фалкерсона не годится. Необходимо также его обобщить.

Другое направление работы относится к критерию близости сбалансированной матрицы. Удастся показать, что сбалансированная матрица, ближайшая в евклидовой метрике, будет ближайшей и в любой метрике нормированного пространства с симметрической нормой.

Литература

1. Коршунова Н. М., Рублев В. С. Задача целочисленного сбалансирования матрицы // Современные проблемы математики и информатики. — Вып. 3. — Ярославль: ЯрГУ им. П. Г. Демидова, 2000. — С. 145—150.

2. Йенсен П., Барнес Д. Потокоевое программирование. — М.: Радио.

ПРИМЕНЕНИЕ ГРАФОВ КОНЕЧНЫХ ПРЕДИКАТОВ ДЛЯ МИНИМИЗАЦИИ ИХ ДИЗЬЮНКТИВНОЙ ФОРМЫ

Статья продолжает тематику автора, затрагиваемую в [4].

Алгебра конечных предикатов излагается в работах Шабанова—Кушнарченко [1], [2], [3]. Это универсальный математический аппарат для реального описания дискретных объектов и явлений. К ним можно отнести алгоритмы, программы, схемы ЭВМ, конечные автоматы, логические закономерности, многие явления социологии, биологии, экономики, механизмы распознавания образов и т. д. Эта алгебра (автор называет ее также алгеброй интеллекта) является обобщением алгебр логики высказываний и многозначной логики.

Наличие алгебры КП дает возможность перехода от алгоритмического описания информационных процессов к описанию их в виде уравнений.

Уравнениям алгебры КП (как и любым другим) не присуща направленность действия, и это выгодно их отличает от алгоритмов и программ для ЭВМ. Впрочем, это относится к процедурным языкам программирования. Декларативный язык Пролог идеально подходит в данной ситуации.

Введение

При рассмотрении определений и свойств алгебры КП использован материал монографии [1].

Простейшими конечными предикатами (атомы алгебры) являются предикаты узнавания. Рассмотрим два множества

$A = \{a_1, a_2, \dots, a_k\}$ — предметный алфавит,
 $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ — алфавит переменных.

Одноместный предикат

$$a_i(x_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } x_j = a_i, \\ 0, & \text{если } x_j \neq a_i \end{cases} \quad (1)$$

как бы «узнает» букву предметного алфавита, а потому и называется предидикатом узнавания. Вместо $a_i(x_j)$ мы договоримся в дальнейшем писать $x_j^{a_i}$.

Базис алгебры конечных операторов образуют предикаты узнаваний и операции конъюнкции и дизъюнкции. Понятие формулы вводится индуктивно с помощью правил:

- 1) символы 0 и 1 суть формулы,
- 2) предикаты узнавания суть формулы,
- 3) если A, B — формулы, то $A \vee B$ — формула,
- 4) если A, B — формулы, то $A \wedge B$ — формула.

Основные тождества алгебры, позволяющие менять форму записи предиката, таковы:

Законы коммутативности

$$A \vee B \equiv B \vee A$$

$$A \wedge B \equiv B \wedge A$$

Законы ассоциативности

$$(A \vee B) \vee C \equiv A \vee (B \vee C)$$

$$(A \wedge B) \wedge C \equiv A \wedge (B \wedge C)$$

Законы дистрибутивности

$$(A \vee B) \wedge C \equiv (A \wedge C) \vee (B \wedge C)$$

$$(A \wedge B) \vee C \equiv (A \vee C) \wedge (B \vee C)$$

Законы идемпотентности

$$A \vee A \equiv A$$

$$A \wedge A \equiv A$$

Законы элиминации (поглощения)

$$A \vee (A \wedge B) \equiv A$$

$$A \wedge (A \vee B) \equiv A$$

Законы, содержащие константы

$$A \vee 1 \equiv 1, \quad A \wedge 1 \equiv A,$$

$$A \vee 0 \equiv A, \quad A \wedge 0 \equiv 0$$

Законы истинности

$$x_i^{a_1} \vee x_i^{a_2} \vee \dots \vee x_i^{a_n} \equiv 1, \quad i = 1, \dots, n$$

Законы ложности

$$x_i^a \wedge x_i^b \equiv 0 \quad \forall a, b \in A$$

В дальнейшем для упрощения записи формул знак конъюнкции мы будем опускать.

Элементарной конъюнкцией назовем любую конъюнкцию предикатов узнавания различных буквенных переменных, взятых с произвольными фиксированными показателями.

Дизъюнктивной нормальной формой (ДНФ) называют любую дизъюнкцию конечного числа элементарных конъюнкций.

Конституентой единицы называем элементарную конъюнкцию, содержащую все переменные алгебры конечных предикатов.

Совершенной дизъюнктивной нормальной формой (СДНФ) называется дизъюнкция конечного числа конституент единицы.

С помощью приведенных выше тождеств любая формула алгебры КП может быть записана однозначным образом (с точностью до перестановки слагаемых) в СДНФ.

Как видим, в определении СДНФ не содержится понятия отрицания переменной (в отличие от определения СДНФ булевой функции). Но при упрощении формы предиката в классе ДНФ понятие отрицания играет важную роль. Отрицание предиката вводится как обычно, но в алгебре конечных предикатов его можно задать следующими тождествами

$$\overline{x^{a_i}} \equiv x^{a_1} \vee x^{a_2} \vee \dots \vee x^{a_{i-1}} \vee x^{a_{i+1}} \vee \dots \vee x^{a_k}$$

$$\left. \begin{aligned} \overline{A \vee B} &\equiv \overline{A} \overline{B} \\ \overline{A \overline{B}} &\equiv \overline{A} \vee B \end{aligned} \right\} \text{ — Законы де Моргана.}$$

Все дальнейшие определения и рассуждения — предмет исследования автора данной статьи.

Минимальной ДНФ (МДНФ) называется ДНФ предиката, содержащая наименьшее возможное количество входящих в нее предикатов узнавания (с отрицаниями или без).

П.1. Минимизация предиката размерности 2×3 .

Пусть $X = \{X_1, X_2\}$, $A = \{0, 1, 2\}$.

Таблица истинности предиката содержит $3^2 = 9$ наборов и имеет вид

Код	X_1	X_2	$f(X_1, X_2)$
0	0	0	$f(0, 0)$
1	0	1	$f(0, 1)$
2	0	2	$f(0, 2)$
3	1	0	$f(1, 0)$
4	1	1	$f(1, 1)$
5	1	2	$f(1, 2)$
6	2	0	$f(2, 0)$
7	2	1	$f(2, 1)$
8	2	2	$f(2, 2)$

Каждый набор является троичным представлением числа, записанного в столбце «Код».

Рассмотрим следующий предикат:

$$f = X_1^2 \overline{X_2^0} \vee X_1^1 X_2^0 \vee \overline{X_1^0} \overline{X_2^2} \vee X_1^1 X_2^1.$$

СДНФ этого предиката имеет вид

$$\begin{aligned} f &= X_1^1 X_2^0 \vee X_1^1 X_2^1 \vee X_1^2 X_2^0 \vee X_1^2 X_2^1 \vee X_1^2 X_2^2 = \\ &= K_3 \vee K_4 \vee K_6 \vee K_8 \vee K_7. \end{aligned}$$

Его таблица истинности

Код	X_1	X_2	$f(X_1, X_2)$
0	0	0	0
1	0	1	0
2	0	2	0
3	1	0	1
4	1	1	1
5	1	2	0
6	2	0	1
7	2	1	1
8	2	2	1

Конституенты единицы: K_3, K_4, K_6, K_7, K_8 .

Разумеется, для нахождения конституент единицы строить таблицу истинности совсем не обязательно, а для предикатов большой размерности даже нежелательно. Рассмотрим еще один способ задания конечного предиката, который обладает большей наглядностью и позволяет предложить методику упрощения его дизъюнктивной формы.

Построим граф $Kon(2, 3)$ следующим образом:

Вершины графа — это коды, а две вершины K_i и K_j соединим ребром, если только соответствующие коды различаются лишь в одной позиции наборов. Получим такой граф:

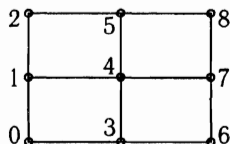
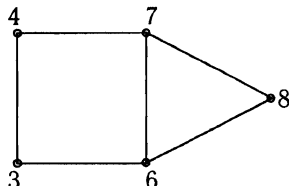


Рис. 1. Граф $Kon(2, 3)$

(На графе не показаны ребра, соединяющие зеркально противоположные вершины внешнего цикла (на этом рисунке таких ребер 6). Это замечание верно и для всех остальных рисунков графов $Kop(i, j)$).

Графом предиката f называется подграф графа $Kop(2, 3)$, порожденный множеством вершин, соответствующих конституентам единицы предиката.

Рис. 2. Граф $G(f)$



Гранью графа $Kop(2, 3)$ называется такое подмножество вершин, что дизъюнкция соответствующих конституент равносильна некоторой элементарной конъюнкции.

Из определения следует, что гранями являются вершины графа, ребра, циклы длины 3, циклы длины 4. Грань образуют также два цикла длины 3, расположенные «параллельно» в графе. Грань $\bar{X}_1^k$ получается дизъюнкцией элементов, расположенных на двух вертикальных (или горизонтальных) тройках вершин графа $Kop(2, 3)$. Грань X_1^k получается дизъюнкцией элементов, расположенных на вертикальной (горизонтальной) тройке, грань $X_1^k X_2^m$ — вершина, грани $X_1^k \bar{X}_2^m$ и $\bar{X}_1^k X_2^m$ — ребра графа (вертикальные и горизонтальные). Наконец, грань $\bar{X}_1^k \bar{X}_2^m$ дает цикл длины 4 в графе. Для рассматриваемого случая (размерность 2×3) выбор граней, покрывающих вершины графа, выполняем визуально.

Для графа на рис. 2 имеем две грани $\{3, 4\}$ и $\{6, 7, 8\}$, что и определит минимальную ДНФ предиката $МДНФ(f) = X_1^1 \bar{X}_2^2 \vee X_1^2$. Сложность предиката $sl = 3$.

П.2. Минимизация предиката размерности 3×3 .

Пусть $X = \{X_1, X_2, X_3\}$, $A = \{0, 1, 2\}$.

Таблица истинности предиката содержит $3^3 = 27$ наборов и имеет вид

Код	X_1	X_2	X_3	$f(X_1, X_2, X_3)$
0	0	0	0	$f(0, 0, 0)$
1	0	0	1	$f(0, 0, 1)$
2	0	0	2	$f(0, 0, 2)$

Код	X_1	X_2	X_3	$f(X_1, X_2, X_3)$
3	0	1	0	$f(0, 1, 0)$
...	...	...	...	...
26	2	2	2	$f(2, 2, 2)$

Каждый набор является трюичным представлением числа, записанного в столбце «Код».

Рассмотрим следующий предикат (см. [1], стр. 43):

$$f = X_1^0 X_2^0 X_3^0 \vee X_1^0 X_2^0 X_3^1 \vee X_1^0 X_2^0 X_3^2 \vee X_1^0 X_2^1 X_3^1 \vee X_1^0 X_2^2 X_3^0 \vee X_1^0 X_2^2 X_3^1 \vee \\ \vee X_1^0 X_2^2 X_3^2 \vee X_1^1 X_2^1 X_3^0 \vee X_1^1 X_2^1 X_3^1 \vee X_1^1 X_2^1 X_3^2 \vee X_1^2 X_2^0 X_3^1 \vee X_1^2 X_2^1 X_3^1 \vee \\ \vee X_1^1 X_2^2 X_3^1 \vee X_1^3 X_2^3 X_3^3.$$

Вопрос минимизации его формы рассмотрим в классе положительных (то есть не содержащих отрицаний) ДНФ.

Граф *Кон* (3, 3) имеет вид, показанный на рис. 3. Заметим, что хотя ребра важны для получения граней, сами они гранями не являются. Изображение граней в общем случае затруднительно, а для конкретного предиката мы это сделаем позже (см. рис. 4). Граф имеет следующие 27 граней веса 2:

- | | | | |
|------------------|------------------|------------------|------------------|
| 1) {0, 1, 2} | 2) {0, 3, 8} | 3) {0, 9, 18} | 4) {3, 4, 5} |
| 5) {1, 4, 7} | 6) {1, 10, 19} | 7) {6, 7, 8} | 8) {2, 5, 8} |
| 9) {2, 11, 20} | 10) {9, 10, 11} | 11) {9, 12, 15} | 12) {3, 12, 21} |
| 13) {12, 13, 14} | 14) {10, 13, 16} | 15) {4, 13, 22} | 16) {15, 16, 17} |
| 17) {11, 14, 17} | 18) {5, 14, 23} | 19) {18, 19, 20} | 20) {18, 21, 24} |
| 21) {6, 15, 24} | 22) {21, 22, 23} | 23) {19, 22, 25} | 24) {7, 26, 25} |
| 25) {24, 25, 26} | 26) {20, 23, 26} | 27) {8, 17, 26} | |

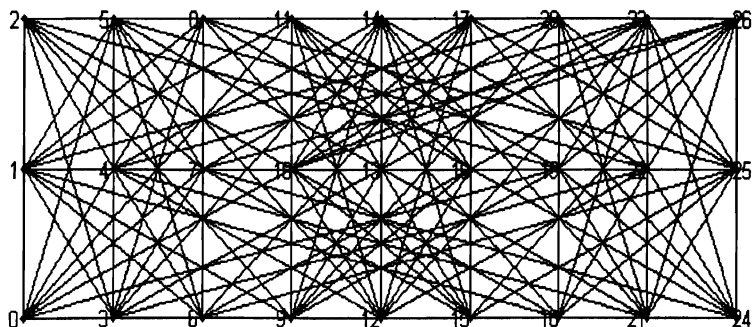
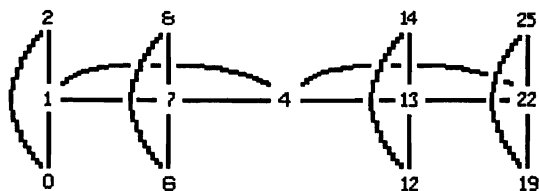


Рис. 3. Граф *Кон* (2, 3)

Граф предиката содержит 6 граней веса 2 — это 1), 5), 7), 13), 15), 23) — и имеет вид, показанный на рис. 4.



26

Рис. 4. Граф $G(f)$

Запишем элементарные конъюнкции, соответствующие граням:

$$\begin{aligned} 1) \{0, 1, 2\} &\rightarrow X_1^0 X_2^0 & 13) \{12, 13, 14\} &\rightarrow X_1^1 X_2^1, \\ 5) \{1, 4, 7\} &\rightarrow X_1^0 X_3^1 & 15) \{4, 13, 22\} &\rightarrow X_1^1 X_3^1, \\ 7) \{6, 7, 8\} &\rightarrow X_1^0 X_2^2 & 23) \{19, 22, 25\} &\rightarrow X_1^1 X_3^1. \end{aligned}$$

Вершина 26 соответствует набору (2, 2, 2), является гранью веса 3, и ей отвечает элементарная конъюнкция $X_1^2 X_2^2 X_3^2$.

Грани 1), 7), 13), 23) и вершина 26 обязательно входят в любое наименьшее покрытие гранями вершин графа $G(f)$, так как каждая из них содержит вершину, не покрываемую другими гранями. Оставшаяся вершина {4} может быть покрыта либо гранью 5), либо гранью 15) — на выбор! В результате имеем 2 решения в классе положительных ДНФ:

$$\begin{aligned} &X_1^0 X_2^0 \vee X_1^0 X_2^3 \vee X_1^1 X_2^1 \vee X_1^2 X_3^1 \vee X_1^2 X_2^2 X_3^2 \vee X_1^0 X_3^1, \\ &X_1^0 X_2^0 \vee X_1^0 X_2^3 \vee X_1^1 X_2^1 \vee X_1^2 X_3^1 \vee X_1^2 X_2^2 X_3^2 \vee X_1^1 X_3^1. \end{aligned}$$

Это совпадает с результатами, полученными применением обобщенного метода Квайна—Мак-Класки (см [1]). Преимущество нашего подхода в том, что процессы логических преобразований мы оставляем в стороне, набор граней стандартен и может храниться в памяти машины, а отсеив ненужных граней (при заданном предикате) задача несложная. Кроме того, метод легко обобщается на случай минимизации предиката в классе ДНФ содержащих отрицания предикатов узнавания, что мы намерены изложить в другой работе. Здесь же отметим, что для рассмотренного выше предиката сложность при переходе к МДНФ с отрицаниями от положительной МДНФ уменьшается с 13 до 9 единиц. Приведем ее вид:

$$f = X_1^0 \overline{X_2^1} \vee X_1^1 X_2^1 \vee \overline{X_1^1} X_3^1 \vee X_1^2 X_2^2 X_3^2.$$

Литература

1. *Шабанов-Кушнарченко Ю. П.* Теория интеллекта. Математические средства // Харьков. ХГУ: «Вища школа», 1984.
2. *Шабанов-Кушнарченко Ю. П.* Теория интеллекта. Технические средства // Харьков. ХГУ: «Вища школа», 1986.
3. *Шабанов-Кушнарченко Ю. П.* Теория интеллекта. Проблемы и перспективы // Харьков. ХГУ: «Вища школа», 1987.
4. *Любота В. Н.* Применение графов булевых функций для минимизации дизъюнктивной нормальной формы // ДОСДМ, № 1 (август 2004), 20—25.

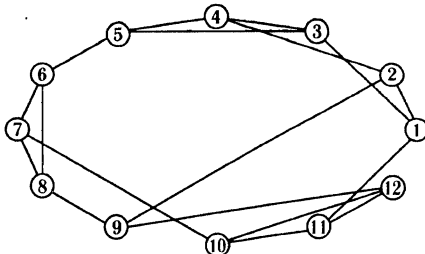
ПРИМЕНЕНИЕ АЛГЕБРЫ КОНЕЧНЫХ ПРЕДИКАТОВ К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ ТЕОРИИ ГРАФОВ

В данной работе рассмотрена возможность использования алгебры конечных предикатов (см. [2]) и декларативного языка *Visio Prolog* для решения задач теории графов. Этой информацией мы сразу отмечаем круг специалистов, которых может заинтересовать данная работа.

Пролог известен как декларативный язык. Программа на Прологе состоит из фактов и правил вывода, с помощью которых описывается не процедура решения (как это принято в чисто процедурных языках, таких как Бейсик, Паскаль, Фортран, Си и др.), а система связей между рассматриваемыми объектами и цель задачи. *Visio Prolog* — язык, который, сохраняя достоинства предыдущих версий *Prolog*, способен эффективно решать любые задачи современного программирования.

Рассмотрим некоторое (желательно близкое к наименьшему) покрытие графа полными подграфами. Граф полностью определится указанием этих полных подграфов и ребрами, которые соединяют вершины разных подграфов. Каждый полный подграф, с точки зрения взаимодействия его с остальными вершинами, может находиться в $p + 1$ состоянии (p — число его вершин). Эти состояния мы кодируем как $\{0, 1, \dots, p\}$. Предметное множество предиката, который мы хотим рассмотреть, разбито на классы множеств указанного выше вида, а множество переменных $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$ сопоставлено полным подграфам.

Вершины графа обозначаем буквами X_1, X_2 и т. д. Предикат узнавания вершины графа в полном подграфе в обозначениях алгебры КП есть X_i^k , где i — номер полного подграфа, а k — код вершин в этом подграфе (причем 0 — код отсутствия). В Прологе мы четко указываем название узнаваемой вершины. Соответствующий предикат мы именуем «uzn». В качестве примера рассмотрим граф



Разбиваем его на полные подграфы следующим образом

$$\begin{aligned} Y_1 &= \{3, 4, 5\}, \\ Y_2 &= \{6, 7, 8\}, \\ Y_3 &= \{10, 11, 12\}, \\ Y_4 &= \{1, 2\}, \\ Y_5 &= \{9\}. \end{aligned}$$

П.1. Алгоритм работы с ядрами неориентированного графа при заданных условиях на выбор ядер. (Нахождение наибольшего ядра, ядер заданной мощности, ядер, не содержащих конкретно заданных вершин и т. п.)

domains

n=integer

m=n*

predicates

o1(n) o2(n) o3(n)

num(m,n)

uzn(n,n,n)

cel(m)

clauses

o1(0).o1(1).o1(2).o1(3).

o2(0).o2(1).o2(2).

o3(0).o3(1).

/*факты, задающие кодировку
вершин в полных подграфах*/

uzn(A,B,1):-A=B.

uzn(A,B,0):-A<>B.

/* правила для определения
предикатов узнавания*/

num([A|Av],B):-num(Av,C), B=(1-A)*C.

num([X,Y],Z):-Z=(1-X)*(1-Y). /*правила для задания вершин
графа в виде списка смежных
вершин*/

cel([Y1,Y2,Y3,Y4,Y5]):- o1(Y1),o1(Y2),o1(Y3),o2(Y4),o3(Y5),

uzn(Y4,1,X1),uzn(Y4,2,X2), uzn(Y1,1,X3), uzn(Y1,2,X4),

uzn(Y1,3,X5),uzn(Y2,1,X6), uzn(Y2,2,X7), uzn(Y2,3,X8),

uzn(Y5,1,X9),uzn(Y3,1,X10),uzn(Y3,2,X11),uzn(Y3,3,X12),

/*кодировка вершин графа, для представления
его в виде подстановочного предиката*/

```

num([X2,X3,X11],X1),
num([X1,X4,X9],X2),
num([X1,X4,X5],X3),
num([X2,X3,X5],X4),
num([X3,X4,X6],X5),
num([X5,X7,X8],X6),
num([X6,X8,X10],X7),
num([X6,X7,X9],X8),
num([X2,X8,X12],X9),
num([X7,X11,X12],X10),
num([X1,X10,X12],X11),
num([X9,X10,X11],X12), /*списки смежных вершин графа*/

```

$X1=0, X9=0$. /*условие (или условия, записанные через запятую) отбора ядер графа*/

goal
 cel(Z). /*целевой предикат задачи*/

/*Найдем все ядра мощности 4. Цель мы не будем изменять, а в конце программы, в строке, определяющей условия вывода, запишем

$X1+X2+X3+X4+X5+X6+X7+X8+X9+X10+X11+X12 = 4$, (*)
 $Z = [1,1,1,0,1]$

и так далее — все 29 ядер. Ядро определится множеством вершин одноименных с переменными, принимающими значения 1, либо с помощью кодирования вершин

(3, 4, 5)	-->	3 (1-й элемент)
(6, 7, 8)	-->	6 (1-й элемент)
(10,11,12)	-->	10 (1-й элемент)
(1, 2)	-->	(элементы в ядро не попадают)
(9)	-->	9 (1-й элемент)

Так что первое (из найденных 29) ядро — $S1 = \{3, 6, 9, 10\}$.

Найдем все ядра, содержащие вершину X9. Для этого в конец программы через запятую добавим условие $X9=1$. Находим

```

Z = [1,1,1,0,1]
Z = [1,1,2,0,1]
Z = [1,2,2,0,1]
Z = [2,1,1,1,1]
Z = [2,1,2,0,1]

```

$Z = [2,2,0,1,1]$
 $Z = [2,2,2,0,1]$
 $Z = [3,0,1,1,1]$
 $Z = [3,2,0,1,1]$
 $Z = [3,2,2,0,1]$

10 Solutions

Если нас интересует только наибольшее ядро графа, то условие (*) нужно заменить на

$$X1+X2+X3+X4+X5+X6+X7+X8+X9+X10+X11+X12=5, \quad (***)$$

либо, что еще проще, на

$$Y1*Y2*Y3*Y4*Y5 > 0. \quad (****)$$

Получим ядро $Z = [2, 1, 1, 1, 1]$ (в принятой кодировке) — 1 Solution. В обычной записи это $S = \{1, 4, 6, 9, 10\}$.

Без дополнительных условий алгоритм выдает все ядра графа $Z = [1, 1, 1, 0, 1]$ — всего 31 решение*/.

П.2. Алгоритм работы с правильными раскрасками неориентированного графа при заданных условиях на выбор раскрасок. (Нахождение раскраски наименьшим числом цветов, раскраски в заданное число цветов, раскраски при условии соцветности определенного множества вершин и т. п.)

domains

$n = \text{integer}$

$m = n^*$

predicates

$ol(n)$

$num(m,n)$

$uzn(n,n,n)$

$cel(m)$

clauses

$ol(0).ol(1).ol(2).ol(3).$

/*факты, задающие кодировку вершин в полных подграфах*/

$uzn(A,B,1):-A=B.$

$uzn(A,B,0):-ol(A),ol(B),A \diamond B.$

/*правила для определения предикатов узнавания*/

$num([A|Av],B):-num(Av,C), B=(1-A)*C.$

$num([X,Y],Z):-Z=(1-X)*(1-Y).$ /*правила для задания графа в виде списка смежных вершин*/

$cel([Y1,Y2,Y3,Y4,Y5,Y6,Y7,Y8,Y9,Y10,Y11,Y12]):-$

```

uzn(Y1,1,X11), uzn(Y1,2,X12), uzn(Y1, 3,X13),
uzn(Y2,1,X21), uzn(Y2,2,X22), uzn(Y2, 3,X23),
uzn(Y3,1,X31), uzn(Y3,2,X32), uzn(Y3, 3,X33),
uzn(Y4,1,X41), uzn(Y4,2,X42), uzn(Y4, 3,X43),
uzn(Y5,1,X51), uzn(Y5,2,X52), uzn(Y5, 3,X53),
uzn(Y6,1,X61), uzn(Y6,2,X62), uzn(Y6, 3,X63),
uzn(Y7,1,X71), uzn(Y7,2,X72), uzn(Y7, 3,X73),
uzn(Y8,1,X81), uzn(Y8,2,X82), uzn(Y8, 3,X83),
uzn(Y9,1,X91), uzn(Y9,2,X92), uzn(Y9, 3,X93),
uzn(Y10,1,X101), uzn(Y10,2,X102), uzn(Y10,3,X103),
uzn(Y11,1,X111), uzn(Y11,2,X112), uzn(Y11,3,X113),
uzn(Y12,1,X121), uzn(Y12,2,X122), uzn(Y12,3,X123),
/*кодировка вершин графа, для представления
его в виде подстановочного предиката*/

```

```

num([X21,X31,X111],X11),
num([X11,X41,X91],X21),
num([X11,X41,X51],X31),
num([X21,X31,X51],X41),
num([X31,X41,X61],X51),
num([X51,X71,X81],X61),
num([X61,X81,X101],X71),
num([X61,X71,X91],X81),
num([X21,X81,X121],X91),
num([X71,X111,X121],X101),
num([X11,X101,X121],X111),
num([X91,X101,X111],X121),

```

```

num([X22,X32,X112],X12),
num([X12,X42,X92],X22),
num([X12,X42,X52],X32),
num([X22,X32,X52],X42),
num([X32,X42,X62],X52),
num([X52,X72,X82],X62),
num([X62,X82,X102],X72),
num([X62,X72,X92],X82),
num([X22,X82,X122],X92),
num([X72,X112,X122],X102),
num([X12,X102,X122],X112),
num([X92,X102,X112],X122),

```

```

num([X23,X33,X113],X13),
num([X13,X43,X93],X23),
num([X13,X43,X53],X33),

```

```

num([X23,X33,X53],X43),
num([X33,X43,X63],X53),
num([X53,X73,X83],X63),
num([X63,X83,X103],X73),
num([X63,X73,X93],X83),
num([X23,X83,X123],X93),
num([X73,X113,X123],X103),
num([X13,X103,X123],X113),
num([X93,X103,X113],X123),

```

/*списки смежных
вершин графа*/

```

Y1*Y2*Y3*Y4*Y5*Y6*Y7*Y8*Y9*Y10*Y11*Y12>0,
Y1=Y4, Y1=Y6 .

```

/*условие (или условия, записанные
через запятую), накладываемые
на раскраску*/

goal
cel(Z). /*целевой предикат задачи*/

При выборе условия

```

Y1>=2,Y2=1,Y3=1,Y4>=2,Y5>=2,Y6>=2,
Y7>=2,Y8=1,Y9>=2,Y10=1,Y11>=2,Y12>=2.

```

которое равносильно тому, что мы краской «1» красим вершины ядра {2, 3, 8, 10}, получаем

```

Z = [2,1,1,2,3,2,3,1,3,1,3,2]
Z = [2,1,1,3,2,3,2,1,3,1,3,2]
Z = [3,1,1,2,3,2,3,1,2,1,2,3]
Z = [3,1,1,3,2,3,2,1,2,1,2,3]

```

4 Solutions

Обратим внимание на то, что существенных решения здесь 2, так как 1-е и 4-е решения (а также 2-е и 3-е) получаются перестановкой красок «2» и «3».

Рассмотрим теперь задачу нахождения такой раскраски, при которой вершины «1», «4» и «6» являются одноцветными. Условие

```
Y1*Y2*Y3*Y4*Y5*Y6*Y7*Y8*Y9*Y10*Y11*Y12>0
```

означает, что каждой вершине будет приписан какой-либо цвет, а условие

$$Y_1 = Y_4, Y_1 = Y_6$$

— требование одноцветности вершин X_1 , X_4 и X_6 .

$$Z = [1, 2, 2, 1, 3, 1, 3, 2, 3, 2, 3, 1]$$

$$Z = [1, 2, 3, 1, 2, 1, 3, 2, 3, 2, 3, 1]$$

$$Z = [1, 3, 2, 1, 3, 1, 2, 3, 2, 3, 2, 1]$$

$$Z = [1, 3, 3, 1, 2, 1, 2, 3, 2, 3, 2, 1]$$

$$Z = [2, 1, 1, 2, 3, 2, 3, 1, 3, 1, 3, 2]$$

$$Z = [2, 1, 3, 2, 1, 2, 3, 1, 3, 1, 3, 2]$$

$$Z = [2, 3, 1, 2, 3, 2, 1, 3, 1, 3, 1, 2]$$

$$Z = [2, 3, 3, 2, 1, 2, 1, 3, 1, 3, 1, 2]$$

$$Z = [3, 1, 1, 3, 2, 3, 2, 1, 2, 1, 2, 3]$$

$$Z = [3, 1, 2, 3, 1, 3, 2, 1, 2, 1, 2, 3]$$

$$Z = [3, 2, 1, 3, 2, 3, 1, 2, 1, 2, 1, 3]$$

$$Z = [3, 2, 2, 3, 1, 3, 1, 2, 1, 2, 1, 3]$$

12 Solutions

Нетрудно заметить, что существенными являются только первое и второе решения, а остальные получаются обменом цветов*/.

Литература

1. *Зыков А. А.* Основы теории графов // Москва: «Вузовская книга», 2004.
2. *Шабанов-Кушнарченко Ю. П.* Теория интеллекта. Математические средства // Харьков. ХГУ: «Вища школа», 1984.
3. *Адаменко А. Н., Кучуков А. М.* Логическое программирование и Visual Prolog // СПб.: БХВ, 2003.

ХРОМАТИЧЕСКОЕ ЧИСЛО ГРАФА ГИПЕРФЕРЗЯ¹

1. Введение

Рассматриваются обыкновенные графы $G = (V, E)$ без петель и кратных ребер. Для подмножества вершин $V' \subseteq V(G)$ индуцированный подграф $G[V']$ — это граф с множеством вершин V' и всеми теми рёбрами графа G , вершины которых принадлежат V' . Не определенные здесь понятия читатель может найти в [4], [5].

Согласно [3], графом шахматной фигуры называется граф, вершины которого — клетки шахматной доски размера $n \times n$ (для обычной шахматной доски $n = 8$), а ребрами служат пары клеток, связанных ходом данной фигуры. Там же поставлена задача 7.10 об определении хроматического числа графов ладьи (Castle or Rook), коня (Knight), слона (Bishop), короля (King) и предложено оценить хроматическое число для ферзя (Queen).

Обозначим соответствующие графы следующим образом: R_n , Kt_n , B_n , Kg_n и Q_n . Если представить себе несуществующую фигуру гиперферзя (HyperQueen) HQ_n , ходы которого объединяют возможности ферзя и коня, то также естественен вопрос определения хроматического числа HQ_n .

Графы первых четырёх фигур относятся к замечательному классу совершенных графов, которые впервые были введены Клодом Бержем в начале 60-х гг. [6]. Граф G называется совершенным, если хроматическое число и плотность любого индуцированного его подграфа $G[A]$ всегда равны. Эквивалентные определения и основные результаты о совершенных графах см. в [7, 8]. Результат о том, что хроматическое число графа коня Kt_n равно 2 для $n \geq 3$, восходит к временам создания шахмат и запечатлен в раскраске шахматной доски. Аналогичные результаты:

$$\chi(Kg_n) = \omega(Kg_n) = 4 \text{ для } n \geq 2,$$

$$\chi(R_n) = \omega(R_n) = n, \quad (B_n) = \omega(B_n) = n \text{ для всех } n.$$

¹ Работа автора поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (коды проектов 05-01-000395 и 05-01-00816).

Более того, вид доски не ограничен $(n \times n)$ -полимино, а может иметь произвольную природу. В качестве доски можно рассматривать любое полимино, даже не 1-связное, т. е. с «дырками» (см. книгу Голомба [2]).

Ситуация для графов ферзя и гиперферзя абсолютно другая:

$$\chi(Q_n) \geq \omega(Q_n), \chi(HQ_n) \geq \omega(HQ_n),$$

причем для некоторых значений n имеем строгие неравенства. Тем не менее, относительно верхних оценок хроматического числа через плотность для этих графов существуют константы $C(Q)$ и $C(HQ)$ такие, что

$$\chi(Q_n) \leq \omega(Q_n) + C(Q), \chi(HQ_n) \leq \omega(HQ_n) + C(HQ). \quad (1)$$

Для квадратной доски размера $n \times n$ и достаточно большого n мы покажем, что обе константы $C(Q)$ и $C(HQ)$ не превосходят 3, поэтому задачи определения хроматического числа этих фигур в чем-то похожи на классическую задачу реберной раскраски, поставленную и решенную Визингом [7]. Более того, мы предполагаем, что для любого вида доски и достаточно большой плотности $\omega(Q)$ и $\omega(HQ)$ обе константы $C(Q)$ и $C(HQ)$ в неравенствах (1) не превосходят 1. Если последнее предположение верно, то оно еще больше похоже на оценку Визинга.

2. Хроматическое число графов Q_n и HQ_n для малых n

Нетрудно проверить, что для $1 \leq n \leq 5$ хроматические числа графов ферзя и гиперферзя равны значениям, собранным в таблице 1. Первые два значения во второй строке и первые три значения в третьей строке очевидны, так как соответствующие графы — полные. Очевидно, неплотность $\varepsilon(Q_3) = 2$, следовательно, $\chi(Q_3) \geq |V(Q_3)|/\varepsilon(Q_3) = 9/2$.

Таблица 1

N	1	2	3	4	5
$\chi(Q_n)$	1	4	5	5	5
$\chi(HQ_n)$	1	4	9	10	10

На следующем рис. 1 представлены 5-раскраска Q_5 и 10-раскраска HQ_5 , дающие верхние оценки, совпадающие с остальными значениями

таблицы 1. Поэтому остается лишь показать, что не существует правильной 9-раскраски HQ_4 . Функция $\chi(HQ_n)$ монотонна, так как из $HQ_p \subseteq HQ_q$ для $p \leq q$ следует $\chi(HQ_p) \leq \chi(HQ_q)$.

1	2	3	4	5
4	5	1	2	3
2	3	4	5	1
5	1	2	3	4
3	4	5	1	2

а) 5-раскраска Q_5

1	6	2	9	3
9	4	5	1	8
3	8	0	7	4
7	2	6	3	9
4	9	1	5	2

б) 10-раскраска HQ_5

Рис. 1.

Предложение 1. Хроматическое число $\chi(HQ_n) \geq 10$ для $n \geq 4$.

Доказательство. На рис. 2 показаны обозначения и три различных типа — A , B , C вершин HQ_4 . Каждая из центральных вершин A_i образует класс одноцветных вершин, так как A_i смежна со всеми 15 оставшимися вершинами. То есть для их раскраски нужно четыре разных цвета. Независимое множество попарно несмежных вершин в HQ_4 имеет не более двух вершин. Так как мощность множества нецентральных вершин в HQ_4 равна 12, то для их раскраски необходимо 6 различных цветов. Таким образом, $\chi(HQ_4) \geq 10$ и, следовательно $\chi(HQ_n) \geq 10$ для $n \geq 4$. Утверждение доказано.

C_1	B_1	B_2	C_2
B_8	A_1	A_2	B_3
B_7	A_3	A_4	B_4
C_4	B_6	B_5	C_3

Рис. 2.

Теорема 1. Хроматическое число $\chi(HQ_n) = 11$ для $6 \leq n \leq 11$.

Доказательство. Верхняя оценка получается из 11-раскраски HQ_{11} (см. рис. 3). Удобно рассматривать эту доску расположенной на торе, а множество одноцветных клеток-вершин — полученным, начиная с произвольной клетки, ходом (1,3)-псевдоконя. Для дальнейшего доказательства необходимо установить невозможность

10-раскраски графа HQ_6 или, что равносильно, $\chi(HQ_6) = 11$. Поэтому подробнее рассмотрим минимальные раскраски HQ_6 .

0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
8	9	10	0	1	2	3	4	5	6	7
5	6	7	8	9	10	0	1	2	3	4
2	3	4	5	6	7	8	9	10	0	1
10	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
7	8	9	10	0	1	2	3	4	5	6
4	5	6	7	8	9	10	0	1	2	3
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	0
9	10	0	1	2	3	4	5	6	7	8
6	7	8	9	10	0	1	2	3	4	5
3	4	5	6	7	8	9	10	0	1	2

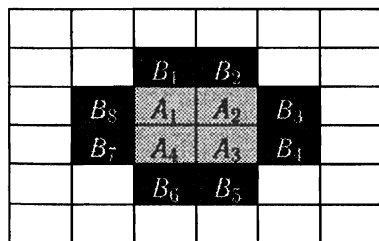
Рис. 3. 11-раскраска HQ_{11}

Утверждение 2. Каждое независимое множество S в графе HQ_6 , содержащее центральную вершину A_i ($i = 1, 2, 3, 4$), имеет мощность $|S| \leq 3$ и не содержит вершин из $B = \{B_j\}_{j=1}^8$.

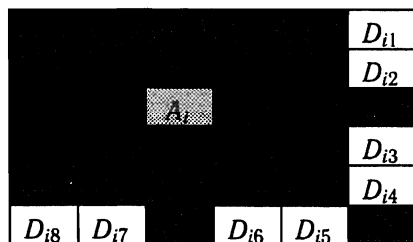
Доказательство: Рис. 4, *b* показывает, что вместе с A_i в независимое множество S входит не более одной вершины из правого столбца и не более одной вершины из нижней строки. Вместе рис. 4, *a*, *b* показывают, что если $A_i \in S$, то $B_j \notin S$. Утверждение доказано.

Утверждение 3. В графе HQ_6 никакое независимое множество S мощности 4 не содержит двух различных вершин B_j и B_k ($j, k = 1, \dots, 8$).

Доказательство. Если $|S \cap B| = 2$, то положение двух различных несмежных вершин B_j и B_k без ограничения общности см. на рис. 5. Клетки-вершины без пометок — это вершины, смежные с множеством $\{B_j, B_k\}$. Так как единственные несмежные с $\{B_j, B_k\}$ вершины



a)



b)

Рис. 4.

— это $\{D_j, D_k\}$ и они смежны: $(D_j, D_k) \in (HQ_6)$, то из $|S \cap B| = 2$ следует, что $|S| = 3$. Противоречие. Утверждение доказано

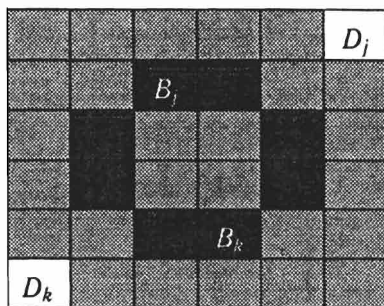


Рис. 5.

Доказательство теоремы 1. Пусть $\chi(HQ_6) = 10$. Заметим, что любое независимое множество S из HQ_6 содержит не более четырех вершин. В каждой четверти (6×6) -доски содержится не более одной вершины множества S графа HQ_6 . Согласно утверждению 2 центральные вершины A_i ($i = 1, 2, 3, 4$) содержатся в четырех одноцветных множествах, мощность которых не превосходит 3. Из допущения $\chi(HQ_6) = 10$ следует, что оставшиеся 6 цветов порождают 6 независимых одноцветных множеств мощности 4, которые покрывают множество $B = \{B_j\}_{j=1}^8$. А значит, в одном из этих независимых множеств S содержится две вершины из B , что противоречит утверждению 3. Теорема доказана.

3. Оценки хроматического числа графа гиперферзя HQ_n

Теорема 2. Для хроматического числа графа гиперферзя верно

$$\begin{aligned} \chi(HQ_{6k-1}) &= 6k - 1, \\ \chi(HQ_{6k+1}) &= 6k + 1, \\ 6k &\leq \chi(HQ_{6k}) \leq 6k + 1, \\ 6k + 2 &\leq \chi(HQ_{6k+2}) \leq 6k + 5, \\ 6k + 3 &\leq \chi(HQ_{6k+3}) \leq 6k + 5, \\ 6k + 4 &\leq \chi(HQ_{6k+4}) \leq 6k + 5, \text{ для } k \geq 2. \end{aligned}$$

Доказательство. Верхние оценки получаются из $(6k - 1)$ -раскраски HQ_{6k-1} (см. рис. 3 для $k = 2$) и из $(6k + 1)$ -раскраски HQ_{6k+1}

(см. таблицу 2 для $k=3$). Удобно рассматривать эти $(n \times n)$ -доски расположенными на торе, и множество одноцветных клеток-вершин полученным, начиная с произвольной клетки, ходом $(1,3)$ -псевдоконя. Отметим, что по меридиану делается три витка, прежде чем мы возвращаемся в начальную клетку. Очевидно, n должно быть нечетным, и в случае, если n делится на 3, возникают пары клеток, бьющие друг друга по диагоналям снизу—слева вверх—вправо. Нижние оценки следуют из очевидного неравенства $\chi(HQ_n) \geq \omega(HQ_n)$. Теорема доказана.

Таблица 2

0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>e</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>h</i>	<i>i</i>
	<i>h</i>	<i>i</i>	0	1	2							9			<i>c</i>		<i>e</i>	<i>F</i>
		<i>f</i>			<i>i</i>	0	1	2							9	<i>a</i>		<i>C</i>
		<i>c</i>	<i>d</i>		<i>f</i>			<i>i</i>	0	1	2				6			9
		9		<i>b</i>	<i>c</i>			<i>f</i>			<i>i</i>	0	1	2				
					9			<i>c</i>			<i>f</i>		<i>h</i>	<i>i</i>	0	1	2	
1	2					7		9			<i>c</i>	<i>d</i>		<i>f</i>			<i>i</i>	0
	<i>I</i>	0	1	2			5				9				<i>c</i>		<i>f</i>	
	<i>F</i>			<i>i</i>	0	1	2	3		5				9			<i>c</i>	
	<i>C</i>			<i>f</i>			<i>i</i>	0	1	2							9	
	9			<i>c</i>			<i>f</i>	<i>g</i>		<i>i</i>	0	1	2					
				9			<i>c</i>			<i>f</i>	<i>g</i>		<i>i</i>	0	1	2		
2						8	9			<i>c</i>		<i>e</i>	<i>f</i>			<i>i</i>	0	1
<i>I</i>	0	1	2		4					9			<i>c</i>			<i>f</i>		
<i>F</i>			<i>i</i>	0	1	2							9	<i>a</i>		<i>c</i>		
<i>C</i>			<i>f</i>			<i>i</i>	0	1	2						8	9		
9		<i>b</i>	<i>c</i>			<i>f</i>			<i>I</i>	0	1	2				6		
	7		9			<i>c</i>			<i>F</i>			<i>i</i>	0	1	2		4	
3						9			<i>C</i>			<i>f</i>			<i>i</i>	0	1	2

Замечание 1. Можно рассмотреть обобщение HQ_n гиперферзя HQ_n , предполагая, что эта фигура бьет все клетки поддоски

Теорема 3. Для хроматического числа графа $H'Q_n$ обобщенного гиперферзя

$$\begin{aligned}\chi(H^r Q_{6k-1}) &= 6k - 1, \\ \chi(H^r Q_{6k+1}) &= 6k + 1, \\ 6k &\leq \chi(H^r Q_{6k}) \leq 6k + 1, \\ 6k + 2 &\leq \chi(H^r Q_{6k+2}) \leq 6k + 5, \\ 6k + 3 &\leq \chi(H^r Q_{6k+3}) \leq 6k + 5, \\ 6k + 4 &\leq \chi(H^r Q_{6k+4}) \leq 6k + 5, \text{ для } k \geq r + 2.\end{aligned}$$

Замечание 2. Вид первоначальной доски также не обязательно квадрат. На рис. 6 предложена зигзагообразная доска ширины 21 и намечена 21-раскраска этой доски.

[illegible]

Рис. 6.

Замечание 3. Если цвета линейно упорядочены, то возможны так называемые радио-раскраски, про которых близко расположенные ячейки желательно окрашивать цветами, модуль разности которых как можно больше. Это связано с распределением частот в сети радиопередатчиков. Начало этих работ было положено в [6] и затем продолжено в серии работ, где одной из последних является [7]. На рис. 7 изображена часть (29×29) -доски — параллелограмм с 29-раскраской, которой можно замостить всю доску для графа $H'Q_{29}$ обобщенного гиперферзя причем, если центры клеток находятся на (евклидовом) расстоянии d_i , то разница цветов $|f(x) - f(y)| \geq k_i$, конкретные данные о d_i и k_i см. в табл. 3.

					10	19	28	08	
			05	14	23	03	12	21	
		09	18	27	07	16	25	05	
	13	22	02	11	20	29	09		
	26	06	15	24	04	13			
	10	19	28	08	17	26			
	23	03	12	21					

Рис. 7.

Таблица 3

1	$\sqrt{2}$	2	$\sqrt{5}$	$\sqrt{8}$	3	$\sqrt{10}$	$\sqrt{13}$	4	$\sqrt{17}$	$\sqrt{18}$	$\sqrt{20}$	5	$\sqrt{26}$	d_i
9	4	3	2	2	2	1	1	1	1	1	1	1	0	k_i

Литература

1. Визинг В. Г. Об оценке хроматического класса p -графа // Дискретный анализ. Сб. научн. тр. Вып. 3. Новосибирск: Институт математики СО АН СССР, 1963. С. 25-30.
2. Голомб С. В. Полимино. — М.: Мир, 1975. — 208 с.
3. Евстигнеев В. А., Мельников Л. С. Задачи и упражнения по теории графов и комбинаторике. — Новосибирск: Изд-во Новосибирского ун-та, 1981. — С. 1—89.

4. *Евстигнеев В. А., Касьянов В. Н.* Толковый словарь по теории графов в информатике и программировании. — Новосибирск: Наука, Сибирское предприятие РАН, 1999. — 291 с.

5. *Емеличев В. А., Мельников О. И., Сарванов В. И., Тышкевич Р. И.* Лекции по теории графов. — М: Наука, 1990. — 384 с.

6. *Мельников Л. С., Носов В. И.* Определение оптимального шага структуры частот в сети радиовещания // Проблемы обработки информационных сетей (конференция СО АН СССР). — Ч. I. — Новосибирск, 1991. — С. 221—228.

7. *Мельников Л. С., Носкова Н. В., Носов В. И.* Использование метода ветвей и границ при планировании сетей радиосвязи // Международный научно-технический семинар «Перспективы развития средств и систем телекоммуникаций». — Новосибирск, 2003. — С. 82—87.

8. *Berge Claude.* Farbung von Graphen, deren samtliche bzw, deren ungerade Kreise starr sind // Wiss. Z. Martin-Luther-Univ, Halle-Wittenberg, Math. — Natur. Reihe, 1961. — S. 114—115.

9. *Golumbic Martin C.* Algorithmic graph theory and perfect graphs. — New York, Academic Press, 1980. — 286 p.

10. *Lovasz Laszlo.* A characterization of perfect graphs // J. Combin. Theory 1972, V. B 13, № 2. — P. 95—98.

ИНВАРИАНТЫ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ РЕШЕТОЧНО-ТОПОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Еще в середине прошлого века были сделаны попытки представить химическую структуру с помощью математических инвариантов. Дальнейшее развитие этих идей выявило важность топологической структуры молекулы, ее зачастую определяющую роль в анализе связи структура—свойство, что привело к созданию разнообразных топологических моделей и большого числа топологических индексов.

На сегодняшний день разработано свыше ста топологических индексов [1], которые активно используются по трем основным направлениям:

- библиографическая классификация соединений;
- определение физико-химических параметров соединений;
- разработка лекарственных препаратов.

В первом случае большое значение имеет полнота топологических индексов как инвариантов. В последних двух важно, насколько тесна связь между значением индекса и некоторой физико-химической, биологической или иной характеристикой соединения. Многочисленные исследования позволили найти большое количество корреляций между топологическими индексами и различными характеристиками для множества рядов соединений [1]. Эффективное использование топологических индексов для вышеуказанных задач стимулирует дальнейшие исследования в области их применения.

Несмотря на бесспорные достоинства топологических индексов, нельзя не указать на ряд присущих им серьезных недостатков.

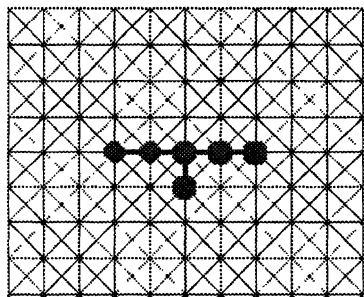
1. Часто наблюдается так называемое «вырождение» топологических индексов: различные химические структуры дают одинаковые по величине топологические индексы. Этот недостаток обходят путем введения супериндексов, представляющих собой комбинацию нескольких (зачастую свыше десятка) индексов [1].

2. Граф не учитывает природы гетероатомов и различных типов связей, составляющих молекулу. Для решения этой проблемы применяют взвешенные и окрашенные графы [2].

3. Расчет топологических индексов ведется по чисто формальным процедурам, не имеющим под собой никакого физико-химического

смысла. Это касается всех известных на сегодня топологических индексов.

Последний недостаток является основным препятствием при анализе связи структура—свойства, так как в этом случае для разработки новых топологических индексов нет какого-либо физико-химического обоснования и их приходится подбирать методом проб и ошибок.



В качестве попытки преодоления недостатков разработанных ранее топологических моделей и методов предлагается решеточно-топологическая модель (РТМ), которая предоставляет возможность для создания в перспективе целой системы различных решеточно-топологических индексов для внеэкспериментального скрининга и молекулярного дизайна физиологически активных веществ и других соединений

с комплексом полезных свойств. Идея РТМ заключается в укладке молекулярного графа на решетку определенного типа, представляющую собой совокупность узлов, каждый из которых соответствует элементу прямоугольной матрицы. Каждый узел может быть:

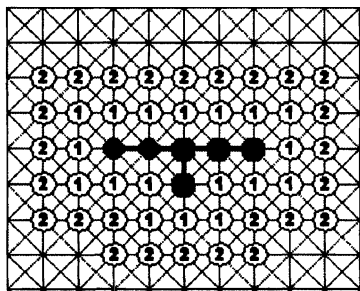
- связан с восемью такими же соседними узлами;
- занят атомами любого элемента Периодической системы Д. И. Менделеева;
- занят некоторой группой атомов;
- занят свободной электронной парой;
- свободен.

Один и тот же молекулярный граф можно уложить на решетке различными способами; при этом частично теряется инвариантность топологических индексов, вычисляемых для молекулярного графа в случае различных укладок. С другой стороны, это свойство решеточно-топологической модели позволяет учитывать, хотя и очень приближенно, конформационные особенности молекул, и мы можем говорить, что индекс является инвариантом пары (G, k) , где G — молекулярный граф, а k — код конформации, соответствующий его укладке на решетке. Впрочем, указанный недостаток модели преодолим путем введения сугубо формальных правил инвариантной укладки молекулярного графа.

На наш взгляд основное преимущество решеточно-топологической модели заключается в том, что она предоставляет возможности для конструирования новых физико-химически обоснованных топологических индексов, «прототипами» которых являются реальные структурные характеристики соединений. В качестве примера мы

хотим представить ряд индексов, большинство из которых были построены с учетом этого свойства. Итак, расположив молекулярный граф на плоскости решетки, можно приступить к извлечению информации, заключенной в решеточно-топологической модели молекулы.

Первой группой индексов, характеризующих как форму, так и размер молекул, являются решеточно-топологические индексы поверхности (РТИП). Молекулярная поверхность в рамках РТМ определяется количеством свободных узлов решетки, удаленных на фиксированное расстояние от МГ, совокупность которых мы назовем слоем. В связи с этим РТИП рассчитывают для ряда последовательных слоев, отражающих ближайшее окружение молекулы. Имеет смысл рассчитывать следующие РТИП:



P_0 — общее количество узлов, занимаемых МГ (нулевой слой); P_i , где $i = 1, 2, \dots, n$ — число свободных узлов в i -ом слое вокруг молекулы, причем n следует выбирать равным 3 или 4, так как при большем n имеет место вырождение индекса.

Описать только форму молекулы, не учитывая ее размера, можно с помощью так называемого формфактора. Причем описанию поддается любой из ряда слоев ближайшего окружения МГ.

Формфактор представляет собой степень приближения молекулярной поверхности в плоскости решетки к кругу. Для плоских фигур $FF = 4\pi S/P^2$, где S — площадь, P — периметр фигуры. Для круга $FF = 1$; для бесконечной прямой $FF \rightarrow 0$. Применительно к изучаемым нами объектам, для вытянутых молекул FF будет близок к 0; если же молекулярная структура имеет разветвленный характер, FF будет приближаться к 1. Учитывая, что МГ на решетке является не сплошной фигурой, а точечной, вместо параметра 4π вводится нормирующий множитель $k < 4\pi$, который зависит от числа занятых узлов решетки $FF_i = kS_i/P_i^2$, и так как $S = P_0 + P_1 + \dots + P_i$, где P_i — последний исследуемый слой, то

$$FF_i = k \sum_{j=0}^i P_j / P_i^2.$$

При $S \rightarrow \infty$, $k \rightarrow 4\pi$. Значение формфактора меняется в пределах $0 < FF < 1$. Для проведения расчетов FF множитель k подобран экспериментально.

Для любого соединения, уложенного на решетку, можно определить узел, соответствующий центру молекулы. Его координаты X_c, Y_c вычисляются как целочисленные через координаты всех вершин МГ:

$$X_c = \text{Round}\left(\sum_{i=1}^N x_i / N\right), \quad Y_c = \text{Round}\left(\sum_{i=1}^N y_i / N\right),$$

где N — число вершин в МГ, Round — здесь и ниже используется для обозначения округления до целого. Причем для взвешенных графов можно определить координаты центра масс (весов) МГ:

$$X_c = \text{Round}\left(\sum_{i=1}^N w_i x_i / N\right), \quad Y_c = \text{Round}\left(\sum_{i=1}^N w_i y_i / N\right),$$

где w_i — вес i -ой вершины графа.

Зная координаты центра молекул, легко определить такие параметры, как $R_{\min}$, R_{mid} , $R_{\max}$, соответствующие расстояниям — минимальному среднему, максимальному — от центра до периферийного атома:

$$R_{\max} = \max(d_{ic}), \quad R_{\text{mid}} = \sum_{i=1}^N d_{ic} / N, \quad R_{\min} = \min(d_{ic}).$$

В последнем случае определяется минимальное расстояние от центра до первого окружающего слоя, которое затем уменьшается на единицу.

Отношение $R_{\min}$ и $R_{\max}$, кроме того, что они характеризуют форму и размер, может также служить характеристикой анизотричности молекул.

Для оценки реакционной способности активных центров молекул большое значение имеет возможность доступа реагентов к этим центрам. С этой целью интерес представляет следующая группа индексов.

Доступность (f_{ix}) определяется как отношение суммы свободных узлов, расположенных в i -м слое от выделенного центра x , к общему числу узлов в этом слое (рис. 4). В связи с этим рассматриваются доступности для ряда слоев и общая доступность (F_x):

$$f_{ix} = \frac{n_{ix}}{8 \times i}, \quad F_x = \sum_{i=1}^L f_{ix}$$

L — номер последнего занятого слоя.

Загроможденность (c_{ix} и C_x) рассчитывается аналогично, но для занятых узлов. Во всех случаях $F + C = L$. *Относительную доступность* можно оценить величиной

$$F'_x = F_x / C_x$$

Параметры F_x , C_x , F'_x приближенно отражают способность реакционного центра к взаимодействию с точки зрения стерических факторов.

В рамках топологической модели имеется возможность описывать молекулу не только в виде обычного МГ, но и взвешенного. Если в качестве весов вершин МГ использовать заряды на атомах, то можно сконструировать серию новых РТИ, в частности электростатических. Последние в какой-то мере будут отражать топологию распределения зарядов в молекуле и могут быть использованы для соединений, существенно не различающихся по своей «разветвленности». В настоящей работе реализована схема расчета зарядов на атомах по методу Джолли—Перри [3]. выравнивания орбитальных электроотрицательностей. В результате укладки взвешенного по зарядам МГ на решетку, ее узлам приписывается соответствующий заряд. Распределение зарядов на решетке может быть охарактеризовано с помощью различных параметров, являющихся своеобразными аналогами реальных электростатических характеристик молекулы.

Аналогом дипольного момента может выступать величина

$$D = d \left(\sum_{i=1}^N |q_i| \right) / 2,$$

где $N = N^+ + N^-$;

N^+ — число положительно заряженных атомов;

N^- — число отрицательно заряженных атомов;

q_i — заряд на i -ом атоме;

d — расстояние между центрами отрицательных и положительных зарядов:

$$d = \sqrt{(X^+ - X^-)^2 + (Y^+ - Y^-)^2},$$

$$X^+ = \frac{\sum_{i=1}^{N^+} q_i x_i}{\sum_{i=1}^{N^+} q_i}, \quad Y^+ = \frac{\sum_{i=1}^{N^+} q_i y_i}{\sum_{i=1}^{N^+} q_i}, \quad X^- = \frac{\sum_{i=1}^{N^-} q_i x_i}{\sum_{i=1}^{N^-} q_i}, \quad Y^- = \frac{\sum_{i=1}^{N^-} q_i y_i}{\sum_{i=1}^{N^-} q_i}.$$

Следует заметить, что величина индекса дипольного момента не слишком хорошо коррелирует с реальными значениями дипольного момента, что не удивительно, так как РТМ — модель двумерная, и поэтому правильнее было бы искать корреляции индекса к проекции дипольного момента на некую плоскость. Однако из этого не следует, что нужно отказаться от использования этого индекса, так как

в ряде случаев он может составить весомый вклад при поиске множественных корреляций.

Другой РТИ — H — может выступать как топологический аналог молекулярного электростатического потенциала. Фактически параметр H рассчитывается по слоям, начиная от первого ($i = 1$), ближайшего к периферийным атомам, и далее во внешние области окружения МГ. По аналогии с РТИП целесообразно проводить исследования не далее 3-го — 4-го слоев. Расчет проводят по следующей схеме:

$$h_i = \sum_{j=1}^N (q_j / r_{kj}), \quad H_i = \sum_{k=1}^L h_k,$$

где i — номер слоя;

k — узел слоя i ;

N — количество вершин МГ;

L — количество узлов в i -ом слое;

q — заряд на j -ой вершине;

r — расстояние между j -ой вершиной и k -ым узлом.

Возможно также использование усредненной величины — значения $\bar{H}_i$, отнесенного к количеству атомов в i -том слое (РТИ поверхности):

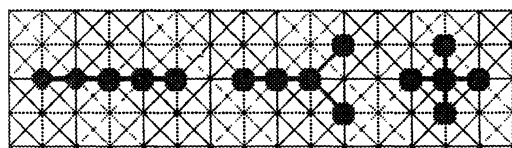
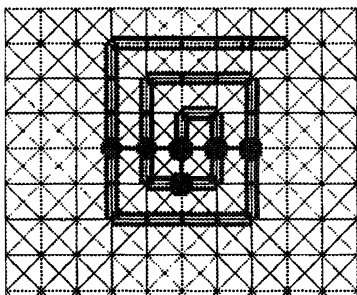
$$\bar{H}_i = H_i / P_i.$$

Важно отметить, что параметры H_i , $\bar{H}_i$ являются характеристиками топологической модели электростатического поля вокруг молекулы и не имеют аналогов среди известных топологических индексов. Они фактически отражают не только топологию молекулы, но и топологию ее воздействия на внешнее окружение, что важно для исследования различных свойств молекулярных соединений, связанных с межмолекулярными взаимодействиями.

В заключение хотим представить вниманию читателя ряд индексов, способных помочь в создании баз данных, архивов, банков химической информации. В основе лежит использование так называемого спирального кода молекулы, который позволяет хранить структурную информацию в достаточно компактном виде и оценивать структурное подобие различных молекулярных графов.

Первый из них — собственно спиральный код. Получают его, накладывая на молекулярный граф спираль определенного вида. Центр спирали находится в узле решетки, наиболее близком к геометрическому центру молекулярного графа. Процедура получения спирального кода молекулы заключается в анализе узлов, которые последовательно обходит спираль, начиная с ее центра и заканчивая последним, в котором спираль проходит через вершины молекулярного графа.

В результате на первом этапе мы получаем последовательность чисел, определяемых «содержимым» узлов решетки на пути спирали: если узел занят, то соответствующий элемент последовательности будет равен весу вершины графа в этом узле (код атома или группы), если узел пуст, то равен 0. Следующий этап сжимает полученный ряд за счет замены нулей, идущих подряд, на их количество. Единственный 0, который остается — первый в ряду (в том случае, если центр спирали — пустой узел). Итак, спиральный код — последовательность



целых чисел, в которой элементы с нечетными номерами представляют собой массы вершин молекулярного графа, а элементы с четными номерами — число незанятых вершин молекулярного графа точек спирали (число нулей) между двумя соседними элементами спирали, обозначающими вершины молекулярного графа, как, например:

н-пентан	1) 1 . 2 . 1 . 3 . 1 . 6 . 1 . 7 . 1
изопентан	2) 1 . 2 . 1 . 3 . 1 . 5 . 1 . 1 . 1
неопентан	3) 1 . 0 . 1 . 1 . 1 . 1 . 1 . 1 . 1

Нетрудно заметить, что, даже используя правила инвариантной укладки, мы можем получить четыре спиральных кода, различных в общем случае:

- правый спиральный код (используется правая спираль, изображенная на рисунке);
- левый спиральный код (используется левая спираль);
- правый и левый спиральные коды, получаемые теми же операциями, но с использованием развернутой на 180 градусов молекулярной структуры.

На базе спирального кода можно построить другие характеристики, например, длину спирального кода

$$L = \sum_{i=1}^{(n-1)/2} k_{2i} + \frac{n+1}{2},$$

где k_i — i -ый элемент спирального кода, n — число элементов кода.

Величина L может использоваться как дополнение к правилам инвариантной укладки. Опираясь на указанные правила, мы можем

получить четыре варианта укладки молекулярных графов, из которых можно выбрать укладку с наименьшей длиной спирального кода.

Используя спиральный код, можно также оценивать структурное подобие молекулярных графов (χ -параметр):

$$\chi_{M_1 M_2} = \left[\sum_{i=1}^n (k_{iM_1} - k_{iM_2})^2 \right]^{1/2},$$

где k_{iM_1} и k_{iM_2} — i -ые элементы спиральных кодов молекулярных графов M_1 и M_2 ; n — число элементов кода.

В случае несоответствия размеров спиральных кодов сравниваемых молекул в код с меньшим размером добавляется необходимое число нулей. Нам представляется особенно интересным применение χ -параметра к соединениям, обладающим хиральностью

$$\chi = \left[\sum_{i=1}^n (k_i^R - k_i^L)^2 \right]^{1/2},$$

где k_i^R — i -ый элемент правого спирального кода, k_i^L — i -ый элемент левого спирального кода.

χ -параметр довольно успешно дифференцирует структуры на хиральные и ахиральные, причем характеризуя хиральность соединений еще и количественно:

$\chi(\text{н-октана}) = \chi(\text{изооктана}) = 0$	(ахиральны)
$\chi(\text{2-метилгептана}) = 8$	(хирален)
$\chi(\text{2,4-диметилгексана}) = 4,24$	(хирален)

Смеем надеяться, что РТМ может стать серьезным инструментом для решения задач анализа связи структура—свойства, т. к. предоставляет новые возможности для конструирования топологических индексов, не имеющих аналогов среди уже существующих, с неплохой дискриминирующей способностью и, что немаловажно, несущих определенный физико-химический смысл. Однако всегда важно помнить, что приведенные выше структурные параметры МГ — всего лишь топологическая модель реальных молекул и являются только шагом к истинному пониманию процессов, происходящих на молекулярном уровне.

Литература

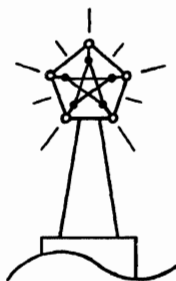
1. *Химические приложения топологии и теории графов* / Под ред. Р. Кинга. — М., 1987.
2. *Папулов Ю. Г.* Молекулярные графы. — 1991.
3. *Кузьмин В. Е., Берестецкая Е. Л.* Программа расчета зарядов на атомах методом выравнивания орбитальных электроотрицательностей // Журн. структ. химии. — 24 (1983). — № 6. — С. 131—132.

СОДЕРЖАНИЕ

Фрэнк ХАРАРИ (1921—2005)	3
<i>В. Г. Визинг</i>	
ОБ ОДНОЙ ПРОБЛЕМЕ, СВЯЗАННОЙ С ЦИКЛИЧЕСКИМ ОБХОДОМ НЕОРИЕНТИРОВАННОГО МУЛЬТИГРАФА	5
<i>А. М. Гурин</i>	
О СТРУКТУРЕ УПАКОВКИ ШАРОВ	8
<i>А. А. Зыков</i>	
ОБ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЛОГИЧЕСКИХ И МАТЕМАТИЧЕСКИХ ОШИБКАХ И ИХ ПОСЛЕДСТВИЯХ В СПЕЦИАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ	15
<i>А. С. Кондаков, В. С. Рублев</i>	
ЗАДАЧА СБАЛАНСИРОВАНИЯ МАТРИЦЫ ПЛАНА	24
<i>В. Н. Любота</i>	
ПРИМЕНЕНИЕ ГРАФОВ КОНЕЧНЫХ ПРЕДИКАТОВ ДЛЯ МИНИМИЗАЦИИ ИХ ДИЗЪЮНКТИВНОЙ ФОРМЫ	27
<i>В. Н. Любота</i>	
ПРИМЕНЕНИЕ АЛГЕБРЫ КОНЕЧНЫХ ПРЕДИКАТОВ К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ ТЕОРИИ ГРАФОВ	35
<i>Л. С. Мельников</i>	
ХРОМАТИЧЕСКОЕ ЧИСЛО ГРАФА ГИПЕРФЕРЗА	42
<i>А. И. Хромов, В. Е. Кузьмин, А. Г. Артеменко</i>	
ИНВАРИАНТЫ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ РЕШЕТОЧНО-ТОПОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ	51

Наукове видання

**ПІВДЕННИЙ НАУКОВИЙ ЦЕНТР НАН
І МОН УКРАЇНИ**



ДОПОВІДІ ОДЕСЬКОГО СЕМІНАРУ

З ДИСКРЕТНОЇ
МАТЕМАТИКИ

2

Липень 2005

Російською мовою

Технічні редактори *Р. М. Кучинська, О. В. Стадніченко*

Здано у виробництво 06.06.2005. Підписано до друку 05.07.2005.
Формат 60×84/16. Папір офсетний. Гарнітура «Літературна».
Друк офсетний. Ум. друк. арк. 3,72. Тираж 300 прим. Зам. № 354.

Видавництво і друкарня «Астропринт»
(Свідоцтво ДК № 1373 від 28.05.2003 р.)
65026, м. Одеса, вул. Преображенська, 24.
Тел.: 726-98-82, 726-96-82, 37-14-25.

Д632 **Доповіді Одеського Семінару з дискретної математики.** —
Одеса: Астропринт, 2005. — 64 с.
Рос. мовою.
ISBN 966—318—388—8.

Цей другий номер ДОСДМ (Доповіді Одеського Семінару з дискретної математики) присвячується світлій пам'яті Френка Харарі, одного з провідних спеціалістів світу з теорії графів, видатного вченого і чудової людини.

Починаючи з 1969 р. цикли розширених засідань Семінару припадають на другий (іноді третій) тиждень вересня. 26-й цикл відбувся 6—10 вересня 2004 р., 27-й цикл пройде 5—9 вересня 2005 р., наступні передбачені на 11—15 вересня 2006 р., 10—14 вересня 2007 р. і т. д.

ДОСДМ — не періодичний, але систематичний збірник, що виходить у міру надходження матеріалу; зразковий обсяг кожного номера — 3 друковані аркуші (48 сторінок). У збірнику містяться статті, повідомлені й обговорені на Семінарі, або тези доповідей (якщо повний текст публікується в іншому місці). Основна тематика: теорія графів і гіперграфів, завдання дискретної оптимізації, додатки до структурної хімії; розглядаються також питання обґрунтування теорії множин, алгебри, математичної логіки й спеціальної теорії відносності.

Від автора статті (або тез обсягом більше 1 сторінки) потрібна оплата (приблизно 4 долари за сторінку), але цей «негативний гононар» буде поступово знижуватися завдяки залученню спонсорів і за рахунок виторгу від продажу.