Clar-számok

Diplomamunka

Kun Krisztián

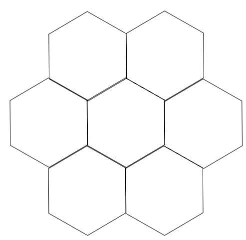
Eötvös Loránd Tudományegyetem
Operációkutatási Tanszék
2001

Témavezető: Frank András

Tartalomjegyzék

1. Bevezető

Az aromás benzenoid szénhidrogének szerves molekulák, melyekben szén- és hidrogénatomok összefüggő (hatszögű) benzolgyűrűket alkotnak. Egy ilyen molekulát általában benzenoid rendszerrel rajzolhatunk le, azaz egy 2-összefüggő páros gráffal, melynek belső tartományai mind egyforma hatszögek. Ebben a reprezentációban minden pont egy szénatomnak felel meg, és minden él egy egyszerű vagy kettős kötés a szénatomok között. A hidrogénatomokat nem jelöljük közvetlenül, mivel az elhelyezkedésük egyértelműen meghatározható a szénatomokéból.



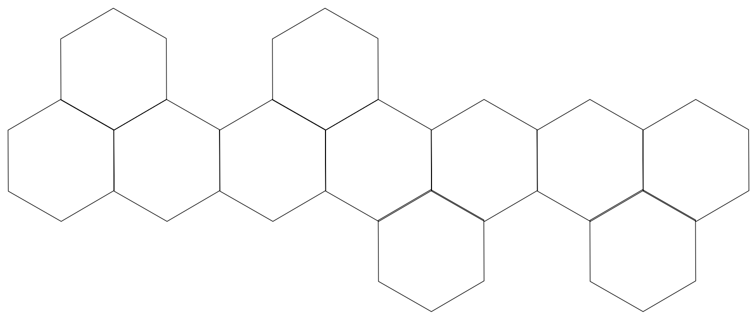
1. ábra. *Benzenoid rendszer*

Általában többféleképpen is kinézhet, ha n szénatomot h hatszöggyűrűbe akarunk rendezni. (Ekkor $n-2(h-1)$ hidrogénatom lesz). $C_nH_{n-2(h-1)}$ jelöli az ilyen felépítésű izomerek rendszerét. Vegyészek tapasztalati megfigyelések alapján megmutatták, hogy ezen molekulák gráfjai mindig tartalmaznak teljes párosítást,amit a kémiai gráfelméletben Kekulé rendszernek hívnak. Egy benzenoid rendszer általában sok teljes párosítást tartalmaz, ezek vizsgálata számos kémiai és kombinatorikus optimalizálási problémát felvet.

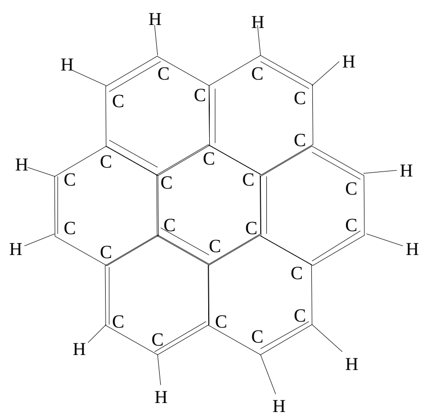
Meg kell jegyezni, hogy egy általános hatszögrendszer nem feltétlenül tartalmaz teljes párosítást. Egyszerű olyan ellenpéldát találni persze, ahol a gráf páratlan számú pontból áll. Ekkor nyilvánvalóan nem létezhet teljes párosítás. Azonban a teljes párosítás létezéséhez a páros pontszám sem elegendő feltétel. Könnyen látható, hogy nincs teljes párosítása például a 2.ábrán látható gráfnak.

Szerencsére azonban a valóban előforduló molekulák nem lehetnek ilyenek.

Az ilyen szénhidrogén-molekulákban minden szénatomnak 4 a vegyértéke, melyet a 2 vagy 3 ”szomszédos” szénatommal egyszerű kötésekkel köt le (egyikükkel kettős kötést alkot) , ha pedig még marad szabad, lekötetlen vegyérték, ahhoz egy hidrogénatom csatlakozik. Mivel egy szénatom kötései (azaz a gráfban az élek) közül pontosan egy lesz kettős kötés, így ezek a kettős kötések együtt a gráfnak pontosan egy teljes párosítását fogják alkotni.



2. ábra. *Nem létezik teljes párosítás páros pontszámú gráfban*



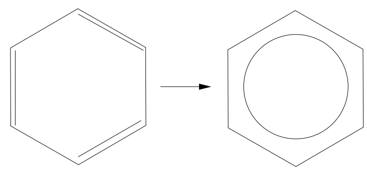
3. ábra. *Egy molekula, jelölve minden szén- és hidrogénatommal*

Persze, a kettős kötések stabilabb kapcsolatot jelentenek az egyszerű kötéseknél abban az értelemben, hogy ezáltal nehezebben bomlik fel a molekula, kevésbé reakcióképes. Azonban a molekulák még stabilabb állapotra törekednek, és ezt úgy érik el, hogy az egyik hatszögtartományhoz tartozó 6 atom a 3 kettős kötést "összeadja", ezáltal egy közös gyűrűt alkotnak.

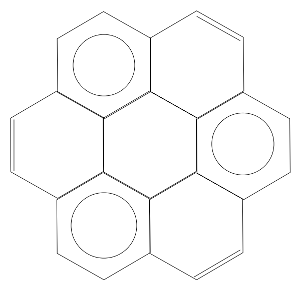
1958-ban Clar és Zander megmutatta, hogy két izomer molekula közül az lesz a stabilabb, amelyben több ilyen gyűrűt tudnak alkotni a kettős kötésekből az atomok, és ez az érték befolyásolja a molekula színét is.

A hatszögrendszerre bizonyított következő állítások csak azt használják ki, hogy a gráf síkbeli, páros és 2-összefüggő, így ezek az eredmények ezekre az általánosabb rendszerekre is érvényesek. Valamint a továbbiakban ha ilyen gráfról beszélünk, feltesszük, hogy létezik benne teljes párosítás.

A következőkben tehát szeretnénk meghatározni egy tetszőleges, teljes



4. ábra. *A kettős kötések gyűrűvé alakulnak*



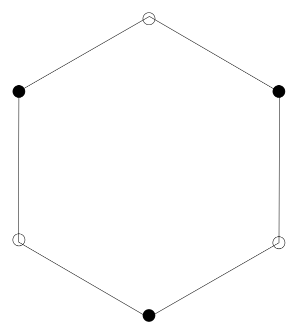
5. ábra. *Benzenoid rendszer kettős kötésekkel*

párosítást tartalmazó hatszögrendszerről egy teljes párosításában keletkező lehető legtöbb hatszög számát. Ezt a rendszer Clar-számának nevezik. A 2.fejezetben a Hansen és Zheng által vizsgált vágásfedésről lesz szó, és sejtésükről, mi szerint egy vágásfedés minimális súlya megegyezik a Clar-számmal. Ezt Atkinson és Abeledo bizonyította minimális áramprobléma segítségével, és ezt a bizonyítást egyszerűsítve megmutatom a 4. fejezetben, hogy ez a minimax-tétel igaz. Ehhez azért előbb szükség lesz ezek egy-két tulajdonságára, amikről a 3. fejezet szól. A 5. fejezetben elhagyom a gráfra adott kezdeti feltételeket, és egy sokkal általánosabb tételt bizonyítok, amely segítségével a 6. fejezetben újra belátom a Hansen-Zheng sejtést.

2. Definíciók

(V, E, F) jelölje a síkbeli gráfot pontjaival, éleivel és a korlátos tartományaival (F) megadva. Az egyszerűség kedvéért színezzük a pontokat feketére illetve fehérre aszerint, hogy a páros gráf melyik oldalán helyezkednek el. Tehát minden él különböző színű pontokat köt össze.

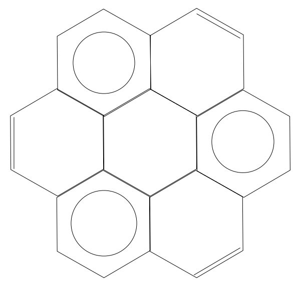
A gráf egy körének egy teljes párosítását röviden a kör **vázának** nevezzük. Mivel a gráf páros, minden körnek két váza van. Ugyanígy beszélhetünk tehát a legkisebb körök, a tartományok vázáról. Pozitív irányítású egy váz, ha a tartomány határán minden éle fekete pontból fehérbe tart az óramutató járásának megfelelő irányban. Ellenkező esetben negatív irányítású vázról beszélhetünk.



6. ábra. *Hatszög pontjai színezve*

Pontdiszjunkt tartományok egy halmazát $(F' \subseteq F)$ vegyészek **rezonáns halmaz**-nak nevezik, ha G-nek létezik olyan Kekulé-rendszere (=teljes párosítása), ami minden F'-beli tartománynak egy vázát tartalmazza. A maximális elemszámú ilyen tartományhalmaz elemszámát $res(V, E, F)$-vel jelöljük. A maximális rezonáns halmaz probléma a $res(V, E, F)$ meghatározása. Ez tehát, ahogy a bevezetőben már szó volt róla, a molekula stabilitása szempontjából fontos kérdés. Minél nagyobb ez a szám, annál stabilabb lesz a rendszer, tehát kevésbé reakcióképes, nehezebb megbontani a molekula egységét.

Másként megfogalmazva a feladatot: fedjük le a gráf pontjait pontdiszjunkt tartományokkal és élekkel úgy, hogy a tartományok száma maximális legyen. Ilyen fedés persze csak akkor létezhet, ha a gráfnak létezik teljes párosítása. Ha (V, E, F) egy benzenoid rendszer gráfját jelöli, a $res(V, E, F)$ értékét **Clar-számnak** nevezzük, és $cn(G)$-vel jelöljük. **Clar-struktúrának** pedig a Clar-számot adó, optimális megoldás egy reprezentációját hívjuk, azaz az ebben szereplő teljes párosítást. Ebben általában a kiválasztott tartományokat körökkel, a megjelölt éleket pedig dupla vonallal (kettős kötés) jelöljük.



7. ábra. *A Clar-szám legalább 3*

A Clar-szám kiszámítása tehát a cél, amelyre Hansen és Zheng adott először felső becslést. Ehhez először definiálnunk kell a vágásfedés fogalmát.

2.1. Definíció. *$H = (V, E, F)$ egy* ***vágása*** *alatt egy irányított vágást értünk, abban az irányításban, ahol minden élt megirányítunk a fekete pontjából a fehér felé.*

2.2. Definíció. *$H = (V, E, F)$ egy* ***vágásfedése*** *vágások olyan halmaza, amely minden tartományba (F minden elemébe) legalább egyszer belemetsz.*

2.3. Definíció. *Legyen M egy teljes párosítás, k egy vágás, K pedig egy vágásfedés. Jelöljük a k vágás által metszett éleket E_k-val. Egy vágás M szerinti súlya: $m(k, M) = |E_k \cap M|$, egy vágásfedés M szerinti súlya pedig $m(K, M) = \sum_{k \in K} m(k, M)$.*

Legyen M teljes párosítás, k pedig a H 2-összefüggő páros síkgráf vágása.

2.1. Lemma. *$m(k, M)$ független M-től.*

Bizonyítás: Legyen w az abszolút értéke a vágás egyik oldalán lévő fekete és fehér pontok különbségének (legyen mondjuk több fehér az általánosság megsértése nélkül). Mivel minden párosításél egy fekete és egy fehér élt fed, minden M párosítás pontosan w fehéret párosít a másik oldal fekete pontjaival, így $m(k, M) = w$ lesz.

•

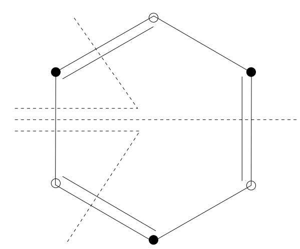
Így $m(k, M)$ helyett használhatjuk az $m(k)$ jelölést.

2.1. Következmény. *Adott K vágásfedésre: $m(K, M)$ minden párosításra ugyanaz.*

Tehát ehelyett is írhatunk egyszerűen $m(K)$-t.

2.1. Tétel (Hansen-Zheng). *$m(C) \geq cn(H)$, vagyis a Clar-szám legfeljebb annyi, mint egy vágásfedés súlya. (Ezáltal $CL(H) \geq cn(H)$.)*

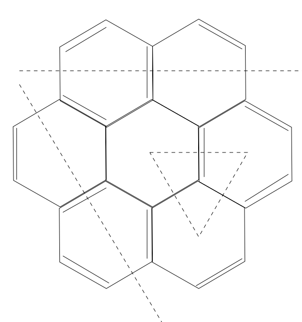
Bizonyítás: Vegyünk egy Clar-struktúrát, tehát egy olyan teljes párosítást, amelyen a diszjunkt hatszögek számának maximuma, tehát a Clar-szám felvétetik. Egy vágásfedés ennek minden tartományát metszi, a kiválasztottakon pedig a definíció alapján biztosan metsz párosításélt, mivel azok felváltva helyezkednek el a tartomány határán. Így a vágásfedés súlya legalább a Clar-struktúrában szereplő hatszögek - vagy általánosan tartományok - száma.



8. ábra. *Egy hatszög egy teljes párosításából biztosan tartalmaz élt a vágás*

•

Legyen $CL(H) = \min_K m(K)$



9. ábra. *A minimális vágás is legalább 3, így a gráf Clar-száma 3.*

Hansen és Zheng azt tapasztalta, hogy ez a két szám ráadásul az általuk vizsgált összes gráfra egyenlő, így azt sejtették, hogy ez mindig igaz is. Abeledo és Atkinson megmutatta, hogy ez a sejtés tényleg igaz. A következőkben ezt egyszerűsítve be is látjuk az állítást. Mivel a bizonyítás minimális költségű áramokkal történik, ezekről érdemes egy-két dolgot áttekinteni előbb.

3. Minimális költségű áramprobléma

Legyen $D = (V, A)$ irányított gráf, az élein $f : A \to \mathbf{R}$ alsó és $g : A \to \mathbf{R}$ felső korlátok, melyekre $f \leq g$. A korlátokon kívül adott még egy $c : E \to \mathbf{R}$ költségfüggvény is. Egy x áram költségén a cx skaláris szorzatot értjük. Legkisebb költségű megengedett áramot szeretnénk meghatározni.

Egy x áramhoz definiáljuk a $D_x = (V, A_x)$ segédgráfot és a c_x módosított költségfüggvényt a következőképpen: egy $\overrightarrow{uv}$ él akkor tartozzék A_x-hez, ha vagy (i) $\overrightarrow{uv} \in A, x(\overrightarrow{uv}) < g(\overrightarrow{uv})$ és ekkor legyen $c_x(\overrightarrow{uv}) = c(\overrightarrow{uv})$ (A_x előre éle), vagy ha (ii) $\overrightarrow{vu} \in A, x(\overrightarrow{vu}) > f(\overrightarrow{vu})$ és ekkor legyen $c_x(\overrightarrow{uv}) = -c(\overrightarrow{vu})$ (A_x hátra éle).

3.1. Tétel. *x megengedett áramra a következők ekvivalensek: (a) x minimális költségű, (b) D_x-ben nincs negatív kör, (c) létezik egy $\pi : V \to \mathbf{R}$ potenciál, melyre*

$$\begin{gathered}\pi(v) - \pi(u) \leq c(\overrightarrow{uv}),\ \textit{ha}\ x(\overrightarrow{uv}) < g(\overrightarrow{uv})\ (\overrightarrow{uv} \in A)\\ \textit{és}\\ \pi(v) - \pi(u) \geq c(\overrightarrow{uv}),\ \textit{ha}\ x(\overrightarrow{uv}) > f(\overrightarrow{uv})\ (\overrightarrow{uv} \in A).\end{gathered}$$

A tétel alapján látható, hogy a következő algoritmus megoldja a feladatunkat:

Induljunk ki egy x megengedett áramból. Ha D_x-ben nincs negatív kör, akkor készen vagyunk: a tétel szerint az adott x áram minimális költségű. Ha van negatív kör, akkor e mentén cseréljük ki x-et úgy, hogy az előre éleken $\triangle$-val növeljük, a hátra éleken $\triangle$-val csökkentjük, ahol $\triangle = min(m_1, m_2)$ és m_1 a C előre élein a $g(\overrightarrow{uv}) - x(\overrightarrow{uv})$ minimuma, m_2 pedig a C hátra élein az $x(\overrightarrow{uv}) - f(\overrightarrow{uv})$ minimuma. Végezzük el ezt újra és újra az így kapott új áramra!

Ez az algoritmus így még általában nem polinomiális futásidejű, sőt, nem is feltétlenül véges, de ha a költségek és a korlátok 0-1 értékűek, polinom idő alatt végetér.

3.2. Tétel. *Kis (0-1) költségek és korlátok esetén az algoritmus polinom időben véget ér.*

3.3. Tétel. *Ha f és g egész, akkor a megengedett megoldások poliédere is egész, azaz az extremális pontok egész értékek, tehát az optimum is egészeken vétetik fel.*

4. Hansen-Zheng-sejtés

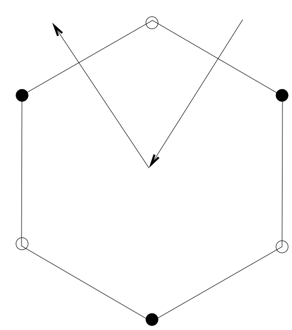
Az alábbi tétel tehát a Hansen és Zheng által megsejtett egyenlőségről szól. Ezt először Abeledo és Atkinson bizonyította minimális súlyú áramok segítségével. Ennek a bizonyításnak egy egyszerűsített változata a következő:

4.1. Tétel (Hansen-Zheng-sejtés). $CL(H) = cn(H)$

Bizonyítás: A minimális súlyú vágásfedés problémához Abeledo és Atkinson ötlete alapján definiálunk egy minimális súlyú áramproblémát a síkgráf síkduálisán:

Legyen adott egy teljes párosítás.

Jelölje $G^* = (F \cup t, E^*)$ a (V, E, F) duális gráfját, ahol t jelöli G külső (végtelen) tartományát. Ezt a duális gráfot fogjuk most megirányítani. Ha egy él az eredeti gráfban a tartományból nézve fekete pontból halad fehérbe az óramutató járásával megegyező irányban, a tartománynak megfelelő duális pontból az élt metsző duális élt kifelé irányítjuk. Ellenkező esetben befelé.



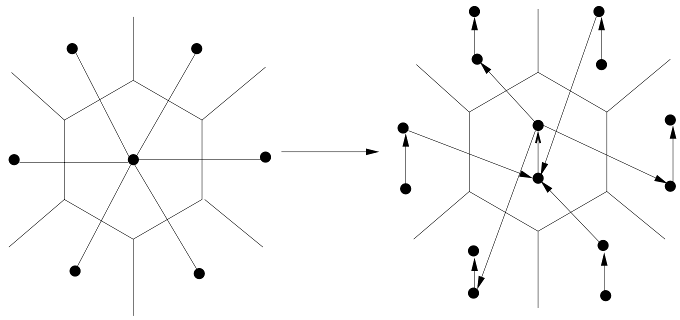
10. ábra. *Az új élek a duális gráfon*

Ezen kívül a duális gráf pontjait is kettéosztjuk:d_1 és d_2. A bejövő élek d_1-be mennek, a kimenők d_2-ből jönnek ki, és d_1-ből is vezet d_2-be egy él (ezen utóbbi új élek halmaza legyen A_d). (11. ábra)

Most pedig definiálunk egy minimális súlyú áramproblémát ezen az irányított gráfon: Legyen minden élen a keresztül haladó áram nem negatív, és minden A_d-beli élen az alsó korlát 1. Ezen kívül adjunk minden élre 0 súlyt, kivéve az eredeti párosítás éleket metszőkre, ezek súlya 1. (12. ábra)

Tehát a megadott korlátoknak megfelelő áramot keresünk, amelynek minimális a súlya.

Az A_d-beli élek alsó korlátja azt jelenti, hogy minden eredeti tartományt fedni szeretnénk, az élek súlyát pedig pont a párosítás határozza meg, ami már a vágásfedések súlyát is meghatározta. Mivel az áram-feladatnak egy



11. ábra. *A duális gráf pontjait széthúzzuk*

megoldása körök uniója lesz, fedve minden eredeti tartományt, ezáltal pont egy vágásfedést kapunk, amelynek a súlya az elmetszett párosításélek száma lesz az élek súlyának definiálása miatt.

Azt már láttuk, hogy ennek egy optimális megoldása alsó becslés a Clar-számra.

Legyen A az elkészített irányított duális gráf incidenciamátrixa, f az élekhez tartozó vektor, amely csak A_d-beli éleken 1, mindenhol máshol 0, végül legyen c egy teljes párosítás incidenciavektora.

$$(P1)$$
$$Ax = 0$$
$$x \geq f$$
$$min\ cx$$

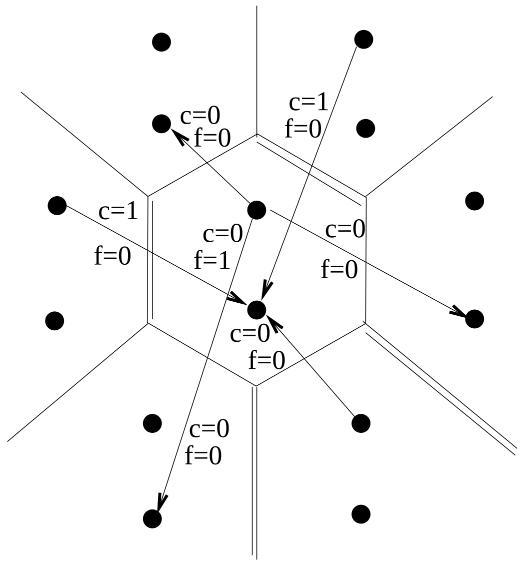
Ennek a LP-feladatnak a duálisa:

$$(D1)$$
$$\pi(v) - \pi(u) + y(uv) = c \ \forall uv \text{ élre}$$
$$y \geq 0$$
$$max\ fy$$

Vegyük (D) egy optimális megoldását! Egy eredeti gráfbeli pont körül összeadva (D) egyenlőségeit a π-k kiesnek, a c-k összege pedig 1 lesz, mivel ez egy teljes párosításhoz tartozó vektor. Így marad egy C körre:

$$\sum_C (y(uv)) = 1$$

Mivel egy áramprobléma és a duálisa is egész poliédert határoz meg, az optimum egészeken is felvétetik, így y egész lesz. Tehát egyetlen helyen vesz fel 1-et egy ilyen körön. Ha A_d-beli élen vesz fel 1-et, ez az él egy tartományt



12. ábra.
A súlyok és alsó korlátok, amik alapján a minimális áram-problémát definiáljuk

képviselő pont két széthúzottja között halad, azaz a megfelelő eredeti tartományt kiválasztottuk, és persze a $\sum_C (y(uv)) = 1$ egyenlőségből következően sem szomszédos tartomány, sem a kiválasztott tartomány pontjaira illeszkedő él nem választható ki, mivel az y nem lehet ezeken 1. Ha eredeti élhez tartozó élen 1 az y, akkor pedig kiválasztottuk ezt az élt, más szóval párosítottuk a neki megfelelő pontokat, és az egyenlőség miatt ezekhez a pontokhoz tartozó egyéb élek már nem választhatóak ki. Ezáltal az y kiválaszt az eredeti gráfon pontdiszjunkt tartományokat és éleket. Az optimum pedig ezek közül az A_d-beli élek, azaz a tartományok száma lesz, vagyis ez pontosan a Clar-szám-probléma. Egy optimális duálmegoldás tehát megoldás az eredeti kérdésünkre is, és mivel, mint láttuk, a Clar-számra ez egyben felső becslés is, ez az optimális megoldás erre a kérdésre is.

•

Tehát a Clar-szám probléma duálisa egy minimális súlyú áramprobléma 0-1 korlátokkal és súlyokkal, így az érték ennek segítségével könnyen számolható polinom időben.

5. Általánosabb megközelítés

A Hansen-Zheng-sejtés a hatszögrendszereknél általánosabb gráfokra is igaznak bizonyult, de azt így is fel kellett tennünk, hogy a kiindulási gráf síkbeli, páros és 2-összefüggő legyen. Kémiailag valószínűleg már ez sem jelent sok mindent, de matematikailag további érdekes kérdés, hogy vajon ezek a kikötések is elhagyhatók-e és ha igen, ez mit változtat a feladat megfogalmazásán. Úgy gondoltuk, érdekes lehet ez a megközelítés is, ezért kezdtük el ilyen, általánosabb oldalról is vizsgálni a problémát, és kiderült, ez valóban eredményre vezet.

Ha a síkbeliséget is elhagyjuk, nyilván nem lehetne már tartományokról beszélni, de a megirányított síkduális egy pontjaként nézve már lehet általánosítani, hiszen, mint később látni fogjuk, egyik párosításból a másikba alternáló körök segítségével eljutva nyelővé tehetünk minden, egy Clar-struktúrában szereplő tartománynak megfelelő pontot. Ez pedig már megfogalmazható minden előfeltétel nélkül, általános irányított gráfra, ha az alternáló köröket, mint irányított vágásokat tekintjük. A kérdés már csak az, mi lesz ennek a duálisa és hogy ez tényleg az eredeti duális általánosítása-e.

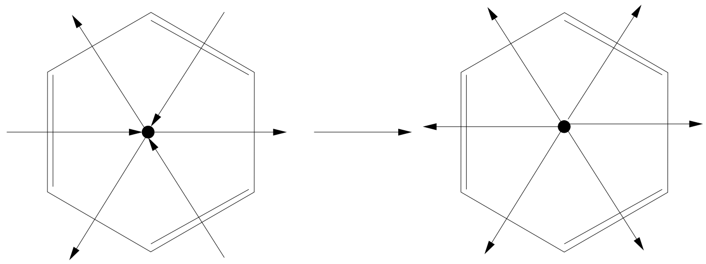
5.1. Lemma. *Síkbeli 2-összefüggő páros gráf síkduálisára a nyelőprobléma pont a Clar-számra specializálódik.*

Bizonyítás: Legyen adva a gráfon egy teljes párosítás. A Clar-számot megadó optimális teljes párosítás olyan, hogy Clar-számnyi tartománynak tartalmazza a vázát. Ez a párosítás az eredetileg adottól alternáló körökkel tér el.

Nézzük a korábban már elkészített irányított síkduális gráfot azzal a különbséggel, hogy ahhoz képest fordítsuk meg az olyan élek irányítását, melyek eredeti párosítás élekre illeszkednek.

Ezen az új irányított gráfon szeretnénk alkalmazni az általános tételt. Itt tehát nyelőket szeretnénk kapni, irányított vágások átfordításával. Egy irányított vágás viszont felváltva illeszkedik eredeti párosítás illetve nem párosítás élekre, tehát alternáló köröket ad, majd ezeket megfordítva egy másik teljes párosítás megfelelő síkduális gráfját. Mivel a nyelőpont pont azt jelenti, hogy a megfelelő eredeti gráfban a hozzá tartozó tartomány egy vázát tartalmazza a párosítás, a maximális ilyenek száma pont a Clar-szám lesz, és ez az érték el is érhető, ha az optimális teljes párosításra vezető alternáló köröket, azaz a két párosítás szimmetrikus differenciáját fordítjuk át.

•



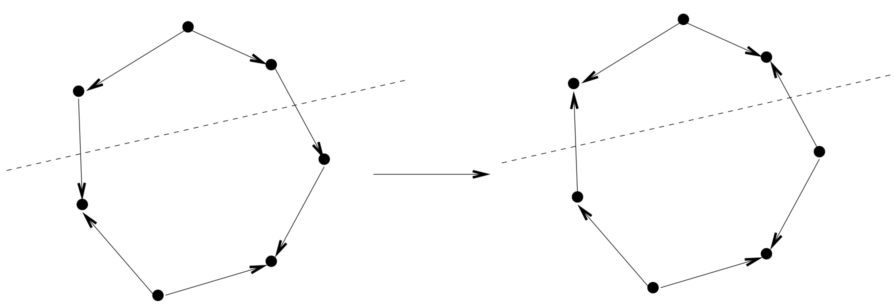
13. ábra. *Megfordítjuk a párosításélek irányítását*

A nyelőprobléma így a Clar-szám kiszámítását általánosítja.

Adott tehát egy irányított gráf. Szeretnénk éldiszjunkt irányított vágások átforgatásával maximalizálni a nyelőpontok számát.

5.1. Tétel. *Irányított gráfban az éldiszjunkt irányított vágások átfordításával létrejövő nyelőpontok maximális száma egyenlő a pontok körökkel, élekkel és pontokkal való fedésének minimális súlyával, ahol élek és pontok súlya 1, a köröké pedig az azokon egy irányba menő élek számának minimuma.*

Megjegyzés: Irányított vágásban szereplő élek irányításanak átforgatása a körök súlyát nem változtatja, hiszen egy vágás az irányítottsága miatt ugyanannyi élt tartalmaz a kör mindkét féle irányításából, így ezeket megfordítva nem változik egyik irányban sem az élek száma. (13. ábra)

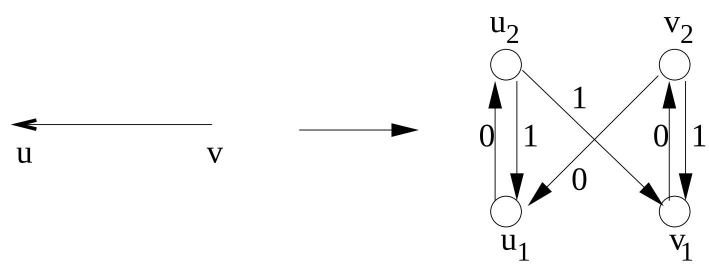


14. ábra. *Irányított vágás egy körön keresztül - a súly 3*

Megjegyzés: Pontok egy ilyen fedésében szereplő pontok és élek nyilván maximum egy nyelőt tartalmazhatnak, és az előző megjegyzés alapján egy körben is maximum a súlyának megfelelő számú nyelő lehet. Tehát nyelőszám-maximum $\leq$ súlyminimum.

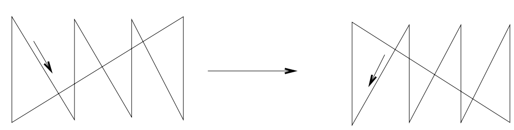
Az 5.1 Tétel bizonyítása: Készítsünk egy új gráfot az eredetiből, úgy, hogy minden pontot széthúzunk: u_1, u_2, és u_1-ből vezessünk élt u_2-be. Egy $\overrightarrow{uv}$ eredeti él két példányban fog szerepelni: $\overrightarrow{u_2v_1}$ és $\overrightarrow{v_2u_1}$.

Ezen a gráfon definiálunk egy minimális áramproblémát (itt egy áram az eredetiben körnek, élnek vagy pontnak fog megfelelni): Mivel minden pontot le akarunk fedni, az $\overrightarrow{u_1u_2}$ és $\overrightarrow{v_1v_2}$ éleken az alsó korlát legyen 1, mindenhol máshol 0. A súly pedig legyen $\overrightarrow{u_2u_1}$-élen illetve $\overrightarrow{v_2u_1}$-élen 1,mindenhol máshol 0.



15. ábra. *A pontokat széthúzzuk és új irányított éleket is berajzolunk*

Ezáltal az áramfeladat pont a súlyozott fedéssel ekvivalens, mivel egy pont kiválasztása megfelel egy ($\overrightarrow{u_1u_2}$, $\overrightarrow{u_2u_1}$) körnek, aminek a súlya $0+1=1$, egy él kiválasztásának súlya szintén 1, hiszen ez egy ($\overrightarrow{u_1u_2}$, $\overrightarrow{u_2v_1}$, $\overrightarrow{v_1v_2}$, $\overrightarrow{v_2u_1}$) kör, ahol csak a visszafelé irányított él, tehát a $\overrightarrow{v_2u_1}$ szerepel 1 súllyal, egy körben pedig a rossz irányba menő élek száma lesz a súly, és ha ez a több, a kör megfordítható (minden $\overrightarrow{u_2v_1}$ helyett a $\overrightarrow{v_2u_1}$ élt véve az irányítás és a súlyok is megfordulnak).



16. ábra. *A kör megfordítása*

Legyen c a súlyfüggvény vektora, f az alsó korlátoké, B pedig az irányított gráf incidenciamátrixa. Az így definiált feladat tehát így néz ki:

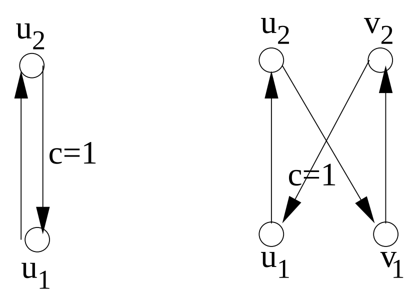
$$\begin{gathered}(P2)\\ Bx \geq 0\\ x \geq f\\ min\ cx\end{gathered}$$

Ennek duálisa:

$$(D2)$$
$$\pi * B + y = c$$
$$\pi \geq 0$$
$$y \geq 0$$
$$max\ fy$$

Vizsgáljuk meg, hogy milyen értékeket vehetnek fel a duálváltozók!

Tetszőleges irányított körre a baloldal összegében a π-k kiesnek, így $y(C) = c(C)$. Ezt egy 4-hosszú körre nézve: $c(C) = 1$, tehát minden ebben szereplő élen az $y \leq 1$ és összegük 1. A 2-hosszú körökre is $y(C) = 1$, tehát $\overrightarrow{u_2 u_1}$ y értéke is ≤ 1, így minden élé. Ráadásul a minimális súlyú áramprobléma poliédere egész, és ezért az optimális y értéke is egész, tehát 0 vagy 1.



17. ábra. *2- és 4-hosszúságú körök*

5.2. Lemma. $\pi(u_2) \leq \pi(u_1) \leq \pi(u_2) + 1$

Bizonyítás: A duális egyenlőség az $\overrightarrow{u_1 u_2}$ élre: $\pi(u_2) - \pi(u_1) + y(\overrightarrow{u_1 u_2}) = 0 \Rightarrow 1 \geq y(\overrightarrow{u_1 u_2}) = \pi(u_1) - \pi(u_2)$
A duális egyenlőség az $\overrightarrow{u_2 u_1}$ élre: $\pi(u_1) - \pi(u_2) + y(u_1 - u_2) = 1 \Rightarrow 0 \geq y(\overrightarrow{u_1 u_2}) - 1 = \pi(u_2) - \pi(u_1)$

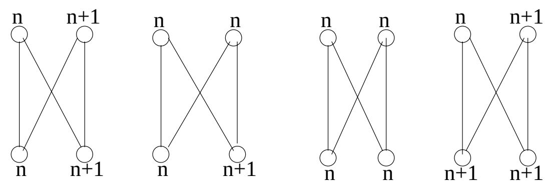
•

5.3. Lemma. $\pi(u_2) \leq \pi(v_1) \leq \pi(u_2) + 1$ *és* $\pi(v_2) - 1 \leq \pi(u_1) \leq \pi(v_2)$

Bizonyítás:A duális egyenlőség az $\overrightarrow{u_2 v_1}$ élre: $\pi(v_1) - \pi(u_2) + y(\overrightarrow{u_2 v_1}) = c(u_2 - v_1) = 1 \Rightarrow 0 \leq \pi(u_2) - \pi(v_1) + 1 \leq 1$
A duális egyenlőség a $\overrightarrow{v_2 u_1}$ élre: $\pi(u_1) - \pi(v_2) + y(\overrightarrow{v_2 u_1}) = c(v_2 - v_1) = 0 \Rightarrow 0 \leq \pi(v_2) - \pi(u_1) \leq 1$

•

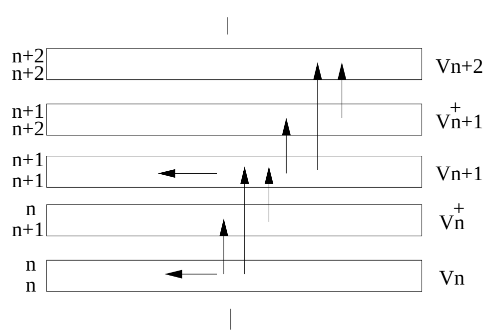
Ezek alapján a π potenciálok a következő értékeket vehetik fel egy széthúzott élen:



18. ábra. *A lehetséges potenciálértékek*

Ha $\pi(u_1)=\pi(u_2)$, a v_i-k csak eggyel lehetnek nagyobbak náluk, ha pedig $\pi(u_1) > \pi(u_2)$, a lemmák miatt egyértelműek a potenciálértékek.

Így a gráf eredeti, széthúzás nélküli pontjaihoz értékeket rendelhetünk aszerint, hogy a széthúzásával kapott két pont milyen potenciálértékekkel rendelkezik. (Lehet tehát (n, n) illetve $(n, n+1)$ értékű pont). A pontok ezen két értéke alapján szintekbe rendezhetjük őket, és az élek fent látott, mindössze 4-féle előfordulási lehetősége alapján egyszerűbb képet kaphatunk a gráfról, amely tehát így néz ki:



19. ábra. *A gráf potenciálok szerinti szintekre osztva*

V_n-nel jelöljük az (n, n), V_n^+-nel az $(n, n+1)$ értékű pontok halmazát.

Az f vektor csak az $\overrightarrow{u_1u_2}$ éleken volt 1, ezeken az y a $\pi(u_2) - \pi(u_1) + y(\overrightarrow{u_1u_2}) = 0$ egyenlőség miatt csak ott 1, ahol a π értékek különbözőek u_1-re és u_2-re, tehát V_i^+ pontjain. A duál LP-ben az yf emiatt éppen a $|\cup V_i^+|$-vel egyenlő és a V_{i+1}, V_i^+ közötti élek egy irányított vágást alkotnak,melyek élidegenek, ezeket megfordítva pedig a V_i^+ elemei mind nyelővé válnak. Tehát a nyelők száma legalább a duáloptimum, viszont láttuk, hogy legfeljebb a primáloptimum, így egyenlő azzal.

•

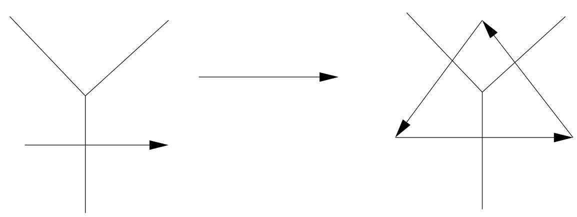
Ennek a sokkal általánosabb tételnek a segítségével újabb bizonyítást adhatunk Hansen és Zheng sejtésére.

6. Újabb bizonyítás a Hansen-Zheng-sejtésre

Célunk tehát, hogy az általános gráfokra kimondott tételt specializálva síkbeli 2-összefüggő páros gráfokra megkapjuk a Hansen-Zheng-sejtés egy újabb bizonyítását. Ehhez azt kell látni, hogy a duális feladat mindkét oldala pont a Hansen-Zheng-sejtés két oldalára specializálódik. Az egyik oldal egyszerűen látszik mivel pontosan ebből indultunk ki, amikor a feladatot általánosítani próbáltuk, erről szól az 5.1*Lemma*.

Mivel a Hansen-Zheng-sejtés speciális gráfokról szól, az általános tételünk alakja is sokat egyszerűsödik. Rögtön látható, (amint az a Hansen-Zheng-sejtés bizonyítása alapján el is várható) hogy körökkel, élekkel és pontokkal való fedés helyett elég csak körökkel fedni, mert már ilyen feltételekkel is megkapjuk az optimumértéket.

Valóban, pontokkal való fedés eleve nem szükséges, hiszen, ha helyette kiválasztunk egy rá illeszkedő élt, annak a súlya is 1, és lefedi a pontot. De síkbeli esetben az élekkel való fedésre sincs szükségünk, mert az él helyett bevehetünk egy őt tartalmazó legkisebb kört (azaz az eredeti gráf egy pontja körüli duális kört).

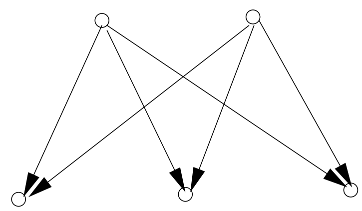


20. ábra. *Él helyett körrel fedünk*

Ekkor az él súlya 1 volt, a kör súlya pedig az egy irányba menő élek számának minimuma, tehát (mivel az imént definiált irányított duális gráfon ez egy irányított kör lesz, egyetlen élt, a párosításélt megfordítva) ez a minimum szintén 1 lesz. Tehát az optimumérték nem változik, és most már csak körökkel fedünk.

Megjegyzés: Csak körökkel nem elég fedni viszont az általános esetben. Egy példa erre a 21. ábra.

Itt minden kör 4-hosszú. Egy ilyennel nem lehet lefedni mind az 5 pontot, tehát ehhez szükség van legalább két körre. Minden kör súlya 2, tehát körökkel nem lehet 4-nél kevesebb súllyal fedni. Viszont egy kör és egy él már



21. ábra. *Csak körökkel nem elég fedni általános esetben*

lefedheti az összes pontot, ezek súlya viszont csak $2 + 1 = 3$. Az optimum tehát maximum 3, és ez, mint láttuk, nem érhető el csak körök segítségével.

Szóval általános gráfokról szóló tételünk síkbeli gráf duálisára körökkel való fedésről szól. A Hansen-Zheng sejtésben viszont irányított körök szerepelnek. Be kellene még látni tehát, hogy az optimum irányított körökön is felvétetik.

6.1. Lemma. *Síkbeli 2-összefüggő páros gráf síkduálisaként előálló gráfra létezik optimális körökkel való fedés, amely pont a minimális súlyú áramot adja.*

Bizonyítás: Már láttuk, hogy elég körökkel való fedésről beszélni, nincs szükség élekre.

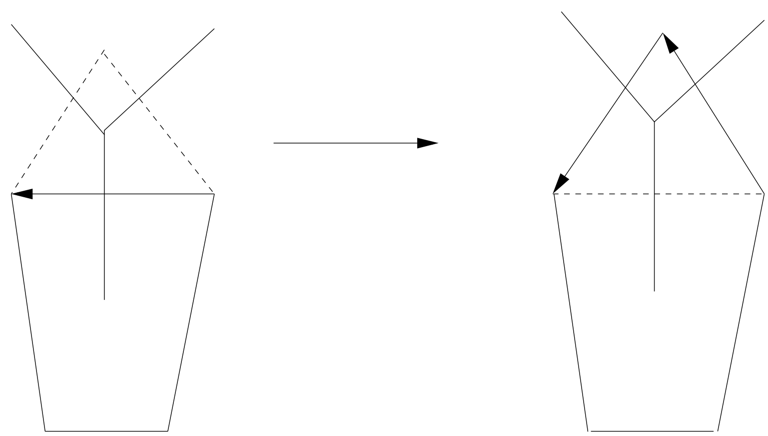
Azt kell bizonyítani tehát, hogy az optimum felvétetik az eredeti irányítás szerint irányított körökön.

Először megmutatjuk, hogy az optimum felvétetik olyan körökön, amelyekben az eredeti és az új, átirányított párosításokkal kapott gráfban is ugyanabban az irányban (innentől "jó irány") megy több él. Ez igaz, hiszen, ha adott egy optimális fedés, amiben egy kör nem ilyen, kivesszük belőle azokat az éleket, amelyek a megfordított irányításban "jó irányba", az eredetiben a másik irányba mutatnak. Ezeket lecseréljük az őket tartalmazó egyik legkisebb kör többi élére. (22. ábra)

(Ha az egyik pontot a körrel már bejártuk, tehát abból csak séta lesz így, szétbonthatjuk azt két körre, ami az optimumértéket csak csökkentheti.)

Mivel ezek az élek megfordulnak, így biztosan párosításélek, tehát a megfordított irányítású gráfban a helyettük bevett élek ugyanabba az irányba mutatnak, tehát a kör súlya nem változott. Viszont az eredeti irányítású gráfban pont fordított irányú élek léptek be helyettük, tehát ezekkel már a "jó irányba" mutat a több él a körben az eredeti gráfban is.

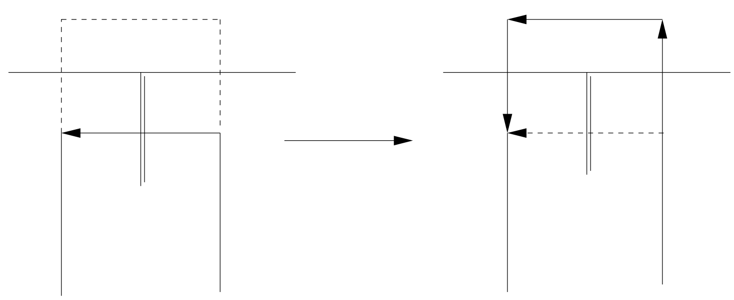
Ha már adott egy ilyen tulajdonságú optimális fedésünk, továbbirányíthatjuk hasonló módszerrel, hogy az eredeti gráfban minden kör teljesen irányított legyen.



22. ábra.
Megfordított irányítás: Az élt lecseréljük, hogy az irányítás azonos legyen

Tegyük fel, hogy létezik egy nem irányított kör az optimumban. Most csak viszonylag kevés "rossz irányú" él van benne, amik ráadásul "rossz irányúak" az átirányított gráfban is. Ezek helyett vegyük be megint csak az őket egyenként tartalmazó egyik legkisebb körben szereplő többi élt. Ezzel a kör irányított lett az eredetiben, hiszen fordított irányú éleket vettünk be a "rossz irányúak" helyett, lefedi a szükséges pontokat ugyanúgy, a súlya viszont nem változott az átirányítottban, mert:

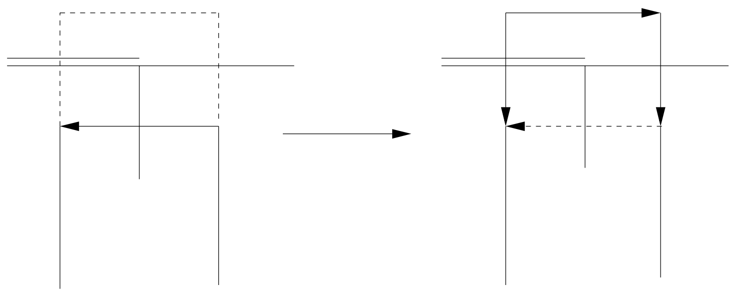
1. Ha az él párosításél volt, megfordítottuk, így "jó irányba" megy már, és ha bevesszük helyette az ugyanebbe az irányba mutató éleket, a súly nem változik.



23. ábra. *Párosításél lecserélése*

2. Ha az él nem párosításél volt, nem fordult meg, tehát "rossz irányba" mutat. Ha bevesszük helyette az új éleket, azok közül egy (a párosítás-)él

mutat majd ebbe az irányba, a többi ellenkezőleg, ”jó felé”. A súlyba tehát eddig is +1 -et számított az él, és most is +1 lesz az új élek hatása a súlyra. Az tehát nem változik ebben az esetben sem.



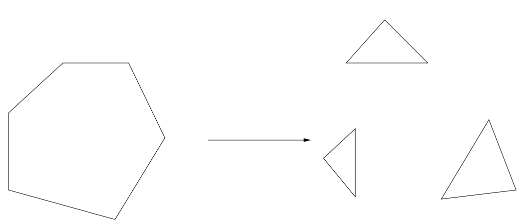
24. ábra. *Nem-párosításél lecserélése*

Így tetszőleges optimális fedést irányítottá tettünk, ezzel alkalmazhatóvá a Hansen-Zheng-sejtésre.

Persze, a két súlyozás nem feltétlenül ugyanaz, hiszen ha egy irányított körben több a párosításél, mint a nem párosításél, akkor az egyik súlyozás az előbbit, a másik az utóbbit adja. De persze ez könnyen kivédhető, ha megmutatjuk, hogy az optimum olyan rendszeren vétetik fel mindig, ami nem tartalmaz ilyen köröket. Ez pedig igaz, hiszen, ha létezne ilyen kör, azt helyettesíthetnénk más irányított körökkel, amik már nem ilyenek, ráadásul kisebb a súlyuk, a következőképpen:

Tegyük fel, hogy létezik ilyen kör az optimális fedésben.

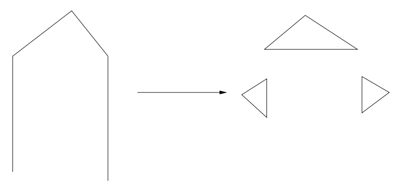
1.Ha a kör páros, vehetjük minden második élét az őt tartalmazó egy legkisebb körrel.



25. ábra. *Nagy körből kis körök*

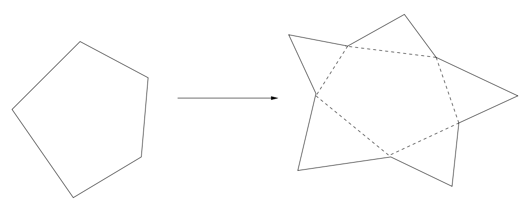
Ekkor minden pont le van fedve továbbra is és az összsúly a körök száma (mivel minden kis kör súlya 1), azaz az eredeti kör éleinek számának fele. Tehát vagy javítottuk az optimumot, ami nem lehet, vagy csak maximum fele volt az éleknek párosításél.

2.Ha a kör páratlan, de van benne "szomszédos" élpár, tehát amik egy pontból kiinduló két élre illeszkednek, akkor ugyanígy járhatunk el, hiszen ez a két él egy kis körön lesz. Tehát itt is kisebb lesz a súly a kör élszámának felénél, ellentmondásban a kör választásával.



26. ábra. *Nagy körből kis körök szomszédos él esetén*

3.Ha a kör páratlan, de nincs benne "szomszédos" élpár, akkor minden egyes él helyett bevehetjük az egyik, őt tartalmazó 3-hosszú kis kör másik két élét. Ezzel megfordul az irányítás a körben, de az továbbra is irányított marad, fedi a pontokat ez is, a súlya viszont (tehát a párosítás élek száma) pont az ellenkező lesz, tehát a feltétel alapján kevesebb,mint eddig. Ellentmondás.



27. ábra. *Páratlan körre minden élt lecserélünk*

•

Ezzel a Hansen-Zheng-sejtésre újabb bizonyítást adtunk.

7. Az általános tétel súlyozott esetben

További érdekes kérdés lehet egy általános irányított gráfról, miután már megállapítottuk, hogy hány pont tehető nyelővé benne irányított vágások átforgatásával, hogy ha megadunk néhány pontot, azok ilyenek-e, tehát lehet-e belőlük nyelő, és ha nem, mekkora részükből lehet mégis. Sőt, ha van a pontokon "fontossági sorrendünk" (azaz súlyok), mennyire lehet ennek megfelelően megkapni a nyelőket. Ez utóbbi, súlyozott esetet belátjuk,és ebből rögtön látszik majd az előbbi, csak néhány pontot vizsgáló probléma megoldása is.

Rendeljünk tehát minden ponthoz egy súlyt.

7.1. Tétel. *A súlyozott nyelőprobléma (tehát, hogy úgy akarunk irányított vágások átfordításával nyelőket kapni, hogy ezeknek az előre megadott súlyokkal vett összege legyen maximális) optimális megoldása egyenlő a pontok körökkel, élekkel és pontokkal való lefedésének korábban már definiált súlyokkal vett minimumával, ahol minden pontot a súlyaszor szeretnénk lefedni.*

Bizonyítás: A nem súlyozott esetben leírt bizonyítást követjük, a különbség csak annyi, hogy itt a c vektor más. Ez a π értékeket nem befolyásolja, tehát a gráf ugyanúgy néz ki, ugyanazokat a pontokat lehet nyelővé tenni, ugyanúgy, és az yf optimumértéke megegyezik itt is egy súlyozott nyelő-értékkel.

Azt kell még látni, hogy az egyenlőtlenség teljesül köztük, tehát súlyozott nyelő-maximum $\leq$ pontfedés-minimum.

Ha adott egy nyelővé tett halmaz, elég csak a vágások átirányításával kapott gráfot viszgálni, mert a körök, élek és pontok súlya az átforgatásokkal nem változik meg. Márpedig egy nyelő egy rajta átmenő él meg kör súlyához is hozzájárul +1-gyel, az összes őt fedő objektum pedig pont az ő súlyával, így, ha az összes nyelőt a megadott számszor fedjük, a fedés összsúlya legalább a nyelők súlyösszege lesz.

•

7.1. Következmény. *Egy előre adott ponthalmazból maximum annyi pont tehető nyelővé irányított vágások átfordításával, amennyi minimálisan lehet az ezt a néhány pontot fedő kör, él és pont súlyának összege.*

Bizonyítás: Vegyük a kiválasztott pontok súlyát 1-nek, az összes többiét pedig 0-nak. Ha alkalmazzuk az előző tételt, rögtön az állításunkat kapjuk.

•

8. Konklúzió

Az aromás benzenoid szénhidrogén molekulák stabilitásának megállapításában fontos szerepet játszó Clar-szám tehát egyszerűen számolható minimális súlyú áramprobléma segítségével. A kémiában ez csak hatszögrendszerekre érdekes, de ugyanez igaz minden, előfeltétel nélküli, általános irányított gráfokra; ezekben minél több nyelőpontot szeretnénk találni, vagy megállapítani adott ponthalmazról, hogy nyelővé tehető-e. Ennek segítségével szintén látható a Clar-szám és a minimális súlyú áramprobléma összefüggése.

9. Irodalom

.

1. E. Clar: The aromatic sextet. *John Wiley and Sons, London*, 1972.

2. P. Hansen/M. Zheng: Upper bounds for the Clar-number of a benzenoid hydrocarbon. *J.Chem.Soc.Faraday Trans.*, 1992. 88(12), 1621-1625

3. H. Abeledo/G. Atkinson: Polyhedral combinatorics of benzenoid problems. *Springer-Verlag Berlin Heidelberg*, 1998., 202-211

4. Frank A.: Kombinatorikus algoritmusok. *egyetemi jegyzet,ELTE*