SYMBOLICKÝ POČET MATLABU PŘI VÝPOČTU CHARAKTERISTICKÉHO A ACYKLICKÉHO POLYNOMU GRAFU.

Seibert J., Slabý A., Trojovský P.
Univerzita Hradec Králové

Abstrakt:
Existuje řada polynomů, které jsou svázány s grafy a jejich teorií. Tyto polynomy jsou užitečné v teorii grafů i jejich aplikacích, protože umožňují určovat vlastnosti grafů a vztahů mezi grafy pomocí algebraických metod. Ve svém příspěvku budeme ilustrovat použití symbolického počtu Matlabu při výpočtu charakteristického a acyklického polynomu různých typů grafů.

V teorii grafů je definována řada polynomů, z nichž každý určitým způsobem charakterizuje strukturu grafu. Některé z těchto polynomů byly zavedeny na základě zkoumání speciálních objektů, nejčastěji v různých fyzikálních a chemických oborech. Zřejmě nejvýstižněji popisuje strukturu grafu G jeho matice sousednosti označovaná A či A(G).
Charakteristický polynom grafu G, který označíme P(G,x) je pak definován jako charakteristický polynom jeho matice sousednosti, tj. je definován vztahem P(G,x)=det(xI-A), kde I je jednotková matice stejného stupně jako matice A. Kořeny charakteristického polynomu se nazývají vlastní čísla a tvoří tzv. spektrum grafu G. Vzhledem k tomu, že pro grafy s větším počtem uzlů je výpočet charakteristického polynomu výpočetně složitý, používá se k výpočtu charakteristického polynomu velmi užitečná věta Sachsova:
Je li G neorientovaný graf s n uzly a charakteristickým polynomem

$$P(G,x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^{n-j}$$

Pak pro každé j takové, že

$$1 \le j \le n$$

platí:

$$a_j = \sum_{s \in S_j} (-1)^{c(s)} 2^{r(s)},$$

kde S_j je množina všech Sachsových podgrafů S grafu G, které mají j uzlů c(s) značí množinu komponent S a r(s) je počet kružnic v S.

Acyklický polynom byl zaveden při řešení konkrétních problémů v přírodních vědách Systematický matematický základ pro acyklický polynom položil v roce 1977 Gutman.
Jeli G graf s n uzly Pak acyklický polynom grafu je definován vztahem:

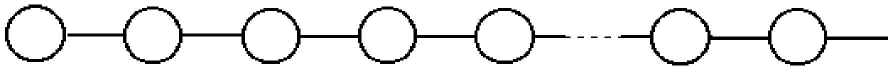
$$\alpha(G,x) = \sum_{k=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]} (-1)^k p(G,k)\, x^{n-2k}$$

kde p(G,k) je počet podgrafů G, které jsou tvořeny právě k disjunktními komponentami K_2

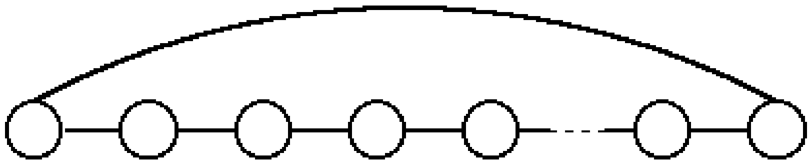
Uvedené podgrafy grafu G, které jsou kořeny k nezávislých hran se nazývají k párování, číslo p(G,k) pak určuje počet různých k párování daného grafu G a někdy se nazývá k té párovací číslo grafu G. Jestliže počet uzlů grafu G je n2´k, pak příslušné k párování nazýváme úplné párování grafu G. Jde o lineární faktor grafu G
Při formulaci zápisu acyklického polynomu grafu je možno využít Saxovu teorii. Za acyklické Saxovy grafy jsou přitom považovány ty podgrafy grafu G, které jsou tvořeny disjunktními grafy K_2j ako jejich komponentami
Matlab a v tomto případě symbolický počet Matlabu poskytují obzvláště rychlý a efektivní prostředek pro výpočet a úpravy těchto polynomů. Vzhledem k rozsahu příspěvku není účelné jednotlivé typy grafů, které jsme vybrali pro výpočet jejich acyklických polynomů v tomto

příspěvku, definovat přísně matematicky formálně. Topologii každého typu grafu budeme ilustrovat obrázkem

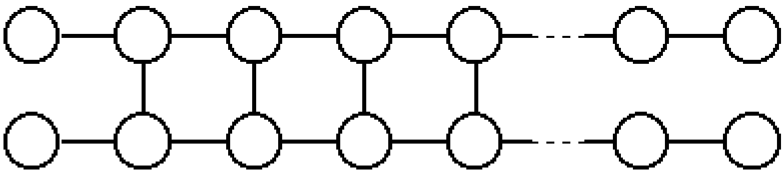
Had L_n n>0 je graf definovaný na obrázku



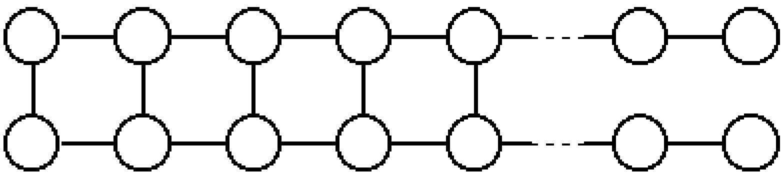
Kružnice C_n n>2 je graf definovaný obrázkem



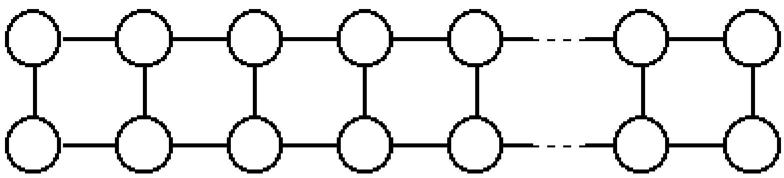
Otevřený žebřík G_n n>0 je definován na následujícím obrázku



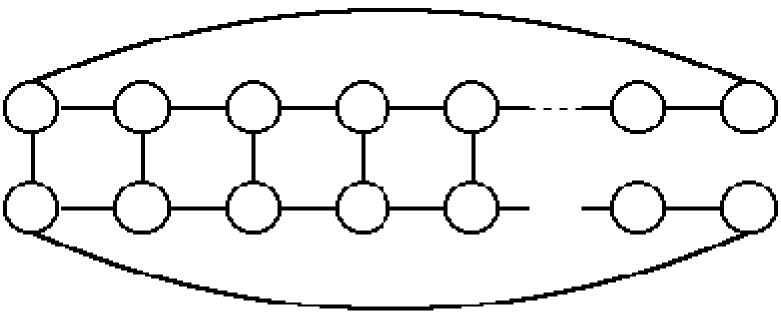
Polouzavřený žebřík $H_{i,j}$,i>0,j>0 je definován na následujícím obrázku. Speciálně $H_{i,1}=H_i$



Uzavřený žebřík Z_n n>0 je definován na následujícím obrázku



Kolo $M_{i,j}$,i>0,j>0 je graf definovaný na následujícím obrázku. Speciálně $M_{n,0}$ n>2 označíme M_n



Bez důkazu uvedeme vztahy pro acyklické polynomy těchto vybraných speciálních typů grafů zmíněných v tomto příspěvku
Těchto rekurentních vztahů bylo použito při výpočtu acyklických polynomů.

$$\beta(L_1) = x$$
$$\beta(L_2) = x^2 - 1$$
$$\beta(L_n) = \beta(L_1)\beta(L_{n-1}) - \beta(L_{n-2}),\ n \geq 3$$
$$\beta(C_n) = \beta(L_n) - \beta(L_{n-2}),\ n \geq 3$$
$$\beta(Z_1) = \beta(L_4) - \beta(L_2)$$
$$\beta(Z_n) = \beta(H_{n-1}) - \beta(Z_{n-1}),\ n \geq 2$$
$$\beta(G_0) = \beta^2(L_3) - \beta^4(L_1)$$
$$\beta(G_n) = \beta(H_n) + \beta(H_{n+1}),\ n \geq 1$$
$$H_i \equiv H_{i,1}$$
$$\beta(H_{1,j}) = \beta(L_{2(j+2)}) - \beta^2(L_j)\beta(L_2),\ j \geq 1$$
$$\beta(H_{i+1,j-1}) = \beta(H_{i,j}) - \beta(Z_i)\beta^2(L_{j-1}),\ i \geq 1,\ j \geq 2$$
$$\beta(M_{1,j}) = \beta^2(C_{j+1}) - \beta^2(L_j),\ j \geq 2$$
$$\beta(M_{2,j}) = \beta(M_{1,j+1}) - \beta(L_{2(j+1)}),\ j \geq 1$$
$$\beta(M_{i+1,j-1}) = \beta(M_{i,j}) - \beta(H_{i-1,j-1}),\ i \geq 2,\ j \geq 2$$
$$\beta(M_n) = \beta(M_{n-1,1}) - \beta(Z_{n-2}),\ n \geq 3$$

Uveďme dále výpis zmíněného M filu využívajícího právě uvedených rekurentních vztahů k výpočtu acyklických polynomů pro grafy typu had, kružnice, žebřík a kolo. Korespondence proměnných v M filu použitých při výpočtu a proměnných z předchozích rekurentních vztahů je zřejmá.

```
%Rekurentní výpočet acyklických polynomů pro vybrané typy grafů s využitím
symbolického počtu Matlabu
%Proměnná POČET udává počet odvozených polynomů
POCET=10
%Výpočet polynomů pro grafy typu had (jsou v proměnných betaL, BetaL)
%Výpočet polynomů pro grafy typu kružnice (jsou v proměnných betaC, BetaC)
c1 = [1 0];
c2 = [1 0 -1];
betaL(1)=poly2sym(c1);
BetaL(1)=betaL(1);
betaL(2)=poly2sym(c2);
BetaL(2)=betaL(2);
for n =3:2*POCET+4
 betaL(n)=betaL(1)*betaL(n-1)-betaL(n-2);
 betaC(n)=betaL(n)-betaL(n-2);
 BetaL(n)=collect (betaL(n));
 BetaC(n)=collect (betaC(n));
end
%Výpočet polynomů pro grafy typu zavřený žebřík (jsou v proměnných betaZ,BetaZ)
%Výpočet polynomů pro grafy typu otevřený žebřík ( jsou v proměnných betaG,BetaG)
```

```
%Výpočet polynomů pro grafy typu polootevřený žebřík (jsou v proměnných betaH,BetaH)
%Využívá se polynomů se dvěma parametry betah2(i,j)
betaZ(1)=betaL(4)-betaL(2);
for j=1:POCET
 betaH2(1,j)=betaL(2*(j+2))-betaL(j)^2*betaL(2);
end
for i=1:POCET
 for j=2:POCET
  betaH(i)=betaH2(i,1);
  if (i>1)
   betaZ(i)=betaH(i-1)-betaZ(i-1);
  end
  betaH2(i+1,j-1)=betaH2(i,j)-betaZ(i)*(betaL(j-1))^2;
 end
end
for n=1:POCET-1
   betaG(n)=betaH(n)+betaH(n+1);
end
for n=1:POCET-1
 BetaZ(n)=collect(betaZ(n));
 BetaG(n)=collect(betaG(n));
 BetaH(n)=collect(betaH(n));
end
%Výpočet polynomů pro grafy typu kolo (jsou v proměnných betaM,BetaM)
%Využívá se polynomů se dvěma parametry betaM2(i,j)
for j=2:POCET+1
 betaM2(1,j)=betaC(j+1)*betaC(j+1)-betaL(j)*betaL(j);
end
for j=1:POCET
 betaM2(2,j)=betaM2(1,j+1)-betaL(2*(j+1));
end
for i=2:POCET
 for j=2:POCET
  betaM2(i+1,j-1)=betaM2(i,j)-betaH2(i-1,j-1);
 end
end
for n=3:POCET
   betaM(n)=betaM2(n-1,1)+betaZ(n-2);
end
```

Výstupy software prvních deseti acyklických polynomů pro zmíněné typy grafů uvádíme v závěru příspěvku. Tyto vztahy předpokládají mj výpočty a úpravu 24 polynomů prografy typu had a kružnice a dalších polynomů odpovídajících speciálním grafům zmíněných tříd. Tvary polynomů jsou uloženy vždy ve dvou proměnných. Z nich uvádíme pouze proměnné, jejichž identifikátor začíná velkým písmenem a které představují upravené hodnoty polynomů (sloučením koeficientů u stejných mocnin)s využitím funkce collect.

Výpis acyklických polynomů pro prvních x grafů typu had udává proměnná BetaL:

```
BetaL =[
x,
x^2-1,
x^3-2*x,
x^4-3*x^2+1,
```

x^5-4*x^3+3*x,
x^6-5*x^4+6*x^2-1,
x^7-6*x^5+10*x^3-4*x,
x^8-7*x^6+15*x^4-10*x^2+1,
x^9-8*x^7+21*x^5-20*x^3+5*x,
x^10-9*x^8+28*x^6-35*x^4+15*x^2-1,
Výpis acyklických polynomů pro prvních x grafů typu kružnice udává proměnná BetaC:
(grafy třídy krunice jsou def pro tři a více uzlů)
BetaC =[
0,0,
x^3-3*x,
x^4-4*x^2+2,
x^5-5*x^3+5*x,
x^6-6*x^4+9*x^2-2,
x^7-7*x^5+14*x^3-7*x,
x^8-8*x^6+20*x^4-16*x^2+2,
x^9-9*x^7+27*x^5-30*x^3+9*x,
x^10-10*x^8+35*x^6-50*x^4+25*x^2-2,

Výpis acyklických polynomů pro prvních 10 grafů typu uzavřený žebřík udává proměnná BetaZ:
BetaZ =[
x^4-4*x^2+2,
x^6-7*x^4+11*x^2-3,
x^8-10*x^6+29*x^4-26*x^2+5,
x^10-13*x^8+56*x^6-94*x^4+56*x^2-8,
x^12-16*x^10+92*x^8-234*x^6+263*x^4-114*x^2+13,
x^14-19*x^12+137*x^10-473*x^8+815*x^6-667*x^4+223*x^2-21,
x^16-22*x^14+191*x^12-838*x^10+1982*x^8-2504*x^6+1577*x^4-424*x^2+34,
x^18-25*x^16+254*x^14-1356*x^12+4115*x^10-7191*x^8+7018*x^6-3538*x^4+789*x^2-55,
x^20-28*x^18+326*x^16-2054*x^14+7646*x^12-17266*x^10+23431*x^8-18336*x^6+7622*x^4-1444*x^2+89]

Výpis acyklických polynomů pro prvních 10 grafů typu otevřený žebřík udává proměnná BetaG:
BetaG =[
x^8-8*x^6+16*x^4-8*x^2+1,
x^10-11*x^8+37*x^6-43*x^4+15*x^2-1,
x^12-14*x^10+67*x^8-132*x^6+104*x^4-28*x^2+2,
x^14-17*x^12+106*x^10-302*x^8+403*x^6-235*x^4+51*x^2-3,
x^16-20*x^14+154*x^12-580*x^10+1128*x^8-1108*x^6+506*x^4-92*x^2+5,
x^18-23*x^16+211*x^14-993*x^12+2576*x^10-3700*x^8+2825*x^6-1051*x^4+164*x^2-8,
x^20-26*x^18+277*x^16-1568*x^14+5125*x^12-9874*x^10+11031*x^8-6804*x^6+2123*x^4-290*x^2+13,
x^22-29*x^20+352*x^18-2332*x^16+9234*x^14-22546*x^12+33899*x^10-30563*x^8+15674*x^6-4194*x^4+509*x^2-21,
x^24-32*x^22+436*x^20-3312*x^18+15443*x^16-45928*x^14+87872*x^12-106816*x^10+79904*x^8-34840*x^6+8136*x^4-888*x^2+34]

Výpis acyklických polynomů pro prvních 10 grafů typu polootevřený žebřík udává proměnná BetaH:
BetaH =[
x^6-6*x^4+7*x^2-1,
x^8-9*x^6+22*x^4-15*x^2+2,
x^10-12*x^8+46*x^6-65*x^4+30*x^2-3,
x^12-15*x^10+79*x^8-178*x^6+169*x^4-58*x^2+5,
x^14-18*x^12+121*x^10-381*x^8+581*x^6-404*x^4+109*x^2-8,
x^16-21*x^14+172*x^12-701*x^10+1509*x^8-1689*x^6+910*x^4-201*x^2+13,
x^18-24*x^16+232*x^14-1165*x^12+3277*x^10-5209*x^8+4514*x^6-1961*x^4+365*x^2-21,
x^20-27*x^18+301*x^16-1800*x^14+6290*x^12-13151*x^10+16240*x^8-11318*x^6+4084*x^4-655*x^2+34,
x^22-30*x^20+379*x^18-2633*x^16+11034*x^14-28836*x^12+47050*x^10-46803*x^8+26992*x^6-8278*x^4+1164*x^2-55]

Výpis acyklických polynomů pro prvních x grafů typu kolo udává proměnná BetaM:
BetaM =[
0,0,
x^6-7*x^4+10*x^2,
x^8-10*x^6+28*x^4-22*x^2+3,
x^10-13*x^8+55*x^6-87*x^4+43*x^2-1,
x^12-16*x^10+91*x^8-224*x^6+232*x^4-80*x^2+4,
x^14-19*x^12+136*x^10-460*x^8+757*x^6-559*x^4+143*x^2-3,
x^16-22*x^14+190*x^12-822*x^10+1888*x^8-2250*x^6+1254*x^4-250*x^2+7,
x^18-25*x^16+253*x^14-1337*x^12+3976*x^10-6692*x^8+6089*x^6-2669*x^4+430*x^2-8,
x^20-28*x^18+325*x^16-2032*x^14+7453*x^12-16396*x^10+21263*x^8-15344*x^6+5459*x^4-732*x^2+15]

Rozborem rekurentních vztahů a odpovídajícího M filu zjistíme okamžitě že byla spočítána řada dalších polynomů speciálních grafů a to polynomů grafů, $H_{i,j,}$ $M_{i,j}$ a dále abychom mohli spočítat n polynomů typů had či kolo musíme spočítat 2n+4 polynomů grafů typů had a kružnice. Jde tedy o značné objemy symbolických výpočtů které software neomylně a rychle provádí
Proto jsme m.j. spočítali hodnotu proměnné BetaL(24), což je acyklický polynom pro graf typu had L_{24}
x^24-23*x^22+231*x^20-1330*x^18+4845*x^16-11628*x^14+18564*x^12-19448*x^10+12870*x^8-5005*x^6+1001*x^4-78*x^2+1]
či hodnotu proměnné BetaC(24), což je acyklický polynom pro graf typu kružnice C_{24}
x^24-24*x^22+252*x^20-1520*x^18+5814*x^16-14688*x^14+24752*x^12-27456*x^10+19305*x^8-8008*x^6+1716*x^4-144*x^2+2]

Literatura:

[1]Farrell E.J.: The matching polynomial and its relation to the acyclic polynomial of a graf. Ars Combinatoria
Vol 9 ,1980, pp. 221-228.
[2]Gutman I.: The acyclic polynomial of a graph Publ Inst Math, 36, 1977,pp63-69
[3]Cvetkovič D. M. Doob M., Sachs. H,:Spectra of graphs, New York, San Fransisco, London, Academic press 1980