ДИСКРЕТНЫЙ АНАЛИЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ОПЕРАЦИЙ
Июль—сентябрь 2007. Серия 1. Том 14, № 3. 46–52

УДК 519.172

НЕУСТОЙЧИВЫЕ ДЕРЕВЬЯ

В. А. Колмыков

Доказано, что множество неустойчивых деревьев в определённом смысле трёхмерно. Множество всех деревьев, в спектре которых имеются заданные числа с кратностями не менее заданных, всюду плотно во множестве всех деревьев. Свойство неустойчивости периодических деревьев является в некотором смысле периодическим.

Введение

Граф называется *устойчивым*, если его матрица смежности невырождена, и *неустойчивым* в противном случае. Такая терминология обусловлена химическими приложениями (подробнее об этом см., например, § 8.1 в [3]). Множество всех (всех неустойчивых) деревьев обозначается через $\mathcal{T}$ ($\mathcal{T}_0$).

В настоящей статье мы вводим понятие свободной склеечной размерности и доказываем трёхмерность множества $\mathcal{T}_0$.

В [2] доказано, что $\mathcal{T}_0$ всюду плотно в $\mathcal{T}$ (т. е. доля n-вершинных неустойчивых деревьев среди всех n-вершинных деревьев стремится к 1 с ростом n). В настоящей статье мы рассматриваем множества всех деревьев, спектры которых содержат заданные собственные значения с кратностями, не меньшими заданных. Мы покажем, что любое такое множество всюду плотно в $\mathcal{T}$.

В 2000 году фирма IBM сообщила о создании мономолекулярного чипа с носителем на периодической углеводородной молекуле. В связи с этим исследования устойчивости или неустойчивости таких молекул могут представлять определённый интерес.

Мы рассматриваем периодические деревья и доказываем, что свойство неустойчивости таких деревьев является в некотором смысле периодическим.

1. Свободная склеечная размерность

Вложением $f : T_1 \to T_2$ деревьев называется инъективное отображение множеств их вершин $f : V(T_1) \to V(T_2)$ такое, что если вершины u и v смежны в T_1, то $f(u)$ и $f(v)$ смежны в T_2.

Будем говорить, что дерево T *склеено* из деревьев T_1 и T_2, если существуют вложения $f_i : T_i \to T$ такие, что $f(V(T_1)) \cup f_2(V(T_2)) = V(T)$, $i = 1, 2$.

Пусть $\mathcal{H}$ — некоторое множество деревьев. Бинарную частичную многозначную операцию $\odot$ на множестве $\mathcal{H}$ (т. е. отображение $\mathcal{H}^2 \to 2^{\mathcal{H}}$) назовём *склейкой*, если для любых $T_1, T_2 \in \mathcal{H}$ любое $T \in T_1 \odot T_2$ (если, конечно, множество $T_1 \odot T_2$ непусто) склеено из T_1 и T_2. Из определения склейки следует, что число вершин в каждом дереве из $T_1 \odot T_2$ не превосходит суммы чисел вершин T_1 и T_2. В частности, множество $T_1 \odot T_2$ конечно.

Если T склеено из T_1 и T_2, а $f_i : T_i \to T$ — соответствующие вложения, то можно определить граф S с множеством вершин $f_1(V(T_1)) \cap f_2(V(T_2))$, причём вершины u и v смежны в графе S, если и только если они смежны в T (если множество $f_1(V(T_1)) \cap f_2(V(T_2))$ пусто, то S — пустой граф, обозначаемый через Emp; очевидно, что если $S \neq \mathrm{Emp}$, то S — дерево). В деревьях T_1 и T_2 существуют соответственно подграфы S_1 и S_2, изоморфные графу S, такие, что $f_1(V(S_1)) = V(S) = f_2(V(S_2))$. Будем говорить, что T склеено из T_1 и T_2 посредством S-*отождествления*.

Пусть $\mathcal{H}$ — некоторое множество деревьев, а $\odot$ — некоторая склейка, определённая на нём. Склейку $\odot$ назовём *свободной*, если для любой пары (T_1, T_2) деревьев из множества $\mathcal{H}$ выполнено условие: если $T_1 \odot T_2$ непусто, то существует граф $S_\odot(T_1, T_2)$ такой, что $T_1 \odot T_2$ состоит из *всех* деревьев, которые можно получить из T_1 и T_2 посредством $S_\odot(T_1, T_2)$-отождествления. Таким образом, с каждой свободной склейкой $\odot$ связано частичное отображение $S_\odot : \mathcal{H}^2 \to \mathcal{T} \cup \{\mathrm{Emp}\}$.

Пусть $\mathcal{M}$ — некоторое множество, $\mathcal{R}$ — набор операций (возможно, частичных и многозначных), позволяющих из элементов множества $\mathcal{M}$ строить какие-то элементы из этого же множества. Если $\mathcal{P} \subseteq \mathcal{M}$, то через $\mathcal{R}(\mathcal{P})$ обозначим множество всех элементов множества $\mathcal{M}$, получающихся из элементов множества $\mathcal{P}$ применением к ним (с учетом арности) операций из множества $\mathcal{R}$. Множество $\mathcal{P} \cup \mathcal{R}(\mathcal{P}) \cup \mathcal{R}(\mathcal{R}(\mathcal{P})) \cup ...$ обозначим через $\langle \mathcal{P} | \mathcal{R} \rangle$. Если $\mathcal{L} \subseteq \mathcal{M}$ и $\mathcal{L} = \langle \mathcal{P} | \mathcal{R} \rangle$, то пару $(\mathcal{P}, \mathcal{R})$ назовём *конструктором* для множества $\mathcal{L}$. Если $\mathcal{P} = \{p_1, ...p_n\}$ и $\mathcal{R} = \{r_1, ..., r_m\}$, то вместо $\langle \mathcal{P} | \mathcal{R} \rangle$ иногда удобно писать $\langle p_1, ..., p_n | r_1, ..., r_m \rangle$.

Конструктор $\mathcal{K} = (\mathcal{P}, \odot)$ назовём *свободным склеечным*, если $\odot$ — свободная склейка. Мощностью card $\mathcal{K}$ такого конструктора назовём мощность множества $\mathcal{P}$.

Пусть $\mathcal{H}$ — некоторое множество деревьев. *Свободной склеечной размерностью* множества $\mathcal{H}$ назовём $\inf\{\mathrm{card}\ \mathcal{K}\}$, где $\mathcal{K}$ пробегает множество всех свободных склеечных конструкторов множества $\mathcal{H}$.

Звездой Z_n называется $(n+1)$-вершинное дерево, в котором есть вершина степени n.

Теорема 1. *Свободная склеечная размерность множества* $\mathcal{T}_0$ *равна* 3.

Доказательство. Из теоремы 8.1 [3] следует, что дерево устойчиво тогда и только тогда, когда в нём есть совершенное паросочетание. Отсюда следует, что n-вершинная цепь P_n неустойчива лишь при нечётном n.

Через d обозначим свободную склеечную размерность множества $\mathcal{T}_0$.

Докажем, что $d \neq 1$. Предположим противное: $\mathcal{T}_0 = \langle X \mid \odot \rangle$, где X — некоторое дерево. Тогда $X = Z_0$, так как $Z_0 \in \mathcal{T}_0$ и Z_0 нельзя склеить из других деревьев, кроме Z_0. Если $S_\odot(Z_0, Z_0) = \mathrm{Emp}$, то $Z_0 \odot Z_0 = \{Z_1\}$, но $Z_1 \notin \mathcal{T}_0$. Если $S_\odot(Z_0, Z_0)$ не определено или равно Z_0, то $\mathcal{T}_0 = \langle Z_0 \mid \odot \rangle$ — одноэлементное множество. Получено противоречие.

Докажем, что $d \neq 2$. Предположим противное: $\mathcal{T}_0 = \langle X, Y \mid \odot \rangle$, где X и Y — некоторые деревья. Так как Z_0 нельзя склеить из других деревьев, кроме Z_0, то одно из деревьев X или Y (для определённости, скажем, X) равно Z_0.

Очевидно, что $S_\odot(Z_0, Z_0) \neq \mathrm{Emp}$ (в противном случае имели бы $Z_1 \in Z_0 \odot Z_0 \subseteq \mathcal{T}_0$). Значит, $S_\odot(Z_0, Z_0)$ не определено или равно Z_0. Поэтому $Z_0 \odot Z_0 \subseteq \{Z_0\}$.

Так как Z_2 нельзя склеить из элементов множества $\mathcal{T}_0 \setminus \{Z_0\}$, то $Y = Z_2$.

Очевидно, что $S_\odot(Z_0, Z_2) \neq \mathrm{Emp}$ (иначе $P_4 \in Z_0 \odot Z_2$, но $P_4 \notin \mathcal{T}_0$). Аналогично, $S_\odot(Z_2, Z_0) \neq \mathrm{Emp}$.

Итак, $S_\odot(Z_0, Z_0) = Z_0$ или не определено, $S_\odot(Z_0, Z_2) = Z_0$ или не определено, $S_\odot(Z_2, Z_0) = Z_0$ или не определено. В любом из восьми возможных случаев можно утверждать, что

$$Z_0 \odot Z_0 \subseteq \{Z_0\}, \qquad Z_0 \odot Z_2 \subseteq \{Z_2\} \supseteq Z_2 \odot Z_0.$$

Если $S_\odot(Z_2, Z_2)$ не определено, то $Z_2 \odot Z_2 = \varnothing$, а $\mathcal{T}_0 = \langle Z_0, Z_2 \mid \odot \rangle$ — двухэлементное множество. Получено противоречие.

Если $S_\odot(Z_2, Z_2) = \mathrm{Emp}$, то $P_6 \in Z_2 \odot Z_2 \subseteq \mathcal{T}_0$ — противоречие.

Если $S_\odot(Z_2, Z_2) = Z_0$, то каждое дерево из $Z_2 \odot Z_2$ имеет пять вершин. Из пятивершинного дерева и дерева из множества $\{Z_0, Z_2\}$ нельзя склеить Z_3. Поэтому $Z_3 \notin \langle Z_0, Z_2 \mid \odot \rangle = \mathcal{T}_0$ — противоречие.

Если $S_\odot(Z_2, Z_2) = Z_1$, то $P_4 \in Z_2 \odot Z_2 \subseteq \mathcal{T}_0$ — противоречие.

Наконец, если $S_\odot(Z_2, Z_2) = Z_2$, то $Z_2 \odot Z_2 = \{Z_2\}$ и $\mathcal{T}_0 = \langle Z_0, Z_2 \mid \odot \rangle$ — двухэлементное множество. Получено противоречие.

Итак, $d \geqslant 3$.

На множестве всех деревьев определим бинарную многозначную операцию $\circ$. Если T_1 и T_2 — деревья, то множество $T_1 \circ T_2$ состоит из *всевозможных* деревьев, получающихся из T_1 и T_2 посредством Z_0-отождествления. Операция $\circ$ коммутативна. Она является свободной склейкой.

В [2] было доказано, что $\mathcal{T}_0 = \langle Z_0, Z_2, Z_3 \mid \circ \rangle$, поэтому $d \leqslant 3$. Теорема 1 доказана.

2. Плотные множества деревьев

Пусть $\mathcal{M}$ и $\mathcal{G}$, $\mathcal{M} \subseteq \mathcal{G}$, — некоторые совокупности множеств деревьев, $\mathcal{M}_n$ и $\mathcal{G}_n$ — множества всех n-вершинных деревьев из $\mathcal{M}$ и $\mathcal{G}$ соответственно. Будем говорить, что $\mathcal{M}$ *всюду плотно* в $\mathcal{G}$, если

$$\lim_{n \to \infty} \ |\mathcal{M}_n|/|\mathcal{G}_n| = 1.$$

В [2] показано, что $\mathcal{T}_0$ всюду плотно в $\mathcal{T}$. Обобщим это утверждение.

Напомним, что характеристический многочлен $|\lambda I - A_G|$ матрицы смежности графа G не зависит от нумерации вершин. Этот многочлен называется характеристическим многочленом графа G и обозначается через $G(\lambda)$. Множество всех его корней обозначается через $\mathrm{Spec}\ G$ и называется спектром графа G. Граф неустойчив тогда и только тогда, когда в его спектре есть нуль.

Объединение спектров всех деревьев обозначим через $\mathrm{Spec}\ \mathcal{T}$. Пусть $\lambda_1, ..., \lambda_n \in \mathrm{Spec}\ \mathcal{T}$, а $k_1, ..., k_n \in \mathbb{N}$. Рассмотрим множество всех деревьев, содержащих в спектре число λ_1 с кратностью не менее k_1, число λ_2 с кратностью не менее k_2, ..., число λ_n с кратностью не менее k_n. Обозначим это множество через $\mathcal{T}^{k_1,\dots,k_n}_{\lambda_1,\dots,\lambda_n}$. Например, $\mathcal{T}^1_0 = \mathcal{T}_0$.

Теорема 2. *Множество* $\mathcal{T}^{k_1,\dots,k_n}_{\lambda_1,\dots,\lambda_n}$ *всюду плотно в* $\mathcal{T}$.

Доказательство. Дерево называется *корневым*, если в нём зафиксирована некоторая вершина. Пусть лес F состоит из s корневых деревьев $T_1, ..., T_s$. Добавим к этому лесу компоненту, состоящую из одной вершины. Добавленную вершину соединим ребром с каждой зафиксированной вершиной (тем самым добавятся s новых рёбер). Полученный лес является деревом. Забудем о фиксации тех его вершин, которые были ранее зафиксированы. Зафиксируем в нём добавленную вершину. Полученное корневое дерево обозначим через $[T_1, ..., T_s]$ и назовём *связкой* леса F.

В спектральной теории графов известна (независимо доказанная многими авторами) следующая теорема о разрезании по разделяющей вершине.

Пусть в графе G есть разделяющая вершина. Тогда G можно представить в виде склейки двух графов X и Y посредством отождествления некоторой вершины u графа X и некоторой вершины v графа Y.

Граф, получающийся из X (Y) удалением вершины u (v), обозначим через X_u (Y_v).

Теорема о разрезании утверждает, что

$$G(\lambda) = X_u(\lambda)Y(\lambda) + X(\lambda)Y_v(\lambda) - \lambda X_u(\lambda)Y_v(\lambda).$$

Применяя эту формулу к дереву $[T_1, ..., T_s]$, получаем равенство

$$[T_1, ..., T_s](\lambda) = [T_1, ..., T_r](\lambda)T_{r+1}(\lambda)...T_s(\lambda) \\ + T_1(\lambda)...T_r(\lambda)[T_{r+1}, ..., T_s](\lambda) - \lambda T_1(\lambda)...T_s(\lambda).$$

Обратимся к множеству $\mathcal{T}^{k_1,...,k_n}_{\lambda_1,...,\lambda_n}$. Пусть $L_1, ..., L_n$ — такие деревья, что $\lambda_i \in \operatorname{Spec} L_i$ при любом i. Рассмотрим лес L, состоящий из $s = 2k_1 + ... + 2k_n$ компонент, среди которых $2k_1$ компонент изоморфны L_1, $2k_2$ компонент изоморфны L_2 и т. д. В каждой компоненте некоторым образом зафиксируем по вершине. Связку полученного леса обозначим через L_0. Возьмём любое $i \in \{1, ..., n\}$. Перенумеруем компоненты леса L так, что первые k_i компонент изоморфны L_i. Применим к L_0 формулу «разрезания», взяв $r = k_i$. Получим, что $L_0(\lambda)$ кратен $(L_i(\lambda))^{k_i}$. Поэтому $L_0 \in \mathcal{T}^{k_1,...,k_n}_{\lambda_1,...,\lambda_n}$.

Если H и T — корневые деревья, то через $H \circ T$ будем обозначать некорневое дерево, получающееся из H и T отождествлением фиксированных вершин и забыванием фиксирования.

Пусть H — произвольное корневое дерево. Применяя формулу «разрезания» к $H \circ L_0$, получаем, что $H \circ L_0 \in \mathcal{T}^{k_1,...,k_n}_{\lambda_1,...,\lambda_n}$.

В [4] доказано, что для любого корневого дерева F множество деревьев вида $H \circ F$ всюду плотно в $\mathcal{T}$. Теорема 2 доказана.

3. Периодические деревья

Двухкорневым деревом с упорядоченными корнями называется дерево, в котором отмечены две вершины; эти вершины называются корнями, причём один из корней считается первым, другой — вторым. Множество всех двухкорневых деревьев с упорядоченными корнями обозначается через $\ddot{\mathcal{T}}$. Через $\ddot{\mathcal{T}}_0$ ($\ddot{\mathcal{T}}_*$) обозначим множество всех неустойчивых (устойчивых) деревьев из $\ddot{\mathcal{T}}$.

Пусть $G \in \ddot{\mathcal{T}}$. Первый корень дерева G обычно обозначают через $\alpha(G)$, или просто α, если ясно, о каком дереве идет речь. Второй корень дерева G обозначают через $\beta(G)$ (или просто β).

На множестве $\ddot{\mathcal{T}}$ определена ассоциативная операция $\circ$ следующим образом: $G \circ F$ получается из G и F отождествлением $\beta(G)$ и $\alpha(F)$, причём $\alpha(G \circ F) \overset{def}{=} \alpha(G)$, $\beta(G \circ F) \overset{def}{=} \beta(F)$.

Если $T \in \ddot{\mathcal{T}}$, то дерево $\underbrace{T \circ T \circ \ \ldots \circ T}_{n \text{ раз}}$ обозначим через $P_n[T]$.

Теорема 3. 1) *Если $T \in \ddot{\mathcal{T}}_0$, то $P_n[T]$ неустойчиво при любом n.*

2) *Если $T \in \ddot{\mathcal{T}}_*$, то либо $P_n[T]$ неустойчиво только при чётном n, либо $P_n[T]$ неустойчиво только при $n \neq 1$. Каждая из этих двух возможностей действительно реализуется на некотором дереве из $\ddot{\mathcal{T}}_*$.*

Доказательство. Сначала введём несколько обозначений.

Если m — натуральное число, то символом P_m обозначают m-вершинную цепь. Естественно положить $P_0 = \mathrm{Emp}$. В спектральной теории графов принято, что характеристический многочлен графа Emp тождественно равен 1. Итак, $P_0(\lambda) = \mathrm{Emp}(\lambda) = 1$. Кроме того, удобно положить $P_{-1}(\lambda) \equiv 0$. Отметим, что при этом никакого графа P_{-1} мы не вводим в рассмотрение.

Пусть U — некоторое подмножество множества вершин дерева T. Тогда T_U означает граф, получающийся из T удалением всех вершин из множества U (например, если $T \in \ddot{\mathcal{T}}$, то T_α означает граф, в котором удалён первый корень). Если F — подграф дерева T и $V(F)$ — множество всех вершин подграфа F, то $T_{V(F)}$ обозначается через T_F.

Пусть $T \in \ddot{\mathcal{T}}$. Положим $T_{\alpha*\beta}(\lambda) = T_\alpha(\lambda) + T_\beta(\lambda) - \lambda T_{\alpha\beta}(\lambda)$ и $T_{[\alpha\beta]}(\lambda) = T_P(\lambda)$, где P — *вершинно-простой* путь с концами α и β.

Пусть $\lambda_0 \in \mathbb{C}$. В [1] доказано, что если $T_{[\alpha\beta]}(\lambda_0) \neq 0$, то

$$P_n[T](\lambda_0) = \left(T_{[\alpha\beta]}(\lambda_0)\right)^{n-1} P_{n-1}\left(\frac{T_{\alpha*\beta}(\lambda_0)}{T_{[\alpha\beta]}(\lambda_0)}\right) T(\lambda_0) - \lambda_0 \left(T_{[\alpha\beta]}(\lambda_0)\right)^n P_{n-2}\left(\frac{T_{\alpha*\beta}(\lambda_0)}{T_{[\alpha\beta]}(\lambda_0)}\right), \quad (1)$$

если же $T_{[\alpha\beta]}(\lambda_0) = 0$, то

$$P_n[T](\lambda_0) = (T_{\alpha*\beta}(\lambda_0))^{n-1}\, T(\lambda_0). \quad (2)$$

При некоторых значениях λ_0 формула (4) может содержать выражение 0^0. Считаем, что $0^0 = 1$.

Воспользуемся (1) и (2) для доказательства теоремы.

1) Пусть $T \in \ddot{\mathcal{T}}_0$. Из формул (1) и (2) видно, что $T(0)$ является множителем в $P_n[T](0)$. Поэтому $P_n[T]$ неустойчиво при любом n.

2) Пусть $T \in \ddot{\mathcal{T}}_*$. Как уже сообщалось выше (см. доказательство в пункте 1), дерево T устойчиво тогда и только тогда, когда в нём есть совершенное паросочетание. Отсюда следует, что устойчивое дерево имеет чётное число вершин, а лес с нечётным числом вершин неустойчив. Поэтому $T_{\alpha*\beta}(0) = 0$.

Пусть $T_{[\alpha\beta]}(0) \neq 0$. Из формулы (1) следует, что $P_n[T](0) = 0$ тогда и только тогда, когда $P_{n-1}(0) = 0$, т. е. цепь P_{n-1} неустойчива. Это равносильно тому, что n чётно.

Пусть $T_{[\alpha\beta]}(0) = 0$. Из равенства (2) следует, что $P_n[T](0) = 0^{n-1}T(0)$. Так как $T(0) \neq 0$, то $0^{n-1}T(0) = 0 \Leftrightarrow n - 1 \neq 0$.

Для завершения доказательства теоремы остаётся убедиться в том, что условия $T_{[\alpha\beta]}(0) \neq 0$ и $T_{[\alpha\beta]}(0) = 0$ реализуются на некоторых элементах из $\ddot{\mathcal{T}}_*$. Первое условие выполнено, например, для цепи P_2, в которой отмечены две вершины. Второе условие выполнено, например, для цепи P_4, в которой отмечены две вершины степени 2. Теорема 3 доказана.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Колмыков В. А.** О характеристических многочленах периодических графов // Дискретная математика. 2004. Т. 16, вып. 3. С. 153–159.
2. **Колмыков В. А.** Об устойчивых и неустойчивых деревьях // Дискретная математика. 2005. Т. 17, вып. 2. С. 150–152.
3. **Цветкович Д., Дуб М., Захс Х.** Спектры графов. Теория и применение. Пер. с англ. Киев: Наукова думка, 1984.
4. **Schwenk A. J.** Allmost all trees are cospectral // New directions in the theory of graphs. Proc. 3rd Ann Arbor Conf., Univ. Michigan (1971). New York: Academic Press, 1973. P. 275–307.

Адрес автора:

Воронежский гос. университет,
НИИ математики при ВГУ,
Университетская пл., 1,
394006 Воронеж,
Россия.

Статья поступила
17 августа 2005 г.

Переработанный вариант —
20 апреля 2007 г.