Kiegészítés a reakciórendszeres előadás színtisztán gráfelméleti részéhez

Boros Balázs

1. Incidenciamátrix

Definíció [irányított gráf incidenciamátrixa] Legyen $D = (V, A)$ irányított gráf, ahol $V = \overline{1, c}$ és $A = \overline{1, m}$. Ekkor a c-szer m-es

$$I_{i,k} = \begin{cases} -1, & \text{ha } i \xrightarrow{k}, \\ +1, & \text{ha } \xrightarrow{k} i, \\ 0, & \text{különben} \end{cases}$$

I mátrixot a D incidenciamátrixának nevezzük.

Tehát az incidenciamátrix minden oszlopa egy élhez tartozik. Minden oszlopban egy $+1$-es és egy -1-es szerepel, a többi helyen nullák. Minden sor pedig egy csúcshoz tartozik. Ha az i-edik csúcsból megy ki a k-adik él (vagyis k töve éppen i), akkor $I_{i,k} = -1$. Ha az i-edik csúcsba megy be a k-adik él (vagyis k feje éppen i), akkor $I_{i,k} = +1$. Ha az i-edik csúcs se nem töve, se nem feje a k-adik élnek, akkor $I_{i,k} = 0$.

Állítás Az I oszlopai lineárisan összefüggenek $\Leftrightarrow$ D-ben van (nem feltétlenül irányított) kör.

Bizonyítás "$\Leftarrow$" Tekintsünk egy kört (ami nem feltétlenül irányított, azaz nem feltétlenül állnak jó irányba a nyilak). Válasszuk ki az incidenciamátrixnak azon oszlopait, melyek ehhez a körhöz tartoznak. Válasszunk egy referenciairányt a körön (mondjuk óramutató járásának megfelelően). Tekintsük a kiválasztott oszlopoknak azt a lineáris kombinációját, ahol az együtthatóknak $+1$ és -1 az értékei, $+1$ akkor, ha az él a referenciairánynak megfelelően áll és -1 akkor, ha az él nem a referenciairánynak megfelelően áll. Gondoljuk meg, hogy ez a lineáris kombináció az $\mathbb{R}^c$-beli nullvektort adja.

"$\Rightarrow$" Tekintsük az oszlopok egy olyan lineárisan összefüggő részhalmazát, amely minimális abban az értelemben, hogy annak bármely részhalmaza már lineárisan független. Tekintsük a kiválasztott oszlopoknak egy nemtriviális lineáris kombinációját. Ebben a minimális választásnak köszönhetően minden együttható nemnulla. Vagyis ha például $I_{i,k} \neq 0$ (azaz i vagy a töve vagy a feje k-nak; k másik végpontját jelölje j_1), akkor kell lennie olyan k' élnek, aminek feje vagy töve szintén i (k' másik végpontját jelölje j_2):

$$j_1 \xrightarrow{k} i \xrightarrow{k'} j_2$$

A j_2 csúcsból hasonló okokból szintén tovább lehet menni. Az eljárás folytatásával előbb-utóbb visszaérünk egy olyan csúcsba, ahol már jártunk, és ezzel megvan a keresett (nem feltétlenül irányított) kör. Az is könnyen látható, hogy valójában minden kiválasztott élnek szerepelni kell a körben (ez is a minimalitási tulajdonság miatt van így). $\square$

Jelölje ℓ a D gráf összefüggő komponenseinek számát. Jelölje c_r, illetve m_r az r-edik komponensben levő csúcsok, illetve élek számát ($r \in \overline{1, \ell}$).

Következmény $\operatorname{rank} I = c - \ell$
Bizonyítás A rang egyenlő az incidenciamátrix oszlopainak egy maximális lineárisan független részhalmazának elemszámával. Az előző állítás szerint ehhez olyan élhalmazt kell tekinteni, mely nem tartalmaz kört. Tehát minden összefüggő komponensben egy feszítő fát kell venni. Ismert, hogy egy c_r csúcsú fa éleinek száma $c_r - 1$. Ezért $\sum_{r=1}^{\ell}(c_r - 1) = c - \ell$ az incidenciamátrix rangja. □

Az incidenciamátrix blokkdiagonális alakja:

$$I = \begin{bmatrix} I^1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & I^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & I^\ell \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(\sum_r c_r) \times (\sum_r m_r)}$$

Az incidenciamátrix egy másik blokkos alakja:

$$I = [I_1, I_2, \ldots, I_\ell] \in \mathbb{R}^{c \times (\sum_r m_r)}$$

Állítás $\operatorname{ran} I = \{v \in \mathbb{R}^c \mid v_{N_r+1} + v_{N_r+2} + \cdots + v_{N_r+c_r} = 0 \text{ minden } r \in \overline{1, \ell}\}$, ahol $N_r = \sum_{i=1}^{r-1} c_i$ ($r \in \overline{1, \ell}$).
Bizonyítás $\ell = 1$-re bizonyítunk, tetszőleges ℓ-re az incidenciamátrix blokkdiagonális alakjának segítségével könnyen látszik a bizonyítandó. Legyen tehát $\ell = 1$. Mivel az incidenciamátrix sorainak összege az $\mathbb{R}^m$-beli nullvektor, így $\operatorname{ran} I$ része az $\mathbb{R}^c$-beli csupa egyes vektorra merőleges altérnek (ami $c-1$ dimenziós). Másrészt az előző következmény miatt $\dim \operatorname{ran} I = c - 1$, így a két szóban forgó altér meg kell, hogy egyezzen. □

2. Áramok

Legyen $D = (V, A)$ irányított gráf és $T \subseteq V$. Legyen

$A_{\delta^{out}}(T) = \{(i,j) \in A \mid i \in T, j \in V \setminus T\}$ T-t elhagyó élek halmaza

$A_{\delta^{in}}(T) = \{(i,j) \in A \mid i \in V \setminus T, j \in T\}$ T-be belépő élek halmaza

Legyen $y : A \to \mathbb{R}$ tetszőleges függvény. Legyenek

$$\delta_y^{out}(T) = \sum_{(i,j) \in A_{\delta^{out}}(T)} y(i,j)$$

$$\delta_y^{in}(T) = \sum_{(i,j) \in A_{\delta^{in}}(T)} y(i,j)$$

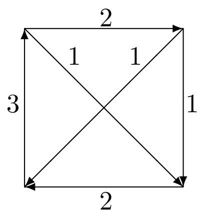
Definíció [áram] Legyen $D = (V, A)$ irányított gráf. Az $y : A \to \mathbb{R}$ függvényt áramnak nevezzük, ha $\delta_y^{out}(\{i\}) = \delta_y^{in}(\{i\})$ minden $i \in V$ esetén. (A feltételt szokás megmaradási szabálynak nevezni.)

Gondoljuk meg, hogy ekvivalens definícióhoz jutunk, ha a megmaradási szabályt az alábbi formában követeljük meg:

$$\delta_y^{out}(T) = \delta_y^{in}(T) \text{ minden } T \subseteq V \text{ esetén.}$$

Vagyis az $y : A \to \mathbb{R}$ függvényt akkor nevezzük áramnak, ha minden csúcs esetén az adott csúcsba befutó élekhez rendelt y értékek összege éppen megegyezik a csúcsból kimenő élekhez rendelt y értékekkel. "Ami befolyik, az kifolyik."

Elképzelhető ez úgy is, mint ha a gráf egy valódi vízvezetékhálózat lenne, az élek vízvezetékcsöveket reprezentálnak, a csúcsok pedig ezen csövek találkozását. A csövekre írt y értékek azt jelzik, hogy az adott csövön egységnyi idő alatt mekkora vízmennyiség folyik át. Természetes követelmény, hogy minden csomópontban teljesüljön a megmaradási szabály, vagyis hogy ugyanannyi víz folyjon be egységnyi idő alatt, mint amennyi kifolyik.



1. ábra. Példa áramra

Állítás Legyen $D = (V, A)$ irányított gráf. Legyen $y : A \to \mathbb{R}$ tetszőleges függvény. Ebből az y-ból képezzünk egy m koordinátájú $\underline{y}$ vektort, mégpedig ugyanúgy tegyük sorba y értékeit, mint ahogyan az incidenciamátrix oszlopai megfelelnek az éleknek. Ekkor y pontosan akkor áram, ha $\underline{y} \in \ker I$.
Bizonyítás Triviális. Gondoljuk meg! $\square$

Nevezzünk egy áramot pozitívnak, ha $y(i, j) > 0$ minden $(i, j) \in A$ esetén.

Állítás Legyen $D = (V, A)$ irányított gráf. Ekkor pontosan akkor létezik D-n pozitív áram, ha annak minden összefüggő komponense erősen összefüggő.
Bizonyítás "$\Rightarrow$" Tegyük fel, hogy van pozitív áram D-n. Legyen $D' = (V', A')$ egy összefüggő komponense. Ha ez nem erősen összefüggő, akkor létezik $T \subseteq V'$, hogy $A_{\delta^{out}}(T) = \emptyset$ és $A_{\delta^{in}}(T) \neq \emptyset$ (vagyis a két csúcshalmaz között csak az egyik irányban futnak élek). Gondoljuk meg, hogy erre a T halmazra nem teljesül a megmaradási szabály!

"$\Leftarrow$" Tegyük most fel, hogy D minden komponense erősen összefüggő. Ha adott egy irányított kör, akkor ahhoz természetes módon hozzá tudunk rendelni egy áramot. Mégpedig úgy, hogy a konkrét irányított kör éleihez 1-et rendeljen y, míg az összes többi élhez 0-t. Fejezzük be a bizonyítást azok felhasználásával, hogy a komponensek erős összefüggősége miatt minden élen át megy irányított kör, és hogy áramok összege áram! □

Látni fogjuk, hogy a reakciórendszerek vizsgálatakor különös szerep jut a pozitív áramoknak. Sőt, az olyan pozitív áramok fognak minket igazán érdekelni, amik egy extra tulajdonságot is teljesítenek. Azt már tudjuk, hogy milyen gráf-tulajdonság ekvivalens azzal, hogy létezzék a gráfon pozitív áram (nevezetesen minden komponensnek erősen összefüggőnek kell lenni). A következő tételből kiderül, hogy az erősen összefüggő gráfokhoz mindig van olyan pozitív áram is, amely a kívánt extra tulajdonságot is teljesíti. Sőt, a tétel bizonyos értelemben leírja az összes olyan áram szerkezetét, amik teljesítik a kívánt tulajdonságokat. Előbb azonban következzen egy egyszerű lineáris algebrai állítás, melyet a tétel bizonyítása során fel fogunk használni.

Állítás Legyenek $u, v \in \mathbb{R}^n_+$ lineárisan független vektorok. Ekkor $\mathrm{span}\{u, v\} \not\subseteq (\mathbb{R}^n_{\geq 0} \cup \mathbb{R}^n_{\leq 0})$. (Jelölje $\mathbb{R}^n_{\leq 0}$ a $-\mathbb{R}^n_{\geq 0}$ kúpot.)
Bizonyítás Könnyű. Gondoljuk meg! □

Tétel Legyen $D = (V, A)$ erősen összefüggő irányított gráf. Legyen $\kappa : A \to \mathbb{R}_+$ tetszőleges függvény. Ekkor létezik $y : A \to \mathbb{R}$ pozitív áram, amelyre

$$\frac{y(i, j_1)}{\kappa(i, j_1)} = \frac{y(i, j_2)}{\kappa(i, j_2)}$$

teljesül minden $(i, j_1), (i, j_2) \in A$ esetén. (Ha tehát egy csúcsból több él is indul ki, akkor van ez a feltétel.) Sőt, az ilyen y lényegében egyértelmű (elég egyet venni, és annak pontonkénti pozitív skalárszorosai kiadják az összeset).
Bizonyítás Legyen $i \in V$. Jelölje t_i az i-ből induló élek számát ($t_i = |A_{\delta^{out}}(i)|$). Ekkor $t_i - 1$ homogén lineáris feltételünk van az i csúcsban a κ-ból. Összesen $\sum_{i \in V}(t_i - 1) = (\sum_{i \in V} t_i) - c = m - c$ feltétel a κ-ból. Plusz még c feltétel abból, hogy y-nak áramnak kell lennie. Ez összesen m homogén lineáris feltétel az m ismeretlenre. Mivel az I sorainak összege a nullvektor, így van nemtriviális y, ami a pozitivitást leszámítva minden feltételt teljesít.

Most belátjuk, hogy a pozitivitást leszámítva minden feltételt teljesítő megoldásnak minden koordinátája azonos előjelű. Legyen y egy megoldás. A κ-s feltétel miatt az egy csúcsból induló éleken azonos előjelűek y értékei. Emiatt értelmes az alábbi:

$$V_- = \{i \in V \mid y(i, j) < 0 \text{ olyan élekre, melyeknek töve } i\}$$

$$V_0 = \{i \in V \mid y(i, j) = 0 \text{ olyan élekre, melyeknek töve } i\}$$

$$V_+ = \{i \in V \mid y(i, j) > 0 \text{ olyan élekre, melyeknek töve } i\}$$

Tegyük fel, hogy $V_- \neq \emptyset$ és $V_0 \cup V_+ \neq \emptyset$. Mivel D erősen összefüggő, ezért $A_{\delta^{out}}(V_-) \neq \emptyset$. Ekkor

$$0 > \delta_y^{out}(V_-) = \delta_y^{in}(V_-) = \delta_y^{out}(V_0 \cup V_+) \geq 0,$$

ellentmondás.

Tehát $V_- = \emptyset$ vagy $V_0 \cup V_+ = \emptyset$. Ha $V_0 \cup V_+ = \emptyset$, akkor $V = V_-$. Ha $V_- = \emptyset$, akkor $V = V_0 \cup V_+$. Az előzőhöz hasonlóan kapjuk, hogy szükségképpen $V_0 = \emptyset$ vagy $V_+ = \emptyset$.

Kapjuk tehát, hogy van csupa pozitív koordinátájú megoldás is. Az egyértelműség a tétel előtti állításból azonnal következik. $\square$

Legyen most D olyan gráf, melynek lehet több összefüggő komponense is, és mindegyik komponens erősen összefüggő. Ekkor az előző tétel alapján látható, hogy ilyenkor is létezik a kívánt tulajdonságú áram. Az összes ilyen pedig megkapható úgy, hogy veszünk egyet, és ennek az értékeit komponensenként megszorozzuk egy tetszőleges pozitív számmal.