УДК 004.021+519.17

**А.В. Коломийчук,** магистр, Одес. нац. политехн. ун-т

# ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ МЕТОД АНАЛИЗА ЗАДАЧИ ЭКСТРЕМАЛЬНОЙ НУМЕРАЦИИ ГРАФОВ (ЗАДАЧИ 2-СУММА)

*О.В. Коломійчук.* **Геометричний метод аналізу задачі екстремальної нумерації графів (задачі 2-сумма).** Представлено новий метод аналізу задачі 2-сумма та спектрального алгоритму. Він заснован на розгляді Евклідової геометрії перестановок. Новий метод дозволяє спростити докази оцінок цільової функції задачі та запропонувати нову інтерпретацію та обґрунтування евристичних властивостей спектрального алгоритму.

*А.В. Коломийчук.* **Геометрический метод анализа задачи экстремальной нумерации графов (задачи 2-сумма).** Представлен новый метод анализа задачи 2-сумма и спектрального алгоритма. Он основан на рассмотрении Евклидовой геометрии перестановок. Новый метод позволяет упростить доказательства оценок целевой функции задачи и предложить новую интерпретацию и обоснование эвристических свойств спектрального алгоритма.

*A.V. Kolomiychuk.* **The geometrical method of analysis of extreme graph enumeration problem (2-sum problem).** The new method for the analysis of the 2-sum problem and of the spectral algorithm is proposed. It is based on the consideration of the Euclidian geometry of permutations. The new method enables one to simplify proofs of bounds for the cost function of the problem and to propose the new interpretation and justification of heuristic properties of the spectral algorithm.

Рассматривается комбинаторная задача экстремальной нумерации графов известная под названием “*задача 2-сумма”*. Она состоит в минимизации суммы квадратов разностей номеров вершин графа, которые соединены ребром, на множестве всевозможных нумераций вершин данного графа [1].

*Нумерацией* графа $G(V,E)$ с $n$ вершинами называется перестановка $\mathbf{p}$ длины $n$, при этом вершина $\nu_1$ получает номер $p_1$, вершина $\nu_2$ — номер $p_2$ и т.д. Множество перестановок $\mathbf{p}$ длины $n$ обозначается как $P$. Матрица смежностей графа $G$ обозначается как $\mathrm{A}=\{a_{ij}\}$.

*Задача 2-сумма* может быть описана выражением

$$\sigma_2^2=\frac{1}{2}\sum_{a_{ij}\neq 0}(p_i-p_j)^2\to\min,\mathbf{p}\in P. \qquad (1)$$

Кроме чисто теоретического значения, изучение задачи (1) актуально в связи с необходимостью решения задач нумерации больших графов с различными целевыми функциями. Методы анализа и решения задачи 2-сумма могут служить основой для разработки методов решения родственных экстремальных задач, например: минимизации профиля/фронта разреженной матрицы, поиска минимальной линейно-упорядоченной нумерации графа, построения оптимального в каком-то смысле разреза графа и т.п. [2, 3], имеющих широкий спектр прикладных применений: переупорядочение больших разреженных матриц, сегментацию изображений, кластеризацию информационных массивов и др.

Задача 2-сумма, как и большинство родственных ей задач нумерации, является NP-полной, для приближенного ее решения предложен эвристический алгоритм, известный как спектральный [1]. Ключевую роль в нем играет т.н. вектор Фидлера [4,5], в последствии применявшийся при решении различных задач комбинаторной оптимизации [6,7].

Известен метод анализа задачи 2-сумма и спектрального алгоритма, основанный на ее сведении к квадратичной задаче о назначениях. Метод технически сложен, на его основе возможно лишь существенно ограниченное обоснование эвристических свойств спектрального алгоритма. Кроме того, получение оценок качества приближенных решений, генерируемых этим алгоритмом, применимо лишь к отдельным специфическим классам графов [8].

Предлагается геометрический метод анализа задачи 2-сумма, основанный на рассмотрении перестановок как векторов Евклидового пространства, в сочетании с анализом ослабленного (непрерывного) варианта той же задачи. Метод позволяет упростить доказательство оценок ее целевой функции и может служить основой для систематической геометрической интерпретации особенностей этой задачи, спектрального алгоритма и обоснования его эвристических свойств.

Рассматриваемые графы полагаются неориентированными и неимеющими петель; все векторы считаются столбцами размерности $n$; $n \geq 3$. Расстояние между векторами понимается в смысле евклидовой нормы; $\mathbf{u}$ — вектор, все компоненты которого — единицы.

*Лапласианом* графа $G$ называется матрица $\mathbf{Q}$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{D} - \mathbf{A} \quad , \tag{2}$$

где $\mathbf{D}$ — диагональная матрица степеней вершин.

Собственные значения $\mathbf{Q}$ обозначаются как $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq ... \leq \lambda_n$. Матрица $\mathbf{Q}$ — сингулярная М-матрица, поэтому $\lambda_k = 0$ $(1 \leq i \leq n)$ [1]. Собственный вектор, соответствующий $\lambda_k$ $(1 \leq k \leq n)$, обозначается $\mathbf{x}_k$ и называется $k$-м собственным вектором $\mathbf{Q}$. Поскольку $\lambda_1 = 0$, первым собственным вектором $\mathbf{x}_1$ можно считать любой ненулевой вектор. Так как $G$ — связный граф, матрица $\mathbf{Q}$ — неприводима.

В дальнейшем используются следующие свойства матрицы $\mathbf{Q}$:

— $\mathbf{x}^T\mathbf{Q}\mathbf{y} = \mathbf{y}^T\mathbf{Q}\mathbf{x}$; $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in R^n$ .; т.к. $\mathbf{Q}$ — симметричная;

— $\mathbf{Q}\mathbf{u} = \mathbf{u}^T\mathbf{Q} = 0$, что следует из определения (2).

Целевая функция задачи (1) может быть преобразована к виду [8]

$$\frac{1}{2}\min_{\mathrm{p}\in P}\sum_{a_{ij}\neq 0}(p_i - p_j)^2 = \min_{\mathrm{p}\in P}\left(\sum_{i=1}^{n} d_{ii}p_i^2 - 2\sum_{\substack{j<i \\ a_{ij}\neq 0}} p_i p_j\right) = \min_{\mathrm{p}\in P}\mathbf{p}^T\mathbf{D}\mathbf{p} - \mathbf{p}^T\mathbf{A}\mathbf{p} = \min_{\mathrm{p}\in P}\mathbf{p}^T\mathbf{Q}\mathbf{p}\ , \tag{3}$$

т.е. задача 2-сумма сводится к поиску минимума квадратичной формы лапласиана графа на множестве перестановок.

Идея спектрального алгоритма [1] состоит в ослаблении задачи 2-сумма и доказательстве того, что второй собственный вектор $\mathbf{x}_2$ лапласиана $\mathbf{Q}$ графа $G$ является точным решением этого варианта задачи. Решение затем используется для эффективного по вычислительной сложности приближенного решения исходной задачи (1).

Предлагается рассматривать *ослабленный (непрерывный) вариант задачи 2-сумма*, получаемый из (1) путем замены множества $P$ перестановок на множество $X$ векторов $\mathbf{x} \in R^n$,

$$\begin{cases} \mathbf{x}^T\mathbf{x} = 1, \\ \mathbf{x}^T\mathbf{u} = 0. \end{cases} \tag{4}$$

В таком случае задача (1) преобразуется к виду

$$\begin{cases} \mathbf{x}^T\mathbf{Q}\mathbf{x} \to \min, \\ \mathbf{x} \in X. \end{cases} \tag{5}$$

Минимум (максимум) непрерывной задачи (5) существует и достигается на втором ($n$-м) собственном векторе лапласиана $\mathbf{Q}$

$$\arg\min_{\mathbf{x}\in X}\{\mathbf{x}^T\mathbf{Q}\mathbf{x}\} = \mathbf{x}_2\ ;\ \arg\max\{\mathbf{x}^T\mathbf{Q}\mathbf{x}\} = \mathbf{x}_n\ ; \tag{6}$$

$$\min_{\mathbf{x}\in X}\{\mathbf{x}^T\mathbf{Q}\mathbf{x}\} = \lambda_2\ ;\ \max_{\mathbf{x}\in X}\{\mathbf{x}^T\mathbf{Q}\mathbf{x}\} = \lambda_n\ . \tag{7}$$

Этот результат является частным случаем теоремы Куранта-Фишера [9], а также может быть получен с помощью применения метода множителей Лагранжа.

Вектор $\mathbf{x}$ *индуцирует* вектор $\mathbf{y}$ (или эквивалентно $\mathbf{y}$ индуцирует $\mathbf{x}$), если выполняется условие

$$x_i \le x_j \Leftrightarrow y_i \le y_j, 1 \le i, j \le n.$$

*Спектральный алгоритм* для решения задачи (1) может быть сформулирован следующим образом:

— по заданному графу $G$ составить лапласиан $\mathbf{Q}$ (2);

— вычислить второй собственный вектор $\mathbf{x}_2$ лапласиана $\mathbf{Q}$;

— сгенерировать перестановку, индуцированную вектором $\mathbf{x}_2$.

При генерировании перестановки на последнем шаге ее компонента 1 помещается на то же место, что и минимальная компонента $\mathbf{x}_2$, компонента 2 на место второй по величине компоненты $\mathbf{x}_2$ и т.д. Таким образом, этот шаг имеет вычислительную сложность задачи сортировки.

На основе обобщенного варианта утверждения [8] можно объяснить эвристическую идею спектрального алгоритма.

*Лемма 1*. Пусть задан вектор $\mathbf{y}$ и множество $Z$, состоящее из $n!$ векторов — всевозможных перестановок фиксированного набора $n$ компонент. Тогда, вектор $\mathbf{z} \in Z$, индуцированный вектором $\mathbf{y}$, является ближайшим к нему вектором среди всех векторов этого множества. Если вектор $\mathbf{y}$ индуцирует несколько векторов из $Z$, все они будут ближайшими к нему.

*Доказательство*. Из определения евклидовой нормы следует тождество

$$\|\mathbf{y}-\mathbf{z}\| = \sqrt{(\mathbf{y}-\mathbf{z})^T(\mathbf{y}-\mathbf{z})} = \sqrt{\mathbf{y}^T\mathbf{y} + \mathbf{z}^T\mathbf{z} - 2\mathbf{y}^T\mathbf{z}}\,.$$

Поскольку векторы $\mathbf{z} \in \mathrm{Z}$ отличаются только порядком компонент, а вектор $\mathbf{y}$ зафиксирован, скалярные произведения $\mathbf{y}^T\mathbf{y}$ и $\mathbf{z}^T\mathbf{z}$ — положительные константы, и $\mathbf{z}^T\mathbf{z}$ не зависит от выбора $\mathbf{z}$. Таким образом, вектор $\mathbf{z}$, соответствующий минимуму расстояния $\|\mathbf{y}-\mathbf{z}\|$, должен соответствовать максимуму скалярного произведения $\mathbf{y}^T\mathbf{z}$. Можно показать, что это справедливо только для вектора $\mathbf{z}$, индуцированного вектором $\mathbf{y}$. От противного: пусть некоторый вектор $\hat{\mathbf{z}} \in Z$ не индуцируется вектором $\mathbf{y}$. В этом случае, по крайней мере, для двух компонент этого вектора $\hat{z}_i$ и $\hat{z}_j$ выполняется неравенство $\hat{z}_i < \hat{z}_j$, т.е. $\hat{z}_j = \hat{z}_i + a$, $a > 0$ и $y_i > y_j$. Если компоненты $\hat{z}_i$ и $\hat{z}_j$ поменять местами, а остальные компоненты оставить на своих местах, то поскольку $a > 0$ и $y_j - y_i < 0$, скалярное произведение $\mathbf{y}^T\hat{\mathbf{z}}$ увеличивается

$$y_i\hat{z}_i + y_j\hat{z}_j = y_i(\hat{z}_j - a) + y_j(\hat{z}_i + a) = y_i\hat{z}_j + y_j\hat{z}_i + a(y_j - y_i) < y_i\hat{z}_j + y_j\hat{z}_i\,.$$

Противоречие заключается в том, что вектор $\hat{\mathbf{z}}$ не соответствует максимуму скалярного произведения $\mathbf{y}^T\mathbf{z}$, т.е. доказательство от противного завершено.

Таким образом, если вектор $\mathbf{y}$ индуцирует несколько векторов из $Z$, то все они будут находиться на одинаковом расстоянии от $\mathbf{y}$ и будут ближайшими к нему.

Из леммы 1 следует, что перестановка, индуцированная вектором $\mathbf{x}_2$, является ближайшей к нему среди всех перестановок.

Таким образом, на последнем шаге спектрального алгоритма осуществляется переход от вектора $\mathbf{x}_2$ — точного решения непрерывной задачи (5) — к ближайшей к нему перестановке, которая рассматривается как приближенное решение дискретной задачи (1). Можно считать, что эвристическая идея спектрального алгоритма основывается на предположении о том, что рост значения целевой функции (1) при таком переходе будет не слишком велик, и выбранная перестановка окажется хорошим приближением к точному решению.

Предлагаемый геометрический анализ задачи (1) и спектрального алгоритма предполагает рассмотрение перестановок как векторов Евклидового пространства.

Следующие тождества элементарны

$$1+2+...+n = \mathbf{p}^T\mathbf{u} = n(n+1)/2,$$
$$1^2+2^2+...+n^2 = \mathbf{p}^T\mathbf{u} = n(n+1)(2n+1)/6. \tag{8}$$

Вводится множество $V$ векторов $\mathbf{v}\in R^n$, удовлетворяющих условиям

$$\mathbf{v}^T\mathbf{u} = n(n+1)/2,$$
$$\mathbf{v}^T\mathbf{v} = n(n+1)(2n+1)/6. \tag{9}$$

Очевидно $P\subset V$.

Рассмотрим отображение множества $V$ на множество $X$, заданное аффинным преобразованием

$$\mathbf{x} = \alpha(\mathbf{v}+\beta\mathbf{u}),\ \alpha,\beta\in R, \alpha\neq 0\,. \tag{10}$$

Константы α и β могут быть определены из условий (4) и (9)

$$\alpha = \sqrt{12/n(n^2-1)}\,,\ \ \beta = -(n+1)/2\,.$$

Нетрудно убедиться, что обратное отображение есть аффинное преобразование с константами $\alpha'$ и $\beta'$

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\alpha}(\mathbf{x}-\alpha\beta\mathbf{u}) = \alpha'(\mathbf{x}+\beta'\mathbf{u}), \tag{11}$$

где $\alpha' = 1/\alpha = \sqrt{n(n^2-1)/12},\quad \beta' = -\alpha\beta = \sqrt{3(n+1)/n(n-1)}\,.$ (12)

Пусть $\widetilde{X}$ обозначает множество образов перестановок $P$, получаемых по (10). Векторы-элементы $\widetilde{X}$ будут называться *представителями* соответствующих перестановок. Очевидно, что поскольку $P\subset V$, то и $\widetilde{X}\subset X$.

*Лемма 2.* $\breve{\mathbf{x}}^T\mathbf{Q}\breve{\mathbf{x}} > \hat{\mathbf{x}}^T\mathbf{Q}\hat{\mathbf{x}} \Leftrightarrow \breve{\mathbf{v}}^T\mathbf{Q}\breve{\mathbf{v}} > \hat{\mathbf{v}}^T\mathbf{Q}\hat{\mathbf{v}}$, а также $\breve{\mathbf{x}}^T\mathbf{Q}\breve{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{x}}^T\mathbf{Q}\hat{\mathbf{x}} \Leftrightarrow \breve{\mathbf{v}}^T\mathbf{Q}\breve{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{v}}^T\mathbf{Q}\hat{\mathbf{v}}$ для любых $\breve{\mathbf{x}} = \alpha(\breve{\mathbf{v}}+\beta\mathbf{u})$; $\hat{\mathbf{x}} = \alpha(\hat{\mathbf{v}}+\beta\mathbf{u})$; $\breve{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{x}}\in X$; $\breve{\mathbf{v}},\hat{\mathbf{v}}\in V$.

*Доказательство* следует из (10) и (11), а также тождества

$$(\alpha(\mathbf{y}+\beta\mathbf{u}))^T\mathbf{Q}(\alpha(\mathbf{y}+\beta\mathbf{u})) = \alpha^2\mathbf{y}^T\mathbf{Q}\mathbf{y}.$$

Поэтому, вместо непосредственного рассмотрения множества $P$ перестановок, можно эквивалентно рассматривать задачу (1) на множестве $X$.

Таким образом, третий шаг спектрального алгоритма можно рассматривать как два последовательных перехода:

— переход от вектора $\mathbf{x}_2$ к индуцированному им вектору $\tilde{\mathbf{x}}^*\in\widetilde{X}$, т.е. ближайшему вектору-представителю перестановки в соответствии с леммой 1;

— переход от вектора-представителя $\tilde{\mathbf{x}}^*$ к соответствующей перестановке.

Замена множества $P$ перестановок на множество $X$ векторов позволяет получить более простое доказательство известной теоремы [4].

*Теорема 1.* Для задачи (1) справедливы следующие оценки ее целевой функции:

$$(1/12)\lambda_2 n(n-1)(n+1) \le \sigma_2^2 \le (1/12)\lambda_n n(n-1)(n+1)\,.$$

*Доказательство* справедливости оценки снизу.

Поскольку $\widetilde{X}\subset X$, то

$$\min_{\tilde{\mathbf{x}}\in\widetilde{X}}\{\tilde{\mathbf{x}}^T\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{x}}\} \ge \min_{\mathbf{x}\in X}\{\mathbf{x}^T\mathbf{Q}\mathbf{x}\}\,,$$

и из (7) следует, что

$$\min_{\tilde{\mathbf{x}}\in\widetilde{X}}\{\tilde{\mathbf{x}}^T\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{x}}\} \ge \lambda_2\,.$$

С учетом леммы 2 справедливо неравенство

$$\min_{\mathbf{p}\in P}\{\mathbf{p}^T\mathbf{Q}\mathbf{p}\} = (\alpha')\min_{\tilde{\mathbf{x}}\in\tilde{X}}\{\tilde{\mathbf{x}}^T\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{x}}\} \geq (\alpha')^2\lambda_2 .$$

Подстановка $\alpha'$ из (12) завершает доказательство.

Справедливость оценки сверху доказывается аналогично.

Интерес представляет геометрическая интерпретация множеств $X$ и $\widetilde{X}$. Уравнение $\mathbf{x}^T\mathbf{x} = 1$ (4) определяет $n$-мерную гиперсферу единичного радиуса с центром в начале координат, а уравнение $\mathbf{x}^T\mathbf{u} = 0$ — гиперплоскость с нормалью $\mathbf{u}$, проходящую через начало координат. Поэтому $X$ есть $(n-1)$-мерная гиперсфера (далее сфера), получаемая сечением $n$-мерной сферы $n$-мерной гиперплоскостью, проходящей через ее центр.

Множество $\widetilde{X}$ представляет собой $(n-1)$-мерный многогранник, вершины которого лежат на сфере $X$. Можно показать, что ближайшими к друг другу перестановками являются те, которые могут быть получены друг из друга перестановкой пары компонент, отличающихся на единицу; например, (1; 2; 3; 4) и (2; 1; 3; 4). Поскольку (10) — аффинное преобразование, многогранники перестановок и представителей перестановок подобны. Если $n = 4$, то перестановки лежат в одной гиперплоскости мерного пространства т.е. в трехмерном пространстве.

Теперь можно проанализировать увеличение значения целевой функции задачи (5) при переходе от вектора $\mathbf{x}_2$ к ближайшему к нему вектору $\tilde{\mathbf{x}}^* \in \widetilde{X}$. Расстояние между векторами, лежащими на сфере $X$, определяется их скалярным произведением, поскольку

$$\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\| = \sqrt{(\mathbf{x}-\mathbf{y})^T(\mathbf{x}-\mathbf{y})} = \sqrt{2(1-\mathbf{x}^T\mathbf{y})},\ \ \mathbf{x},\mathbf{y}\in X .$$

В соответствии с (9) и (10) $\mathbf{x}\in X \Leftrightarrow -\mathbf{x}\in X$, а при замене аргумента $\mathbf{x}$ целевой функции задачи (5) на $-\mathbf{x}$ ее значение, очевидно, не изменяется. Поэтому можно для удобства полагать, что скалярное произведение любой пары рассматриваемых векторов принадлежит интервалу $[0, 1]$.

Если $\tilde{\mathbf{x}}^* \neq \mathbf{x}_2$, можно считать, что конец вектора $\tilde{\mathbf{x}}^*$ лежит на дуге сферы $X$, соединяющей $\mathbf{x}_2$ и некоторый ортогональный ему вектор $\mathbf{z}\in X$, $\mathbf{z}^T\mathbf{x}_2 = 0$, т.е.

$$\tilde{\mathbf{x}}^* = \frac{a\mathbf{x}_2 + (1-a)\mathbf{z}}{\|a\mathbf{x}_2 + (1-a)\mathbf{z}\|},\ \ a\in[0, 1]. \tag{12}$$

Вектор $\mathbf{z}$ будет называться *сферическим ортогональным продолжением* вектора $\mathbf{x}_2$ через вектор $\tilde{\mathbf{x}}^*$. Из (12) следует, что

$$(\mathbf{x}_2^T\tilde{\mathbf{x}}^*)\|a\mathbf{x}_2 + (1-a)\mathbf{z}\| = a ,$$

$$(\mathbf{x}_2^T\tilde{\mathbf{x}}^*)^2(a^2 + (1-a)^2) = a^2. \tag{13}$$

С учетом (13) целевая функции задачи (5) на векторах-представителях перестановок может быть представлена в виде

$$\tilde{\mathbf{x}}^{*T}\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{x}}^* = \frac{a^2\lambda_2 + (1-a)^2\mathbf{z}^T\mathbf{Q}\mathbf{z}}{a^2 + (1-a)^2} = (\mathbf{x}_2^T\tilde{\mathbf{x}}^*)^2\lambda_2 + (1-(\mathbf{x}_2^T\tilde{\mathbf{x}}^*)^2)\mathbf{z}^T\mathbf{Q}\mathbf{z}. \tag{14}$$

На основе разложения (14) легко видеть, что целевая функция задачи (5) строго возрастает вдоль дуги, соединяющей $\mathbf{x}_2$ и $\mathbf{z}$, а при фиксированном расстоянии от $\mathbf{x}_2$ до $\tilde{\mathbf{x}}^*$ ее значение определяется величиной $\mathbf{z}^T\mathbf{Q}\mathbf{z}$.

Таким образом, возрастание целевой функции задачи (5) при переходе от $\mathbf{x}_2$ к $\tilde{\mathbf{x}}^*$ зависит как от расстояния между $\mathbf{x}_2$ и $\tilde{\mathbf{x}}^*$ (значение целевой функции увеличивается по мере его увеличения), так и от направления, в котором происходит переход, т.е. от значения целевой функции на сферическом ортогональном продолжении вектора $\mathbf{x}_2$ через вектор $\tilde{\mathbf{x}}^*$.

Матрица $\mathbf{Q}$ — нормальная матрица, поскольку она симметрична, а для нормальной матрицы существует ортонормированная система собственных векторов [9]. Приняв $\mathbf{x}_1 = (1/\sqrt{n})\mathbf{u}$, можно получить ортонормированную систему собственных векторов $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, ..., \mathbf{x}_n\}$, $\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j = 0$, $1 \le i, j \le n$, $i \ne j$, которая может служить базисом пространства $R^n$. Поскольку $\tilde{\mathbf{x}}^{*T}\mathbf{u} = 0$, в указанном базисе вектор $\tilde{\mathbf{x}}^*$ может быть представлен в виде линейной комбинации

$$\tilde{\mathbf{x}}^* = a_2\mathbf{x}_2 + a_3\mathbf{x}_3 + ... + a_n\mathbf{x}_n, \tag{15}$$

при этом

$$\tilde{\mathbf{x}}^{*T}\tilde{\mathbf{x}}^* = a_2^2 + a_3^2 + ... + a_n^2 = 1; \quad \mathbf{x}_i^T\tilde{\mathbf{x}}^* = a_i, \quad 2 \le i \le n. \tag{16}$$

Из (16) следует разложение

$$\tilde{\mathbf{x}}^{*T}\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{x}}^* = a_2^2\lambda_2 + a_3^2\lambda_3 + ... + a_n^2\lambda_n \le a_2^2\lambda_2 + (a_3^3 + ...a_n^2)\lambda_n = a_2^2\lambda_2 + (1 - a_2^2)\lambda_n. \tag{17}$$

Если принять $\mathbf{z} = \arg\max_{\mathbf{x}\in Z}\{\mathbf{x}^T\mathbf{Q}\mathbf{x}\} = \mathbf{x}_n$, то получен тот же вид разложения, что и в (14).

*Лемма 3*. Справедливы следующие оценки приближенного решения задачи 2-сумма, полученного по спектральному алгоритму

$$(\mathbf{x}_2^T\tilde{\mathbf{x}}^*)^2\lambda_2 + (1 - (\mathbf{x}_2^T\tilde{\mathbf{x}}^*)^2)\lambda_3 \le \tilde{\mathbf{x}}^{*T}{}_2 Q\tilde{\mathbf{x}}^* \le (\mathbf{x}_2^T\tilde{\mathbf{x}}^*)^2\lambda_2 + (1 - (\mathbf{x}_2^T\tilde{\mathbf{x}}^*)^2)\lambda_{n,},$$

где $\tilde{\mathbf{x}}^* \in \tilde{X}$ — вектор-представитель перестановки, ближайшей к $\mathbf{x}_2$, т.е. $\mathbf{x}_2$ индуцирует $\tilde{\mathbf{x}}^*$.

*Доказательство* оценки сверху следует из (17) или (14) с использованием (6) и (7).

Оценка снизу доказывается аналогично.

Можно сделать вывод о том, что качество эвристического решения задачи 2-сумма, полученного по спектральному алгоритму, существенно зависит от взаимного геометрического расположения векторов $\mathbf{x}_2$ и $\tilde{\mathbf{x}}^*$, а также их расположения относительно других собственных векторов лапласиана $\mathbf{Q}$. “Наихудшим” направлением перехода от $\mathbf{x}_2$ к $\tilde{\mathbf{x}}^*$ можно считать дугу, соединяющую $\mathbf{x}_2$ и $\mathbf{x}_n$, хотя такое “неудачное” направление может компенсироваться близостью расположения $\tilde{\mathbf{x}}^*$ к $\mathbf{x}_2$.

В соответствии с разложением (17) можно интерпретировать эвристическую идею спектрального алгоритма как максимизацию произведения $(\mathbf{x}_2^T\tilde{\mathbf{x}}^*)^2 = a_2^2$, благодаря чему ожидается уменьшение коэффициентов при больших собственных значениях в разложении (14). Из этого разложения следует, что даже при использовании всех пар собственных значений и векторов лапласиана $\mathbf{Q}$, задача выбора такого вектора $\tilde{\mathbf{x}} \in \tilde{X}$, который минимизировал бы $\tilde{\mathbf{x}}^T\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{x}}$ хотя бы с гарантированным приближением, остается трудной. Это обусловлено присутствием в разложении (14) целевой функции квадратов коэффициентов разложения вектора $\tilde{\mathbf{x}}$ по базису собственных векторов $\mathbf{Q}$. Кроме того, точное вычисление всех собственных значений и векторов матриц большой размерности можно считать неосуществимым на практике.

Таким образом, предложенный геометрический метод анализа задачи 2-сумма позволил:

— доказать оценки целевой функции задачи через собственные значения лапласиана графа более простым способом по сравнению с известным [8];

— дать геометрическую интерпретацию спектрального алгоритма и на этой основе предложить новое обоснование его эвристических свойств;

— получить оценки погрешности приближенных решений задачи 2-сумма, получаемых по спектральному алгоритму через собственные значения лапласиана графа.

Представляет интерес проведение вычислительного эксперимента с большими разреженными матрицами, характерными для приложений, с целью апробации оценок и выявления особенностей “патологичных” для спектрального алгоритма экземпляров рассматриваемой задачи. Кроме того, остается актуальным получение более точных нетривиальных оценок погрешности приближенных решений задачи 2-сумма, генерируемых спектральным алгоритмом, которые могли бы учитывать одновременно и особенности геометрии перестановок и специфику матриц-лапласианов.

**Литература**


1. Barnard, S.T. A spectral algorithm for envelope reduction of sparse matrices. / S.T. Barnard, A. Pothen, H.D. Simon // Numer. Linear Algebra Appl. — 1995. — Vol. 2, № 4. — P. 317 — 334.
2. Hendrickson, B. An improved spectral graph partitioning algorithm for mapping parallel computations. / B. Hendrickson, R. Leleand // SIAM J. Sci. Comput. — 1995. — Vol. 16. — P. 452 — 469.
3. Pothen, A. Partitioning sparse matrices with eigenvectors of graphs / A. Pothen, H.D. Simon, K.P. Liou // SIAM J. Matrix Anal. Appl. — 1990. — Vol. 11. — P. 430 — 452.
4. Fiedler, M. Algebraic connectivity of graphs / M. Fiedler // Czech. Math. J. — 1973. — Vol. 23(98). — P. 298 — 305.
5. Fiedler, M. A property of eigenvectors of nonnegative symmetric matrices and its application to graph theory / M. Fiedler // Czech. Math. J. — 1975. — Vol. 25(100). — P. 619 — 633.
6. Juvan, M. Optimal linear labeling and eigenvalues of graphs / M. Juvan, B. Mohar // Discr. Appl. Math. — 1992 — Vol. 36. — P. 153 — 168.
7. Mohar, B. Eigenvalues in combinatorial optimization / B. Mohar, S. Poljak // Combinatorial and Graph-Theoretical Problems in Linear Algebra. IMA Volumes in Mathematics and its applications. — 1993. — Vol. 50. — P. 107 — 152.
8. George, J.A. An analysis of spectral envelope reduction via quadratic assignment problems / J.A. George, A. Pothen // SIAM J. Matrix Anal. Appl. — 1997. — Vol. 18, № 3. — P. 706 — 732.
9. Хорн, Р. Матричный анализ: Пер. с англ. / Р Хорн, Ч. Джонсон.— М.: Мир, 1989. — 655 с.


Рецензент д-р техн. наук, проф. Одес. нац. политехн. ун-та Крылов В.Н.

Поступила в редакцию 3 декабря 2008 г.