

LINMA1691 : Théorie des graphes

Devoir 3 : Réseau cristallin

Contexte

En rentrant d'une soirée arrosée en Casa, vous faites votre arrêt habituel au Goldway pour un petit casse-croûte nocturne. Vous décidez subitement d'examiner les grains de sel servis avec votre paquet de frites et vous vous demandez pourquoi ils forment des cristaux si réguliers et transparents. En rassemblant vos souvenirs embrumés de cours de physique, vous vous souvenez que c'est dû à la structure des atomes qui les composent.

Un cristal est un solide dont les atomes forment un réseau ordonné périodique, c'est-à-dire que la même structure microscopique se répète sur toute la taille du cristal. Cette structure se retrouve reproduite naturellement à l'échelle macroscopique, comme pour les cristaux de gallium ci-dessous. De nombreux éléments observés couramment ont une structure cristalline : citons par exemple les flocons de neige, le sel de table (NaCl) et la pyrite.

En tant qu'étudiant zélé du cours de théorie des graphes, vous vous dites que les cristaux semblent pouvoir être modélisés naturellement sous forme de graphes. On pourrait imaginer que chaque atome dans le cristal corresponde à un noeud du graphe. Considérons ici le sel de table, dont la structure est donnée ci-dessous. C'est un composé ionique, c'est-à-dire que la molécule NaCl se retrouve dans le cristal séparée en ions Na^+ et Cl^- . Il est légitime de se demander comment ces ions vont s'agencer dans le cristal. On sait qu'une structure physique est stable si elle correspond à un minimum local de l'énergie. Intuitivement, on peut se convaincre que l'énergie électrostatique sera minimisée si les plus proches voisins de tout ion positif sont des ions négatifs (et vice-versa), afin de maximiser l'attraction coulombienne. Puisque la structure est périodique, on doit pouvoir identifier une structure minimale qui se répète indéfiniment dans le cristal : c'est la maille fondamentale du cristal. Si on modélise un tel cristal par un graphe dans lequel chaque noeud correspond à un ion et chaque arête pointe vers un plus proche voisin de l'ion, il doit donc exister une décomposition du graphe en sous-graphes tous identiques.

Concrètement, considérons un graphe dont tous les sommets sont de degré 6. Cela correspond au réseau de NaCl dans le cas où on imposerait des conditions périodiques au bord (on néglige les effets de bord en somme). Nous vous demandons de déterminer si le graphe peut être décomposé en sous-graphes $K_{1,6}$. On

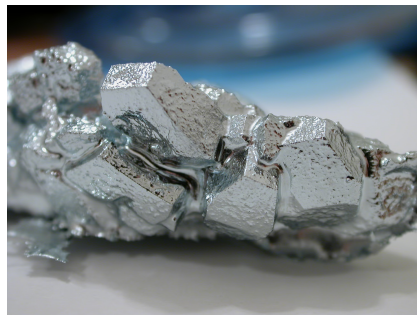


Figure 1: Cristaux de gallium

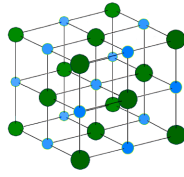


Figure 2: Structure du cristal de NaCl

ignorera ici d'autres potentielles conditions sur le graphe venant de son interprétation physique : structure 3D, etc.

Input de la fonction *decomposition*

L'input vous est donné sous la forme d'arguments d'une fonction à compléter : *decomposition*($|V|$, *adj*).

V est l'ensemble des noeuds du graphe ($|V| \leq 10^5$), et *adj* est une liste d'adjacence du graphe. L'indexation des noeuds commence à 0. Tous les noeuds du graphe ont un degré de 6.

Output de la fonction *decomposition*

Il vous est demandé de compléter la fonction *decomposition*, qui devra retourner "True" s'il existe une liste de sous-graphes isomorphes à $K_{1,6}$ tel que le graphe est l'union de ces sous-graphes, et que chaque arête apparaît exactement une fois dans ces sous-graphes. La fonction retourne "False" sinon.

Autrement dit, vous devez déterminer si le graphe peut se décomposer en sous-graphes isomorphes à $K_{1,6}$ disjoints sur les arêtes. Notez qu'un noeud peut apparaître dans plusieurs de ces sous-graphes.

Nous attendons un algorithme de complexité temporelle $\mathcal{O}(V + E)$.

Consignes

Vous devez soumettre votre implémentation de la méthode sur l'activité Ingenious¹ du même nom.

Le langage de programmation est **Python 3** (version 3.5).

Deadline : Mercredi 1 décembre 2021, 22h00. La deadline est stricte : il n'est plus possible de soumettre après cette date.

Contact : charles.massart@student.uclouvain.be et brieuc.pinson@uclouvain.be

¹<https://ingenious.info.ucl.ac.be>