Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. А. Колмыков, О характеристических многочленах периодических графов, *Дискрет. матем.*, 2004, том 16, выпуск 3, 153–159

DOI: <https://doi.org/10.4213/dm169>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.174.149.18

26 апреля 2023 г., 05:39:23

О характеристических многочленах периодических графов

© 2004 г. В. А. Колмыков

Рассматриваются два типа периодических графов, цепное и циклическое продолжения произвольного графа. Находятся формулы, выражающие характеристические многочлены таких конструкций, через многочлены основного графа, его подграфов и многочлены цепи и цикла. Проиллюстрированы некоторые применения этих результатов.

1. Характеристический многочлен графа

В статье рассматриваются конечные графы без петель и кратных ребер. Несмотря на известную узость такого класса графов, он, однако, оказывается вполне достаточным для большинства вопросов спектральной теории графов и ее приложений в химии.

Характеристический многочлен матрицы смежности графа G не зависит от нумерации вершин, он называется характеристическим многочленом графа и обозначается $G(\lambda)$, характеристический многочлен пустого графа по определению тождественно равен единице. Подробнее об этом см. [1].

Двухкорневым графом с упорядоченными корнями называется граф, в котором отмечены две вершины, эти вершины называются корнями, причем один из корней считается первым, другой вторым. Пусть G — двухкорневой граф с упорядоченными корнями. Первый корень G обычно обозначают $\alpha(G)$ или просто α , если ясно, о каком графе идет речь. Второй корень графа G обозначают $\beta(G)$ или просто β .

Пусть U — некоторое подмножество множества вершин графа G , тогда G_U означает граф, получающийся из G удалением всех вершин множества U (например, G_α означает граф, в котором удален первый корень). Если F — подграф графа G и $V(F)$ — множество всех вершин подграфа F , то $G_{V(F)}$ коротко обозначается G_F .

Для двухкорневого графа G с упорядоченными корнями положим

$$G_{\alpha*\beta}(\lambda) = G_\alpha(\lambda) + G_\beta(\lambda) - \lambda G_{\alpha\beta}(\lambda),$$

$$G_{[\alpha\beta]}(\lambda) = \sum_{\alpha \cdot P \cdot \beta} G_P(\lambda),$$

где суммирование ведется по всем вершинно-простым путям P с концами α и β . В [2] доказано, что

$$G_{[\alpha\beta]}(\lambda) = \sqrt{G_\alpha(\lambda)G_\beta(\lambda) - G(\lambda)G_{\alpha\beta}(\lambda)}.$$

Здесь символ корня означает арифметический квадратный корень в кольце многочленов, то есть $\sqrt{f} = g \iff f = g^2$ и старший коэффициент g неотрицателен.

2. Периодические графы

На множестве двухкорневых графов с упорядоченными корнями определена ассоциативная операция склейки $\circ$ следующим образом: $G \circ F$ получается из G и F отождествлением $\beta(G)$ и $\alpha(F)$, причем по определению

$$\alpha(G \circ F) = \alpha(G), \quad \beta(G \circ F) = \beta(F).$$

Если H — двухкорневой граф с упорядоченными корнями, то граф $H \circ H \circ \dots \circ H$ (с $n-1$ операцией склейки) называется периодическим цепным графом и обозначается $P_n[H]$. Это двухкорневой граф с упорядоченными корнями. Если $n \geq 3$, то граф, получающийся из $P_n[H]$ с помощью отождествления его корней, называется периодическим циклическим графом и обозначается $C_n[H]$.

Ниже мы используем стандартные обозначения P_k и C_k соответственно для k -вершинной цепи и k -вершинного цикла. Кроме того, удобно положить $P_0(\lambda) \equiv 1$ и $P_{-1}(\lambda) \equiv 0$.

Теорема 1. Пусть H — двухкорневой граф с упорядоченными корнями.

Для тех λ , для которых $H_{[\alpha\beta]}(\lambda) \neq 0$, справедливы равенства

$$P_n[H](\lambda) = (H_{[\alpha\beta]}(\lambda))^{n-1} P_{n-1} \left(\frac{H_{\alpha*\beta}(\lambda)}{H_{[\alpha\beta]}(\lambda)} \right) H(\lambda) - \lambda (H_{[\alpha\beta]}(\lambda))^n P_{n-2} \left(\frac{H_{\alpha*\beta}(\lambda)}{H_{[\alpha\beta]}(\lambda)} \right),$$

$$C_n[H](\lambda) = (H_{[\alpha\beta]}(\lambda))^n C_n \left(\frac{H_{\alpha*\beta}(\lambda)}{H_{[\alpha\beta]}(\lambda)} \right).$$

Для тех λ , для которых $H_{[\alpha\beta]}(\lambda) = 0$, справедливы равенства

$$P_n[H](\lambda) = (H_{\alpha*\beta}(\lambda))^{n-1} H(\lambda),$$

$$C_n[H](\lambda) = (H_{\alpha*\beta}(\lambda))^n.$$

Отметим, что утверждение о $P_n[H]$ доказано совместно с В. Ф. Субботиным.

Доказательство. В спектральной теории графов хорошо известна (независимо доказанная многими авторами) теорема о разрезании по разделяющей вершине. Сформулируем ее.

Пусть в графе G есть разделяющая вершина. Тогда G можно представить в виде склейки двух графов A и B посредством отождествления некоторой вершины u графа A и некоторой вершины v графа B . Теорема о разрезании утверждает, что

$$G(\lambda) = A_u(\lambda)B(\lambda) + A(\lambda)B_v(\lambda) - \lambda A_u(\lambda)B_v(\lambda).$$

Теорему о разрезании нам удобно использовать в матричном виде, причем в ситуации, когда граф описан как склейка двух двухкорневых графов E и F :

$$E \circ F(\lambda) = \begin{pmatrix} E(\lambda) & E_\beta(\lambda) \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F(\lambda) \\ F_\alpha(\lambda) \end{pmatrix}.$$

Положим

$$M_n = \begin{pmatrix} P_n[H](\lambda) & P_n[H]_\beta(\lambda) \\ P_n[H]_\alpha(\lambda) & P_n[H]_{\alpha\beta}(\lambda) \end{pmatrix}, \quad \Lambda = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix}.$$

Применяя теорему о разрезании, получим, что $M_{m+k} = M_m \Lambda M_k$. Отсюда следует, что

$$M_n = M_1 \Lambda M_1 \Lambda \dots \Lambda M_1 = (M_1 \Lambda)^n \Lambda^{-1}.$$

Степень квадратной матрицы второго порядка может быть выражена через саму эту матрицу и многочлены Чебышева второго рода

$$U_0(x) = 1, \quad U_1(x) = 2x, \quad U_{n+1}(x) = 2xU_n(x) - U_{n-1}(x), \quad n \in \mathbb{N}.$$

Если позволить индексу n принимать произвольные целые значения, то при таком доопределении $U_{-1}(x) = 0$.

Лемма 1. Для любой комплексной 2×2 матрицы M и натурального n

$$M^n = (\sqrt{\det M})^{n-1} U_{n-1} \left(\frac{\operatorname{tr} M}{2\sqrt{\det M}} \right) M - (\sqrt{\det M})^n U_{n-2} \left(\frac{\operatorname{tr} M}{2\sqrt{\det M}} \right) I,$$

если $\det M \neq 0$;

$$M^n = (\operatorname{tr} M)^{n-1} M,$$

если $\det M = 0$.

Здесь символ корня обозначает арифметический корень в $\mathbb{C}$, т.е. $\sqrt{z} = w \iff z = w^2$ и $\arg w \in (-\pi/2, \pi/2]$.

Доказательство. Для доказательства используется индукция по n . Однако индукция не объясняет происхождения формулы. Приведем наброски двух естественных доказательств. Первое использует приведение M к жордановой форме $M = L J L^{-1}$. Тогда $M^n = L J^n L^{-1}$. Затем можно воспользоваться тем, что

$$((x + \sqrt{x^2 - 1})^k - (x - \sqrt{x^2 - 1})^k) / (2\sqrt{x^2 - 1}) = U_{k-1}.$$

Такое доказательство приводит к многочленам Чебышева. Неудобно оно тем, что требует рассмотрения случаев диагонализируемости и недиагонализируемости, либо в случае недиагонализируемости приходится воспользоваться предельным переходом по множеству диагонализируемых матриц. Второе доказательство использует Фробениусову рекурсию $M^k(M^2 - M \operatorname{tr} M + I \det M) = 0$. Затем рекурсия $a_{k+2} - t a_{k+1} + d a_k = 0$ приводится к чебышевской.

Перейдем к доказательству индукцией по n . Положим

$$\begin{aligned} t &= \operatorname{tr}(M_1 \Lambda) = H_\alpha(\lambda) + H_\beta(\lambda) - \lambda H_{\alpha\beta}(\lambda), \\ d &= \det(M_1 \Lambda) = H_\alpha(\lambda) H_\beta(\lambda) - H(\lambda) H_{\alpha\beta}(\lambda), \\ s &= H_{[\alpha\beta]}(\lambda). \end{aligned}$$

Для тех λ , для которых $d \neq 0$, справедливы равенства

$$M_n = (\sqrt{d})^{n-1} U_{n-1} \left(\frac{t}{2\sqrt{d}} \right) M_1 - (\sqrt{d})^n U_{n-2} \left(\frac{t}{2\sqrt{d}} \right) \Lambda^{-1},$$

а для тех λ , для которых $d = 0$,

$$M_n = t^{n-1} M_1.$$

Рассмотрим случай, когда λ вещественное. Тогда $\sqrt{d} = |s|$, так как $d = s^2$. Функция U_k четна или нечетна вместе с k , поэтому $|b|^k U_k(a/|b|) = b^k U_k(a/b)$. Кроме того, $U_k(x/2) \equiv P_k(x)$ (см. [1], §2.6, п. 7).

Таким образом, для тех вещественных λ , для которых $s \neq 0$,

$$M_n = s^{n-1} P_{n-1}(t/s) M_1 - s^n P_{n-2}(t/s) \Lambda^{-1}, \quad (1)$$

а для тех вещественных λ , для которых $s = 0$,

$$M_n = t^{n-1} M_1. \quad (2)$$

Эти соотношения верны и в случае произвольного комплексного λ , так как они состоят из дробно-рациональных выражений.

Матричные равенства (1) и (2) распишем поэлементно. Для тех λ , для которых $s \neq 0$,

$$P_n[H](\lambda) = s^{n-1} P_{n-1}(t/s) H(\lambda) - s^n P_{n-2}(t/s) \lambda, \quad (3)$$

$$P_n[H]_\beta(\lambda) = s^{n-1} P_{n-1}(t/s) H_\beta(\lambda) - s^n P_{n-2}(t/s), \quad (4)$$

$$P_n[H]_\alpha(\lambda) = s^{n-1} P_{n-1}(t/s) H_\alpha(\lambda) - s^n P_{n-2}(t/s), \quad (5)$$

$$P_n[H]_{\alpha\beta}(\lambda) = s^{n-1} P_{n-1}(t/s) H_{\alpha\beta}(\lambda). \quad (6)$$

Для тех λ , для которых $s = 0$,

$$P_n[H](\lambda) = t^{n-1} H(\lambda), \quad (7)$$

$$P_n[H]_\beta(\lambda) = t^{n-1} H_\beta(\lambda), \quad (8)$$

$$P_n[H]_\alpha(\lambda) = t^{n-1} H_\alpha(\lambda), \quad (9)$$

$$P_n[H]_{\alpha\beta}(\lambda) = t^{n-1} H_{\alpha\beta}(\lambda). \quad (10)$$

Равенства (3) и (7) — это те утверждения о $P_n[H]$, которые требовалось доказать.

Из (4), (5), (6) и (8), (9), (10) получаем, что для тех λ , для которых $s \neq 0$, выполнено равенство

$$P_n[H]_{\alpha*\beta}(\lambda) = (P_{n-1}(t/s)t/s - 2P_{n-2}(t/s))s^n, \quad (11)$$

а для тех λ , для которых $s = 0$,

$$P_n[H]_{\alpha*\beta}(\lambda) = t^n. \quad (12)$$

Теперь рассмотрим граф $C_n[H]$. Напомним формулу Швенка (см. [1], §2.7, п. 9)

$$G(\lambda) = \lambda G_v(\lambda) - \sum_{u \sim v} G_{uv}(\lambda) - 2 \sum_{\mathcal{C} \ni v} G_{\mathcal{C}}(\lambda).$$

Первое суммирование ведется по всем вершинам u , смежным с v , второе — по всем простым (вершинно-простым) циклам $\mathcal{C}$, содержащим вершину v .

Пример 1. Справедливы равенства

$$C_n(\lambda) = \lambda P_{n-1}(\lambda) - 2P_{n-2}(\lambda) - 2.$$

Раскроем $C_n[H](\lambda)$ по формуле Швенка, применив ее к вершине (обозначим ее v), полученной отождествлением корней графа $P_n[H]$. Тогда

$$C_n[H](\lambda) = \lambda C_n[H]_v(\lambda) - \sum_{u \sim v} C_n[H]_{uv}(\lambda) - 2 \sum_{\mathcal{C} \ni v} C_n[H]_{\mathcal{C}}(\lambda).$$

Множество простых циклов графа $C_n[H]$, содержащих v , разобьем на три класса, класс α -циклов, класс β -циклов и класс $\alpha\beta$ -циклов. К первому классу отнесем те циклы, которые соответствуют простым циклам графа $P_n[H]$, содержащим вершину $\alpha(P_n[H])$. Ко второму классу отнесем те циклы, которые соответствуют простым циклам графа $P_n[H]$, содержащим вершину $\beta(P_n[H])$. К третьему классу отнесем те циклы, которые соответствуют простым путям графа $P_n[H]$, соединяющим вершину $\alpha(P_n[H])$ и вершину $\beta(P_n[H])$. Суммирование по α -, β - и $\alpha\beta$ -циклам обозначим соответственно $\sum_{\mathcal{C} \ni v}^{(\alpha)}$, $\sum_{\mathcal{C} \ni v}^{(\beta)}$ и $\sum_{\mathcal{C} \ni v}^{(\alpha\beta)}$.

Множество вершин графа $C_n[H]$, смежных с v , разобьем на два класса, класс α -вершин и класс β -вершин. К первому классу отнесем вершины, соответствующие тем вершинам графа $P_n[H]$, которые смежны с вершиной $\alpha(P_n[H])$. К второму классу отнесем вершины, соответствующие тем вершинам графа $P_n[H]$, которые смежны с вершиной $\beta(P_n[H])$. Суммирование по α -вершинам и по β -вершинам обозначим соответственно $\sum_{u \sim v}^{(\alpha)}$ и $\sum_{u \sim v}^{(\beta)}$.

Так как

$$C_n[H]_v = P_n[H]_{\alpha\beta}, \quad \sum_{\mathcal{C} \ni v}^{(\alpha\beta)} C_n[H]_{\mathcal{C}}(\lambda) = s^n,$$

справедливы равенства

$$\begin{aligned} C_n[H](\lambda) &= \left(\lambda P_n[H]_{\alpha\beta}(\lambda) - \sum_{u \sim v}^{(\alpha)} C_n[H]_{uv}(\lambda) - 2 \sum_{\mathcal{C} \ni v}^{(\alpha)} C_n[H]_{\mathcal{C}}(\lambda) \right) \\ &\quad + \left(\lambda P_n[H]_{\alpha\beta}(\lambda) - \sum_{u \sim v}^{(\beta)} C_n[H]_{uv}(\lambda) - 2 \sum_{\mathcal{C} \ni v}^{(\beta)} C_n[H]_{\mathcal{C}}(\lambda) \right) \\ &\quad - \lambda P_n[H]_{\alpha\beta}(\lambda) - 2s^n \\ &= P_n[H]_{\beta}(\lambda) + P_n[H]_{\alpha}(\lambda) - \lambda P_n[H]_{\alpha\beta}(\lambda) - 2s^n. \end{aligned}$$

Совмещая это с формулами (11) и (12), получим следующее.

Для тех λ , для которых $s \neq 0$, справедливы равенства

$$C_n[H](\lambda) = (P_{n-1}(t/s)t/s - 2P_{n-2}(t/s) - 2)s^n,$$

а для тех λ , для которых $s = 0$,

$$C_n[H](\lambda) = t^n.$$

К первому из этих равенств применим формулу из примера 1.

Теорема доказана.

3. Следствия

Сделаем несколько выводов о спектре (то есть о множестве собственных значений матрицы смежности) периодических графов. Спектр графа G будем обозначать $\text{Спекс } G$. Ниже везде H — двухкорневой граф с упорядоченными корнями.

Следствие 1. Пусть $\lambda \in \text{Спекс } H$. Если $H_{\alpha}(\lambda)H_{\beta}(\lambda) \neq 0$, то

$$P_n[H](\lambda) = -\lambda(H_{[\alpha\beta]}(\lambda))^n P_{n-2}(H_{\alpha*\beta}(\lambda)/H_{[\alpha\beta]}(\lambda)),$$

если $H_{\alpha}(\lambda)H_{\beta}(\lambda) = 0$, то $P_n[H](\lambda) = 0$.

Следствие 2. *Справедливо равенство*

$$C_n[H](\lambda) = \prod_{k=1}^n \left(H_{\alpha*\beta}(\lambda) - \left(2 \cos \frac{2\pi k}{n} \right) H_{[\alpha\beta]}(\lambda) \right).$$

Если $\mu \in [-2, 2]$, то все корни многочлена $H_{\alpha*\beta}(\lambda) - \mu H_{[\alpha\beta]}(\lambda)$ вещественные.

Доказательство. Первое утверждение вытекает из доказанной теоремы и равенства (см. [1], §2.1)

$$C_n(\lambda) = \prod_{k=1}^n (\lambda - 2 \cos(2\pi k/n)).$$

Для доказательства второго утверждения заметим, что для каждого фиксированного $\mu \in 2 \cos(2\pi(\mathbb{Q} \cap (0; 1)))$ все корни многочлена $H_{\alpha*\beta}(\lambda) - \mu H_{[\alpha\beta]}(\lambda)$ являются собственными значениями $C_n[H]$ для некоторого n , поэтому они вещественные. Множество же $2 \cos(2\pi(\mathbb{Q} \cap (0; 1)))$ всюду плотно в $[-2; 2]$.

Множества $\bigcap_{n \geq 1} \text{Спец } P_n[H]$ и $\bigcap_{n \geq 3} \text{Спец } C_n[H]$ назовем, соответственно, цепным и циклическим спектрами графа H .

Следствие 3. *Цепной спектр H является пересечением $\text{Спец } H$ и множества всех корней многочлена $\lambda H_\alpha(\lambda) H_\beta(\lambda)$.*

Циклический спектр H совпадает с множеством всех корней многочлена $H_{\alpha\beta}(\lambda) - 2H_{[\alpha\beta]}(\lambda)$.*

Доказательство. Цепной спектр H есть подмножество $\text{Спец } H$. Пусть $\lambda_0 \in \text{Спец } H$. Из следствия 1 видно, что если λ_0 является корнем многочлена $H_\alpha(\lambda) H_\beta(\lambda)$, то оно принадлежит цепному спектру, а если не является, то принадлежит цепному спектру тогда и только тогда, когда

$$\lambda_0 P_{n-2}(H_{\alpha*\beta}(\lambda_0)/H_{[\alpha\beta]}(\lambda_0)) = 0$$

для любого натурального n . Последнее условие равносильно тому, что $\lambda_0 = 0$, так как $P_0(\lambda) \equiv 1$.

Множество $\mathcal{H}$ корней многочлена $H_{\alpha*\beta}(\lambda) - 2H_{[\alpha\beta]}(\lambda)$ включено в циклический спектр (это вытекает из следствия 2). Обратное включение следует из того, что

$$\text{Спец } C_3[H] \cap \text{Спец } C_4[H] = \mathcal{H}$$

(это равенство также вытекает из следствия 2).

Отметим, что утверждение о цепном спектре доказано совместно с В. Ф. Субботиным.

Спектральным радиусом графа называется максимум модулей собственных значений этого графа.

Следствие 4. *Пусть R_H — максимум модулей корней многочлена*

$$(H_{\alpha*\beta}(\lambda))^2 - 4(H_{[\alpha\beta]}(\lambda))^2.$$

Тогда спектральный радиус графа $C_n[H]$ не превосходит R_H .

Доказательство. Предположим противное, пусть $\lambda^* \in \text{Срес } C_m[H]$ и $\lambda^* > R_H$ (случай $\lambda^* < -R_H$ рассматривается аналогично). Из того, что λ^* — не является корнем многочлена

$$h(\lambda) = (H_{\alpha\beta}(\lambda))^2 - 4(H_{[\alpha\beta]}(\lambda))^2,$$

но принадлежит спектру $C_m[H]$, следует, что λ^* — корень многочлена $H_{\alpha\beta}(\lambda) - (2 \cos(2\pi k/m))H_{[\alpha\beta]}(\lambda)$ для некоторого $k \in \{1, \dots, m-1\} \setminus \{m/2\}$. Если $H_{[\alpha\beta]}(\lambda^*) = 0$, то $H_{\alpha\beta}(\lambda^*) = 0$, откуда $h(\lambda^*) = 0$. Получаем противоречие.

Пусть $H_{[\alpha\beta]}(\lambda^*) \neq 0$. Обозначим f функцию, получающуюся из $H_{\alpha\beta}(\lambda)/H_{[\alpha\beta]}(\lambda)$ устранением всех устранимых разрывов. Функция f неограничена при $\lambda \rightarrow \infty$ и $\lim_{\lambda \rightarrow a} f(\lambda) = \infty$ для любой точки разрыва a . Так как $|f(\lambda^*)| < 2$, найдется $\lambda^{**} > \lambda^*$ такое, что $|f(\lambda^{**})| = 2$, откуда $h(\lambda^{**}) = 0$, поэтому $\lambda^{**} \leq R_H$. Получаем противоречие.

4. Открытые вопросы

1. Исследовать вопрос об ограниченности спектрального радиуса графа $P_n[H]$ при росте n .
2. Исследовать многочлены $H_{\alpha\beta}(\lambda)$ и $H_{[\alpha\beta]}(\lambda)$, так как они играют ключевую роль в строении спектров периодических графов.

Список литературы

1. Цветкович Д., Дуб М., Захс Х., *Спектры графов. Теория и применение*. Наукова Думка, Киев, 1984.
2. Колмыков В. А., О суммировании по путям в спектральной теории графов. *Дискретная математика* (2001) **13**, №4, 122–125.

Статья поступила 05.03.2002.

Переработанный вариант поступил 16.06.2003.