Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М. И. Скворцова, И. В. Станкевич, О связи между собственными векторами взвешенных графов и их подграфами, *Дискрет. матем.*, 2004, том 16, выпуск 4, 32–40

DOI: <https://doi.org/10.4213/dm173>

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: 3.81.55.215

26 апреля 2023 г., 13:58:04

О связи между собственными векторами взвешенных графов и их подграфами

© 2004 г. М. И. Скворцова, И. В. Станкевич

Рассматривается задача установления связи между собственными векторами и подграфами взвешенного неориентированного графа G .

Пусть граф G имеет n вершин, занумерованных числами $1, \dots, n$, и пусть λ — собственное число графа G кратности $t \geq 1$, $X^{(i)} = (x_1^{(i)}, \dots, x_n^{(i)})$, $i = 1, \dots, t$, — линейно независимые собственные векторы, отвечающие этому собственному числу. Получены формулы, позволяющие найти компоненты $x_j^{(i)}$ собственных векторов $X^{(i)}$ по некоторым характеристикам специальных подграфов графа G , $i = 1, \dots, t$, $j = 1, \dots, n$. Приведен иллюстративный пример.

1. Введение

Одна из задач спектральной теории графов заключается в установлении связей между спектральными и структурными свойствами графов [1]. Пусть G — полный неориентированный взвешенный граф с n вершинами и матрицей весов $W = (W_{ij})$,

$$P(x) = |xE - W| = x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_n$$

— характеристический полином графа G (E — единичная матрица n -го порядка). Обозначим через S подграф графа G на i вершинах, состоящий из объединения следующих компонент связности: некоторого числа вершин, пар вершин, соединенных ребром, и циклов, а через $\mathfrak{S}_i$ — множество всех таких подграфов. Пусть $r(S)$ и $c(S)$ — общее число компонент связности и число циклов подграфа S , соответственно. Припишем компонентам связности подграфа S следующие веса: i -й вершине — число W_{ii} , ребру (i, j) — число $(W_{ij})^2$, циклу с ребрами (i_k, j_k) , $k = 1, 2, \dots$, — число $\prod_k W_{i_k j_k}$, равное произведению весов его ребер. Определим вес $W(S)$ подграфа S как произведение весов его компонент связности. Известно [2], что

$$a_i = \sum_{S \in \mathfrak{S}_i} (-1)^{r(S)} 2^{c(S)} W(S), \quad i = 1, \dots, n,$$

где суммирование распространено на все подграфы $S \in \mathfrak{S}_i$ графа G . В частном случае, когда G — простой граф, каждый подграф S представляет собой объединение некоторого числа изолированных ребер и циклов, попарно не имеющих общих элементов. Такие подграфы называют подграфами Захса. Формулы для вычисления коэффициентов a_i упрощаются ($W(S) = 1$). Эти формулы обычно связывают с именем Захса.

В настоящей работе рассматривается задача нахождения связи между собственными векторами взвешенного неориентированного графа и его подграфами. Эта задача представляет интерес как с практической, так и с теоретической точки зрения. Она возникает, например, в теоретической химии, так как через координаты собственных векторов вычисляются такие характеристики молекул как электронные плотности на атомах и порядки связей, а эти величины обычно нуждаются в структурной интерпретации. Так как граф однозначно определяется по его спектру и собственным векторам, нахождение связей между собственными векторами и подграфами графа поможет определить такую структурную информацию, по которой граф восстанавливается однозначно.

В данной работе получены формулы для нахождения собственных векторов взвешенного ориентированного графа в терминах его специальных подграфов и некоторых их характеристик. Приведен иллюстративный пример.

2. Основные результаты

Пусть G — полный неориентированный взвешенный граф с n вершинами, занумерованными числами $1, \dots, n$, $W = (W_{ij})$ — вещественная матрица весов графа G . Очевидно, что простой граф является частным случаем определенного выше графа G . Пусть λ — собственное число графа G кратности $t \geq 1$, а $X^{(i)} = (x_1^{(i)}, \dots, x_n^{(i)})$, $i = 1, \dots, t$, — соответствующие линейно независимые собственные векторы. Обозначим через

$$\Delta(\lambda) = |W - \lambda E|$$

определитель матрицы $W - \lambda E$ (E — единичная матрица), а через $\Delta(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda)$ — определитель, получаемый из $\Delta(\lambda)$ вычеркиванием t строк и t столбцов с номерами $m_1, m_2, \dots, m_t$, $m_1 < m_2 < \dots < m_t$.

Так как λ — собственное число кратности t , для него существует такой набор номеров $m = (m_1, m_2, \dots, m_t)$, что $\Delta(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda) \neq 0$. Это также означает, что если у графа G удалить вершины с этими номерами, то λ не будет собственным числом полученного подграфа.

Определим три числовые множества

$$N_0 = \{1, \dots, n\}, \quad N^{(m)} = \{m_1, m_2, \dots, m_t\}, \quad N_1 = N_0 \setminus N^{(m)}.$$

Рассмотрим подграфы графа G следующих четырех типов:

- (I) $P(m_i, k, j)$ — цепь, содержащую k вершин $j = j_1, j_2, \dots, j_{k-1}, j_k = m_i$, соединяющую j -ю, $j \in N_1$, и m_i -ю вершины, $i = 1, \dots, t$,
- (II) подграф, состоящий из одной изолированной вершины,
- (III) подграф, состоящий из двух вершин, соединенных ребром (подграф-ребро),
- (IV) цикл $(v_1, \dots, v_r)$, где $3 \leq r$.

Обозначим через $S(m_i, k, j)$ подграф графа G на $n - t + 1$ вершинах с номерами из множества $N_1 \cup \{m_i\}$, состоящий из объединения следующих несвязных компонент: одной цепи $P(m_i, k, j)$ при некотором k и некоторого числа (возможно, равного нулю) подграфов типа (II), (III), (IV).

Обозначим через $S(n-t)$ подграф графа G на $n-t$ вершинах с номерами из множества N_1 , состоящий из объединения некоторого числа изолированных подграфов типов (II), (III), (IV).

Введем ряд характеристик подграфа $S(m_i, k, j)$. Для $S(m_i, k, j)$ зададим отображение P множества вершин N_1 в множество вершин $(N_1 \setminus \{j\}) \cup \{m_i\}$ следующим образом: если вершина u принадлежит цепи $P(m_i, k, j)$, $u = j_s$ при некотором s , $s = 1, \dots, k$, то $P(u) = j_{s+1}$; если u — изолированная вершина, то $P(u) = u$; если u принадлежит изолированному ребру (u, v) , то $P(u) = v$; если u принадлежит циклу, $u = v_s$ при некотором $s = 1, \dots, r$, то $P(u) = v_{s+1}$, где индекс $s+1$ берется по модулю r .

Опишем отображение P при помощи двустрочной матрицы

$$P = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \dots & \alpha_{n-t} \\ \beta_1 & \dots & \beta_{n-t} \end{pmatrix} \quad (1)$$

где $\alpha_i \in N_1$, $\beta_i = P(\alpha_i)$, $i = 1, \dots, n-t$. Перенумеруем элементы верхней строки числами от 1 до $n-t$ в порядке возрастания. Аналогично перенумеруем элементы нижней строки. Тогда матрице P будет соответствовать перестановка P_1 на $n-t$ элементах $1, \dots, n-t$

$$P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n-t \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \dots & \gamma_{n-t} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $\gamma_j \in \{1, 2, \dots, n-t\}$. Эту перестановку можно записать в виде произведения независимых циклов. Пусть $r(m_i, k, j)$ — общее число циклов в циклической записи P_1 (включая и циклы единичной длины), а $c(m_i, k, j)$ — число циклических компонент самого подграфа $S(m_i, k, j)$.

Для подграфа $S(n-t)$ пусть $r(n-t)$ и $c(n-t)$ — общее число компонент и число циклических компонент в $S(n-t)$, соответственно.

Припишем подграфам типа (I)–(IV), входящим в $S(m_i, k, j)$ или $S(n-t)$ следующие веса: цепи и циклу — веса, равные произведениям весов всех их ребер; подграфу-ребру — вес, равный квадрату веса соответствующего ребра; изолированной вершине — вес $W_{ii} - \lambda$, где i — номер вершины. Определим веса $W(m_i, k, j, \lambda)$ и $W(n-t, \lambda)$ подграфов $S(m_i, k, j)$ и $S(n-t)$, соответственно, как произведения весов их компонент связности.

Для графа G построим следующие функции от λ :

$$\alpha(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda) = (-1)^{n-t} \sum_{S(n-t)} (-1)^{r(n-t)} 2^{c(n-t)} W(n-t, \lambda), \quad (3)$$

где суммирование распространено на все подграфы графа G вида $S(n-t)$;

$$\alpha(m_i, j, \lambda) = (-1)^{n-t+q} \sum_{S(m_i, k, j)} (-1)^{r(m_i, k, j)} 2^{c(m_i, k, j)} W(m_i, k, j, \lambda), \quad (4)$$

где $i = 1, \dots, t$, $j \in N_1$ и суммирование распространено на все подграфы графа G вида $S(m_i, k, j)$, а q равно числу целых чисел, расположенных либо в интервале (j, m_i) , если $j < m_i$, либо в интервале (m_i, j) , если $m_i < j$, не равных ни одному из чисел $m_1, \dots, m_t$.

Теорема 1. Пусть $X^{(i)} = (x_1^{(i)}, \dots, x_n^{(i)})$, $i = 1, \dots, t$, — линейно независимые собственные векторы, отвечающие собственному числу λ кратности t графа G . Тогда

$$\alpha(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda) \neq 0;$$

$$x_j^{(i)} = \frac{\alpha(m_i, j, \lambda)}{\alpha(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda)}, \quad j \in N_1; \quad (5)$$

$$x_j^{(i)} = \begin{cases} -1, & j \in N^{(m)}, j = m_i, \\ 0, & j \in N^{(m)}, j \neq m_i. \end{cases} \quad (6)$$

Докажем предварительно следующую лемму.

Лемма 1. Пусть W' — матрица весов некоторого взвешенного неориентированного графа G' с n вершинами, $|W'|$ — определитель матрицы W' , $d(m_1, m_2, \dots, m_t)$ — определитель, полученный из $|W'|$ вычеркиванием строк и столбцов с номерами $m_1, m_2, \dots, m_t$; $d(m_i, j)$ — определитель, полученный из $|W'|$ вычеркиванием строк с номерами $m_1, \dots, m_t$ и столбцов с номерами $m_1, \dots, m_{i-1}, m_{j+1}, \dots, m_t, j$, $j \in N_1$, $i = 1, \dots, n$.

Пусть подграфы $S'(m_i, k, j)$ и $S'(n-t)$ графа и их характеристики $r'(m_i, k, j)$, $c'(m_i, k, j)$, $r'(n-t)$, $c'(n-t)$ определяются подобно подграфам $S(m_i, k, j)$ и $S(n-t)$ графа G и их соответствующим характеристикам. Припишем изолированным вершинам этих подграфов веса, равные значениям соответствующих диагональных элементов матрицы W' . Веса изолированных цепей, ребер и циклов, входящих в подграфы $S(m_i, k, j)$ и $S'(n-t)$, и веса $W'(m_i, k, l)$ и $W'(n-t)$ этих подграфов, соответственно, определим так же, как и в случае графа G , учитывая при этом отличие в определении весов изолированных вершин. Тогда для определителей $d(m_1, m_2, \dots, m_t)$ и $d(m_i, j)$ имеют место формулы

$$d(m_1, m_2, \dots, m_t) = (-1)^{n-t} \sum_{S'(n-t)} (-1)^{r'(n-t)} 2^{c'(n-t)} W'(n-t), \quad (7)$$

$$d(m_i, j) = (-1)^{n-t} \sum_{S'(m_i, k, j)} (-1)^{r'(m_i, k, j)} 2^{c'(m_i, k, j)} W'(m_i, k, j). \quad (8)$$

Доказательство. Очевидно, что определитель $d(m_1, m_2, \dots, m_t)$ составлен из строк матрицы W' с номерами $\alpha_1, \dots, \alpha_{n-t} \in N_1$ и столбцов с номерами $\beta_1, \dots, \beta_{n-t} \in N_1$. Составим перестановки вида

$$P = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_{n-t} \\ \beta_1 & \beta_2 & \dots & \beta_{n-t} \end{pmatrix}.$$

Перенумеруем элементы верхней строки числами от 1 до $n-t$ по возрастанию. Аналогичным образом перенумеруем элементы нижней строки. Тогда P преобразуется в перестановку P_1 на множестве элементов $\{1, \dots, n-t\}$, причем соответствие между P и P_1 взаимно однозначно. Тогда согласно формуле для определителя произвольной матрицы

$$d(m_1, m_2, \dots, m_t) = \sum_P (-1)^{I(P_1)} W'_{\alpha_1 \beta_1} \dots W'_{\alpha_{n-t} \beta_{n-t}}.$$

В этой формуле $I(P_1)$ — число транспозиций в нижней строке перестановки P_1 . Изучим более подробно структуру подстановки P_1 , являющейся перестановкой элементов множества N_1 . Ее можно записать в виде произведения независимых циклов. При этом циклу

длины 1 соответствует вершина в графе G' , длины два — ребро, а длины больше двух — некоторый цикл в G' , причем все эти подграфы попарно не имеют общих элементов. Следовательно, каждой подстановке P_1 соответствует подграф вида $S'(n-t)$ в G' , причем одному $S'(n-t)$ соответствует $2^{c'(n-t)}$ подстановок, все циклы которых содержат одинаковые элементы, но различаются направлениями обхода. Поэтому, учитывая, что $(-1)^{n-t+I(P_1)} = (-1)^{r(P_1)}$, а $r(P_1) = r'(n-t)$, где $r(P_1)$ — число циклов в P_1 , получим, что

$$\begin{aligned} d(m_1, m_2, \dots, m_t) &= (-1)^{n-t} \sum_P (-1)^{n-t+I(P_1)} W'_{\alpha_1 \beta_1} \dots W'_{\alpha_{n-t} \beta_{n-t}} \\ &= (-1)^{n-t} \sum_{S'(n-t)} (-1)^{r'(n-t)} 2^{c'(n-t)} W'(n-t). \end{aligned}$$

Рассмотрим теперь определитель $d(m_i, j)$ и преобразуем его аналогичным образом. Каждому слагаемому в разложении этого определителя в сумму по произведениям его элементов соответствует некоторая двухстрочная матрица P' . Верхняя строка P' составлена из элементов множества N_1 , а нижняя — из элементов множества $(N_1/\{j\}) \cup \{m_i\}$. Можно считать, что P' задает отображение одного множества в другое. Очевидно, что в верхней строке P' нет элемента m_i , но есть j , а в нижней строке нет элемента j , но есть m_i . Элементы m_p , $p = 1, \dots, t$, $p \neq i$, отсутствуют в обеих строках P' . Составим цепочку переходящих друг в друга элементов, порождаемую отображением P' и начинающуюся с элемента j верхней строки. Тогда она окончится элементом m_i нижней строки. Действительно, цепочка, начинающаяся с j -го элемента верхней строки, не замкнется, так как в нижней строке нет j . Она кончится в нижней строке тем элементом, которого нет в верхней строке, то есть элементом m_i . Множество элементов, не вошедших в эту цепочку, не содержит m_i и j , и P' задает на этом множестве взаимно однозначное отображение.

Вышеуказанной цепочке номеров $j \rightarrow \dots \rightarrow m_i$ в графе G' соответствует цепь $P'(m_i, k, j)$ при некотором k . Остальные элементы (присутствующие в обеих строках P') дадут несколько непересекающихся циклов, которым будут соответствовать изолированные вершины, ребра или циклы в G' . Следовательно, каждой P' соответствует некоторый подграф $S'(m_i, k, j)$, причем нескольким P' с одной $P'(m_i, k, j)$ (а их $2^{c'(m_i, k, j)}$) и одинаковыми множествами элементов в циклах (но с разной ориентацией) будет соответствовать один подграф $S'(m_i, k, j)$. По матрице P' построим перестановку P'_1 , перенумеровав элементы строк так же, как это делалось выше для подстановки P . Учитывая, что

$$(-1)^{n-t+I(P'_1)} = (-1)^{r(P'_1)} = (-1)^{r'(m_i, k, j)}$$

где $r'(P'_1)$ — число циклов в P'_1 , для определителя $d(m_i, j)$ получим выражение

$$\begin{aligned} d(m_i, j) &= (-1)^{n-t} \sum_{P'} (-1)^{n-t+I(P'_1)} W'_{\alpha_1 \beta_1} \dots W'_{\alpha_{n-t} \beta_{n-t}} \\ &= (-1)^{n-t} \sum_{S'(m_i, k, j)} (-1)^{r'(m_i, k, j)} 2^{c'(m_i, k, j)} W'(m_i, k, j), \end{aligned}$$

что и требовалось доказать. Лемма доказана.

Перейдем теперь к доказательству теоремы.

Доказательство теоремы 1. Для нахождения компонент $x_j^{(i)}$ собственных векторов $X^{(i)} = (x_1^{(i)}, \dots, x_n^{(i)})$ составим однородную систему уравнений

$$(W - \lambda E)X = 0,$$

(для простоты опустим индекс i) и найдем для нее фундаментальную систему решений, учитывая, что ранг ее матрицы равен t . Согласно выбору чисел $m_1, m_2, \dots, m_t$ определитель $\Delta(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda)$, полученный из $\Delta(\lambda) = |W - \lambda E|$ в результате выбрасывания строк и столбцов с номерами $m_1, m_2, \dots, m_t$ отличен от нуля. Следовательно, в системе уравнений $(W - \lambda E)X = 0$ можно отбросить строки с этими номерами, выбрать в качестве свободных неизвестные $x_{m_1}, \dots, x_{m_t}$ и положить

$$x_{m_1} = -1, \quad x_{m_2} = 0, \dots, x_{m_t} = 0$$

(или $x_{m_1} = 0, x_{m_2} = -1, x_{m_3} = 0, \dots, x_{m_t} = 0$ и т. д.), получив t неоднородных систем $n - t$ уравнений с $n - t$ неизвестными $x_j, j \in N_1$, с определителями $\Delta(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda) \neq 0$. Решая каждую из этих систем методом Крамера, получим, что

$$x_j^{(i)} = \frac{\Delta(m_i, j, \lambda)}{\Delta(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda)}, \quad j \in N_1,$$

где $\Delta(m_i, j, \lambda)$ — определитель, получаемый из $\Delta(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda)$ путем замены в нем столбца, соответствующего x_j , на столбец из свободных членов, который является столбцом с номером $m_i, i = 1, \dots, t$, определителя $\Delta(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda)$.

Преобразуем эти определители, используя лемму 1 и полагая $W' = W - \lambda E$. Очевидно, что $\Delta(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda)$ имеет структуру определителя $d(m_1, m_2, \dots, m_t)$, поэтому

$$\begin{aligned} \Delta(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda) &= (-1)^{n-t} \sum_{S(n-t)} (-1)^{r(n-t)} 2^{c(n-t)} W(n-t, \lambda) \\ &= \alpha(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda) \neq 0, \end{aligned}$$

где $\Delta(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda)$ определено в (3). Преобразуем определитель $\Delta(m_i, j, \lambda)$ к виду $d(m_i, j)$. Для этого последовательно переставим столбцы в $\Delta(m_i, j, \lambda)$, поместив столбец, в котором индексы его элементов соответствуют m_i -му столбцу матрицы $W - \lambda E$ сразу после столбца $m_i - 1$. Пусть q равно количеству целых чисел в интервале (j, m_i) , если $j < m_i$ (либо в интервале (m_i, j) , если $j > m_i$), не совпадающих с $m_1, \dots, m_t$. Тогда в результате перестановки столбцов перед определителем появится знак $(-1)^q$, а сам определитель приобретет вид определителя $d(m_i, j)$. Поэтому, используя лемму 1, получим, что

$$\Delta(m_i, j, \lambda) = (-1)^{n-t+q} \sum_{S(m_i, k, j)} (-1)^{r(m_i, k, j)} 2^{c(m_i, k, j)} W(m_i, k, j, \lambda) = \alpha(m_i, j, \lambda),$$

где $\alpha(m_i, j, \lambda)$ определено в (4). Отсюда следует, что векторы $X^{(i)}$ могут быть найдены по формулам (5) и (6), что и требовалось доказать. Теорема доказана.

3. Пример

Рассмотрим простой полный граф G с числом вершин $n = 4$ (рис. 1). Спектр его матрицы смежности состоит из числа $\lambda = 3$ кратности $t = 1$ и числа $\lambda = -1$ кратности $t = 3$. Найдем его собственные векторы, пользуясь теоремой, приведенной выше.

Рис. 1. Граф G и все его подграфы типа $S(n-t)$ с их характеристиками c, r, W для случая $\lambda = 3$

Пусть $\lambda = 3$. Так как все вершины графа топологически эквивалентны, в качестве вершины с номером m_1 можно взять любую вершину. Пусть, например, $m_1 = 1$. Найдем все подграфы графа G типа $S(n-t)$, то есть подграфы на трех вершинах с номерами 2, 3, 4, состоящие из объединения вершин, пар вершин, соединенных ребром и циклов. На рис. 1 приведены все пять таких подграфов, а также их следующие параметры: число компонент связности $r(n-t) = r$, число циклических компонент $c(n-t) = c$ и вес $W(n-t) = W$. Вычислим значение функции $\alpha(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda)$, используя формулу (3):

$$\begin{aligned} \alpha(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda) &= (-1)^3 (3(-1)^2 2^0 (-\lambda) + (-1)^1 2^1 1 + (-1)^3 2^0 (-\lambda)^3) \\ &= (\lambda + 1)^2 (2 - \lambda). \end{aligned}$$

Найдем теперь все подграфы типа $S(m_i, k, j)$ при $j = 2$, то есть подграфы на четырех вершинах ($n-t+1 = 4$), состоящие из объединения одной цепи, соединяющей вершины $m_1 = 1$ и $j = 2$, а также изолированных вершин, пар вершин, соединенных ребром, и циклов. На рис. 2 приведены все шесть таких подграфов, а также их параметры $k, c(m_i, k, j) = c, r(m_i, k, j) = r, W(m_i, k, j) = W$. Для вычисления r составим матрицы P и P_1 для этих подграфов по формулам (1) и (2) и найдем значение r , равное числу циклов в соответствующей подстановке P_1 (верхние индексы при P и P_1 соответствуют номеру подграфа на рис. 2):

$$\begin{aligned} P^{(1)} &= \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 3 \end{pmatrix}, \quad P_1^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} = (1)(23), \quad r = 2, \\ P^{(2)} &= \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 1 & 3 & 4 \end{pmatrix}, \quad P_1^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} = (1)(2)(3), \quad r = 3, \\ P^{(3)} &= \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 3 & 2 & 4 \end{pmatrix}, \quad P_1^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} = (12)(3), \quad r = 2, \\ P^{(4)} &= \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 4 & 3 & 1 \end{pmatrix}, \quad P_1^{(4)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = (13)(2), \quad r = 2, \end{aligned}$$

Рис. 2. Все подграфы типа $S(m_1, k, j)$, при $m_1 = 1, j = 2$ с их характеристиками k, c, r, W для случая $\lambda = 3$

$$P^{(5)} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}, \quad P_1^{(5)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = (123), \quad r = 1,$$

$$P^{(6)} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 4 & 1 & 3 \end{pmatrix}, \quad P_1^{(6)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} = (132), \quad r = 1.$$

Найдем функцию $\alpha(m_i, 2, \lambda)$ по формуле (4), учитывая, что $q = 0$. Справедлива цепочка равенств

$$\begin{aligned} \alpha(m_i, 2, \lambda) &= (-1)^3((-1)^2 \cdot 1 \cdot 2^0 + (-1)^3\lambda^2 2^0 + 2(-1)^2(-\lambda)2^0 + 2(-1)^1 \cdot 1 \cdot 2^0) \\ &= (\lambda + 1)^2. \end{aligned}$$

Для $j = 3$ и для $j = 4$ в силу симметрии графа получаем такие же выражения:

$$\alpha(m_i, j, k) = (\lambda + 1)^2, \quad j = 3, 4.$$

Из (5) и (6) следует, что координаты $x_j, j = 1, \dots, 4$, собственного вектора $X^{(1)}$, отвечающего $\lambda = 3$, равны следующим значениям:

$$x_j = \frac{(\lambda + 1)^2}{(\lambda + 1)^2(2 - \lambda)} = (2 - \lambda)^{-1}, \quad j = 1, 2, 3, \quad x_4 = -1.$$

Следовательно,

$$X^{(1)} = (-1, -1, -1, -1).$$

Пусть теперь $\lambda = -1$. Положим $m_1 = 1, m_2 = 2, m_3 = 3$. В данном случае существует только один подграф типа $S(n - t)$, состоящий из одной изолированной вершины (см. рис. 3, на котором изображен этот подграф и приведены значения параметров r, c, W). Используя формулу (3), получим, что

$$\alpha(m_1, m_2, \dots, m_t, \lambda) = -\lambda = 1.$$

Рис. 3. Подграфы типа $S(n-i)$ и $S(m_1, k, j)$ с их характеристиками для случая $\lambda = -1, m_1 = 1, m_2 = 2, m_3 = 3$ и $j = 4$

При $j = 4, i = 1$ существует только один подграф типа $S(m_i, k, j)$ (см. рис. 3). Он представляет собой цепь, соединяющую вершины с номерами $j = 4$ и $m_1 = 1$. Для него параметр r оказывается равным единице, так как

$$P = \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad P_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = (1).$$

Следовательно, для функции $\alpha(m_1, j, \lambda)$, определенной формулой (4), справедливо равенство $\alpha(m_1, j, \lambda) = 1$. В силу симметрии графа

$$\alpha(m_1, j, \lambda) = \alpha(m_2, j, \lambda) = \alpha(m_3, j, \lambda) = 1.$$

Поэтому при $j = 4, i = 1, 2, 3$, справедливо равенство $x_4^{(i)} = -1/\lambda = 1$. Следовательно,

$$X^{(2)} = (-1, 0, 0, 1),$$

$$X^{(3)} = (0, -1, 0, 1),$$

$$X^{(4)} = (0, 0, -1, 1).$$

Список литературы

1. Цветкович Д., Дуб М., Захс Х., *Спектры графов. Теория и применение*. Наукова думка, Киев, 1984.
2. Trinajstić N., The characteristic polynomial of a chemical graph. *Math. Chem.* (1988) **2**, №3, 197–215.

Статья поступила 23.01.2003.