Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. А. Колмыков, О суммировании по путям в спектральной теории графов, *Дискрет. матем.*, 2001, том 13, выпуск 4, 122–125

DOI: <https://doi.org/10.4213/dm303>

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: 44.207.124.84

26 апреля 2023 г., 16:42:08

О суммировании по путям в спектральной теории графов

© 2001 г. В. А. Колмыков

Различные виды суммирования по путям возникают в некоторых теоретико-графовых конструкциях. Например, в ситуации, когда графы появляются в виде фейнмановских диаграмм теории возмущений. Другой пример: сопоставление молекуле углеводорода графа, отражающего ее структуру, породило спектральную теорию графов, в которой используется суммирование по простым путям характеристических многочленов. Эта сумма и является предметом рассмотрения в настоящей статье. Доказано, что эта сумма выражается через многочлены четырех подграфов, и проиллюстрированы некоторые применения этого результата.

1. Характеристический многочлен графа

В настоящей 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 A_G 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].

Одной из важнейших задач спектральной теории графов является нахождение рекуррентных соотношений для характеристических многочленов графов и, более общо, нахождение формул, связывающих характеристические многочлены графов, получающихся в результате тех или иных операций над ними.

2. Формулы Швенка

Пусть U — некоторое подмножество множества вершин графа G , тогда G_U означает граф, получающийся из G удалением всех вершин множества U . Если H — подграф графа G , то G_H — граф, получающийся из G удалением всех вершин подграфа H . Наконец, если $\overline{uv}$ — ребро графа G , то $G_{\overline{uv}}$ означает граф, получающийся удалением этого ребра (все вершины сохраняются, убирается лишь связь между u и v).

Формулы Швенка [2] таковы:

$$G(\lambda) = \lambda G_v(\lambda) - \sum_{u \text{ ad } v} G_{uv}(\lambda) - 2 \sum_{C \ni v} G_C(\lambda),$$

$$G(\lambda) = G_{\bar{u}\bar{v}}(\lambda) - G_{uv}(\lambda) - 2 \sum_{C \ni \bar{u}\bar{v}} G_C(\lambda).$$

Первое суммирование ведется по всем вершинам u , смежным с v , второе по всем простым циклам C , содержащим вершину v , третье по всем простым циклам C , содержащим ребро $\bar{u}\bar{v}$.

Вторую формулу можно переписать так:

$$G(\lambda) = G_{\bar{u}\bar{v}}(\lambda) + G_{uv}(\lambda) - 2 \sum_{u \cdot P \cdot v} G_P(\lambda), \quad (1)$$

где суммирование ведется по всем простым путям с концами u и v .

3. Квадрат суммы по простым путям

Пусть α и β — различные вершины графа G . Сумма $\sum_{\alpha \cdot P \cdot \beta}$ означает суммирование по всем простым путям с концами α и β . Если α и β лежат в разных компонентах, то эта сумма по определению равна 0.

Теорема 1. *Справедливо равенство*

$$\left(\sum_{\alpha \cdot P \cdot \beta} G_P(\lambda) \right)^2 = G_\alpha(\lambda) G_\beta(\lambda) - G(\lambda) G_{\alpha\beta}(\lambda).$$

Доказательство основано на следующих леммах.

Пусть, как обычно, $X_{j_1, \dots, j_s}^{i_1, \dots, i_s}$ означает алгебраическое дополнение для минора, стоящего на пересечении столбцов с номерами $i_1, \dots, i_s$ и строк с номерами $j_1, \dots, j_s$. Леммы 1–3 относятся к случаю $k \neq l$.

Лемма 1. *Справедливо равенство*

$$X_k^l = X_k^l|_{x_l^k=0} - x_l^k X_{k,l}^{k,l}.$$

Лемма 2. *Справедливо равенство*

$$|X| = |X|_{x_l^k=x_k^l=0} + x_l^k X_l^k + x_k^l X_k^l + x_l^k x_k^l X_{l,k}^{k,l}.$$

Доказательство. Ясно, что

$$\begin{aligned} |X| &= |X|_{x_l^k=0} + x_l^k X_l^k \\ &= (|X|_{x_l^k=x_k^l=0} + x_k^l X_k^l|_{x_l^k=0}) + x_l^k X_l^k \\ &= |X|_{x_l^k=x_k^l=0} + x_k^l (X_k^l + x_l^k X_{l,k}^{k,l}) + x_l^k X_l^k. \end{aligned}$$

Последнее равенство вытекает из леммы 1.

Лемма 3. Пусть задана некоторая нумерация вершин графа G , вершины α и β имеют номера k и l соответственно, тогда

$$\sum_{\alpha \cdot P \cdot \beta} G_P(\lambda) = (\lambda I - A_G)_l^k.$$

Доказательство. Рассмотрим два возможных случая. Пусть α и β смежны в G . Применяя лемму 2 к матрице $\lambda I - A_G$, получим, что

$$G(\lambda) = G_{\overline{\alpha\beta}}(\lambda) - 2(\lambda I - A_G)_l^k + G_{\alpha\beta}(\lambda).$$

Принимая во внимание (1), получим требуемое утверждение.

Рассмотрим второй случай. Пусть α и β несмежны в G . Обозначим через $\tilde{G}$ граф, получающийся из G добавлением ребра $\overline{\alpha\beta}$. Тогда

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha \cdot P \cdot \beta} G_P(\lambda) &= \sum_{\alpha \cdot P \cdot \beta} \tilde{G}_P(\lambda) - \tilde{G}_{\alpha\beta}(\lambda) \\ &= (\lambda I - A_{\tilde{G}})_l^k - (\lambda I - A_G)_{k,l}^{k,l} = (\lambda I - A_G)_l^k. \end{aligned}$$

Последнее равенство вытекает из леммы 1.

Теперь утверждение теоремы вытекает из леммы 3 и формулы Сильвестра

$$|X|X_{k,l}^{k,l} - X_k^k X_l^l + X_l^k X_k^l = 0.$$

4. Следствия

С помощью полученных результатов можно упрощать некоторые рекуррентные формулы. Например, формулы Швенка теперь можно существенно сократить.

Следствие 1. Справедливы равенства

$$\begin{aligned} G(\lambda) &= \lambda G_v(\lambda) - \sum_{u \text{ ad } v} G_{uv}(\lambda) - 2 \sum_{\{\alpha, \beta\} \text{ ad } v} \sqrt{G_{\alpha v}(\lambda) G_{\beta v}(\lambda) - G_v(\lambda) G_{\alpha\beta v}(\lambda)}, \\ G(\lambda) &= G_{\overline{uv}}(\lambda) - G_{uv}(\lambda) - 2 \sqrt{G_u(\lambda) G_v(\lambda) - G_{\overline{uv}}(\lambda) G_{uv}(\lambda)}, \end{aligned}$$

где $\sqrt{f}$ — арифметический квадратный корень из f в кольце многочленов $R[x]$, то есть

$$\sqrt{f} = g \iff f = g^2$$

и старший коэффициент g неотрицателен, и второе суммирование ведется по всевозможным неупорядоченным двухэлементным множествам вершин, смежных с v .

Вторая формула показывает, что характеристический многочлен графа выражается через многочлены четырех его подграфов. Открытым остается вопрос о возможности еще более уменьшить число подграфов.

Пусть n — число вершин графа, r_{uv} — расстояние между вершинами u и v , h_{uv} — степень многочлена

$$G_u(\lambda) G_v(\lambda) - G(\lambda) G_{uv}(\lambda).$$

Следствие 2. *Справедливо равенство*

$$2(n - 1 - r_{uv}) = h_{uv}.$$

Заметим, что ранее М. В. Сумин в [3] независимо доказал это утверждение для некоторых типов графов.

Пусть R_{uv} — число простых путей длины r_{uv} с концами u и v , a_{uv} — старший коэффициент многочлена $G_u(\lambda)G_v(\lambda) - G(\lambda)G_{uv}(\lambda)$. Ясно, что $R_{uv}^2 = a_{uv}$.

Граф называется устойчивым, если в спектре его матрицы смежности нет нуля, и неустойчивым в противном случае. Это понятие имеет важное применение в химии углеводородов (подробнее об этом см. [1]). Ребро $\overline{uv}$ назовем альтернирующим, если $G_{\overline{uv}}(0) = -G_{uv}(0)$, и особо альтернирующим, если $G_{\overline{uv}}(0) = -G_{uv}(0) = (1/4)G(0)$.

Следствие 3. *Если двудольный граф неустойчив, то все его ребра альтернирующие.*

Если двудольный граф устойчив и $\overline{uv}$ — его ребро, то либо оно неальтернирующее, либо особо альтернирующее.

Доказательство. Вершины u и v лежат в разных долях, поэтому либо G_u , либо G_v имеет неравномошные доли, а значит (см. [1], следствие теоремы 8.2), он неустойчив. Поэтому $G_u(0)G_v(0) = 0$. Подставим это во второе равенство следствия 1 и, проведя преобразования, получим, что

$$G(0)(2(G_{uv}(0) + G_{\overline{uv}}(0)) - (G(0) + 4G_{uv}(0))) = (G_{uv}(0) + G_{\overline{uv}}(0))^2.$$

Отметим, что это следствие получено совместно с В. Ф. Субботиным.

Список литературы

1. Цветкович Д., Дуб М., Захс Х., *Спектры графов. Теория и применение*. Наукова Думка, Киев, 1984.
2. Schwenk A. J., Computing the characteristic polynomial of a graph. *Lect. Notes Math.* (1974) **406**, 153-172.
3. Сумин М. В., *О спектральном методе нахождения расстояния между вершинами для некоторых классов графов*. Воронеж. гос. ун-т, Воронеж, 1985.

Статья поступила 12.08.1999.

Исправленный вариант поступил 25.05.2001.