УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Емир Зогић

Неке особине резолвентне и Рандићеве енергије графа

Докторска дисертација

Крагујевац, 2018.

Идентификациона страница докторске дисертације

Аутор

- Име и презиме: Емир Зогић
- Датум и место рођења: 19.02.1988., Нови Пазар
- Запослење: асистент на Државном универзитету у Новом Пазару

Докторска дисертација

- Наслов: Неке особине резолвентне и Рандићеве енергије графа
- Број страна: 116
- Број слика и табела: 27 слика, 1 табела
- Установа у којој је израђена: Природно-математички факултет, Крагујевац
- Научна област (УДК): Математика 51
- Ментор: др Бојана Боровићанин, доцент Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу

Оцена и одбрана

- Датум пријаве теме: 31.01.2018.
- Број одлуке и датум прихватања теме дисертације: IV-01-352/7, 16.05.2018.
- Комисија за оцену подобности теме и кандидата: број одлуке IV-01-102/11, 14.02.2018.
    1. др Иван Гутман, професор емеритус Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу, редовни члан САНУ (председник Комисије)
    2. др Игор Миловановић, редовни професор Електронског факултета Универзитета у Нишу
    3. др Бојана Боровићанин, доцент Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу
- Комисија за оцену и одбрану дисертације: број одлуке IV-01-653/13, 12.09.2018.
    1. др Иван Гутман, професор емеритус Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу, редовни члан САНУ (председник Комисије)
    2. др Игор Миловановић, редовни професор Електронског факултета Универзитета у Нишу
    3. др Марјан Матејић, доцент Електронског факултета Универзитета у Нишу
- **Датум одбране докторске дисертације**:

Садржај

Предговор

Спектрална теорија графова је математичка дисциплина у којој се особине графа изучавају коришћењем сопствених вредности и сопствених вектора различитих матрица придружених графу. Ова грана математике последњих деценија бележи интензиван развој, захваљујући бројним и различитим применама, пре свега у домену рачунарства, али и у области хемије, теорији електричних кола, теорији коначних аутомата, у економским наукама, социологији, биологији, итд.

Предмет истраживања у дисертацији је енергија графа, графовска инваријанта заснована на спектру графа, која има значајне примене у различитим областима, а пре свега у хемији. Енергија графа данас представља веома актуелну тематику истражиавња, како са аспекта хемије, тако и са аспекта математике. Специјално, биће разматрана резолвентна и Рандићева енергија графа. Резолвентна енергија графа је графовска инваријанта која је уведена недавно (2016. године), те стога представља инваријанту која је веома актуелна са аспекта истраживања њених особина, примене, као и њене повезаности са другим графовским инваријантама. Рандићева енергија се доводи у везу са Рандићевим индексом, графовском инваријантом која има многобројне примене у хемији и математици.

У оквиру дисертације дата је систематизација одређених особина резолвентне и Рандићеве енергије, а затим њихова компарација са неким новим резултатима.

Дисертација садржи пет поглавља која су подељена на известан број одељака.

У првом поглављу дат је приказ познатих резултата из теорије графова, неопходних за даља разматрања, а посебно резултата који се односе на спектар и енергију графа.

У другом поглављу су изложени основни појмови, дефиниције и познати резултати који се односе на резолвентну и Рандићеву енергију. Ово поглавље је подељено на два одељка.

Одељак 2.1 посвећен је дефиницији Рандићеве матрице и Рандићеве енергије. Дата је веза између Рандићеве матрице и Рандићевог индекса, затим основне особине спектра Рандићеве матрице, као и веза између спектра Рандићеве матрице и матрице суседства. Такође, приказано је да се Рандићева енергија може посматрати као нормализована Лапласова енергија графа. Излагања у овом одељку базирана су на монографији [72].

У одељку 2.2 дата је дефиниција резолвентне енергије и доказане су њене основне особине. Такође, уведене су дефиниције Лапласове резолвентне и ненегативне Лапласове резолвентне енергије. Овај одељак базиран је на радовима [68] и [17].

У трећем поглављу представљене су границе за Рандићеву и резолвентну енергију.

Одељак 3.1 се односи на границе за Рандићеву енергију и подељен је на пододељке познатих и нових резултата. Преглед познатих резултата конципиран је уз коришћење монографије [72]. У пододељку нових резултата дате су неке нове горње и доње границе за Рандићеву енергију које су објављене у радовима [78] и [131]. Неке од њих су побољшања граница публикованих у протеклих неколико година. На крају пододељка нових резултата, из рада [134] је изложено једно уопштење Рандићеве матрице и Рандићеве енергије из чега је изведено неколико граница за Рандићеву и класичну енергију графа.

У одељку 3.2 дате су границе за резолвентну енергију, засноване на резултатима радова [68], [133] и [136]. Најпре су изложене границе из рада [68], које представљају прве границе добијене за ову графовску инваријанту. Затим су изложене и новије границе за резолвентну енергију, садржане у радовима [133] и [136], и на крају неке нове границе за Лапласову резолвентну и ненегативну Лапласову резолвентну енергију које су излагане у [135].

Четврто поглавље се односи на екстремалне графове у односу на резолвентну енергију графова у класама стабала, унициклличних, бициклличних и трициклличних графова. Ово поглавље је базирано на радовима [68] и [3]. На крају поглавља дата су четири отворена проблема.

У петом поглављу у одељку 5.1 познатих резултата разматрана је веза између Рандићеве и Лапласове енергије и класичне енергије графа. Одељак 5.1 је конципиран на основу монографије [71].

У одељку 5.2 приказани су нови резултати који се односе на везу између резолвентне и класичне енергије графа.

Најважнији допринос аутора овој дисертацији представљају следећи резултати:

- Испитивање основних особина резолвентне енергије (одељак 2.2, према резултатима рада [68]).
- Побољшање једне горње и једне доње границе за Рандићеву енергију (одељак 3.1, према резултатима радова [78] и [131]).
- Добијање нових граница за резолвентну, Лапласову резолвентну и ненегативну Лапласову резолвентну енергију графа (одељак 3.2, према резултатима радова [68], [133], [136] и [135]).
- Карактеризација екстремалних графова у односу на резолвентну енергију у класама свих стабала, унициклличних, бициклличних и трициклличних графова (одељци 4.1-4.4, према резултатима радова [68] и [3]).
- Одређивање зависности између резолвентне и класичне енергије графа (одељак 5.2).

⋆ ⋆ ⋆

Овом приликом посебно желим да се захвалим свом ментору, др Бојани Боровићанин на помоћи, подршци и изузетно коректном односу према мом раду и залагању што је за мене било од кључног значаја. Такође, велику захвалност дугујем професорима др Ивану Гутману, др Игору Миловановићу и др Мирославу Петровићу на великој помоћи и подршци током мог целокупног истраживачког рада. Захваљујем се свима који су веровали у мене, а посебно професорима др Ћемалу Долићанину, др Драгићу Банковићу, др Радошу Бакићу и др Драгани Тодорић. На крају, захваљујем се својој породици и пријатељима, на стрпљењу и разумевању током свих ових година.

Крагујевац, октобар 2018. Емир Зогић

Глава 1

Увод

1.1 Теорија графова

Нека је V непразан коначан скуп и E бинарна релација дефинисана на скупу V. За уређени пар $G = (V, E)$ кажемо да је граф. Елементи скупа V су чворови графа, а елементи скупа E су гране графа. Ако је E симетрична релација, тада је граф G симетричан или неоријентисан, што подразумева да ако пару чворова v_i, v_j одговарају две гране (v_i, v_j) и (v_j, v_i), на цртежу се не повлаче две линије између чворова v_i и v_j, него се јединствена линија двострано оријентише или се уопште не оријентише. Грана која спаја чвор са самим собом назива се петља. Граф G је антисиметричан или оријентисан ако и само ако је E антисиметрична релација. Ако је E једна комбинација са понављањем скупа V^2, тада се између два чвора у графу G могу појавити две или више грана исте оријентације које се називају вишеструке гране.

У применама, појам графа добија своју пуну вредност када се скупови и релације на њима представљају геометријским фигурама које су образоване од низа тачака спојених линијама. Теорија графова проучава особине ових фигура које остају инваријантне при континуалним деформацијама, тј. непрекидним пресликавањима.

Теорија графова је једна од математичких дисциплина коју последњих година одликује изузетно интензиван развој. Гипкост апарата теорије графова омогућава да се бројни проблеми на коначним скуповима, из веома разнородних научних области, формулишу и решавају на јединствен начин. Примена теорије графова и њених метода заузима данас значајно место у теорији електричних кола, теорији поузданог преноса информација, затим у хемији, економским наукама, социологији, биологији, итд. Главни разлог за овако широк распон примена лежи, у првом реду, у јасној геометријској представи коју граф садржи и која је блиска интуитивној представи коју човек има о особинама и понашању објекта који се представља графом [25].

У наставку ћемо изложити неке основне појмове теорије графова користећи [25,126]. На почетку истакнимо да на основу дефиниције графа следи да је $|V| \geqslant 1$. Осим тога, може бити $E = \emptyset$. Такође, скупови V и E не морају бити коначни. Уколико су оба коначна, тада кажемо да је G коначан граф.

У теорији графова разликују се три типа тзв. неусмерених графова:

- **ПРОСТ (ЈЕДНОСТАВАН) ГРАФ** је граф који не садржи петље ни вишеструке гране.
- МУЛТИГРАФ је граф код кога могу постојати вишеструке гране, али не и петље.
- ПСЕУДОГРАФ је граф који може садржати вишеструке гране и (или) петље.

Поред наведених врста графова постоје усмерени графови.

Дефиниција 1.1.1. *Усмерени граф или диграф D је уређени пар $(V(D), A(D))$, где је $V(D)$ скуп чворова, а $A(D)$ скуп лукова, односно усмерених грана које спајају чворове скупа $V(D)$.*

У дисертацији ће бити разматрани само прости коначни графови. Навешћемо дефиниције неких појмова из теорије графова који су од интереса за даља разматрања.

Дефиниција 1.1.2. *Степен чвора v графа G, у ознаци $d_G(v)$ (или d_v), је број грана суседних (инцидентних) са њим. За прост граф G, степен чвора v се дефинише као број суседних чворова чвору v.*

Највећи степен чвора у графу G означавамо са $\Delta(G)$, а најмањи са $\delta(G)$. Ако је $d_G(v) = 0$, онда за чвор v кажемо да је изоловани чвор графа G.

Следећа тврђења су директна последица дефиниције степена чвора.

Теорема 1.1.1. [25] *За сваки граф $G = (V, E)$ важи*

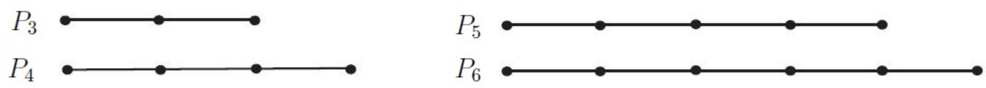
$$\sum_{v \in V} d_G(v) = 2|E|.$$

Лема 1.1.1. [25] *У сваком графу број чворова непарног степена је паран.*

Сада ћемо навести неке важније класе графова.

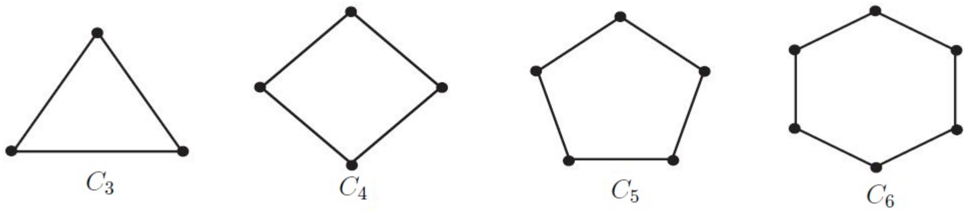
Дефиниција 1.1.3. *Празан граф је граф без грана, тј. састоји се само од изолованих чворова.*

Дефиниција 1.1.4. *Пут са n чворова, у ознаци P_n, дефинисан је са $V(P_n) = \{v_1, v_2, .., v_n\}$, $E(P_n) = \{v_i v_{i+1} : i = 1, \ldots, n-1\}$ (слика 1.1).*

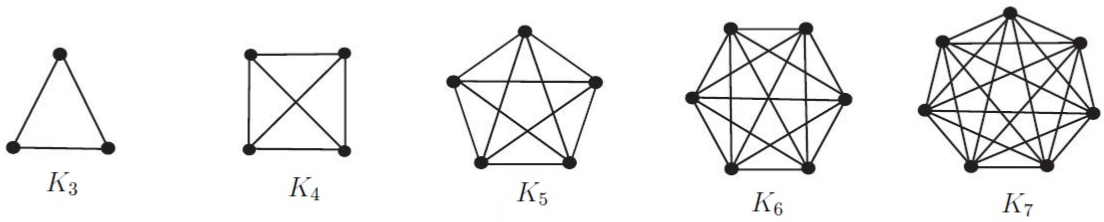


Слика 1.1: Граф P_n за $n = 3, 4, 5, 6$

Дефиниција 1.1.5. *Контура (циклус) са n чворова, у ознаци C_n, је прост граф дефинисан са $V(C_n) = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}, E(C_n) = \{v_1v_2, v_2v_3, \ldots, v_{n-1}v_n, v_nv_1\}$ (слика 1.2).*



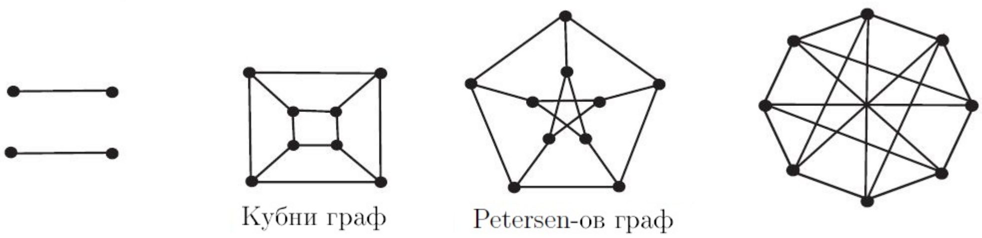
Слика 1.2: Граф C_n за $n = 3, 4, 5, 6$



Слика 1.3: Граф K_n за $n = 3, 4, 5, 6, 7$

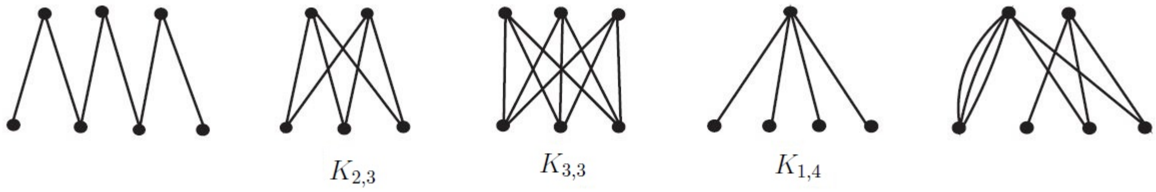
Дефиниција 1.1.6. *Комплетан граф са n чворова, у ознаци K_n, је прост граф у коме је сваки пар чворова спојен граном (слика 1.3).*

Дефиниција 1.1.7. *Граф је r-регуларан ако му је сваки чвор степена r, тј. $d(v) = r$, за свако $v \in V$. Граф је регуларан ако је r-регуларан за неко r (слика 1.4).*



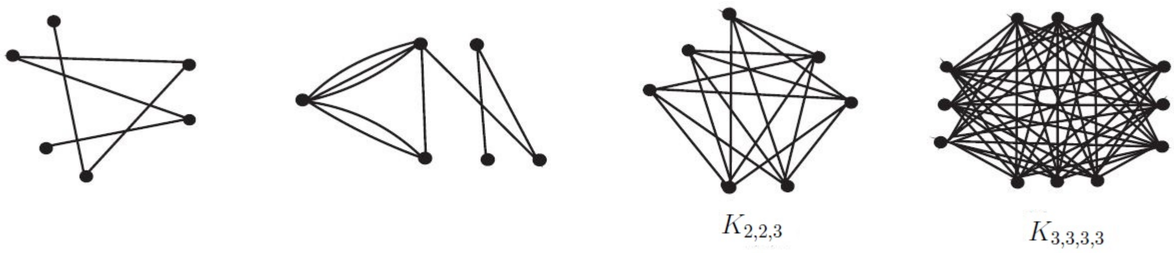
Слика 1.4: Регуларни графови

Дефиниција 1.1.8. *Бипартитан граф је граф чији се скуп чворова може поделити на два међусобно дисјунктна скупа X и Y тако да свака грана има један крај у X, а други у Y. Разбијање (партиција) (X, Y) скупа чворова графа зове се бипартиција графа. Комплетан бипартитан граф је прост граф с партицијом (X, Y) у коме је сваки чвор скупа X спојен граном са сваким чвором скупа Y. Ако је $|X| = a$ и $|Y| = b$, комплетан бипартитан граф означавамо са $K_{a,b}$ (слика 1.5).*



Слика 1.5: Бипартитни графови

Дефиниција 1.1.9. *Граф је k-партитан, $k \geqslant 1$, ако се његов скуп чворова V може разбити на k међусобно дисјунктних подскупова, тако да ниједна грана не повезује два чвора из истог подскупа. Комплетан k-партитан граф је k-партитан граф у коме су свака два чвора из различитих партиција спојена граном. Ако су $V_1, V_2, \ldots, V_k$ блокови k-партиције са бројем чворова $n_1, \ldots, n_k$, редом, тада комплетан k-партитан граф означавамо са $K_{n_1,n_2,\ldots,n_k}$. Граф је комплетан мултипартитан ако је комплетан k-партитан за неко $k \geqslant 2$.*



Слика 1.6: k-партитни графови, $k = 3, 4$

Даље ћемо дефинисати појам подграфа.

Дефиниција 1.1.10. *Граф $G' = (V', E')$ је подграф графа $G = (V, E)$ ако је $V' \subseteq V$ и $E' \subseteq E \cap \binom{V'}{2}$. Граф G је надграф графа G' ако је G' подграф графа G. Граф $G' = (V', E')$ је индуковани подграф графа $G = (V, E)$ ако важи $V' \subseteq V$ и $E' = E \cap \binom{V'}{2}$. За граф G' се каже да је индукован скупом чворова V'. Граф $G' = (V', E')$ је разапињући (спрежни) подграф графа $G = (V, E)$ ако је $V' = V$ и $E' \subseteq E$.*

Дефиниција 1.1.11. *Стабло је повезан граф са n чворова и $m = n - 1$ грана.*

Основне особине стабала су дате у следећој теореми.

Теорема 1.1.2. [126] *Нека је $G = (V, E)$ граф, такав да је $|V| = n > 1$. Следећи искази су еквивалентни.*

(а) *Граф G је стабло.*

(б) *Граф G је повезан и не садржи ниједну контуру.*

(в) *Граф G има $n - 1$ грана и не садржи ниједну контуру.*

(г) *Граф G је повезан, али губи то својство ако се удаљи његова произвољна грана.*

(д) Граф G не садржи ниједну контуру, али додавањем нове гране, између произвољна два чвора, образује се једна.

(ђ) Свака два чвора графа G су повезана тачно једним путем.

Дефиниција 1.1.12. *За повезан граф G кажемо да је c-цикличан ако важи $c = m - n + 1$. Ако је $c = 1$, тј. $m = n$, онда је G унicикличан, за $c = 2$ кажемо да је граф бицикличан, а ако је $c = 3$, онда за G кажемо да је трицикличан граф.*

Део теоријске хемије у којој се као основни математички апарат примењује теорија графова данас се уобичајено назива хемијска теорија графова. Математички апарат хемијске теорије графова омогућава да се много дубље и много прецизније сагледају одређене хемијске чињенице, те да се оне на јасан и недвосмислен начин формулишу. За хемијску теорију графова од фундаменталног значаја је појам молекулског графа. Граф који одговара структурној формули назива се молекулски граф одговарајућег молекула. Сложени односи унутар појединачних молекула изражавају се често бројем - структурним дескриптором. Тада се губи знатан део укупне информације о молекулској структури, али са бројевима је обично много погодније радити него са "хемијском структуром". Молекулски структурни десктриптори засновани на молекулском графу често се називају тополошки индекси. У вези са молекулским структурним дескрипторима морамо увек имати на уму следећи општи проблем. Молекулска структура је не-нумерички појам, па се не може у потпуности описати бројевима. С друге стране, у хемији се врше мерења и сви мерни резултати се изражавају бројем. На тај начин једној одређеној супстанци се могу придружити разни бројчани подаци, који одговарају њеним физичко-хемијским особинама. Трагање за везама између структуре (ненумеричког појма) и физичко-хемијских особина једињења (које су изражене бројем) јесте једно од основних циљева хемије као науке [58]. Будући да су нам од интереса само структурни дескриптори засновани на молекулском графу, потребно је дефинисати појам графовске инваријанте као и појам изоморфних графова.

Дефиниција 1.1.13. *Два графа $G_1 = (V_1, E_1)$ и $G_2 = (V_2, E_2)$ су изоморфна ако и само ако постоји бијекција $f : V_1 \to V_2$ која чува особину суседности чворова.*

Дефиниција 1.1.14. *Нека је $I = I(G)$ математички објекат (број, матрица, полином, вектор, група,...) који се на неки начин придружује графу G. Ако је задовољен услов да за свака два изоморфна графа G_1 и G_2 важи $I(G_1) = I(G_2)$, онда се каже да је I инваријанта графа или да је I графовска инваријанта.*

Дефинисаћемо даље и следеће појмове који су значајни за разматрања у дисертацији.

Дефиниција 1.1.15. *Нека је дат граф $G = (V, E)$, где је $V = \{v_1, \ldots, v_n\}, E = \{e_1, \ldots, e_m\}$. Шетња дужине t у графу G је низ $W = (v_0, e_1, v_1, e_2, v_2, \ldots, e_t, v_t)$. Уколико је $v_0 = v_t$, тада је W затворена шетња.*

Дефиниција 1.1.16. *Чворови u и v графа G су повезани ако у G постоји шетња од u до v. Граф G је повезан ако су свака два чвора $u, v \in V$ повезана.*

Дефиниција 1.1.17. *Ако су чворови* u *и* v *графа* G *повезани, тада је растојање од чвора* u *до чвора* v*, у ознаци* $d(u,v)$*, једнако дужини најкраћег пута између чворова* u *и* v*. Дијаметар графа* G*, у ознаци* $diam(G)$*, дефинисан је са* $diam(G) = \max_{u,v \in V(G)} d(u,v)$.

Дефиниција 1.1.18. *Унија два графа* G_1 *и* G_2 *у ознаци* $G_1 \cup G_2$ *је граф чији је скуп чворова унија скупова чворова графова* G_1 *и* G_2*, а скуп грана унија скупова грана графова* G_1 *и* G_2.

Дефиниција 1.1.19. *Комплетан производ графова* G_1 *и* G_2 *у ознаци* $G_1 \vee G_2$ *је граф добијен од* $G_1 \cup G_2$ *повезивањем сваког чвора из* G_1 *са сваким чвором из* G_2.

1.2 Спектри графа

Спектар графа G дефинише се као спектар матрице која је придружена датом графу. Најпознатији спектар графа заснован је на матрици суседства. Поред овог спектра, посебно се издвајају три типа Лапласовог спектра које ћемо изложити у наставку.

На почетку дајемо неке основне појмове и резултате о спектру матрице.

Дефиниција 1.2.1. *Ако је* A *комплексна квадратна матрица реда* n*, тада се сваки вектор* $x \in \mathbb{C}^n$ *који је различит од нула вектора и задовољава услов*

$$(\exists \lambda \in \mathbb{C})\ Ax = \lambda x\,, \tag{1.1}$$

назива сопствени вектор матрице A*, а скалар* λ *сопствена вредност матрице* A*. За вектор* x *каже се да одговара сопственој вредности* λ.

Дефиниција 1.2.2. *Скуп свих сопствених вредности квадратне матрице* A *назива се спектар те матрице.*

Теорема 1.2.1. *Број* λ_0 *је сопствена вредност матрице* A *ако и само ако* λ_0 *задовољава једначину* $\det(\lambda I_n - A) = 0$*, где је са* I_n *означена јединична матрица реда* n.

Дефиниција 1.2.3. *Ако је* A *квадратна матрица, матрица* $\lambda I_n - A$ *је њена карактеристична матрица, полином* $P(\lambda) = \det(\lambda I_n - A)$ *по* λ *њен карактеристични полином и једначина* $\det(\lambda I_n - A) = 0$ *њена карактеристична једначина.*

Једначина $\det(\lambda I_n - A) = 0$ има важну улогу у небеској механици, геометрији, теорији осцилација и у другим областима теоријске и примењене математике. У применама је нарочито важан случај када је матрица A симетрична.

Простом графу може се придружити више матрица, тј. њихових спектара, а најстарија и најразвијенија теорија изграђена је полазећи од класичне матрице суседства графа.

Дефиниција 1.2.4. *Нека је* G *прост граф са скупом чворова* $V(G) = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$*. Матрица суседства графа* G*, у ознаци* $A(G)$*, је квадратна* $n \times n$ *матрица дефинисана на следећи начин:*

$$[A(G)]_{i,j} = \begin{cases} 1, & \textit{ако су чворови } v_i \textit{ и } v_j \textit{ суседни,} \\ 0, & \textit{у супротном.} \end{cases}$$

Сопствене вредности матрице суседства $A(G)$ означаваћемо са $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ и називати сопственим вредностима графа G.

Спектралне особине матрица каква је матрица суседства $A(G)$ описане су у Perron-Frobenius-овој теорији ненегативних матрица. У циљу формулације Perron-Frobenius-ове теореме, као централне теореме у поменутој теорији, наведимо дефиниције ненегативних и неразложивих матрица.

Дефиниција 1.2.5. *Правоугаона матрица A са реалним елементима*

$$A = ||a_{ik}|| \quad (i = 1, 2, \ldots, m; k = 1, 2, \ldots, n)$$

назива се ненегативном (у ознаци $A \geqslant 0$) или позитивном (у ознаци $A > 0$) матрицом ако су сви елементи матрице A ненегативни ($a_{ik} \geqslant 0$) или позитивни ($a_{ik} > 0$).

Да бисмо дефинисали појам разложиве, односно неразложиве матрице, дефинишимо најпре појам пермутације матрице. Под пермутацијом квадратне матрице $A = ||a_{ik}||_1^n$ подразумевамо пермутацију врста матрице A у комбинацији са истом пермутацијом колона.

Дефиниција 1.2.6. *Квадратна матрица $A = ||a_{ik}||_1^n$ се назива разложивом ако постоји пермутација матрице A којом се она своди на облик*

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} B & O \\ C & D \end{bmatrix},$$

где су B и C квадратне матрице. У супротном, за матрицу A кажемо да је неразложива.

Perron је 1907. године доказао значајну особину спектра позитивних матрица.

Теорема 1.2.2. [55] *Позитивна матрица $A = ||a_{ik}||_1^n$ увек има позитивну реалну сопствену вредност r која је прост корен карактеристичне једначине и већа је од модула свих осталих сопствених вредности. Овој "максималној" сопственој вредности одговара сопствени вектор $z = (z_1, z_2, \ldots, z_n)$ матрице A са позитивним координатама $z_i > 0, i = 1, 2, \ldots, n$.*

Позитивна матрица је специјалан случај неразложиве ненегативне матрице. Frobenius је генерализовао Perron-ову теорему разматрајући спектралне особине неразложивих ненегативних матрица.

Теорема 1.2.3. [55] *Неразложива ненегативна матрица $A = ||a_{ik}||_i^n$ увек има позитивну сопствену вредност r која је прост корен карактеристичне једначине. Модули свих осталих сопствених вредности су мањи од r. Сопственој вредности r одговара сопствени вектор са позитивним координатама.*

Ако матрица A има h сопствених вредности $\lambda_0 = r, \lambda_1, \ldots, \lambda_{h-1}$ модула r, тада су бројеви $\lambda_0 = r, \lambda_1, \ldots, \lambda_{h-1}$ међусобно различити и представљају корене једначине

$$\lambda^h - r^h = 0. \tag{1.2}$$

Уопште, цео спектар $\lambda_0, \lambda_1, \ldots, \lambda_{n-1}$ матрице A посматран као систем тачака у комплексној λ-равни, пресликава се у самог себе ротацијом равни за угао од $\frac{2\pi}{h}$. Ако је $h > 1$, тада се матрица A може пермутацијом свести на циклични облик

$$A = \begin{bmatrix} O & A_{12} & O & \cdots & O \\ O & O & A_{23} & \cdots & O \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ O & O & O & \cdots & A_{h-1,h} \\ A_{h1} & O & O & \cdots & O \end{bmatrix}, \tag{1.3}$$

при чему су одговарајући блокови на главној дијагонали квадратне матрице.

Ако је дата квадратна симетрична матрица A реда n, тада се њена главна подматрица реда k добија брисањем последњих $n-k$ врста и $n-k$ колона матрице A.

Следећа теорема говори о спектру главне подматрице симетричне матрице.

Лема 1.2.1. [123] *Нека је B квадратна симетрична матрица реда p и нека је B_k њена главна подматрица реда k. Тада, за $i = 1, 2, \ldots, k$ важи*

$$\xi_{p-i+1}(B) \leqslant \xi_{k-i+1}(B_k) \leqslant \xi_{k-i+1}(B),$$

где је са $\xi_i(B)$ означена i-та највећа сопствена вредност матрице B.

Матрица суседства $A(G)$ је симетрична матрица ($A(G) = A(G)^T$), и отуда спектар графа G садржи само реалне бројеве који према теореми 1.2.3 припадају сегменту $[-r, r]$. Највећа сопствена вредност r се зове индекс графа G.

За најмању сопствену вредност q графа G важе неједнакости $-r \leqslant q \leqslant 0$. За граф без грана важи да је $q = 0$, док је за графове са бар једном граном $q \leqslant -1$.

У следећој теореми су изложене основне спектралне особине графова.

Теорема 1.2.4. [26] *Нека је G граф са спектром $\{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n\}$. Означимо са q најмању, а са r највећу сопствену вредност графа G. Тада важе следећа тврђења:*

1. *Бројеви $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ су реални и важи да је $\sum\limits_{i=1}^{n} \lambda_i = 0$.*

2. *Ако граф G не садржи ниједну грану, тада је $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_n = 0$.*

3. *Ако граф G садржи бар једну грану, тада је*

$$1 \leqslant r \leqslant n-1, \tag{1.4}$$

$$-r \leqslant q \leqslant -1. \tag{1.5}$$

Једнакост на десној страни неједнакости (1.4) важи ако и само ако је G комплетан граф, а једнакост на левој страни неједнакости (1.4) важи ако и само ако су компоненте графа G, K_2 и евентуално K_1.

Једнакост на десној страни неједнакости (1.5) *важи ако и само ако су компоненте графа G комплетни графови, док једнакост на левој страни неједнакости* (1.5) *важи једнакост ако и само ако је компонента графа G која има највећи индекс бипартитан граф.*

Ако је G повезан граф, доња граница у (1.4) *може се заменити са* $2\cos\dfrac{\pi}{n+1}$, *при чему једнакост важи ако и само ако је G пут P_n.*

У следећој теореми је дат потребан и довољан услов регуларности графа.

Теорема 1.2.5. [24] *Граф G је регуларан ако и само ако је*

$$n\lambda_1 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \cdots + \lambda_n^2.$$

Ако једнакост важи, број компоненти графа G једнак је мултиплицитету сопствене вредности λ_1.

Пређимо сада на разматрање спектра бипартитног графа.

Теорема 1.2.6. [28] *Граф G је бипартитан ако и само ако је његов спектар симетричан у односу на координатни почетак.*

Теорема 1.2.7. [24] *Нека је дат бипартитан граф G са сопственим вредностима $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$. Тада је G бипартитан ако и само ако је $\lambda_1 = -\lambda_n$.*

Наводимо још два резултата која ће нам бити потребна.

Лема 1.2.2. [26] *Граф G има једну сопствену вредност ако и само ако је G тотално неповезан граф, тј. састоји се само од изолованих чворова. Граф G има две различите сопствене вредности $\lambda_1 > \lambda_2$, вишеструкости m_1 и m_2, редом, ако и само ако је граф G унија m_1 комплетних графова реда $\lambda_1 + 1$. У овом случају, $\lambda_2 = -1$ и $m_2 = m_1\lambda_1$.*

Лема 1.2.3. [26] *Нека је* $\overline{d} = \dfrac{1}{n}\sum\limits_{i=n}^{n} d_i = \dfrac{2m}{n}$ *средња вредност степена чворова и λ_1 највећа сопствена вредност графа G. Тада је $\overline{d} \leqslant \lambda_1$, при чему једнакост важи ако и само ако је G регуларан граф.*

Важан појам који ћемо користити је k-ти спектрални момент графа G, у ознаци $M_k(G)$, који се дефинише са $M_k = M_k(G) = \sum\limits_{i=1}^{n} \lambda_i^k$.

Навешћемо следећи познати резултат који се односи на број шетњи дужине k у графу.

Теорема 1.2.8. [26] *Ако је A матрица суседства графа, тада је елемент a_{ij}^k на позицији (i,j) матрице A^k једнак броју шетњи дужине k које почињу у чвору i и завршавају се у чвору j.*

На основу претходне теореме следи да је број затворених шетњи дужине k једнак k-том спектралном моменту, јер је $\sum\limits_{j=1}^{n} a_{jj}^{(k)} = tr(A^k) = \sum\limits_{j=1}^{n} \lambda_j^k$.

За спектралне моменте графа важе следеће једнакости [26]

$$M_0 = n,\ \ M_1 = 0,\ \ M_2 = 2m,\ \ M_3 = 6t,$$

где је t број троуглова у графу.

Карактеристичан полином графа G са n чворова, у ознаци $\phi(G, \lambda)$, дефинише се са $\phi(G, \lambda) = \det(\lambda I_n - A)$.

У следећој леми дат је поступак којим се може одредити карактеристични полином графа.

Лема 1.2.4. [26] *Нека је $v \in V(G)$ и $\mathcal{C}(v)$ скуп контура које садрже чвор v. Тада је*

$$\phi(G, \lambda) = \lambda\phi(G - v, \lambda) - \sum_{vw \in E(G)} \phi(G - v - w, \lambda) - 2 \sum_{Z \in \mathcal{C}(v)} \phi(G - V(Z), \lambda),$$

где је $\phi(G - v - w, \lambda) \equiv 1$ ако је $G \cong P_2$, и $\phi(G - V(Z), \lambda) \equiv 1$ ако је G контура.

Поред спектра графа који је заснован на матрици суседства, постоје и други спектри засновани на матрицама различитим од матрице суседства. Најпознатије такве матрице су Лапласова матрица L, нормализована Лапласова матрица $\mathcal{L}$, као и ненегативна Лапласова матрица Q. У наставку ћемо навести неке основне особине поменутих матрица и њихових спектара.

Нека је D дијагонална матрица чији су дијагонални елементи једнаки степенима чворова графа. Лапласова матрица се дефинише као $L = D - A$. Дакле, Лапласова матрица $L(G)$ је матрица дефинисана са

$$[L(G)]_{ij} = \begin{cases} -1, & \text{ако су чворови } v_i \text{ и } v_j \text{ суседни}; i \neq j \\ 0, & \text{ако чворови } v_i \text{ и } v_j \text{ нису суседни}; i \neq j \\ d_i, & \text{ако је } i = j. \end{cases}$$

Ако са μ_i означимо i-ту највећу сопствену вредност матрице L, тада је

$$\mu_1 \geqslant \mu_2 \geqslant \cdots \geqslant \mu_n.$$

Скуп $\{\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_n\}$ назива се Лапласов спектар графа.

Показаћемо да су Лапласове сопствене вредности ненегативне и у ту сврху подсетимо се најпре дефиниције позитивне семидефинитне матрице.

Дефиниција 1.2.7. *Симетрична матрица $A \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$ је позитивна семидефинитна ако је $x^T A x \geqslant 0$ за свако $x \in \mathbb{R}^n$.*

Теорема 1.2.9. [55] *Ако постоји матрица B таква да је $A = B^T B$, тада је матрица A позитивна семидефинитна.*

Теорема 1.2.10. [55] *Ако је матрица A позитивна семидефинитна, онда су све њене сопствене вредности ненегативне.*

Доказ. Уочимо најпре да су све сопствене вредности матрице A реалне, с обзиром на то да је A симетрична матрица. Нека је λ произвољна сопствена вредност матрице A и x одговарајући сопствени вектор. Тада је

$$Ax = \lambda x.$$

Множећи последњу једнакост са x^T са леве стране добијамо

$$x^T Ax = \lambda x^T x.$$

Како је A позитивна семидефинитна матрица добијамо да је $\lambda x^T x \geqslant 0$. Како је x сопствени вектор и $x^T x = (x, x) = ||x||^2 > 0$, следи да је $\lambda \geqslant 0$. $\square$

Покажимо да је L позитивна семидефинитна матрица када се произвољно оријентишу гране графа G тако што ћемо је приказати у облику $L = \tilde{R}\tilde{R}^T$, где је $\tilde{R}$ матрица инциденције чворова и грана одговарајућег усмереног графа $\vec{G}$ дефинисана са

$$[\tilde{R}(G)]_{ie} = \begin{cases} -1, & \text{ако је } v_i \text{ почетни чвор гране } e \\ 0, & \text{ако чвор } v_i \text{ и грана } e \text{ нису инцидентни} \\ +1, & \text{ако је } v_i \text{ завршни чвор гране } e. \end{cases}$$

Матрица $\tilde{R}$ се зове градијент матрица усмереног графа $\vec{G}$ (и градијент матрица графа G).

Лема 1.2.5. [28] *Лапласова матрица L графа G се може приказати у облику $L = \tilde{R}\tilde{R}^T$.*

Доказ. Приметимо да је $(\tilde{R}\tilde{R}^T)_{ij} = \sum_e (\tilde{R})_{e,v_i}(\tilde{R})_{e,v_j}$, одакле разликујемо следеће случајеве:

- $i = j$:
  $(\tilde{R}\tilde{R}^T)_{ij} = \sum\limits_e (\tilde{R}_{e,v_i})^2 = \sum\limits_{e \sim v_i} 1 = d_i$, где d_i означава степен чвора v_i.

- $i \neq j$ и не постоји грана између v_i и v_j:
  $(\tilde{R}\tilde{R}^T)_{ij} = \sum\limits_e (\tilde{R}_{e,v_i})(\tilde{R}_{e,v_j}) = 0$, јер свака грана није инцидентна са бар једним од чворова v_i, v_j.

- $i \neq j$ и постоји грана e' између чворова v_i и v_j:
  $(\tilde{R}\tilde{R}^T)_{ij} = \sum\limits_e (\tilde{R}_{e,v_i})(\tilde{R}_{e,v_j}) = (\tilde{R}_{e',v_i})(\tilde{R}_{e',v_j}) = -1.$ $\square$

На основу теореме 1.2.9 и леме 1.2.5 следи да је матрица L позитивна семидефинитна, одакле на основу теореме 1.2.10 следи да су све сопствене вредности матрице L ненегативне.

За матрицу L, као што је већ речено, важи да је $L = D - A$. Како је сума елемената j-те врсте матрице A једнака степену чвора v_j, следи да је $L\mathbf{j} = \mathbf{0}$, где је $\mathbf{j}$ вектор чије су све координате једнаке 1. Ово значи да је $L\mathbf{j} = 0 \cdot \mathbf{j}$, одакле следи да је $\mu_n = 0$. Како је $\mathbf{j}$ сопствени вектор, L има $n - 1$ линеарно независних сопствених вектора у ортогоналном комплементу $\mathbf{j}^\perp$.

Теорема 1.2.11. [28] *Вишеструкост сопствене вредности 0 матрице L једнака је броју компоненти графа G.*

Спектар матрице L, за разлику од спектра матрице A, одређује број компоненти графа.

Посматрајући траг матрице L, добијамо

$$\mu_1 + \mu_2 + \cdots + \mu_n = d_1 + d_2 + \cdots + d_n,$$

одакле следи да је број грана m одређен помоћу Лапласовог спектра

$$m = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} \mu_i. \tag{1.6}$$

Теорема 1.2.12. [28] *Нека је G граф са Лапласовим сопственим вредностима $\mu_1 \geqslant \mu_2 \geqslant \cdots \geqslant \mu_n$. Ако су степени чворова графа G дати у нерастућем поретку, тј. $d_1 \geqslant d_2 \geqslant \cdots \geqslant d_n$, тада је*

$$\sum_{i=1}^{k} \mu_i \geqslant \sum_{i=1}^{k} d_i \quad (k = 1, 2, \ldots, n), \tag{1.7}$$

при чему једнакост важи када је $k = n$.

Коментар 1.2.1. [28] *Из* (1.7) *добијамо*

$$\frac{n-1}{n}\mu_{n-1} \leqslant \overline{d} \leqslant \frac{n-1}{n}\mu_1,$$

где $\overline{d}$ представља средњу вредност степена чворова. Ове две неједнакости је побољшао Fiedler на следећи начин:

$$\mu_{n-1} \leqslant \frac{n}{n-1}\delta \ \text{ и } \ \mu_1 \geqslant \frac{n}{n-1}\triangle, \tag{1.8}$$

где су δ и $\triangle$ редом минимални и максимални степен чвора.

Теорема 1.2.13. [28] *Ако је G повезан граф са r различитих Лапласових сопствених вредности и дијаметром D, тада је $D \leqslant r - 1$.*

Ако је G граф без изолованих чворова, тада се нормализована Лапласова матрица дефинише са $\mathcal{L} = D^{-\frac{1}{2}} L D^{-\frac{1}{2}}$. Дефиниција нормализоване Лапласове матрице може се проширити на све графове:

$$[\mathcal{L}(G)]_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{ако је } i = j, d_i \neq 0, \\ -\frac{1}{\sqrt{d_i d_j}}, & \text{ако је чвор } v_i \text{ суседан са чвором } v_j,\ i \neq j, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Нека је T дијагонална матрица чији је i-ти дијагонални елемент једнак $1/d_i$ ако је $d_i \neq 0$, односно 0, у супротном. Тада је $\mathcal{L} = T^{\frac{1}{2}} L T^{\frac{1}{2}}$ и за било коју градијент матрицу $\tilde{R}$ важи да је $\mathcal{L} = \mathcal{R}\mathcal{R}^T$, где је $\mathcal{R} = T^{\frac{1}{2}}\tilde{R}$. Дакле, све сопствене вредности матрице $\mathcal{L}$ су ненегативне. Најмања сопствена вредност $\tilde{\mu}_n$ матрице $\mathcal{L}$ је 0, јер је $(\sqrt{d_1}, \sqrt{d_2}, \ldots, \sqrt{d_n})^T$ одговарајући сопствени вектор.

Теорема 1.2.14. [28] *Нека је G граф са n чворова ($n \geqslant 2$) и нормализованим Лапласовим сопственим вредностима $\tilde{\mu}_1 \geqslant \tilde{\mu}_2 \geqslant \cdots \geqslant \tilde{\mu}_n$. Тада*

(а) $\sum\limits_{i=1}^{n} \tilde{\mu}_i \leqslant n$, при чему једнакост важи ако и само ако G нема изолованих чворова;

(б) Ако је $G \ncong K_n$, тада је $\tilde{\mu}_{n-1} \leqslant 1$;

(в) Ако G нема изолованих чворова, тада је $\tilde{\mu}_{n-1} \leqslant \dfrac{n}{n-1}$, при чему једнакост важи ако и само ако $G \cong K_n$;

(г) Ако G нема изолованих чворова, тада је $\tilde{\mu}_1 \geqslant \dfrac{n}{n-1}$, при чему једнакост важи ако и само ако $G \cong K_n$;

(д) $\tilde{\mu}_1 \leqslant 2$, при чему једнакост важи ако и само ако G има нетривијалну компоненту која је бипартитна.

Теорема 1.2.15. [28] *Вишеструкост сопствене вредности 0 матрице $\mathcal{L}$ једнака је броју компоненти графа G.*

Последица 1.2.1. [28] *Граф G је бипартитан ако и само ако је сопствена вредност $\tilde{\mu}_1$ једнака 2 и исте је вишеструкости као сопствена вредност $\tilde{\mu}_n$.*

Ненегативна Лапласова матрица Q је матрица дефинисана са $Q = D + A$. Нека је B матрица инциденције чворова и грана графа G са n чворова и m грана. Тада је $BB^T = Q$.

Означимо i-ту највећу сопствену вредност матрице Q са q_i. Како је Q позитивна семидефинитна матрица, важи да је

$$q_1 \geqslant q_2 \geqslant \cdots \geqslant q_n \geqslant 0.$$

Приметимо да је $m = \frac{1}{2}tr(Q) = \frac{1}{2}\sum\limits_{i=1}^{n} q_i$.

Ако је G повезан граф, тада је матрица Q неразложива и постоји јединствени позитиван јединични сопствени вектор који одговара сопственој вредности q_1.

Теорема 1.2.16. [28] *Нека је G нетривијалан повезан граф са n чворова. Тада је граф G бипартитан ако и само ако је $q_n = 0$. У том случају, 0 је проста сопствена вредност матрице Q.*

Последица 1.2.2. [28] *Вишеструкост сопствене вредности 0 матрице Q једнака је броју компоненти графа G које су бипартитне или тривијалне.*

Користећи спектар матрице суседства, можемо одредити да ли је граф бипартитан, али не и да ли је граф повезан. На основу Лапласовог спектра можемо утврдити да ли је граф повезан, али не и да ли је бипартитан. Ако је познат спектар ненегативне Лапласове матрице Q, на основу последице 1.2.2, ако је G повезан, можемо одредити да ли је G бипартитан. Такође, ако је G бипартитан граф, можемо утврдити да ли је G повезан. С друге стране, на основу спектра нормализоване Лапласове матрице можемо утврдити да ли је G повезан и да ли је G бипартитан граф.

Последица 1.2.3. [28] *За било који бипартитан граф, спектри матрица Q и L се поклапају.*

Последица 1.2.4. [28] *Ако је q_1 највећа сопствена вредност матрице Q, тада*

(а) $q_1 = 0$ *ако и само ако G нема грана;*

(б) $q_1 < 4$ *ако и само ако су све компоненте од G путеви;*

(в) За повезан граф G важи да је $q_1 = 4$ ако и само ако G је контура или граф $K_{1,3}$.

Полугранска шетња дужине k у графу G је низ чворова $v_1, v_2, \ldots, v_{k+1}$, такав да је v_i суседан са v_{i+1} или $v_i = v_{i+1}$, за свако $i \in \{1, \ldots, k\}$. За полугранску шетњу дужине k кажемо да је затворена ако је $v_1 = v_{k+1}$.

Теорема 1.2.17. [29] *Број полугранских затворених шетњи дужине k у графу G једнак је k-том спектралном моменту матрице Q, тј. $M_k(Q) = \sum_{i=1}^{n} q_i^k$.*

У следећој леми дајемо везу између сопствених вредности матрице суседства и Лапласове матрице за регуларне графове.

Лема 1.2.6. [111] *Нека је G повезан r-регуларан граф реда n. Тада је*

$$\mu_i = r - \lambda_{n-i+1}, \quad i = 1, 2, \ldots, n,$$

где су λ_i и μ_i i-та највећа сопствена вредност матрице суседства и Лапласове матрице графа G, респективно.

Теорема 1.2.18. [30] *Нека је G повезан граф са дијаметром D и r различитих ненегативних Лапласових сопствених вредности. Тада је $D \leqslant r - 1$.*

Коментар 1.2.2. *На основу теорема* 1.2.13 *и* 1.2.18 *закључујемо да за графове са тачно једном, односно тачно две различите (ненегативне) Лапласове сопствене вредности важи аналогно тврђење тврђењу леме* 1.2.2.

1.3 Енергија графа

Појам енергије графа уведен је 1978. године у раду [59] и од тада до данас је објављен велики број радова који се баве математичким и хемијским особинама енергије графа. У почетку, главно тежиште истраживања енергије је била зависност енергије од молекулске структуре (или од структуре графа) и зато ћемо кратко изложити везу између хемије и спектралне теорије графова, као и увођење појма енергије графа које је проистекло из хемије. У ту сврху, користићемо књигу [58].

За почетак, наведимо везу између спектралне теорије графова и хемије у виду одређених појмова. Следећом табелом дата је кореспонденција између назива неких појмова у теорији графова и одговарајућих назива у хемији [125].

Појам у теорији графова	**Појам у хемији**
Хемијски (молекулски) граф	Структурална формула
Чвор	Атом
Грана	Хемијска веза
Степен чвора	Валенца атома
Стабло	Ациклична структура
Ланац	Линеарни алкан
Контура	Циклоалкан
Бипартитни граф	Алтернативна хемијска структура
Небипартитни граф	Неалтернативна хемијска структура
1-фактор	Kekulé-ова структура
Матрица суседства	Hückel-ова (тополошка) матрица
Сопствена вредност матрице	Сопствена вредност Hückel-ове матрице
Сопствени вектор матрице	Hückel-ова (тополошка) молекуларна орбитала
Спектрална теорија графова	Hückel-ова теорија

Граф који одговара структурној формули назива се молекулски граф одговарајућег молекула. Постоје две основне врсте молекулских графова за које је Cayley увео називе плерограм и кенограм. Ови називи се у савременој литератури ретко употребљавају. Плерограм се конструише тако што се сваки атом приказује чвором, а два чвора су суседна ако су одговарајући атоми хемијски повезани. Кенограм се конструише тако што се чворовима приказују сви атоми осим водоникових. На тај начин кенограм репрезентује само (угљенични) скелет органског молекула. Истраживања у савременој хемијској теорији графова готово искључиво се врше на кенограмима. У литератури се зато често говори о молекулским графовима, подразумевајући при томе кенограме.

Када је почетком 20. века уведена квантна теорија постало је јасно да се помоћу ње могу описати основне особине хемијских једињења, а посебно електронска структура молекула. У то време је Hückel применио квантну теорију за објашњење хемијске и термодинамичке стабилности бензена. Показало се да је метода коју је конструисао за опис електронске структуре бензена применљива и за друге коњуговане π-електронске системе. Та метода је данас позната под именом Hückel-ова молекулско-орбитална теорија и уобичајено се означава скраћено као ХМО теорија.

За квантно-механички опис неког молекула потребно је решити одговарајућу Schrödinger-ову једначину облика

$$\mathcal{H}\Psi = E\Psi,$$

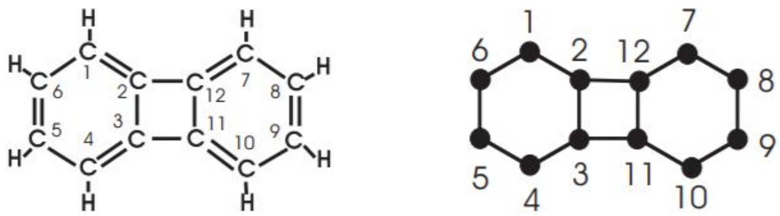
где је $\mathcal{H}$ Hamilton-ов оператор, Ψ таласна функција, а E енергија посматраног система. Hamilton-ов оператор је познат за сваки конкретан молекул, а задатак се састоји у налажењу оних бројева E и функција Ψ који задовољавају Schrödinger-ову једначину. Hückel је уместо правог Hamilton-овог оператора употребио једну његову апроксимативну форму.

У наставку ћемо се ограничити на молекуле коњугованих угљоводоника. У ХМО теорији описују се само њихови π-електрони. Сваки атом угљеника даје систему један π-електрон; дакле молекул са n угљеникових атома има n π-електрона.

У ХМО теорији се уместо правог Hamilton-овог оператора користи његова апроксимативна матрична репрезентација у виду квадратне матрице $\mathbf{H}$, реда n, која је дефинисана са

$$[\mathbf{H}]_{ij} = \begin{cases} \alpha, & \text{ако је } i = j \\ \beta, & \text{ако је } i \neq j \text{ и ако постоји хемијска веза између атома } i \text{ и } j \\ 0, & \text{ако је } i \neq j \text{ и ако атоми } i \text{ и } j \text{ нису хемијски везани.} \end{cases}$$

Размотримо матрицу $\mathbf{H}$ на примеру бифенилена који је типичан незасићени коњуговани угљоводоник. На слици 1.7 приказан је бифенилен H и његов одговарајући граф G.



Слика 1.7: Бифенилен H и одговарајући граф G

Матрица $\mathbf{H}$ се може записати у облику

$$\mathbf{H} = \alpha I_n + \beta A(G).$$

У молекулско-орбиталној теорији позната је тзв. секуларна једначина

$$\det(EI_n - \mathbf{H}) = 0,$$

где је матрица $\mathbf{H}$ позната и I_n је одговарајућа јединична матрица. Секуларна једначина се решава по енергији E и при том се добија n различитих решења $E_1, E_2, \ldots, E_n$, која се интерпретирају као енергије молекулских орбитала, тј. енергије које поједини електрони имају када се таласају на начин описан том молекулском орбиталом. Десну страну секуларне једначине можемо сада трансформисати на следећи начин

$$\begin{aligned} \det(EI_n - \mathbf{H}) &= \det(EI_n - (\alpha I_n + \beta A(G))) = \det((E-\alpha)I_n - \beta A(G)) \\ &= \beta^n \det\left(\frac{E-\alpha}{\beta} I_n - A(G)\right) = \beta^n \det(\lambda I_n - A(G)) = \beta^n \phi(G, \lambda), \end{aligned}$$

где смо увели смену $\lambda = \dfrac{E-\alpha}{\beta}$. Услов $\det(EI_n - \mathbf{H}) = 0$ је еквивалентан услову $\phi(G, \lambda) = 0$. Закључујемо да између сопствених вредности $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ молекулског графа G и π-електронских молекулско-орбиталних енергетских нивоа $E_1, E_2, \ldots, E_n$, постоји веза

$$E_i = \alpha + \lambda_i \beta, \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{1.9}$$

Укупна π-електронска енергија у ХМО теорији добија се тако што се саберу енергије појединачних π-електрона. Ако број електрона у j-тој молекулској орбитали означимо са g_j, онда је укупна π-електронска енергија једнака

$$E_\pi = \sum_{j=1}^{n} g_j E_j,$$

одакле на основу (1.9) следи

$$E_\pi = \sum_{j=1}^{n} g_j(\alpha + \lambda_j\beta) = \alpha n + \beta \sum_{j=1}^{n} g_j\lambda_j,$$

где је n укупан број π-електрона. С обзиром на то да су α и β константе, једини нетривијални део израза за E_π је $\sum\limits_{j=1}^{n} g_j\lambda_j$. У ХМО теорији се тај део искључиво и проучава.

За већину коњугованих молекула попуњене су (са по два π-електрона) све везивне орбитале, а празне су све антивезивне орбитале. То значи да је

$$g_j = \begin{cases} 2, & \text{ако је } \lambda_j > 0 \\ 0, & \text{ако је } \lambda_j < 0. \end{cases}$$

За израз $\sum\limits_{j=1}^{n} g_j\lambda_j$, свеједно је коју вредност има g_j за невезивне молекулске орбитале (када је $\lambda_j = 0$). У најчешћем случају, важи да је

$$\sum_{j=1}^{n} g_j\lambda_j = 2\sum_{+} \lambda_j,$$

где $\sum\limits_{+}$ означава сумирање преко позитивних сопствених вредности.

Величину $2\sum\limits_{+} \lambda_j$ ћемо означити са $\mathcal{E} = \mathcal{E}(G)$. Она је потпуно одређена графом G. Сумирање преко позитивних сопствених вредности може се заменити сумирањем преко свих сопствених вредности. Наиме, ако са $\sum\limits_{-} \lambda_j$ означимо сумирање преко негативних соптвених вредности λ_j, тада користећи чињеницу да је $\sum\limits_{j=1}^{n} \lambda_j = \sum\limits_{+} \lambda_j + \sum\limits_{-} \lambda_j = 0$, следи да је

$$2\sum_{+} \lambda_j = \sum_{+} \lambda_j - \sum_{-} \lambda_j = \sum_{+} |\lambda_j| + \sum_{-} |\lambda_j| = \sum_{j=1}^{n} |\lambda_j|.$$

Величина $\mathcal{E}(G)$ дефинисана је за све графове, а не само за молекулске графове коњугованих једињења. То је била мотивација да се предложи следећа генерализација појма ХМО укупне π-електронске енергије.

Дефиниција 1.3.1. [59] *Нека је дат граф G и нека је $\{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n\}$ његов спектар. Енергија графа G, у ознаци $\mathcal{E}(G)$, је графовска инваријанта дефинисана са*

$$\mathcal{E}(G) = \sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|.$$

Следећи су основни разлози за увођење појма енергије графа:

- Сви познати резултати у теорији укупне π-електронске енергије односе се на енергију графа. Велики број тих резултата важи за све графове, дакле није ограничен на молекулске графове.

- У истраживањима укупне π-електронске енергије, нарочито њене зависности од молекулске структуре, често је погодније не ограничавати се на молекулске графове. Разматрања која се односе на све графове често омогућују бољи увид у хемијску страну проблема и његовог решења.

- Показано је да се енергија графа може успешно примењивати као молекулски структурни дескриптор, за описивање физичко-хемијских особина алкана. То указује да се хемијске примене енергије графа не ограничавају на Hückelову теорију коњугованих молекула.

- Како је $\mathcal{E}(G)$ симетрична функција свих сопствених вредности, ова дефиниција је допринела да се многи математичари почну бавити енергијом графова.

Од 1996. године, енергију графова као област истраживања хемије и математике прати интензиван развој, што се посебно огледа у чињеници да се од 2007. годишње публикује око 60 радова о енергији графова, а до данас је објављено преко 800 радова о овој графовској инваријанти.

Велики број интересантних и нетривијалних резултата у вези са енергијом графова мотивисао је истраживаче широм света да дефинишу и разматрају неке нове енергије које су засноване на матрицама различитим од матрице суседства, као и на неким полиномима. Данас постоји преко 60 различитих типова енергије графа. Навешћемо неке најпознатије.

Лапласова енергија. За сопствене вредности Лапласове матрице важи да је $\mu_i \geqslant 0, i = 1, \ldots, n$ и $\sum_{i=1}^{n} \mu_i = 2m$, одакле следи да је дефинисање енергије засноване на Лапласовој матрици са $\sum_{i=1}^{n} |\mu_i|$ тривијално. Енергија заснована на Лапласовој матрици назива се Лапласова енергија, у ознаци $LE(G)$, и дефинисана је са [77]

$$LE(G) = \sum_{i=1}^{n} \left| \mu_i - \frac{2m}{n} \right| .$$

Енергија растојања. Нека је G повезан граф са n чворова и $V(G) = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$. Матрица растојања, у ознаци $\mathcal{D}(G)$, је квадратна матрица реда n, чији је елемент на позицији (i, j) једнак растојању између чворова v_i и v_j. Нека су $\rho_1, \rho_2, \ldots, \rho_n$ сопствене вредности матрице $\mathcal{D}(G)$. С обзиром на то да је сума ових сопствених вредности једнака нули, следи да се енергија заснована на матрици $\mathcal{D}$, у ознаци $DE(G)$, може дефинисати са [81]

$$DE(G) = \sum_{i=1}^{n} |\rho_i|.$$

Енергија $DE(G)$ назива се енергија растојања.

Енергија матрица. Нека је M реална матрица типа $p \times q$. Сингуларне вредности матрице M су једнаке (позитивним) квадратним коренима сопствених вредности матрице MM^T. Нека су $s_1, s_2, \ldots, s_p$ сингуларне вредности матрице M. Енергија матрице M, у ознаци $E(M)$, дефинисана је са [114]

$$E(M) = \sum_{i=1}^{p} s_i.$$

Енергија спаривања. Нека је дат прост граф G са n чворова. Означимо са $m(G,k)$ број k-спаривања графа G, тј. број одабира k независних грана. Специјално, важи да је $m(G,1) = m, m(G,k) = 0$ за $k > \frac{n}{2}$ и $m(G,0) = 1$. Полином спаривања у графу G, у ознаци $\alpha(G)$, дефинише се са

$$\alpha(G) = \alpha(G,x) = \sum_{k \geqslant 0} (-1)^k m(G,k) x^{n-2k}.$$

Нека су $x_1, x_2, \ldots, x_n$ нуле полинома спаривања $\alpha(G)$. Енергија спаривања, у ознаци $ME(G)$, дефинисана је са [76]

$$ME(G) = \sum_{i=1}^{n} |x_i|.$$

Са математичког аспекта енергије графа, као и њених модификација, од значаја је анализирати следећа три проблема:

1. Одређивање што бољих граница у којима се налазе вредности различитих типова енергије графа.

2. Налажење екстремалних графова у разним класама графова, где се посебно издвајају класе стабала, уницикличних, бицикличних и трицикличних графова са задатим бројем чворова.

3. Утврђивање међусобне зависности различитих типова енергије графа.

У сва три наведена проблема, за било који тип енергије графа, важно је истражити могућности представљања одређене енергије.

Најважнији резултати који се односе на енергију графа, $\mathcal{E}(G)$, могу се наћи у монографијама [72, 92]. Посебно је за проучавање енергије графа значајна Coulson-ова интегрална формула, као и њена примена на одређивање екстремалних стабала. Такође, за наша даља разматрања од интереса је дефинисати хипоенергетске и хиперенергетске графове.

У теорији графова, тзв. Coulson-ова интегрална формула (1.10) има веома значајну улогу. Ову формулу је добио Coulson и она гласи

$$\mathcal{E}(G) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(n - \frac{ix\phi'(G,ix)}{\phi(G,ix)} \right) dx = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(n - x \frac{d}{dx} \ln \phi(G,ix) \right) dx, \tag{1.10}$$

где је G дати граф, $\phi(G,x)$ је његов карактеристични полином, $\phi'(G,x) = \frac{d}{dx}\phi(G,x)$ његов први извод и $i^2 = -1$.

У формули (1.10), интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} F(x)dx$ представља главну вредност одговарајућег интеграла, тј.

$$\lim_{t\to+\infty} \int_{-t}^{+t} F(x)dx.$$

Формула (1.10) и њене модификације имају важне примене у хемији. Ова формула успоставља везу између енергије графа и карактеристичног полинома графа.

Следећа теорема је позната као Sachs-ова теорема и она даје зависност између коефицијената карактеристичног полинома графа и структуре графа.

Теорема 1.3.1. [26] *Нека је G граф чији је карактеристични полином $\phi(G) = \sum\limits_{k=0}^{n} a_k x^{n-k}$. Тада, за $k \geqslant 1$, важи да је*

$$a_k = \sum_{S\in L_k} (-1)^{\omega(S)} 2^{c(S)},$$

где L_k означава скуп Sachs-ових подграфова (то су графови чије су све компоненте P_2 и/или C_3 и/или C_4 и/или C_5 и/или C_6 и/или..) графа G; $\omega(S)$ је број повезаних компоненти од S, $c(S)$ је број контура садржаних у S. Специјално, $a_0 = 1$.

Нека су G_1 и G_2 два графа са истим бројем чворова. Тада, применом формуле (1.10) добијамо следећу формулу

$$\mathcal{E}(G_1) - \mathcal{E}(G_2) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \ln \frac{\phi(G_1, ix)}{\phi(G_2, ix)} dx. \tag{1.11}$$

Формула (1.11) се назива Coulson-Jacobs-ова формула.

Подинтегрална функција у формули (1.11) може имати комплексну вредност, а лева страна ове формуле има реалну вредност. Узимајући у обзир да је реални део од $\ln z$, $\ln |z|$, формулу (1.11) можемо записати на следећи начин

$$\mathcal{E}(G_1) - \mathcal{E}(G_2) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \ln \left| \frac{\phi(G_1, ix)}{\phi(G_2, ix)} \right| dx. \tag{1.12}$$

Ако је $G_2 \cong \overline{K}_n$, тада је $\mathcal{E}(G_2) = 0$ и десна страна формуле (1.11) постаје једнака енергији графа G_1. Узимајући у обзир да је

$$\phi(G, x) = \sum_{k\geqslant 0}^{n} a_k x^{n-k} \ \text{ и } \ \phi(\overline{K}_n, x) = x^n,$$

следи да је

$$\mathcal{E}(G) = \frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \ln\left|\sum_{k\geqslant 0} a_k (ix)^{-k}\right| dx, \tag{1.13}$$

одакле се добија следећа формула за енергију графа

$$\mathcal{E}(G) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^2}\ln\left[\left(\sum_{k\geqslant 0}(-1)^k a_{2k}x^{2k}\right)^2 + \left(\sum_{k\geqslant 0}(-1)^k a_{2k+1}x^{2k+1}\right)^2\right] dx. \tag{1.14}$$

Нека је $b_{2k}(G) = |a_{2k}(G)|$ и $b_{2k+1}(G) = |a_{2k+1}(G)|$, за $0 \leqslant k \leqslant \lfloor n/2 \rfloor$. Важи да је $b_0(G) = 1$ и $b_2(G) = |E(G)|$.

Ако је G бипартитан граф, онда је његов карактеристични полином облика $\sum\limits_{k\geqslant 0}(-1)^k b_{2k} x^{n-2k}$, где је $b_{2k} \geqslant 0$ за свако k. Тада се формула (1.13) може поједноставити на следећи начин

$$\mathcal{E}(G) = \frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^2}\ln\left[\sum_{k\geqslant 0} b_{2k}x^{2k}\right] dx = \frac{2}{\pi}\int\limits_{0}^{+\infty} \frac{1}{x^2}\ln\left[1 + \sum_{k\geqslant 1} b_{2k}x^{2k}\right] dx. \tag{1.15}$$

На основу формуле (1.15) може се дефинисати квази-поредак за бипартитне графове помоћу кога се могу упоређивати енергије бипартитних графова.

За два бипартитна графа G_1 и G_2, дефинишемо квази-поредак $\preceq$ и пишемо $G_1 \preceq G_2$ ($G_2 \succeq G_1$) ако је $b_{2k}(G_1) \leqslant b_{2k}(G_2)$ ($b_{2k}(G_1) \geqslant b_{2k}(G_2)$) за свако k. Ако је бар једна од неједнакости $b_{2k}(G_1) \leqslant b_{2k}(G_2)$ ($b_{2k}(G_1) \geqslant b_{2k}(G_2)$) строга, онда пишемо $G_1 \prec G_2$ ($G_2 \succ G_1$). Дакле, важе импликације

$$G_1 \preceq G_2 \Rightarrow \mathcal{E}(G_1) \leqslant \mathcal{E}(G_2),$$
$$G_1 \prec G_2 \Rightarrow \mathcal{E}(G_1) < \mathcal{E}(G_2).$$

Са $m(G,k)$ означили смо број спаривања реда k у графу G. По дефиницији је $m(G,0) = 1$ и $m(G,k) = 0$ за свако $k < 0$. Ако је G граф без контура (ациклични граф), тада је на основу Sachs-ове теореме, $b_{2k}(G) = m(G,k)$ за свако $0 \leqslant k \leqslant \lfloor n/2 \rfloor$. Ако је G стабло (или уопштено шума), тада је

$$\phi(G,x) = \sum_{k\geqslant 0}(-1)^k m(G,k) x^{n-2k}. \tag{1.16}$$

У овом случају важи

$$\mathcal{E}(G) = \frac{2}{\pi}\int\limits_{0}^{+\infty} \frac{1}{x^2}\ln\left[1 + \sum_{k\geqslant 1} m(G,k)x^{2k}\right] dx. \tag{1.17}$$

Лема 1.3.1. [26] *Нека је $e = uv$ грана стабла T са n чворова. Тада је*

$$m(T,k) = m(T-uv,k) + m(T-u-v,k-1), \text{ за } k = 1,2,\ldots,\lfloor n/2 \rfloor,$$

где је $m(T,0) = 1$. Специјално, ако је u висећи чвор, тада је

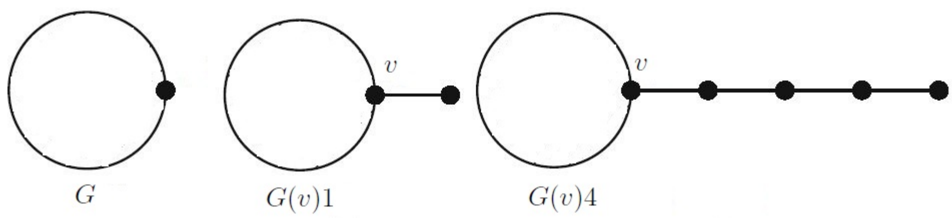
$$m(T,k) = m(T-u,k) + m(T-u-v,k-1).$$

На основу леме 1.3.1 важи следеће тврђење.

Лема 1.3.2. [92] *Нека је T ацикличан граф са n чворова ($n > 1$) и T' разапињући подграф (прави разапињући подграф) од T. Тада је $T \succeq T'$ ($T \succ T'$).*

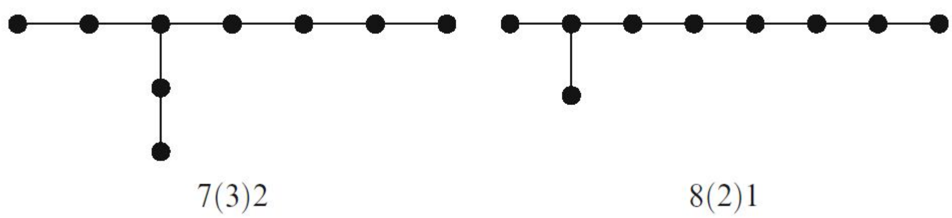
Нека је $\mathcal{T}_n$ скуп свих стабала са n чворова. Нека су чворови $v_1, v_2, \ldots, v_n$ пута P_n означени тако да су v_1 и v_n завршни чворови и чворови v_j и v_{j+1} су суседни ($j = 1,2,\ldots,n-1$).

Даље, нека је G произвољан граф и $v \in V(G)$. Означимо са $G(v)m$ граф добијен повезивањем граном пута P_m и чвора $v \in V(G)$ (слика 1.8).



Слика 1.8: Графови $G, G(v)1, G(v)4$

Осим тога, граф $P_n(i)m$ добијен повезивањем граном пута P_m и чвора $v_i \in V(P_n)$ означаваћемо са $n(i)m$ (слика 1.9).



Слика 1.9: Графови 7(3)2 и 8(2)1

За било које $T \in \mathcal{T}_n$, на основу формуле (1.16), полином $\phi(T,x)$ се може написати у облику

$$\phi(T,x) = x^n - b_2x^{n-2} + b_4x^{n-4} - \cdots + (-1)^k b_{2k} x^{n-2k} + \cdots . \tag{1.18}$$

На основу леме 1.3.1, за било коју грану $e = uv$, важи

$$b_{2j}(T) = b_{2j}(T - uv) + b_{2j-2}(T - u - v). \tag{1.19}$$

Приметимо да ако је v висећи чвор стабла T, онда је

$$b_{2j}(T) = b_{2j}(T - v) + b_{2j-2}(T - u - v). \tag{1.20}$$

Специјално, ако је $T = T_0(v)m$, онда је $b_{2j}(T) = b_{2j}(T_0(v)m - 1) + b_{2j-2}(T_0(v)m - 2)$.

Теорема 1.3.2. [92] *За било које стабло $T \in \mathcal{T}_n$ важи*

$$\mathcal{E}(S_n) \leqslant \mathcal{E}(T) \leqslant \mathcal{E}(P_n). \tag{1.21}$$

Доказ. Карактеристични полином звезде је $\phi(S_n, x) = x^n - (n-1)x^{n-2}$. За сва остала стабла $T \in \mathcal{T}_n$ такође је $b_2 = n - 1$, али за $T \neq S_n$ важи да је $b_4 > 0$. Дакле, $\mathcal{E}(T) \geqslant \mathcal{E}(S_n)$.

Сада је остало да се докаже да је $\mathcal{E}(T) \leqslant \mathcal{E}(P_n)$. Једноставном провером се утврђује да је ово тврђење тачно за $n = 2, 3, 4$. Сада, претпоставимо да $P_n \succ T$ важи за $n = 2, 3, \ldots, m-1$, где је $T \in \mathcal{T}_n$. Нека је T_0 стабло такво да је $T_0 \succ T$ за свако $T \in \mathcal{T}_m$. Показаћемо да је $T_0 \cong P_m$.

Нека је v висећи чвор у стаблу T_0 суседан чвору w. Тада на основу (1.20) важи

$$b_{2j}(T_0) = b_{2j}(T_0 - v) + b_{2j-2}(T_0 - v - w).$$

Коефицијент $b_{2j}(T_0)$ биће максималан ако су коефицијенти $b_{2j}(T_0 - v)$ и $b_{2j-2}(T_0 - v - w)$ максимални. На основу наше претпоставке и леме 1.3.2, следи да је $T_0 - v \cong P_{m-1}$ и $T_0 - v - w \cong P_{m-2}$. Ово је могуће ако је $T_0 \cong P_m$. □

Дакле, међу свим стаблима, пут P_n има максималну енергију, а звезда S_n има минималну енергију. Приметимо да је Lovasz са сарадницима у раду [95] доказао да за сва стабла T са n чворова важи

$$\lambda_1(S_n) \geqslant \lambda_1(T) \geqslant \lambda_1(P_n). \tag{1.22}$$

Сличност између неједнакости (1.21) и (1.22) је евидентна. Неједнакост (1.22) упућује на чињеницу супротну од оне која је дата у теореми 1.3.2, а то је $\mathcal{E}(S_n) \geqslant \mathcal{E}(T) \geqslant \mathcal{E}(P_n)$. Показали смо да последње неједнакости не важе, одакле следи да је резултат теореме 1.3.2 нетривијалан.

Једну од познатих горњих граница за енергију графа дао је McClelland.

Теорема 1.3.3. [105] *За било који граф G са n чворова и m грана важи*

$$\mathcal{E}(G) \leqslant \sqrt{2mn}.$$

Једнакост важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или $G \cong (n/2)K_2$.

Дакле, једна од апроксимација енергије графа је $\mathcal{E} \approx a\sqrt{2mn}$. Имајући у виду ову и друге апроксимације енергије графа које су монотоно растуће функције у односу на параметар m, као и чињеницу да је $\mathcal{E}(K_n) = 2n - 2$, долази се до следеће претпоставке.

Претпоставка 1.3.1. [59] *Ако је G граф са n чворова, различит од комплетног графа K_n, тада је $\mathcal{E}(G) < 2n - 2$.*

У каснијим разматрањима, проналажењем многих контрапримера, доказано је да претпоставка 1.3.1 није тачна. За графове за које је $\mathcal{E} > 2n - 2$ кажемо да су хиперенергетски графови. Следећа теорема указује да су скоро сви графови хиперенергетски.

Теорема 1.3.4. [114] *За скоро све графове важи*

$$\mathcal{E}(G) = \left(\frac{4}{3\pi} + o(1)\right) n^{\frac{3}{2}}.$$

За графове за које је $\mathcal{E}(G) < n$ кажемо да су хипоенергетски графови. На основу теореме 1.3.4 закључујемо да скоро сви графови нису хипоенергетски.

1.4 Аналитичке неједнакости

У спектралној и хемијској теорији графова од посебног је значаја разматрање граница у којима се налазе вредности одређених графовских инваријанти. За њихово добијање често се уводе нове или користе неке познате аналитичке неједнакости. У наставку су дате неједнакости које ћемо користити у нашим даљим разматрањима.

Лема 1.4.1. [106] *За реалне бројеве $a_1 \geqslant a_2 \geqslant \cdots \geqslant a_k \geqslant 0$ и $\alpha > 1$ важи*

$$\sum_{i=1}^{k} a_i^{\alpha} \leqslant \left(\sum_{i=1}^{k} a_i\right)^{\alpha},$$

при чему једнакост важи ако и само ако је $a_2 = \cdots = a_k = 0$.

Лема 1.4.2. [106] *Нека су $a = (a_i)$ и $b = (b_i)$ два реална низа исте монотоности и $p = (p_i)$ реални низ. Тада је*

$$\sum_{i=1}^{n} p_i \sum_{i=1}^{n} p_i a_i b_i \geqslant \sum_{i=1}^{n} p_i a_i \sum_{i=1}^{n} p_i b_i. \tag{1.23}$$

Ако су низови $a = (a_i)$ и $b = (b_i)$ различите монотоности, тада важи обрнута неједнакост од неједнакости (1.23).
Једнакост у (1.23) важи ако и само ако је $a_1 = a_2 = \cdots = a_n$ или $b_1 = b_2 = \cdots = b_n$.

Лема 1.4.3. [98] *Нека је $a_i, r, R \in \mathbb{R}$, $0 < r \leqslant a_i \leqslant R$, $i = 1, \ldots, n$. Тада је*

$$\sum_{i=1}^{n} a_i \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{a_i} \leqslant \left(1 + \alpha(n)\left(\sqrt{\frac{R}{r}} - \sqrt{\frac{r}{R}}\right)^2\right) n^2, \tag{1.24}$$

при чему је $\alpha(n) = \frac{1}{4}\left(1 - \frac{(-1)^{n+1}+1}{2n^2}\right)$.
Једнакост важи ако и само ако је $R = a_1 = a_2 = \cdots = a_n = r$ или $R = a_1 = a_2 = \cdots = a_k \geqslant a_{k+1} = \cdots = a_n = r$, за $k = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$.

Лема 1.4.4. [23] *Нека су $a_1, a_2, \ldots, a_n$ позитивни реални бројеви, такви да је $a_1 \geqslant a_2 \geqslant \cdots \geqslant a_n > 0$. Тада је*

$$\sum_{i=1}^{n} a_i - n\left(\prod_{i=1}^{n} a_i\right)^{\frac{1}{n}} \geqslant (\sqrt{a_1} - \sqrt{a_n})^2. \tag{1.25}$$

Једнакост важи ако и само ако је $a_2 = a_3 = \cdots = a_{n-1} = \sqrt{a_1 a_n}$.

Лема 1.4.5. [23] *Нека су дати реални бројеви $0 < a_1 \leqslant \cdots \leqslant a_i \leqslant \cdots \leqslant a_k \leqslant \cdots \leqslant a_n$, и $p_1, p_2, \ldots, p_n$ позитивни реални бројеви такви да је $p_1 + p_2 + \cdots + p_n = 1$ и $Q_i = p_1 + p_2 + \cdots + p_i, R_k = p_k + p_{k+1} + \cdots + p_n$. Тада је*

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{p_i}{a_i} - \frac{1}{\sum\limits_{i=1}^{n} p_i a_i} \geqslant \frac{Q_i R_k (a_k - a_i)^2}{a_i a_k (Q_i a_i + R_k a_k)}. \tag{1.26}$$

Једнакост важи ако и само ако је $a_1 = a_2 = \cdots = a_i, a_k = a_{k+1} = \cdots = a_n, a_{i+1} = a_{i+2} = \cdots = a_{k-1} = \frac{Q_i a_i + R_k a_k}{Q_i + R_k}$.

За два низа реалних бројева $a = (a_i)$ и $b = (b_i)$, $i = 1, 2, \ldots, n$, кажемо да су истог уређења ако и само ако за сваки пар (i, j), $i, j = 1, 2, \ldots, n$, важи да је $(a_i - a_j)(b_i - b_j) \geq 0$.

Нека су дати скупови $I = \{1, 2, \ldots, n\}, J_k = \{i_1, i_2, \ldots, i_k\}, J_k \subset I, 1 < i_1 < i_2 < \cdots < i_k < n$, $0 \leqslant k \leqslant n-2$, $J_0 = \emptyset$, $I_{n-k} = I - J_k$, где је $I_n = I, I_2 = \{1, n\}$ и $I_1 = \{1\}$.

Нека су $a = (a_i)$ и $p = (p_i)$ два реална ненегативна низа. Тежинска средина реда r, низа $a = (a_i)$ у односу на низ $p = (p_i)$, дефинисана је са

$$M_r(a, p; I) = \left(\frac{\sum\limits_{i \in I} p_i a_i^r}{\sum\limits_{i \in I} p_i}\right)^{\frac{1}{r}}.$$

Лема 1.4.6. [63] *Нека су $a = (a_i)$ и $b = (b_i)$, $i = 1, 2, \ldots, n$, ненегативни реални низови исте монотоности, и $p = (p_i), i = 1, 2, \ldots, n$, позитиван реални низ. Ако су парови $(M_1(a, p; I - I_2), M_1(a, p; I_2))$ и $(M_1(b, p; I - I_2), M_1(b, p; I_2))$ истог уређења, тада је*

$$\sum_{i=1}^{n} p_i \sum_{i=1}^{n} p_i a_i b_i - \sum_{i=1}^{n} p_i a_i \sum_{i=1}^{n} p_i b_i \geqslant \frac{p_1 p_n (a_1 - a_n)(b_1 - b_n)}{p_1 + p_n} \sum_{i=1}^{n} p_i. \tag{1.27}$$

Једнакост важи ако и само ако је $a_2 = a_3 = \cdots = a_{n-1} = \frac{a_1 + a_n}{2}$ или $b_2 = b_3 = \cdots = b_{n-1} = \frac{b_1 + b_n}{2}$.

Лема 1.4.7. [7] *Нека су дати реални бројеви $a_1, \ldots, a_n$ и $b_1, \ldots, b_n$, такви да је $a \leqslant a_i \leqslant A$ и $b \leqslant b_i \leqslant B, i = 1, \ldots, n$. Тада је*

$$\left| n \sum_{i=1}^{n} a_i b_i - \sum_{i=1}^{n} a_i \sum_{i=1}^{n} b_i \right| \leqslant n^2 \alpha(n)(A - a)(B - b), \tag{1.28}$$

при чему је $\alpha(n) = \frac{1}{n}\left\lfloor\frac{n}{2}\right\rfloor\left(1 - \frac{1}{n}\left\lfloor\frac{n}{2}\right\rfloor\right) = \frac{1}{4}\left(1 - \frac{(-1)^{n+1}+1}{2n^2}\right)$.
Једнакост важи ако и само ако је $a_1 = a_2 = \cdots = a_n$ *или* $b_1 = b_2 = \cdots = b_n$.

Лема 1.4.8. [88, 138] *Нека је* $a = (a_i)$, $i = 1, \ldots, n$ *низ ненегативних реалних бројева. Тада је*

$$(1.29)\qquad (n-1)\sum_{i=1}^{n} a_i + n\left(\prod_{i=1}^{n} a_i\right)^{\frac{1}{n}} \geqslant \left(\sum_{i=1}^{n}\sqrt{a_i}\right)^2 \geqslant \sum_{i=1}^{n} a_i + n(n-1)\left(\prod_{i=1}^{n} a_i\right)^{\frac{1}{n}}.$$

Једнакост у обе неједнакости (1.29) *важи ако и само ако је* $a_1 = a_2 = \cdots = a_n$.

Лема 1.4.9. [121] *Нека су* $a_i, p_i, r, R \in \mathbb{R}$, $0 < r \leqslant a_i \leqslant R$, $i = 1, \ldots, n$, $\sum\limits_{i=1}^{n} p_i = 1$. *Тада је*

$$(1.30)\qquad \sum_{i=1}^{n} p_i a_i + rR\sum_{i=1}^{n}\frac{p_i}{a_i} \leqslant r + R.$$

Једнакост важи ако и само ако је $R = a_1 = a_2 = \cdots = a_n = r$ *или је* $R = a_1 = a_2 = \cdots = a_k \geqslant a_{k+1} = \cdots = a_n = r$, *за неко* k, $1 \leqslant k \leqslant n-1$.

Лема 1.4.10. [85] *Нека су* $a_i, p_i, r, R \in \mathbb{R}$, $0 < r \leqslant a_i \leqslant R$, $i = 1, \ldots, n$, $\sum\limits_{i=1}^{n} p_i = 1$. *Тада је*

$$(1.31)\qquad \sum_{i=1}^{n} p_i a_i \sum_{i=1}^{n}\frac{p_i}{a_i} \leqslant \frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{R}{r}} + \sqrt{\frac{r}{R}}\right)^2.$$

Једнакост важи ако и само ако је $R = a_1 = a_2 = \cdots = a_n = r$.

Лема 1.4.11. [117] *Нека су* $x = (x_i)$, *и* $a = (a_i)$, $i = 1, 2, \ldots, n$, *два низа позитивних реалних бројева. Тада за свако* $r \geqslant 0$ *важи неједнакост*

$$(1.32)\qquad \sum_{i=1}^{n}\frac{x_i^{r+1}}{a_i^r} \geqslant \frac{\left(\sum\limits_{i=1}^{n} x_i\right)^{r+1}}{\left(\sum\limits_{i=1}^{n} a_i\right)^{r}}.$$

Једнакост важи ако и само ако је $\frac{x_1}{a_1} = \frac{x_2}{a_2} = \cdots = \frac{x_n}{a_n}$.

Лема 1.4.12. [13] *За бројеве* $a_1, a_2, \ldots, a_r \in \mathbb{R}^+$ *важе неједнакости*

$$P_1 \geqslant P_2^{1/2} \geqslant P_3^{1/3} \geqslant \cdots \geqslant P_r^{1/r},$$

при чему је

$$\begin{aligned} P_1 &= \frac{a_1+a_2+\cdots+a_r}{r}, \\ P_2 &= \frac{a_1a_2+a_1a_3+\cdots+a_1a_3+a_2a_3+\cdots+a_{r-1}a_r}{\frac{1}{2}r(r-1)}, \\ &\vdots \\ P_{r-1} &= \frac{a_1a_2\cdots a_{r-1}+a_1a_2\cdots a_{r-2}a_r+\cdots+a_2a_3\cdots a_{r-1}a_r}{r}, \\ P_r &= a_1a_2\cdots a_r. \end{aligned}$$

Јендакост у свим неједнакостима важи ако и само ако је $a_1=a_2=\cdots=a_r$.

Лема 1.4.13. [44] *Нека су* $X,Y\in\mathbb{R}^n$ *и* $A(X)=\frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n}x_i, A(Y)=\frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n}y_i$. *Ако је* $\phi\leqslant x_i\leqslant\Phi$ *и* $\gamma\leqslant y_i\leqslant\Gamma$, *тада је*

$$\left|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_iy_i-\frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}x_i\sum_{i=1}^{n}y_i\right|\leqslant\sqrt{(\Phi-A(X))(A(X)-\phi)(\Gamma-A(Y))(A(Y)-\gamma)}.$$

Лема 1.4.14. [108] *Нека су* $a_1\geqslant a_2\geqslant\cdots\geqslant a_n\geqslant 0$ *реални ненегативни бројеви,* $P=\sum\limits_{i=1}^{n}a_i^2$ *и* $Q=\sum\limits_{i=1}^{n}a_i$. *За произвољне реалне бројеве* k_1 *и* k_2 *са особином* $a_1\geqslant k_1\geqslant\sqrt{\frac{P}{n}}$ *и* $\sqrt{\frac{P}{n}}\geqslant k_2\geqslant a_n$, *важи следећа неједнакост*

$$Q\leqslant\min\left\{k_1+\sqrt{(n-1)(P-k_1^2)},k_2+\sqrt{(n-1)(P-k_2^2)},\sqrt{nP-\frac{n}{2}(a_1-a_n)^2}\right\}.$$

Једнакост важи ако и само ако је $a_1=a_2=\cdots=a_n$.

Лема 1.4.15. [107] *Нека је* $a=(a_i)$, $i=1,2,\ldots,n$, *низ позитивних реалних бројева. Тада за било који реалан број* r, *такав да је* $r\geqslant 1$ *или* $r\leqslant 0$, *важи следећа Jensen-ова неједнакост*

$$n^{r-1}\sum_{i=1}^{n}a_i^r\geqslant\left(\sum_{i=1}^{n}a_i\right)^r. \tag{1.33}$$

Ако је $0\leqslant r\leqslant 1$, *тада важи обрнута неједнакост од* (1.33).

Лема 1.4.16. [43] *Нека су* $a_i\neq 0$, b_i, $i=1,2,\ldots,n$, *реални бројеви са особином*

$$m\leqslant\frac{b_i}{a_i}\leqslant M,\quad i=1,2,\ldots,n. \tag{1.34}$$

Тада је

$$\sum_{i=1}^{n}b_i^2+mM\sum_{i=1}^{n}a_i^2\leqslant(M+m)\sum_{i=1}^{n}a_ib_i. \tag{1.35}$$

Једнакост у (1.35) *важи ако и само ако у свакој од* n *неједнакости* (1.34) *важи бар једна једнакост, тј.* $b_i=ma_i$ *или* $b_i=Ma_i$, *за свако* $i=1,2,\ldots,n$.

Глава 2

Основни резултати

2.1 Рандићева енергија

Нека је дат прост граф $G = (V, E)$, где је $V = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ и $|E| = m$. Нека је d_i степен чвора v_i, $i = 1, 2, \ldots, n$. Подсетимо се да смо са Δ и δ означили максимални и минимални степен чвора у графу G, респективно.

1975. године је M. Randić [118] дефинисао тополошки индекс $\mathcal{R}$ са

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}(G) = \sum_{v_i \sim v_j} \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}}, \tag{2.1}$$

где се сумирање врши по свим паровима суседних чворова v_i и v_j.

Данас се тополошки индекс $\mathcal{R}$ назива Рандићев индекс. Овај индекс нашао је бројне примене у хемији и убрзо је постао предмет истраживања и у математици [70, 91, 116, 118, 119, 120].

Посматрајући Рандићев индекс, S. Bozkurt и сарадници [11] дошли су на идеју да дефинишу Рандићеву матрицу у којој се сабирци на десној страни формуле (2.1) могу посматрати као елементи матрице. Рандићева матрица, у означи $R(G)$, дефинисана је са [11]

$$[R(G)]_{ij} = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{d_i d_j}}, & \text{ако } v_i v_j \in E(G) \\ 0, & \text{у супротном.} \end{cases}$$

Уочавамо да су Рандићев индекс и Рандићева матрица повезани релацијом

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} [R(G)]_{ij} = 2\mathcal{R}.$$

У наставку ћемо изложити неколико резултата који се односе на Рандићеву матрицу.

Теорема 2.1.1. [65] *Нека је G граф са n чворова, и A и R, редом, матрица суседства и Рандићева матрица графа G. Ако матрица A има n_+, n_0 и n_- позитивних, једнаких нули и негативних сопствених вредности, респективно ($n_+ + n_0 + n_- = n$), тада матрица R има такође n_+, n_0 и n_- позитивних, једнаких нули и негативних сопствених вредности, респективно.*

Означимо са η нултност графа G, тј. мултиплицитет (вишеструкост) броја 0 као сопствене вредности матрице суседства $A(G)$ графа G. На основу теореме 2.1.1 следи да је η заправо мултиплицитет 0 као сопствене вредности Рандићеве матрице R.

Теорема 2.1.2. [54] *Нека је G бипартитан граф са n чворова. Тада је*

$$\rho_i = -\rho_{n-i+1}, \quad i = 1, 2, \ldots, \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil.$$

Теорема 2.1.3. [10] *Повезан граф G има две различите Рандићеве сопствене вредности ако и само ако је G комплетан граф.*

У наредној теореми је дата веза између Рандићевих сопствених вредности и уопштеног Рандићевог индекса, дефинисаног са $R_{-1}(G) = \sum\limits_{v_i \sim v_j} \frac{1}{d_i d_j}$.

Теорема 2.1.4. [19, 90] *Нека је G повезан граф са n чворова и Рандићевим сопственим вредностима $\rho_1 \geqslant \rho_2 \geqslant \cdots \geqslant \rho_n$. Тада*

1. $\sum\limits_{i=1}^{n} \rho_i = 0, \sum\limits_{i=1}^{n} \rho_i^2 = 2R_{-1}$ *и* $\sum\limits_{i<j} \rho_i \rho_j = -R_{-1}$.
2. *Ако је $G \cong K_n$, тада је $\rho_1 = 1$ и $\rho_2 = \cdots = \rho_n = \frac{-1}{n-1}$.*
3. *Ако је $G \ncong K_n$, тада је $\rho_2 \geqslant 0$. Специјално, једнакост важи ако и само ако је G комплетан мултипартитан граф.*

Теорема 2.1.5. [65] *Ако граф G садржи изоловане чворове, тада је $\det R = \det A = 0$. Ако је G граф без изолованих чворова, тада је*

$$\det R = \frac{\det A}{\prod\limits_{i=1}^{n} d_i}. \tag{2.2}$$

Производ степена чворова је графовска инваријанта позната као Narumi-Katayama-ин индекс [66]. Навешћемо неколико резултата у вези са овим индексом.

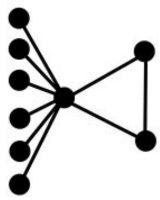
Теорема 2.1.6. [66]

(а) *Међу стаблима са n чворова највећу вредност NK индекса има пут P_n.*

(б) *Повезан уницикличан граф реда n са највећом вредносшћу NK индекса је контура C_n.*

Теорема 2.1.7. [66] *Међу свим повезаним графовима реда n, звезда S_n има најмањи NK индекс (једнак $n-1$).*

Теорема 2.1.8. [66] *Међу свим повезаним уницикличним графовима реда n, граф Y_n, приказан на слици 2.1 има најмању вредност NK индекса (једнаку $4(n-1)$).*



Слика 2.1: Граф Y_n

Зависност детерминанте матрице суседства $A(G)$ од структуре графа G је позната [80]. Изложићемо у наставку неке резултате који се односе на детерминанту $\det A$ матрице суседства графа G.

Нека је дат граф G са скупом чворова $V = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ и скупом грана $E = \{e_1, e_2, \ldots, e_m\}$. Матрица суседства која зависи од грана графа G, у ознаци $A(G, e)$, дефинисана је са

$$(A(G,e))_{i,j} = \begin{cases} 0, & \text{ако је } i = j \\ e_k, & \text{ако су чворови } i \text{ и } j \text{ повезани граном } e_k. \end{cases}$$

Подсетимо се да је линеарни подграф графа G разапињући подграф чије су компоненте путеви или контуре. Нека је k број линеарних подграфова графа G и нека је G_i i-ти линеарни подграф. За $\det(A(G, e))$ важи да је [80]

$$\det(A(G,e)) = \sum_{i=1}^{k} \det(A(G_i, e)).$$

Нека је L_i скуп компоненти графа G_i који се састоји од графова K_2 и нека је M_i скуп преосталих компоненти графа G_i који се састоји од контура. Парна компонента графа G_i је она која има паран број чворова. Означимо са r_i број парних компоненти графа G_i и са c_i број компоненти графа G_i које садрже више од два чвора (самим тим и контуру).

Теорема 2.1.9. [80] *За детерминанту* $\det(A(G_i, e))$ *важи једнакост*

$$\det(A(G_i,e)) = (-1)^{r_i} 2^{c_i} \prod_{e_k \in E(L_i)} e_k^2 \prod_{e_j \in E(M_i)} e_j.$$

Теорема 2.1.10. [80] *За* $\det(A(G))$ *важи једнакост*

$$\det(A(G)) = \sum_{i=1}^{n} (-1)^{r_i} 2^{c_i}.$$

На основу једнакости (2.2) следи да се сви резултати у вези са Narumi-Katayama -иним индексом, као и резултати о $\det(A(G))$ могу применити на $\det(R(G))$.

Теорема 2.1.11. [65], [102] *Нека је G граф са n чворова, $n \geqslant 1$, и нека је ρ_1 највећа сопствена вредност матрице $R(G)$. Тада је $\rho_1 = 0$ ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$. Ако граф G има бар једну грану, тада је $\rho_1 = 1$.*

Теорема 2.1.12. [65] *Нека је G граф са n чворова. Тада је $\rho_1 = 1$ једина позитивна сопствена вредност матрице $R(G)$ ако и само ако је једна компонента графа G комплетан мултипартитан граф, а све остале компоненте (ако постоје) су изоловани чворови.*

Рандићева енергија графа дефинише се аналогно обичној енергији графа полазећи од сопствених вредности Рандићеве матрице.

Дефиниција 2.1.1. [11] *Нека је дат прост граф G са n чворова и нека су $\rho_1 \geqslant \rho_2 \geqslant \cdots \geqslant \rho_n$ сопствене вредности матрице $R(G)$. Рандићева енергија, у ознаци $RE(G)$, дефинисана је са*

$$RE = RE(G) = \sum_{i=1}^{n} |\rho_i|.$$

Основне особине и резултати у вези са Рандићевом енергијом обједињени су у монографији [37].

Рандићева енергија се може посматрати и као нормализована Лапласова енергија. Подсетимо се да је нормализована Лапласова матрица графа G, у ознаци $\mathcal{L}$, дефинисана са

$$\mathcal{L} = I_n - D^{-1/2} A D^{-1/2},$$

где је $D(G)$ дијагонална матрица чији су дијагонални елементи степени чворова датог графа и I_n је одговарајућа јединична матрица. Напоменимо да је $D^{-1/2}$ заправо дијагонална матрица чији је i-ти дијагонални елемент једнак $\frac{1}{\sqrt{d_i}}$. Рачунајући производ $D^{-1/2}AD^{-1/2}$ долазимо до закључка да је

$$D^{-1/2} A D^{-1/2} = R.$$

Теорема 2.1.13. [11] *Нека је G граф без изолованих чворова. Тада за његову нормализовану Лапласову и Рандићеву матрицу важи следећа релација*

$$\mathcal{L} = I_n - R. \tag{2.3}$$

Рандићева матрица је за разлику од нормализоване Лапласове матрице (која је дефинисана за графове без изолованих чворова), дефинисана за све графове.

Означимо са $\tilde{\mu}_1 \geqslant \tilde{\mu}_2 \geqslant \cdots \geqslant \tilde{\mu}_n$ сопствене вредности матрице $\mathcal{L}$.

Дефиниција 2.1.2. [15] *Нека је дат прост граф G са n чворова. Нормализована Лапласова енергија графа G, у ознаци $E_{\mathcal{L}}(G)$, дефинисана је са*

$$E_{\mathcal{L}}(G) = \sum_{i=1}^{n} |\tilde{\mu}_i(\mathcal{L}) - 1|.$$

Теорема 2.1.14. [11] *Ако је G граф без изолованих чворова, тада је $E_{\mathcal{L}}(G) = RE(G)$.*

Доказ. На основу једнакости (2.3) следи да је $\rho_i = 1 - \tilde{\mu}_{n-i+1}$ за $i = 1, 2, \ldots, n$, одакле је

$$E_{\mathcal{L}}(G) = \sum_{i=1}^{n} |(1-\rho_i) - 1| = \sum_{i=1}^{n} |-\rho_i| = \sum_{i=1}^{n} |\rho_i| = RE(G). \qquad \square$$

Како је $\rho_i = 1 - \tilde{\mu}_{n-i+1}$, $i = 1, 2, \ldots, n$, а у раду [19] је доказано да је $0 \leqslant \tilde{\mu}_i \leqslant 2$, $i = 1, 2, \ldots, n$, следи да је $-1 \leqslant \rho_i \leqslant 1$, $i = 1, 2, \ldots, n$.

Неке нове границе за Рандићеве сопствене вредности могу се наћи у раду [132].

2.2 Резолвентна енергија

Нека је дат граф G са n чворова и нека је A његова матрица суседства. Као што је и уобичајено, са $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ означаваћемо сопствене вредности матрице A, тј. сопствене вредности графа G. Резолвентна матрица матрице A, у ознаци $\mathcal{R}_A(z)$, дефинише се са

$$\mathcal{R}_A(z) = (zI_n - A)^{-1}\,,$$

где је z комплексна променљива. Сопствене вредности матрице $\mathcal{R}_A(z)$ су

$$\frac{1}{z - \lambda_i}\ ,\ \ i = 1, 2, \ldots, n\,. \tag{2.4}$$

На основу чињенице [26] да је $\lambda_i \leqslant n - 1, i = 1, \ldots, n$, следи да се у (2.4) може узети да је $z = n$. Недавно је у раду [68], I. Gutman са сарадницима дошао на идеју дефинисања енергије графа која је заснована на матрици $\mathcal{R}_A(n)$.

Дефиниција 2.2.1. [68] *Нека је дат граф G са n чворова и сопственим вредностима $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$. Резолвентна енергија графа G, у ознаци $ER(G)$, је графовска инваријанта дефинисана са*

$$ER(G) = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{n - \lambda_i}. \tag{2.5}$$

За испитивање резолвентне енергије графа, а посебно за одређивање екстремалних графова, важно је истаћи да се резолвента енергија графа може дефинисати преко броја свих затворених шетњи дужине k, тј. преко спектралних момената $M_k(G)$.

Теорема 2.2.1. [68] *Ако је G граф са n чворова, тада је*

$$ER(G) = \frac{1}{n} \sum_{k \geqslant 0} \frac{M_k(G)}{n^k}, \tag{2.6}$$

при чему је $M_k(G) = \sum\limits_{i=1}^{n} \lambda_i^k$, k-ти спектрални момент графа G.

Доказ. Користећи дефиницију (2.5) и имајући у виду да је $\left|\dfrac{\lambda_i}{n}\right| < 1$, $i = 1, 2, \ldots, n$, следи да је

$$ER(G) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{1 - \frac{\lambda_i}{n}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{k \geqslant 0} \left(\frac{\lambda_i}{n}\right)^k = \frac{1}{n} \sum_{k \geqslant 0} \frac{\sum\limits_{i=1}^{n} \lambda_i^k}{n^k} = \frac{1}{n} \sum_{k \geqslant 0} \frac{M_k(G)}{n^k}.$$

□

Резолвентна енергија припада класи функција облика [51]

$$\mathbb{E}(G) = \sum_{k \geqslant 0} c_k M_k(G), \tag{2.7}$$

где су $c_0, c_1, c_2, \ldots$ позитивни реални бројеви одабрани тако да Maclaurin-ов ред $\sum\limits_{k\geqslant 0} c_k x^k$ конвергира некој функцији $f(x)$. Како је $M_k(G) = tr(A^k)$, следи да је

$$\mathbb{E}(G) = tr(f(A)).$$

На пример, када је $-n < x < n$, тада ред $\sum\limits_{k\geqslant 0} n^{-k-1}x^k$ конвергира ка $(n-x)^{-1}$. Како сопствене вредности матрице A такође задовољавају ову неједнакост за било који граф G, следи да ред $\sum\limits_{k\geqslant 0} n^{-k-1}A^k$ конвергира ка $(nI_n - A)^{-1}$. Приметимо да су сопствене вредности матрице $(nI_n - A)^{-1}$ бројеви $\dfrac{1}{n-\lambda_1}, \dfrac{1}{n-\lambda_2}, \ldots, \dfrac{1}{n-\lambda_n}$. Дакле, резолвентна енергија се може посматрати као функција $\mathbb{E}(G)$ где је $c_k = \dfrac{1}{n^{k+1}}$ за свако k и $f(x) = \dfrac{1}{n-x}$.

Лема 2.2.1. [52] $ER(G) = tr\left((nI_n - A)^{-1}\right)$.

Означимо са $G-e$ подграф добијен брисањем гране e из графа G. С обзиром на то да је $M_k(G) \geqslant M_k(G-e)$ за свако $k \geqslant 0$, као и да је $M_2(G) > M_2(G-e)$, имајући у виду (2.6), добијамо следећу последицу.

Последица 2.2.1. [68] *Нека је e грана графа G. Тада је*

$$ER(G-e) < ER(G).$$

На основу неједнакости $M_k(\overline{K}_n) \leqslant M_k(G) \leqslant M_k(K_n)$ и (2.6) важи следећа последица.

Последица 2.2.2. [68] *Нека је K_n комплетан граф са n чворова и $\overline{K}_n$ његов комплемент. Тада за било који граф G са n чворова који је различит од K_n и $\overline{K}_n$ важи*

$$ER(\overline{K}_n) < ER(G) < ER(K_n).$$

С обзиром на то да је $ER(\overline{K}_n) = \sum\limits_{i=1}^{n} \dfrac{1}{n-0} = n \cdot \dfrac{1}{n} = 1$ и $ER(K_n) = \sum\limits_{i=1}^{n} \dfrac{1}{n-\lambda_i} = \dfrac{1}{n-(n-1)} + \dfrac{1}{n+1} + \cdots + \dfrac{1}{n+1} = 1 + (n-1) \cdot \dfrac{1}{n+1} = \dfrac{2n}{n+1}$, важи следећа последица.

Последица 2.2.3. [68] *Ако је G граф са n чворова, тада је*

$$1 \leqslant ER(G) \leqslant \frac{2n}{n+1}.$$

Једнакост $ER(G) = 1$ важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$. Једнакост $ER(G) = \dfrac{2n}{n+1}$ важи ако и само ако је $G \cong K_n$.

Теорема 2.2.2. [52] *Ако са r_{jk} означимо елемент у j-тој врсти и k-тој колони матрице $(nI_n - A)^{-1}$, тада је*

$$\frac{1}{n} \leqslant r_{jk} \leqslant \frac{2}{n+1} \text{ ако је } j = k \text{ и } 0 \leqslant r_{jk} \leqslant \frac{1}{n+1} \text{ ако је } j \neq k,$$

где се обе горње границе достижу ако и само ако је $G \cong K_n$. Ако је G повезан, тада је $r_{jk} > 0$ за свако $j, k \in \{1, 2, \ldots, n\}$.

Доказ. Потражимо резолвентну матрицу празног и комплетног графа. За празан граф важи да је $\mathcal{R}_{A(\overline{K}_n)}(n) = (nI_n)^{-1} = \frac{1}{n} I_n$, док је за комплетан граф $\mathcal{R}_{A(K_n)}(n) = ((n+1)I_n - J)^{-1} = \frac{1}{n+1}(I_n + J)$, јер је

$$((n+1)I_n - J)(I_n + J) = (n+1)I_n + (n+1)J - J - nJ = (n+1)I_n,$$

при чему је J квадратна матрица реда n чији су сви елементи једнаки 1. На основу последице 2.2.2 следи да ако је $G \ncong \overline{K}_n$ и $G \ncong K_n$, тада је $\mathcal{R}_{A(\overline{K}_n)}(n) < \mathcal{R}_{A(G)}(n) < \mathcal{R}_{A(K_n)}(n)$, одакле следи доказ. □

На основу последице 2.2.1 важи и следеће тврђење.

Последица 2.2.4. [68] *Међу свим повезаним графовима са n чворова, граф са најмањом резолвентном енергијом је неко стабло.*

Размотримо сада везу између резолвентне енергије и карактеристичног полинома графа. Нека је $\phi(G, \lambda) = \det(\lambda I_n - A)$ карактеристични полином графа G.

Теорема 2.2.3. [68] *Нека је G граф са n чворова. Тада је*

$$ER(G) = \frac{\phi'(G, n)}{\phi(G, n)}, \tag{2.8}$$

где је $\phi'(G, \lambda)$ први извод од $\phi(G, \lambda)$.

Доказ. Нека је карактеристични полином графа G облика $\phi(G, \lambda) = (\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2) \cdots (\lambda - \lambda_n)$. Тада је

$$|\phi(G, \lambda)| = |\lambda - \lambda_1| \cdot |\lambda - \lambda_2| \cdots |\lambda - \lambda_n|,$$

одакле, када пређемо на логаритам са основом e, следи

$$\ln |(\phi(G, \lambda)| = \sum_{i=1}^{n} \ln |\lambda - \lambda_i|.$$

Користећи логаритамски извод добијамо

$$\frac{\phi'(G, \lambda)}{\phi(G, \lambda)} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\lambda - \lambda_i}. \tag{2.9}$$

Ако је у (2.9) $\lambda = n$, следи да је

$$\frac{\phi'(G,n)}{\phi(G,n)} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{n-\lambda_i},$$

тј.

$$ER(G) = \frac{\phi'(G,n)}{\phi(G,n)}. \qquad \square$$

Дакле, за рачунање резолвентне енергије графа довољно је знати карактеристични полином графа. Такође, с обзиром на то да су коефицијенти карактеристичног полинома цели бројеви, из једначине (2.8) следи да је $ER(G)$ увек рационалан број.

Полазећи од дефиниције резолвентне енергије графа и имајући у виду да је $\mu_i \leqslant n, i = 1,2,..,n$ и $q_i \leqslant 2n-2, i = 1,2,\dots,n$ (према [28]), Cafure и сарадници су у раду [17] дефинисали Лапласову резолвентну енергију и ненегативну Лапласову резолвентну енергију (енг. signless Laplacian resolvent energy), у ознаци $RL(G)$ и $RQ(G)$, респективно, коришћењем Лапласових, односно ненегативних Лапласових сопствених вредности графа G, уместо сопствених вредности матрице суседства графа G, тј.

$$RL(G) = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{n+1-\mu_i} \quad \text{и} \quad RQ(G) = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2n-1-q_i}.$$

У наставку ћемо изложити неке основне особине за $RL(G)$ и $RQ(G)$.

Ако су $M_k(L(G)) = \sum\limits_{i=1}^{n} \mu_i^k$ и $M_k(Q(G)) = \sum\limits_{i=1}^{n} q_i^k$, k-ти спектрални моменти Лапласове и ненегативне Лапласове матрице, тада је [17]

$$RL(G) = \frac{1}{n+1}\sum_{k=0}^{\infty} \frac{M_k(L(G))}{(n+1)^k} \quad \text{и} \quad RQ(G) = \frac{1}{2n-1}\sum_{k=0}^{\infty} \frac{M_k(Q(G))}{(2n-1)^k}. \tag{2.10}$$

Имајући у виду последицу 1.2.3, долазимо до следећег резултата.

Последица 2.2.5. [17] *Ако је G бипартитан граф, тада је*

$$RL(G) = \frac{1}{n+1}\sum_{k=0}^{\infty} \frac{M_k(Q(G))}{(n+1)^k}.$$

Дакле, за бипартитне графове, Лапласова резолвентна и ненегативна Лапласова резолвентна енергија се поклапају.

Додавањем грана графу G, свака Лапласова сопствена вредност се не смањује већ се евентуално повећава, одакле се може закључити да додавање грана графу G повећава k-ти Лапласов спектрални момент или га оставља непромењеним [112]. Сада на основу (2.10) следи да за сваки граф G са n чворова важе неједнакости

$$\frac{n}{n+1} = RL(\overline{K}_n) \leqslant RL(G) \leqslant RL(K_n) = \frac{n^2}{n+1}.$$

Додавање грана графу G такође повећава или оставља непромењеним k-ти ненегативни Лапласов спектрални момент, јер је $M_k(Q(G))$ једнак броју свих полугранских затворених шетњи дужине k (теорема 1.2.17), одакле, на основу (2.10), за било који граф G са n чворова важи да је

$$\frac{n}{2n-1} = RQ(\overline{K}_n) \leqslant RQ(G) \leqslant RQ(K_n) = \frac{2n}{n+1}.$$

Глава 3

Границе за Рандићеву и резолвентну енергију графа

3.1 Границе за Рандићеву енергију

У овом одељку разматрамо неке познате резултате у вези са доњим и горњим границама за Рандићеву енергију. Осим тога, биће изложени и неки нови резултати и побољшања постојећих резултата, објављени у радовима [78] и [131].

3.1.1 Познати резултати

Најпре ћемо изложити неке доње, а затим и горње границе за Рандићеву енергију у функцији броја чворова, броја грана, минималног и максималног степена чвора, Narumi-Katayama-иног индекса $NK = \prod_{i=1}^{n} d_i$, уопштеног Рандићевог индекса $R_{-1}(G) = \sum_{v_i v_j \in E(G)} \frac{1}{d_i d_j}$, детерминанте Рандићеве матрице, као и детерминанте матрице суседства. Резултати које ћемо изложити су доказани у радовима објављеним током последњих неколико година.

На почетку, показаћемо да Рандићева енергија за било који повезан граф није мања од 2.

Теорема 3.1.1. [65] *Нека је G повезан граф са n чворова. Тада је $RE(G) \geqslant 2$. Једнакост важи ако и само ако је G комплетан мултипартитан граф.*

Доказ. Нека су $\rho_1 \geqslant \rho_2 \geqslant \cdots \geqslant \rho_n$ Рандићеве сопствене вредности и $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$ сопствене вредности матрице суседства графа G. На основу теореме 2.1.11 важи да је $\rho_1 = 1$. Сада је

$$RE(G) = 1 + \sum_{i=2}^{n} |\rho_i| \geqslant 1 + \left| \sum_{i=2}^{n} \rho_i \right| = 1 + \left| \sum_{i=1}^{n} \rho_i - 1 \right| = 1 + |-1| = 2.$$

Једнакост важи ако и само ако је $\rho_2 \leqslant 0$ што је еквивалентно са $\lambda_2 \leqslant 0$. Граф G има само једну позитивну сопствену вредност ако и само ако је G комплетан мултипартитан граф [26]. $\square$

У следећој теореми дата је веза између Рандићеве енергије и уопштеног Рандићевог индекса.

Теорема 3.1.2. [16] *Нека је G граф са n чворова који нема изолованих чворова. Тада је*

$$RE(G) \geqslant 2R_{-1}. \tag{3.1}$$

Доказ. Како је $\rho_i \in [-1,1], i = 1,2,\ldots,n$, следи да је $\rho_i^2 \leqslant |\rho_i|, i = 1,2,\ldots,n$. Користећи чињеницу да је $tr(R^2) = 2 \cdot \sum_{v_iv_j \in E(G)} \frac{1}{d_id_j} = 2R_{-1}(G)$, добијамо

$$RE(G) = \sum_{i=1}^{n} |\rho_i| \geqslant \sum_{i=1}^{n} \rho_i^2 = tr(R^2) = 2R_{-1}(G). \qquad \square$$

У раду [104], Maden је недавно добила две границе за Рандићеву енергију користећи неједнакости из леме 1.4.12.

Теорема 3.1.3. [104] *Нека је G повезан граф са n чворова и P апсолутна вредност детерминанте Рандићеве матрице R. Тада је*

$$RE(G) \geqslant 1 + \sqrt{(n-1)(n-2)P^{2/(n-1)} + 2R_{-1} - 1}.$$

Једнакост важи ако и само ако је G комплетан граф.

Теорема 3.1.4. [104] *Нека је G повезан граф са n чворова и P апсолутна вредност детерминанте Рандићеве матрице R. Тада је*

$$RE(G) \geqslant 2 + \sqrt{(n-2)(n-3)P^{2/(n-2)} + 2R_{-1} - 2}.$$

Једнакост важи ако и само ако је G комплетан бипартитан граф.

У следећој теореми дата је доња границе до које је 2015. године дошао Li са сарадницима у раду [101].

Теорема 3.1.5. [101] *Нека је G повезан граф са n чворова и Рандићевим сопственим вредностима $\rho_1 \geqslant \rho_2 \geqslant \cdots \geqslant \rho_n$. Тада је*

$$RE(G) \geqslant \sqrt{2R_{-1} - 1 + 2|1 - R_{-1}|} + 1.$$

Једнакост важи ако и само ако је G комплетан мултипартитан граф.

Доказ. На основу теореме 2.1.4 (1) следи да је $\sum_{2 \leqslant i < j} \rho_i\rho_j = 1 - R_{-1}$ и $\rho_n < 0$ за повезани граф G. Приметимо да је $\sum_{2 \leqslant i < j} |\rho_i||\rho_j| \geqslant |\sum_{2 \leqslant i < j} \rho_i\rho_j| = |1 - R_{-1}|$. Једнакост важи ако и само ако је $\rho_i \leqslant 0$ за $i = 2, \ldots, n$, јер је $\rho_n < 0$. Следи да је G комплетан мултипартитан граф на основу теореме 2.1.4 (2, 3). Сада је

$$\begin{aligned} RE^2(G) = \left(\sum_{i=1}^{n} |\rho_i|\right)^2 &= \sum_{i=1}^{n} |\rho_i|^2 + \sum_{i \neq j} |\rho_i||\rho_j| \\ &= \sum_{i=1}^{n} |\rho_i|^2 + 2\sum_{i=2}^{n} |\rho_i| + \sum_{2 \leqslant i \neq j} |\rho_i||\rho_j| \\ &\geqslant 2R_{-1} + 2(RE(G) - 1) + 2|1 - R_{-1}|. \end{aligned}$$

Из последње неједнакости следи да је $RE(G) \geqslant \sqrt{2R_{-1} - 1 + 2|1 - R_{-1}|} + 1$, при чему једнакост важи ако и само ако је G комплетан мултипартитан граф. □

Наредне четири теореме доказао је Li са сарадницима у раду [101] користећи лему 1.4.13.

Теорема 3.1.6. [101] *Нека је G повезан граф са n чворова и Рандићевим сопственим вредностима $\rho_1 \geqslant \rho_2 \geqslant \cdots \geqslant \rho_n$. Тада је*

$$RE(G) \geqslant \frac{2R_{-1} + (n-1)\alpha\beta - 1}{\alpha + \beta} + 1,$$

где је $\alpha = \min\limits_{1 \leqslant i \leqslant n} \{|\rho_i|\}$ и $\beta = \max\{\rho_2, |\rho_n|\}$.

Теорема 3.1.7. [101] *Нека је G повезан граф са n чворова и Рандићевим сопственим вредностима $\rho_1 \geqslant \rho_2 \geqslant \cdots \geqslant \rho_n$. Ако је $rang(A) = r$, тада је*

$$RE(G) \geqslant \frac{2R_{-1} + (r-1)\alpha^*\beta - 1}{\alpha^* + \beta} + 1,$$

где је $\alpha^* = \min\limits_{1 \leqslant i \leqslant n} \{|\rho_i| : \rho_i \neq 0\}$ и $\beta = \max\{\rho_2, |\rho_n|\}$.

Теорема 3.1.8. [101] *Нека је G повезан бипартитан граф са n чворова и Ранди -ћевим сопственим вредностима $\rho_1 \geqslant \rho_2 \geqslant \cdots \geqslant \rho_n$. Ако G није комплетан бипартитан граф, тада*

$$RE(G) \geqslant 2\left(\frac{R_{-1} + \left(\lfloor \frac{n}{2} \rfloor - 1\right)\alpha\rho_2 - 1}{\alpha + \rho_2} + 1\right),$$

где је $\alpha = \min\limits_{2 \leqslant i \leqslant \lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \{|\rho_i|\}$.

Теорема 3.1.9. [101] *Нека је G повезан бипартитан граф са n чворова и Рандићевим сопственим вредностима $\rho_1 \geqslant \rho_2 \geqslant \cdots \geqslant \rho_n$. Ако је $rang(A) = r$ и G није комплетан бипартитан граф, тада*

$$RE(G) \geqslant 2\left(\frac{R_{-1} + \left(\frac{r}{2} - 1\right)\alpha^*\rho_2 - 1}{\alpha^* + \rho_2} + 1\right),$$

где је $\alpha^* = \min\limits_{1 \leqslant i \leqslant n} \{|\rho_i| : \rho_i \neq 0\}$.

Cavers је са сарадницима у раду [16] добио следећу доњу границу за Рандићеву енергију, али није одредио графове за које се достиже једнакост у добијеној неједнакости.

Теорема 3.1.10. [16] *Нека је G граф са n чворова који нема изолованих чворова. Тада је*

$$RE(G) \geqslant \sqrt{2R_{-1} + n(n-1)\det(I - \mathcal{L})^{2/n}}.$$

Gutman и сарадници добили су доњу границу за Рандићеву енергију изложену у следећој теореми, одредивши притом и екстремалне графове код којих се достиже једнакост (а који нису одређени у оквиру теореме 3.1.10).

Теорема 3.1.11. [35] *Нека је G граф са n чворова који нема изолованих чворова. Тада је*

$$RE(G) \geqslant \sqrt{2R_{-1}(G) + n(n-1)\left(\frac{|\det A|}{\prod\limits_{i=1}^{n} d_i}\right)^{2/n}}. \tag{3.2}$$

Једнакост важи ако и само ако је $G \cong K_2$.

Доказ. Важи да је $\sum\limits_{i=1}^{n} \rho_i^2 = 2R_{-1}$. Користећи неједнакост између аритметичке и геометријске средине, добијамо

$$\sum_{1 \leqslant i < j \leqslant n} |\rho_i||\rho_j| \geqslant \frac{n(n-1)}{2}\left(\prod_{i=1}^{n} |\rho_i|\right)^{2/n},$$

при чему једнакост важи ако и само ако је $|\rho_1| = |\rho_2| = \cdots = |\rho_n|$. Сада је

$$\begin{aligned}
\left(\sum_{i=1}^{n} |\rho_i|\right)^2 &= \sum_{i=1}^{n} \rho_i^2 + 2\sum_{1 \leqslant i < j \leqslant n} |\rho_i||\rho_j| \\
&\geqslant 2R_{-1} + n(n-1)\left(\prod_{i=1}^{n} |\rho_i|\right)^{2/n} \\
&= 2R_{-1} + n(n-1)\left(\frac{|\det A|}{\prod\limits_{i=1}^{n} d_i}\right)^{2/n}.
\end{aligned}$$

За анализу једнакости у (3.2) користићемо следећу лему.

Лема 3.1.1. [14] *Нека је G граф са n чворова без изолованих чворова. Тада је*

$$\frac{\mu_2}{\Delta} \leqslant \tilde{\mu}_2 \leqslant \frac{\mu_2}{\delta}.$$

Претпоставимо да једнакост важи у (3.2). Тада у претходном доказу све неједнакости постају једнакости, одакле следи да је $|\rho_1| = |\rho_2| = \cdots = |\rho_n|$. Како је $\rho_1 = 1$, следи да све Рандићеве сопствене вредности морају бити једнаке 1 или -1. Ако је $G \cong K_2$, тада је $\rho_1 = 1$, $\rho_2 = -1$, и једнакост важи у (3.2).

Претпоставимо сада да је $n \geqslant 3$. Ако је $G \cong K_n$, тада не важи једнакост у (3.2). У супротном, ако $G \ncong K_n$, тада је на основу теореме 2.1.4, $\rho_2 \geqslant 0$. На основу леме 3.1.1 и чињенице да је $\mu_2 > 0$, следи да је

$$\tilde{\mu}_2 = 1 - \rho_2 \geqslant \frac{\mu_2}{\Delta},$$

тј.

$$\rho_2 \leqslant \frac{\Delta - \mu_2}{\Delta} < 1.$$

Сада је $0 \leqslant \rho_2 < 1$, одакле следи да услов $|\rho_1| = |\rho_2| = \cdots = |\rho_n|$ не може бити задовољен. □

У следећој теореми дата је доња граница чије побољшање ћемо представити у одељку који се односи на нове резултате.

Теорема 3.1.12. [12, 36, 84] *Нека је G граф са n чворова. Тада*

$$RE(G) \geqslant 1 + (n-1)|\det R|^{\frac{1}{n-1}}. \tag{3.3}$$

Једнакост важи ако и само ако је G комплетан граф или ако је G небипартитан граф са три различите Рандићеве сопствене вредности

$$\left(1, \sqrt{\frac{2\sum\limits_{v_i \sim v_j} \frac{1}{d_i d_j} - 1}{n-1}}, -\sqrt{\frac{2\sum\limits_{v_i \sim v_j} \frac{1}{d_i d_j} - 1}{n-1}}\right). \tag{3.4}$$

Доказ. Користећи неједнакост између аритметичке и геометријске средине, добија се

$$RE(G) = \rho_1 + \sum_{i=2}^{n} |\rho_i| \geqslant 1 + (n-1)\left(\prod_{i=2}^{n} |\rho_i|\right)^{\frac{1}{n-1}} = 1 + (n-1)|\det R|^{\frac{1}{n-1}}.$$

Размотримо случајеве када важи једнакост у (3.3). Ако је $G \cong K_n$ или ако је G небипартитан граф са три различите Рандићеве сопствене вредности (3.4), тада се директном провером утврђује да важи једнакост.

Претпоставимо да у (3.3) важи једнакост. Тада је $\rho_1 = 1$ и $|\rho_2| = \cdots = |\rho_n| = \sqrt{\frac{2\sum\limits_{v_i \sim v_j} \frac{1}{d_i d_j} - 1}{n-1}}$.

Могу наступити следећи случајеви:

- Граф G има тачно две различите сопствене вредности. Тада на основу теореме 2.1.3 важи да је $G \cong K_n$ за неко $n \geqslant 2$.

- Граф G има тачно три различите Рандићеве сопствене вредности. Како је $\rho_1 > \rho_i$ и $\rho_i \neq 0$ за $2 \leqslant i \leqslant n$, закључујемо да је G небипартитан повезан граф са три различите Рандићеве сопствене вредности (3.4).

□

У наредном излагању приказаћемо неке доње границе које су у вези са јако регуларним графовима. Јако регуларан граф са параметрима (n, r, λ, μ), у ознаци $SRG(n, r, \lambda, \mu)$, је r-регуларан граф са n чворова, такав да за сваки пар суседних чворова i и j постоји λ чворова суседних чвору i и λ чворова суседних чвору j, и за сваки пар несуседних чворова k и l постоји μ чворова суседних чвору k и μ чворова суседних чвору l. У наставку претпостављамо да је јако регуларан граф G повезан и да није комплетан. Такође, важи да је број r сопствена вредност графа G вишеструкости 1 док остале сопствене вредности морају задовољавати једначину

$$x^2 - (\lambda - \mu)x - (r - \mu) = 0.$$

Дакле, сопствене вредности графа G су

$$r \quad \text{и} \quad x_{1,2} = \frac{\lambda - \mu \pm \sqrt{(\lambda - \mu)^2 + 4(r - \mu)}}{2}. \tag{3.5}$$

Познато је да су вишеструкости сопствених вредности r, x_1 и x_2 једнаке, редом, 1,

$$\frac{1}{2}\left[n - 1 - \frac{2r + (n-1)(\lambda - \mu)}{\sqrt{\lambda - \mu)^2 + 4(r - \mu)}}\right] \quad \text{и} \quad \frac{1}{2}\left[n - 1 - \frac{2r + (n-1)(\lambda - \mu)}{\sqrt{\lambda - \mu)^2 + 4(r - \mu)}}\right].$$

Лема 3.1.2. [130] *Нека је G повезан d-регуларан граф са n чворова и три различите Лапласове сопствене вредности $0, r$ и s. Тада је G јако регуларан граф са параметрима $(n, d, rs/n + 2d - (r + s), rs/n)$.*

Теорема 3.1.13. [36] *Нека је G повезан граф са n чворова, максималним степеном Δ и низом степена чворова $\pi(G) = (d_1, d_2, \dots, d_n)$. Тада је*

$$RE(G) \geqslant 1 + \sqrt{\frac{n}{\Delta} - 1 + (n-1)(n-2)\left(\frac{|\det A|}{\prod\limits_{i=1}^{n} d_i}\right)^{2/(n-1)}}. \tag{3.6}$$

Једнакост у (3.6) важи ако и само ако је $G \cong K_n$ или
$G \cong SRG\left(n, r, \dfrac{r(r-1)}{n-1}, \dfrac{r(r-1)}{n-1}\right)$.

За граф кажемо да је несингуларан ако су све његове сопствене вредности различите од нуле. За такав граф важи да је $|\det A| > 0$. У наредној теореми дајемо доњу границу за Рандићеву енергију несингуларних графова.

Теорема 3.1.14. [35] *Нека је G повезан несингуларан граф са n чворова и максималним степеном Δ. Тада је*

$$RE(G) \geqslant 1 + \frac{n - 1 + \ln\left(\frac{|\det A|}{\Delta}\right)}{\Delta}. \tag{3.7}$$

Једнакост важи ако и само ако је $G \cong K_n$.

Доказ. Нека су $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$ сопствене вредности графа G. У раду [31] показано је да је $x \geqslant 1 + \ln x$ за $x > 0$, при чему једнакост важи ако и само ако је $x = 1$. Користећи овај резултат, добијамо

$$
\begin{aligned}
\mathcal{E}(G) - \lambda_1 &= \sum_{i=2}^{n} |\lambda_i| && (3.8)\\
&\geqslant n - 1 + \sum_{i=2}^{n} \ln|\lambda_i| && (3.9)\\
&= n - 1 + \ln|\det A| - \ln \lambda_1 && (3.10)\\
&\geqslant n - 1 + \ln|\det A| - \ln \Delta. && (3.11)
\end{aligned}
$$

У раду [35] показано је да важи неједнакост $\mathcal{E}(G) \leqslant \Delta RE(G) + \lambda_1 - \Delta$ (чији ћемо доказ касније изложити). Сада је

$$RE(G) \geqslant 1 + \frac{\mathcal{E}(G) - \lambda_1}{\Delta} \geqslant 1 + \frac{n - 1 + \ln|\det A| - \ln \Delta}{\Delta}. \tag{3.12}$$

Претпоставимо да важи једнакост у (3.7). Тада све неједнакости у претходно изложеном доказу постају једнакости. Из једнакости у (3.9) следи

$$|\lambda_2| = |\lambda_3| = \cdots = |\lambda_n| = 1.$$

Сада је $\lambda_n = -1$. Из једнакости (3.11) следи да је $\lambda_1 = \Delta$, одакле добијамо да је G регуларан граф. Ако је $\Delta = n - 1$, тада је $G \cong K_n$ и претходне једнакости важе. У супротном, $\Delta \leqslant n - 2$. Тада је $K_{1,2}$ индуковани подграф графа G. На основу леме 1.2.1 следи да је

$$-1 = \lambda_n \leqslant \lambda_3(K_{1,2}) = -\sqrt{2},$$

што је контрадикција.

Ако је $G \cong K_n$, тада важи једнакост у (3.7). □

Сада ћемо изложити неке горње границе за Рандићеву енергију. У раду [16], Cavers је са сарадницима добио горњу границу у функцији броја чворова и уопштеног Рандићевог индекса.

Теорема 3.1.15. [16] *Нека је G граф са n чворова који нема изолованих чворова. Тада је*

$$RE(G) \leqslant \sqrt{2nR_{-1}}.$$

Доказ. Примењујући Cauchy-Schwarz-ову неједнакост на векторе $(1, 1, \ldots, 1)^T$ и $(|\rho_1|, |\rho_2|, \ldots, |\rho_n|)^T$ следи да је

$$RE(G) \leqslant \sqrt{n \sum_{i=1}^{n} |\rho_i|^2} = \sqrt{n \cdot tr(R^2)} = \sqrt{2nR_{-1}(G)}.$$ □

Користећи неједнакости из леме 1.4.12, у раду [104] добијене су следеће две горње границе за Рандићеву енергију.

Теорема 3.1.16. [104] *Нека је G повезан граф са n чворова. Тада је*

$$RE(G) \leqslant 1 + \sqrt{(n-1)(2R_{-1}-1)}. \tag{3.13}$$

Теорема 3.1.17. [104] *Нека је G повезан бипартитан граф са n чворова. Тада је*

$$RE(G) \leqslant 2 + \sqrt{(n-2)(2R_{-1}-2)}. \tag{3.14}$$

Резултати претходне две теореме недавно су побољшани у раду [38], тако што је дата карактеризација екстремалних графова и постављена нова претпоставка.

Теорема 3.1.18. [38] *Ако је $\Delta = n-1$, тада важи једнакост у* (3.13) *ако и само ако је $G \cong K_n$ или $G \cong K_1 \vee rK_2$, где је $n = 2r+1, r \geqslant 2$.*

Теорема 3.1.19. [38] *Ако је n непаран број, тада једнакост важи у* (3.14) *ако и само ако је $G \cong K_{p,q}$, где је $n = p+q$.*

Претпоставка 3.1.1. [38] *Нека је G повезан граф реда $n > 2$ са максималним степеном чворова $\Delta \leqslant n-2$ и $P = |\det R|$. Ако је*

$$RE(G) = 1 + \sqrt{(n-1)(n-2)P^{2/(n-1)} + 2R_{-1} - 1},$$

или

$$RE(G) = 1 + \sqrt{(n-1)(2R_{-1}-1)},$$

тада је $G \cong SRG\left(n, d, \dfrac{d^2-d}{n-1}, \dfrac{d^2-d}{n-1}\right)$ или $G \cong K_1 \vee rK_2$, где је $n = 2r+1, r \geqslant 2$.

I. Milovanović са сарадницима је у раду [108] доказао лему 1.4.14 и применио је за добијање неколико нових и побољшаних горњих граница за неке типове енергије графа. Међу њима се издваја горња граница за Рандићеву енергију која је дата у следећој теореми.

Теорема 3.1.20. [108] *Нека је G прост граф реда $n \geqslant 2$ са m грана. Тада, за било које реалне бројеве k_1 и k_2 са особином $1 \leqslant k_1 \leqslant \sqrt{2R_{-1}/n}$ и $\sqrt{2R_{-1}/n} \geqslant k_2 \geqslant |\rho_n^*|$, где је ρ_n^* најмања Рандићева сопствена вредност по апсолутној вредности, важи да је*

$$RE(G) \leqslant \min\left\{k_1 + \sqrt{(n-1)(2R_{-1}-k_1^2)}, k_2 + \sqrt{(n-1)(2R_{-1}-k_2^2)}, \sqrt{2nR_{-1} - \tfrac{n}{2}(1-|\rho_n^*|)^2}\right\}.$$

Једнакост важи ако и само ако је $G \cong K_n$.

Следећи резултат добио је Li са сарадницима у раду [89].

Теорема 3.1.21. [89] *Нека је G повезан граф са n чворова и Рандићевим сопственим вредностима $\rho_1 \geqslant \rho_2 \geqslant \cdots \geqslant \rho_n$. Тада је*

$$RE(G) \leqslant \sqrt{(n-1)(2R_{-1}-1)} + 1.$$

Једнакост важи ако и само ако је $|\rho_2| = |\rho_3| = \cdots = |\rho_n|$.

Доказ. Подсетимо се да је $2R_{-1} = \sum\limits_{i=1}^{n} \rho_i^2$. Даље је

$$\begin{aligned}
4nR_{-1} - 2RE^2 &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(|\rho_i| - |\rho_j|)^2 \\
&= 2\sum_{i=2}^{n}(|\rho_1| - |\rho_i|)^2 + \sum_{i=2}^{n}\sum_{j=2}^{n}(|\rho_i| - |\rho_j|)^2 \\
&= 2(n + 2R_{-1} - 2RE) + \sum_{i=2}^{n}\sum_{j=2}^{n}(|\rho_i| - |\rho_j|)^2 \\
&\geqslant 2(n + 2R_{-1} - 2RE).
\end{aligned}$$

Из последње неједнакости следи да је $(RE-1)^2 \leqslant (n-1)(2R_{-1}-1)$, при чему једнакост важи ако и само ако је $\sum\limits_{i=2}^{n}\sum\limits_{j=2}^{n}(|\rho_i| - |\rho_j|)^2 = 0$. Дакле,

$$RE(G) \leqslant \sqrt{(n-1)(2R_{-1}-1)} + 1,$$

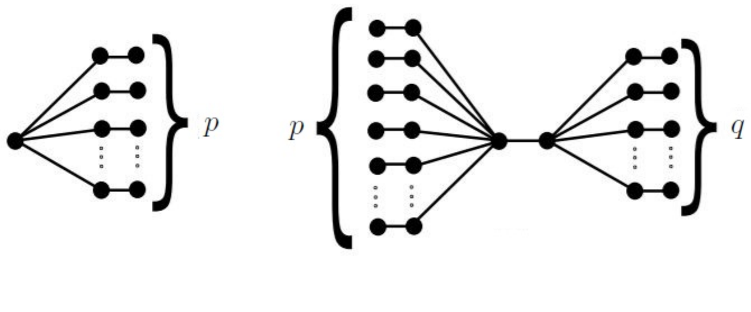
при чему једнакост важи ако и само ако је $|\rho_2| = \cdots = |\rho_n|$. □

Сада ћемо навести горњу границу за Рандићеву енергију стабала у функцији броја чворова n.

Теорема 3.1.22. [36] *Нека је T стабло са n чворова. Тада је*

$$RE(T) \leqslant 2\sqrt{\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor \cdot \frac{5n+8}{18}}.$$

Резултат у теореми 3.1.22 у вези је са хипотезом коју је поставио Gutman са сарадницима у раду [65]. У циљу излагања поменуте хипотезе, најпре ћемо дефинисати неке специјалне класе графова. Нека је $p \geqslant 0$. Стабло Su_p реда $n = 2p+1$, које садржи p висећих чворова суседних са чворовима степена 2 и чвор степена p, назваћемо p-сунце. Нека су $p, q \geqslant 0$. Стабло $DSu_{p,q}$ реда $n = 2(p+q+1)$, добијено од p-сунца и q-сунца, повезивањем њихових централних чворова, назваћемо (p, q)-дупло сунце (видети слику 3.1).



Слика 3.1: Графови Su_p и $DSu_{p,q}$

Претпоставка 3.1.2. [65] *Нека је T стабло са n чворова. Ако је n непарно, тада међу свим стаблима, највећу вредност Рандићеве енергије има $\left(\frac{n-1}{2}\right)$-сунце. Ако је n парно, тада међу свим стаблима, највећу Рандићеву енергију има $\left(\lceil\frac{n-2}{4}\rceil, \lfloor\frac{n-2}{4}\rfloor\right)$-дупло сунце.*

У следећој теореми Das је са сарадницима одредио горњу границу за Рандићеву енергију и дао карактеризацију екстремалних графова користећи јако регуларне графове.

Теорема 3.1.23. [36] *Нека је G прост граф реда n са минималним степеном чвора δ. Тада је*

$$RE(G) \leqslant 1 + \sqrt{\frac{(n-1)(n-\delta)}{\delta}}. \tag{3.15}$$

Једнакост важи ако и само ако је $G \cong K_n$ или $G \cong SRG\left(n, r, \frac{r(r-1)}{n-1}, \frac{r(r-1)}{n-1}\right)$.

Доказ. Важи да је

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n} \rho_i^2 &= 2 \sum_{v_iv_j \in E(G)} \frac{1}{d_i d_j} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{d_i} \sum_{v_iv_j \in E(G)} \frac{1}{d_j} \\ &\leqslant \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\delta} \sum_{v_iv_j \in E(G)} \frac{1}{d_j} \\ &\leqslant \frac{n}{\delta}. \end{aligned} \tag{3.16}$$

Користећи Cauchy-Schwarz-ову неједнакост добијамо

$$\begin{aligned} RE(G) &= \sum_{i=1}^{n} |\rho_i| = 1 + \sum_{i=2}^{n} |\rho_i| \\ &\leqslant 1 + \sqrt{(n-1)\left(\sum_{i=1}^{n} \rho_i^2 - 1\right)} \\ &\leqslant 1 + \sqrt{\frac{(n-1)(n-\delta)}{\delta}}. \end{aligned} \tag{3.17}$$

Претпоставимо сада да једнакост важи у (3.15). Тада све неједнакости у претходно наведеном доказу постају једнакости. Из једнакости у (3.16) следи да је $d_1 = d_2 = \cdots = \delta$, одакле следи да је G r-регуларан граф за неко r.

Из једнакости у (3.17), следи да је $|\rho_2| = |\rho_3| = \cdots = |\rho_n|$. Такође, важи да је

$$1 + (n-1)|\rho_2| = 1 + \sqrt{\frac{(n-1)(n-r)}{r}},$$

тј.

$$|\rho_2| = \sqrt{\frac{n-r}{r(n-1)}}.$$

Посматрајмо следећа два случаја:
(i) $\rho_2 = \rho_n$,
(ii) $\rho_2 = -\rho_n$.
(i) Нека је $\rho_2 = \rho_n$. Тада је $\rho_1 = 1$ и $\rho_i = -\dfrac{1}{n-1}, i = 2, 3, \ldots, n$, јер је $\sum\limits_{i=1}^{n} \rho_i = 0$. Дакле, $G \cong K_n$.
(ii) Нека је $\rho_2 = -\rho_n$. Тада је $\rho_2 > 0$. У овом случају три различите Рандићеве сопствене вредности графа G су $1, \rho_2, -\rho_2$, при чему је Рандићева сопствена вредност 1 мултиплицитета 1. Како је G r-регуларан, следи да је $A(G) = rR(G)$. Сада граф G има три различите сопствене вредности (матрице суседства) $r, r\rho_2, -r\rho_2$, при чему је r мултиплицитета 1. На основу леме 1.2.6, три различите Лапласове сопствене вредности графа G су $0, r - r\rho_2, r + r\rho_2$, тј.

$$\left(0, r - \sqrt{\frac{r(n-r)}{n-1}}, r + \sqrt{\frac{r(n-r)}{n-1}}\right), \text{ јер је } \rho_2 = \sqrt{\frac{n-r}{r(n-1)}}.$$

Граф G је повезан. На основу леме 3.1.2 следи да је

$$G \cong SRG\left(n, r, \frac{r(r-1)}{n-1}, \frac{r(n-1)}{n-1}\right).$$

Претпоставимо сада, обрнуто, да је $G \cong K_n$. Тада је $RE(G) = 2$.

Размотримо други случај. Нека је G изоморфан јако регуларном графу са параметрима $\left(n, r, \dfrac{r(r-1)}{n-1}, \dfrac{r(n-1)}{n-1}\right)$. На основу (3.5), различите сопствене вредности матрице суседства су

$$r, \sqrt{\frac{r(n-r)}{n-1}}, -\sqrt{\frac{r(n-r)}{n-1}},$$

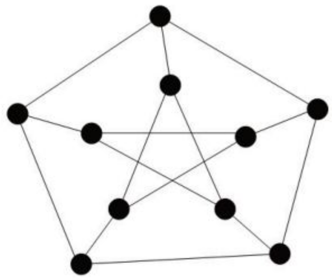
одакле следи да су различите сопствене вредности Рандићеве матрице

$$1, \sqrt{\frac{n-r}{(n-1)r}}, -\sqrt{\frac{n-r}{(n-1)r}}.$$

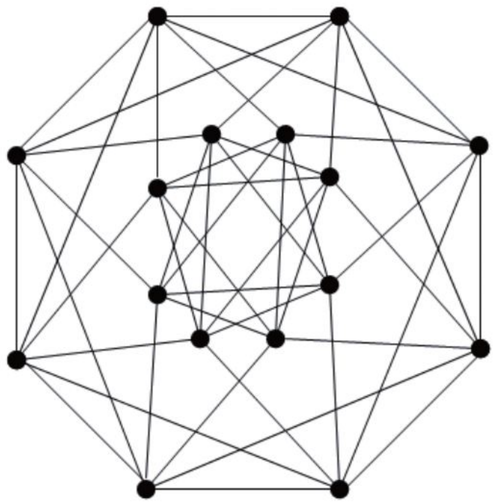
Дакле,

$$RE(G) = 1 + (n-1)\sqrt{\frac{n-r}{(n-1)r}} = 1 + \sqrt{\frac{(n-1)(n-r)}{r}}. \qquad \square$$

Коментар 3.1.1. [72] *Два јако регуларна графа* H_1 *и* H_2 *приказана су на сликама 3.2 и 3.3. За* H_1 *важи да је* $r = 3, n = 10$ *и* $\dfrac{r(r-1)}{n-1}$ *није цео број, одакле следи да* $H_1 \ncong SRG\left(n, r, \dfrac{r(r-1)}{n-1}, \dfrac{r(r-1)}{n-1}\right)$. *За* H_2 *важи да је* $n = 16, r = 6$ *и* $\dfrac{r(r-1)}{n-1} = 1$. *Дакле,* $H_2 \cong SRG\left(n, r, \dfrac{r(r-1)}{n-1}, \dfrac{r(r-1)}{n-1}\right)$.



Слика 3.2: Граф H_1



Слика 3.3: Граф H_2

Коментар 3.1.2. [72] *Користећи теорему 3.1.23 може се добити горња граница за $RE(G) + RE(\overline{G})$ у функцији од n, Δ и δ.*

$$\begin{aligned} RE(G) + RE(\overline{G}) &\leqslant 2 + \sqrt{\frac{(n-1)(n-\delta)}{\delta}} + \sqrt{\frac{(n-1)(\Delta+1)}{n-\Delta-1}} \\ &= 2 + \sqrt{n-1}\left(\sqrt{\frac{n-\delta}{\delta}} + \sqrt{\frac{\Delta+1}{n-\Delta-1}}\right). \end{aligned}$$

У следећој теореми наводимо горњу границу за $RE(G)$ у функцији од n, m, Δ и δ.

Теорема 3.1.24. [35] *Нека је G прост граф реда n $(n > 2)$. Тада је*

$$RE(G) \leqslant 1 + \frac{1}{\delta}\sqrt{\frac{n-1}{n(n-2)}[2mn(n-2) - (2m-\Delta-\delta)^2 - (n-2)(\Delta^2+\delta^2)]}.$$

Једнакост важи ако и само ако је $G \cong K_n$ или $G \cong SRG\left(n, r, \frac{r(r-1)}{n-1}, \frac{r(r-1)}{n-1}\right)$.

3.1.2 Нови резултати

Нека је G бипартитан повезан граф са n ($n \geqslant 3$) чворова, m грана и Рандићевим сопственим вредностима $\rho_1 = 1 \geqslant \rho_2 \geqslant \cdots \geqslant \rho_{n-1} \geqslant \rho_n = -1$. Нека је $\rho = \max_{2 \leqslant i \leqslant n-1} \{|\rho_i|\}$.

Теорема 3.1.25. [78] *Нека је G бипартитан повезан граф са n чворова ($n \geqslant 3$) и m грана. Тада за сваки реални број k, за који је $\rho \geqslant k \geqslant \sqrt{\dfrac{2(R_{-1}-1)}{n-2}}$, важи неједнакост*

$$RE(G) \leqslant 2 + k + \sqrt{(n-3)(2R_{-1} - 2 - k^2)}. \tag{3.18}$$

Једнакост у (3.18) важи ако је G комплетан бипартитан граф, и у том случају је $k = 0$.

Доказ. Посматрајмо класу реалних полинома, у ознаци $\mathcal{P}_n(a_1, a_2)$, облика

$$P_n(x) = x^n + a_1 x^{n-1} + a_2 x^{n-2} + b_3 x^{n-3} + \cdots + b_n,$$

где су a_1 и a_2 фиксирани реални бројеви. Ова класа полинома разматрана је у раду [97], где је доказано да за корене ових полинома $x_1 \geqslant x_2 \geqslant \cdots \geqslant x_n$, важи неједнакост

$$x_1 \leqslant \overline{x} + \frac{1}{n}\sqrt{(n-1)\Delta}\ , \tag{3.19}$$

где је

$$\overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \quad \text{и} \quad \Delta = n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \Big(\sum_{i=1}^{n} x_i\Big)^2. \tag{3.20}$$

Посматрајмо сада полином

$$\varphi_n(x) = (x-1)^2 \prod_{i=2}^{n-1} \big(x - |\rho_i|\big) = (x-1)^2 (x^{n-2} + a_1 x^{n-3} + a_2 x^{n-4} + b_1 x^{n-5} + \cdots + b_{n-3}),$$

при чему је

$$a_1 = -\sum_{i=2}^{n-1} |\rho_i| = -(RE(G) - 2),$$

и

$$a_2 = \frac{1}{2}\Big(\Big(\sum_{i=2}^{n-1} |\rho_i|\Big)^2 - \sum_{i=2}^{n-1} |\rho_i|^2\Big) = \frac{1}{2}\Big((RE(G)-2)^2 - (2R_{-1} - 2)\Big).$$

Овај полином припада класи $\mathcal{P}_n\big(2 - RE(G), \frac{1}{2}(RE(G)-2)^2 - R_{-1} + 1\big)$. Сада из релације (3.20), замењујући n са $n-2$ и узимајући да је $x_i = |\rho_i|$, $i = 2, \ldots, n-1$, добијамо

$$\overline{x} = \frac{1}{n-2} \sum_{i=2}^{n-1} |\rho_i| = \frac{RE(G)-2}{n-2}\,,$$

и

$$\Delta = (n-2) \sum_{i=2}^{n-1} |\rho_i|^2 - \Big(\sum_{i=2}^{n-1} |\rho_i| \Big)^2 = 2(n-2)(R_{-1}-1) - (RE(G)-2)^2\,.$$

Тада за свако k такво да је $\rho \geqslant k \geqslant \sqrt{\dfrac{2(R_{-1}-1)}{n-2}}$, имајући у виду (3.19), важи неједнакост

$$k \leqslant \rho \leqslant \frac{RE(G)-2}{n-2} + \frac{1}{n-2}\sqrt{(n-3)(2(n-2)R_{-1} - (RE(G)-2)^2)}\,,$$

односно

$$(n-2)k - (RE(G)-2) \leqslant \sqrt{(n-3)(2(n-2)R_{-1} - (RE(G)-2)^2)}\,. \tag{3.21}$$

Имајући у виду услов дат у теореми, следи да је

$$(n-2)k - (RE(G)-2) \geqslant \sqrt{2(n-2)(R_{-1}-1)} - (RE(G)-2) \geqslant 0\,,$$

одакле се, на основу (3.21), добија

$$\begin{aligned}&(n-2)^2k^2 - 2(n-2)k(RE(G)-2) + (RE(G)-2)^2 \leqslant 2(n-2)(n-3)(R_{-1}-1)\\ &-(n-3)(RE(G)-2)^2\end{aligned}$$

тј.

$$(n-2)k^2 - 2k(RE(G)-2) + (RE(G)-2)^2 \leqslant 2(n-3)(R_{-1}-1)\,,$$

одакле следи да је

$$\Big((RE(G)-2) - k\Big)^2 \leqslant (n-3)\Big(2(R_{-1}-1) - k^2\Big).$$

Сада неједнакост (3.18) директно следи.

Ако је G комплетан бипартитан граф, тада је $R_{-1}(G) = 1$ и $\rho = 0$. Следи да је $k = 0, RE(G) = 2$ и једнакост важи у (3.18). □

Последица 3.1.1. [78] *Нека је G повезан бипартитан граф са $n \geqslant 3$ чворова и m грана. Тада је*

$$RE(G) \leqslant 2 + \rho + \sqrt{(n-3)(2R_{-1} - 2 - \rho^2)}. \tag{3.22}$$

Једнакост важи ако је G комплетан бипартитан граф.

Коментар 3.1.3. *За* $k = \sqrt{\dfrac{2(R_{-1}-1)}{n-2}}$ *на основу* (3.18) *следи да је*

$$\begin{aligned} RE(G) &\leqslant 2 + \sqrt{\frac{2(R_{-1}-1)}{n-2}} + \sqrt{(n-3)\left(2(R_{-1}-1) - \frac{2(R_{-1}-1)}{n-2}\right)} \\ &= 2 + \sqrt{\frac{2(R_{-1}-1)}{n-2}} + (n-3)\sqrt{\frac{2(R_{-1}-1)}{n-2}} = 2 + \sqrt{2(n-2)(R_{-1}-1)}, \end{aligned}$$

одакле се добија неједнакост

$$RE(G) \leqslant 2 + \sqrt{2(n-2)(R_{-1}-1)}, \tag{3.23}$$

која је доказана у раду [12].

Коментар 3.1.4. *Горња граница* (3.18) *је боља од горње границе* (3.22) *за* $k > \dfrac{2(R_{-1}-1)}{n-2}$.

Коментар 3.1.5. *У раду* [15] *доказана је неједнакост* $R_{-1} \leqslant \dfrac{n}{2d_n}$. *На основу ове неједнакости и* (3.23) *следи да је*

$$RE(G) \leqslant 2 + \sqrt{\frac{(n-2)(n-2\delta)}{\delta}}.$$

Последња неједнакост доказана је у раду [15].

У раду [99] доказано је да за уопштен Рандићев индекс важи да је $R_{-1} \leqslant \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$. На основу ове неједнакости и (3.23) следи да је

$$RE(G) \leqslant \begin{cases} n, & \text{ако је } n \text{ паран}, \\ 2 + \sqrt{(n-2)(n-3)}, & \text{ако је } n \text{ непаран}. \end{cases}$$

Једнакост важи ако и само ако је $G \cong K_2$.

Теорема 3.1.26. [131] *Нека је* G *граф са* n *чворова,* $n \geqslant 2$, *и нека су* $\rho_1^* \geqslant \rho_2^* \geqslant \cdots \geqslant \rho_n^*$ *апсолутне вредности Рандићевих сопствених вредности.*

(a) *Ако је* G *несингуларан граф, тј.* $\eta(G) = 0$, *тада је*

$$RE(G) \geqslant 1 + (n-1)|\det R|^{\frac{1}{n-1}} + (\sqrt{\rho_n^*} - \sqrt{\rho_2^*})^2. \tag{3.24}$$

Једнакост важи ако и само ако је G *комплетан граф или ако је* G *небипартитан граф са три различите Рандићеве сопствене вредности*

$$\left(1, \sqrt{\frac{2\sum\limits_{v_i \sim v_j} \frac{1}{d_i d_j} - 1}{n-1}}, -\sqrt{\frac{2\sum\limits_{v_i \sim v_j} \frac{1}{d_i d_j} - 1}{n-1}}\right).$$

(б) Ако је $\eta(G) = n - j$, $0 < j < n$, тада је

$$RE(G) \geqslant 1 + (j-1)\left(\prod_{i=2}^{j-1} \rho_i^*\right)^{\frac{1}{j-1}} + (\sqrt{\rho_j^*} - \sqrt{\rho_2^*})^2. \tag{3.25}$$

Једнакост важи ако је $G \cong K_{p,q} \cup \overline{K}_{n-p-q}$ или $G \cong rK_2 \cup \overline{K}_{n-2r}$.

Доказ. (а) Из $\eta(G) = 0$, следи да $\rho_i^* \in (0, 1]$.

$RE(G)$ можемо записати у облику $RE(G) = \rho_1^* + \sum_{i=2}^{n} \rho_i^*$. Ако применимо неједнакост (1.25) на $\sum_{i=2}^{n} \rho_i^*$ за $a_{i-1} = \rho_i^*$, $i = 2, \ldots, n$, добијамо да је

$$\begin{aligned} \sum_{i=2}^{n} \rho_i^* &\geqslant (n-1)\sqrt[n-1]{\rho_2^* \cdots \rho_n^*} + (\sqrt{\rho_n^*} - \sqrt{\rho_2^*})^2 \\ &= (n-1)|\det R|^{\frac{1}{n-1}} + (\sqrt{\rho_n^*} - \sqrt{\rho_2^*})^2. \end{aligned}$$

Како је $\rho_1^* = 1$, тврђење важи.

Ако је $G \cong K_n$ или ако је G небипартитан граф са наведене три различите Рандићеве сопствене вредности, тада се директном провером утврђује да важи једнакост.

Ако важи једнакост у (3.24), тада се на исти начин као у теореми 3.1.12 може закључити да је $G \cong K_n$ или је G небипартитан граф са наведене три различите Рандићеве сопствене вредности.

(б) Посматрајмо сада случај када је $\eta(G) = n - j$, $0 < j < n$. Ако применимо неједнакост (1.25) на не-нула Рандићеве сопствене вредности $1 = \rho_1^* \geqslant \rho_2^* \geqslant \cdots \geqslant \rho_j^* > 0$, примењујући метод као под (а) добијамо (3.25).

Користећи спектар матрице $\mathcal{L}$ за графове K_n и $K_{p,q}$ [19], на основу (2.3) можемо закључити да је за граф $K_{p,q}$, Рандићев спектар дат са $\{1, -1, [0]^{p+q-2}\}$, а за граф $rK_2 \cup \overline{K}_{n-2r}$, Рандићев спектар је $\{[1]^r, [(-1)]^r, [0]^{n-2r}\}$, одакле закључујемо да за наведене графове важи једнакост у (3.25). □

Коментар 3.1.6. *Ако је G несингуларан граф, тада је доња граница (3.24) боља од доње границе (3.3). Ако је $\eta(G) > 0$, тада $\det R = 0$ и поново је доња граница (3.25) боља од доње границе (3.3).*

Теорема 3.1.27. [131] *Нека је G граф са n чворова, $n \geqslant 2$, и $\rho_1^* \geqslant \rho_2^* \geqslant \cdots \geqslant \rho_n^*$ су апсолутне вредности Рандићевих сопствених вредности. Тада*

$$-\frac{n^2}{n-1}\alpha(n)(\sqrt{\rho_1^*} - \sqrt{\rho_n^*})^2 + n|\det R|^{\frac{1}{n}} \leqslant RE(G) \leqslant n^2\alpha(n)(\sqrt{\rho_1^*} - \sqrt{\rho_n^*})^2 + n|\det R|^{\frac{1}{n}}, \tag{3.26}$$

при чему је $\alpha(n) = \frac{1}{4}\left(1 - \frac{(-1)^{n+1}+1}{2n^2}\right)$.

Једнакост на обе стране неједнакости (3.26) важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или (под условом да је n парно) $G \cong \frac{n}{2}K_2$.

Доказ. У доказу леве стране неједнакости (3.26) користићемо неједнакост (1.28) за $A = B = \sqrt{\rho_1^*}, a = b = \sqrt{\rho_n^*}, a_i = b_i = \sqrt{\rho_i^*}, i = 1, \ldots, n$. Узимајући у обзир десну страну нејендакости (1.29), добијамо да је

$$\begin{aligned} RE(G) &\geqslant -(\sqrt{\rho_1^*} - \sqrt{\rho_n})^2 n\alpha(n) + \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n} \sqrt{\rho_i^*}\right)^2 \\ &\geqslant -(\sqrt{\rho_1^*} - \sqrt{\rho_n})^2 n\alpha(n) + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \rho_i^* + (n-1)\left(\prod_{i=1}^{n} \rho_i^*\right)^{\frac{1}{n}} \\ &= -(\sqrt{\rho_1^*} - \sqrt{\rho_n})^2 n\alpha(n) + \frac{1}{n} RE(G) + (n-1)|\det R|^{\frac{1}{n}}. \end{aligned}$$

Сада доказ следи на основу последње неједнакости.

Имајући у виду случајеве једнакости за (1.28) и (1.29), закључујемо да једнакост на левој страни неједнакости (3.26) важи ако и само ако је $\rho_1^* = \rho_2^* = \cdots = \rho_n^*$, тј. ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или (под условом да је n парно) $G \cong \frac{n}{2}K_2$.

Да бисмо доказали да важи и десна страна неједнакости (3.26), поново користимо неједнакости (1.28) и (1.29). Узимајући да је $A = B = \sqrt{\rho_1^*}$, $a = b = \sqrt{\rho_n^*}$, $a_i = b_i = \sqrt{\rho_i^*}$, $i = 1, \ldots, n$, у неједнакости (1.28), и користећи леву страну неједнакости (1.29), добијамо

$$\begin{aligned} RE(G) &\leqslant (\sqrt{\rho_1^*} - \sqrt{\rho_n^*})^2 n\alpha(n) + \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n} \sqrt{\rho_i^*}\right)^2 \\ &\leqslant (\sqrt{\rho_1^*} - \sqrt{\rho_n^*})^2 n\alpha(n) + \frac{1}{n}(n-1)\sum_{i=1}^{n} \rho_i^* + \left(\prod_{i=1}^{n} \rho_i^*\right)^{\frac{1}{n}} \\ &= (\sqrt{\rho_1^*} - \sqrt{\rho_n^*})^2 n\alpha(n) + \frac{1}{n}(n-1) RE(G) + |\det R|^{\frac{1}{n}}, \end{aligned}$$

одакле следи доказ теореме.

Једнакост на десној страни неједнакости (3.26) важи ако и само ако је $\rho_1^* = \rho_2^* = \cdots = \rho_n^*$, тј. ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или (под условом да је n парно) $G \cong \frac{n}{2}K_2$. □

Сада ћемо приказати још један начин коришћења аналитичких неједнакости за добијање нових граница за Рандићеву енергију, где ћемо изложити резултате из рада [134]. Наиме, можемо посматрати матрицу која представља уопштење Рандићеве матрице.

Многе графовске инваријанте засноване на степенима чворова могу се приказати у облику [61]

$$TI = TI(G) = \sum_{v_i \sim v_j} F(d_i, d_j)\,,$$

при чему је F одговарајуће изабрана функција са својством $F(x, y) = F(y, x)$.

Свакој графовској инваријанти TI, може се придружити Рандићева матрица заснована на степенима чворовима, у означи $\mathcal{RA}$, која је дефинисана са

$$[\mathcal{RA}]_{ij} = \begin{cases} \dfrac{F(d_i, d_j)}{\sqrt{d_i d_j}}\,, & \text{ако је } v_i \sim v_j \\ 0\,, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Нека су $f_1 \geqslant f_2 \geqslant \cdots \geqslant f_n$ сопствене вредности матрице $\mathcal{RA}$, и $\gamma_1 \geqslant \gamma_2 \geqslant \cdots \geqslant \gamma_n$, апсолутне вредности сопствених вредности f_i, $i = 1, 2, \ldots, n$. Тада важе једнакости

$$tr(\mathcal{RA}) = \sum_{i=1}^{n} f_i = 0\,, \tag{3.27}$$

и

$$tr\big((\mathcal{RA})^2\big) = \sum_{i=1}^{n} f_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \gamma_i^2 = 2 \sum_{v_i \sim v_j} \frac{F^2(d_i, d_j)}{d_i d_j}\,. \tag{3.28}$$

Енергија матрице $\mathcal{RA}$, у означи $\mathcal{RE}_{TI}$, може се дефинисати на следећи начин

$$\mathcal{RE}_{TI} = \mathcal{RE}_{TI}(G) = \sum_{i=1}^{n} |f_i| = \sum_{i=1}^{n} \gamma_i\,.$$

Када функција $F(d_i, d_j)$ узима одређене конкретне вредности, добијају се неки познати тополошки индекси и одговарајуће енергије, међу којима се појављује и Рандићева.

- За $F(d_i, d_j) = 1$ добија се Рандићева енергија, тј. $\mathcal{RE}_{TI} = RE$.
- За $F(d_i, d_j) = \sqrt{d_i d_j}$ добија се $TI = RR$, што представља реципрочни Рандићев индекс. У овом случају добија се обична енергија, тј. $\mathcal{RE}_{TI} = \mathcal{E}$.
- За $F(d_i, d_j) = d_i + d_j$ добија се први Загребачки индекс, тј. $TI = Zg_1$. Може се дефинисати одговарајућа енергија у означи $\mathcal{RE}_{TI} = \mathcal{R}Z_1E$.
- За $F(d_i, d_j) = d_i d_j$ добија се други Загребачки индекс, тј. $TI = Zg_2$. Може се дефинисати одговарајућа енергија у означи $\mathcal{RE}_{TI} = \mathcal{R}Z_2E$.

Индекс симетричне поделе степена чворова, у означи SDD, дефинисан је са [127]

$$SDD = SDD(G) = \sum_{v_i \sim v_j} \frac{d_i^2 + d_j^2}{2 d_i d_j}\,.$$

Теорема 3.1.28. [134] *Нека је G прост граф са $n \geqslant 2$ чворова, који нема изолованих чворова. Тада је*

$$\mathcal{RE}_{TI}(G) \leqslant \sqrt{n\,\mathrm{tr}((\mathcal{RA})^2) - \frac{n}{2}(\gamma_1 - \gamma_n)^2}. \tag{3.29}$$

Једнакост важи ако и само ако је $\gamma_2 = \gamma_3 = \cdots = \gamma_{n-1} = \dfrac{\gamma_1 + \gamma_n}{2}$.

Доказ. На основу Lagrange-овог идентитета следи да је

$$n\sum_{i=1}^{n}\gamma_i^2-\left(\sum_{i=1}^{n}\gamma_i\right)^2=\sum_{1\leqslant i<j\leqslant n}(\gamma_i-\gamma_j)^2\geqslant\sum_{i=2}^{n-1}((\gamma_1-\gamma_i)^2+(\gamma_i-\gamma_n)^2)+(\gamma_1-\gamma_n)^2\,. \tag{3.30}$$

За $r=2$, $n=2$, $a_1=\gamma_1-\gamma_i$ и $a_2=\gamma_i-\gamma_n$, на основу (1.33) следи да је

$$(\gamma_1-\gamma_i)^2+(\gamma_i-\gamma_n)^2\geqslant\frac{1}{2}(\gamma_1-\gamma_n)^2\,. \tag{3.31}$$

Из (3.30) и (3.31) добија се

$$n\sum_{i=1}^{n}\gamma_i^2-\left(\sum_{i=1}^{n}\gamma_i\right)^2\geqslant\frac{1}{2}\sum_{i=2}^{n-1}(\gamma_1-\gamma_n)^2+(\gamma_1-\gamma_n)^2=\frac{n}{2}(\gamma_1-\gamma_n)^2\,,$$

тј.

$$n\,\mathrm{tr}((\mathcal{R}A)^2)-\frac{n}{2}(\gamma_1-\gamma_n)^2\geqslant(\mathcal{R}\mathcal{E}_{TI}(G))^2\,.$$

одакле следи (3.29).

Како једнакост у (3.30) важи ако и само ако је $\gamma_1=\gamma_2=\cdots=\gamma_{n-1}$ и $\gamma_2=\gamma_3=\cdots=\gamma_n$, следи да једнакост у (3.29) важи ако и само ако је $\gamma_2=\gamma_3=\cdots=\gamma_{n-1}=\dfrac{\gamma_1+\gamma_n}{2}$. □

Коментар 3.1.7. *За* $F(d_i,d_j)=1$, $F(d_i,d_j)=\sqrt{d_id_j}$, $F(d_i,d_j)=d_i+d_j$ *и* $F(d_i,d_j)=d_id_j$, *на основу* (3.29), *добијају се, респективно, следеће неједнакости*

$$RE(G)\leqslant\sqrt{2nR_{-1}-\frac{n}{2}(\gamma_1-\gamma_n)^2}\,, \tag{3.32}$$

$$\mathcal{E}(G)\leqslant\sqrt{2mn-\frac{n}{2}(\gamma_1-\gamma_n)^2}\,, \tag{3.33}$$

$$\mathcal{R}Z_1E(G)\leqslant\sqrt{4n(SDD+m)-\frac{n}{2}(\gamma_1-\gamma_n)^2}\,,$$

$$\mathcal{R}Z_2E(G)\leqslant\sqrt{2nZg_2-\frac{n}{2}(\gamma_1-\gamma_n)^2}\,.$$

Неједнакост (3.32) *је доказана у* [108], *а неједнакост* (3.33) *у* [109].

С обзиром на то да је $(\gamma_1-\gamma_n)^2\geqslant 0$, добијамо следећу последицу теореме 3.1.28.

Последица 3.1.2. [134] *Нека је G прост граф са $n\geqslant 2$ чворова, који нема изолованих чворова. Тада је*

$$\mathcal{R}\mathcal{E}_{TI}(G)\leqslant\sqrt{n\mathrm{tr}((\mathcal{R}A)^2)}. \tag{3.34}$$

Једнакост важи ако и само ако је $\gamma_1=\gamma_2=\cdots=\gamma_n$.

Коментар 3.1.8. *За* $F(d_i, d_j) = 1$, $F(d_i, d_j) = \sqrt{d_i d_j}$, $F(d_i, d_j) = d_i + d_j$ *и* $F(d_i, d_j) = d_i d_j$, *из* (3.34), *респективно се добијају следеће неједнакости*

$$
\begin{aligned}
&(3.35) \qquad & RE(G) &\leqslant \sqrt{2nR_{-1}}\,,\\
&(3.36) \qquad & \mathcal{E}(G) &\leqslant \sqrt{2mn}\,,\\
&& \mathcal{R}Z_1E(G) &\leqslant 2\sqrt{n(SDD+m)}\,,\\
&& \mathcal{R}Z_2E(G) &\leqslant \sqrt{2nZg_2}\,.
\end{aligned}
$$

Неједнакост (3.35) *је доказана у* [11], *а неједнакост* (3.36) *у* [105].

Теорема 3.1.29. [134] *Нека је* G *прост граф без изолованих чворова са бар једном граном и нека је* $n \geq 2$ *број чворова графа* G. *Ако је* $f_i \neq 0$ *за* $i = 1, 2, \ldots, n$, *тада је*

$$\mathcal{RE}_{TI}(G) \geqslant \frac{\mathrm{tr}((\mathcal{R}A)^2) + n\gamma_1\gamma_n}{\gamma_1 + \gamma_n}. \tag{3.37}$$

Једнакост важи ако и само ако је $\gamma_i = \gamma_1$ *или* $\gamma_i = \gamma_n$, *за* $i = 1, 2, \ldots, n$.

Доказ. За $b_i = 1$, $a_i = \gamma_i$, $m = \gamma_n$, $M = \gamma_1$, $i = 1, 2, \ldots, n$, неједнакост (1.35) се трансформише у

$$\sum_{i=1}^{n} \gamma_i^2 + \gamma_1\gamma_n \sum_{i=1}^{n} 1 \leqslant (\gamma_1 + \gamma_n) \sum_{i=1}^{n} \gamma_i,$$

тј.

$$\mathrm{tr}((\mathcal{R}A)^2) + n\gamma_1\gamma_n \leqslant (\gamma_1 + \gamma_n)\mathcal{RE}_{TI}(G)\,,$$

одакле следи (3.37).

На основу случаја једнакости у (1.35), једнакост у (3.37) важи ако и само ако је $\gamma_i = \gamma_1$ или $\gamma_i = \gamma_n$, за $i = 1, 2, \ldots, n$. $\square$

Коментар 3.1.9. *За* $F(d_i, d_j) = 1$, $F(d_i, d_j) = \sqrt{d_i d_j}$, $F(d_i, d_j) = d_i + d_j$ *и* $F(d_i, d_j) = d_i d_j$, *из* (3.37), *респективно се добијају следеће неједнакости*

$$
\begin{aligned}
RE(G) &\geqslant \frac{2R_{-1} + n\gamma_1\gamma_n}{\gamma_1 + \gamma_n}\,,\\
\mathcal{E}(G) &\geqslant \frac{2m + n\gamma_1\gamma_n}{\gamma_1 + \gamma_n}\,,\\
\mathcal{R}Z_1E(G) &\geqslant \frac{4(SDD+m) + n\gamma_1\gamma_n}{\gamma_1 + \gamma_n},\\
\mathcal{R}Z_2E(G) &\geqslant \frac{2Zg_2 + n\gamma_1\gamma_n}{\gamma_1 + \gamma_n}.
\end{aligned} \tag{3.38}
$$

Неједнакост (3.38) *је доказана у* [110].

Теорема 3.1.30. *Нека је* G *прост граф са* $n \geqslant 2$ *чворова и сопственим вредностима* $f_i \neq 0$, $i = 1, 2, \ldots, n$. *Тада је*

$$\mathcal{RE}_{TI}(G) \geqslant \frac{2\mathrm{tr}((\mathcal{R}A)^2)}{f_1 - f_n}\,. \tag{3.39}$$

Једнакост важи ако и само ако је $f_1 = f_2 = \cdots = f_p = -f_{p+1} = \cdots = -f_n$, $(n = 2p)$.

Доказ. На основу (3.27) и (3.28) следи да је

$$
\begin{aligned}
\operatorname{tr}((\mathcal{R}A)^2) &= \sum_{i=1}^{n} \gamma_i^2 = \sum_{i=1}^{n} f_i^2 = \frac{1}{2}\left|\sum_{i=1}^{n} \big(2f_i - f_1 - f_n\big) f_i\right| \\
&\leqslant \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} |2f_i - f_1 - f_n|\,|f_i|\,.
\end{aligned} \tag{3.40}
$$

Како је $f_1 \geqslant f_i \geqslant f_n$, за $i = 1, 2, \ldots, n$, следи да је

$$-(f_1 - f_n) \leqslant 2f_i - f_1 - f_n \leqslant f_1 - f_n\,,$$

тј.

$$|2f_i - f_1 - f_n| \leqslant f_1 - f_n\,. \tag{3.41}$$

Сада на основу (3.40) и (3.41) следи да је

$$\operatorname{tr}((\mathcal{R}A)^2) \leqslant \frac{1}{2}(f_1 - f_n)\mathcal{R}\mathcal{E}_{TI}(G)\,,$$

што даје тражени резултат.

На основу (3.40), једнакост наступа ако и само ако је $f_1 = -f_n$. Сада је лако закључити на основу (3.41) да једнакост наступа (с обзиром на то да је $f_1 + f_2 + \cdots + f_n = 0$) ако и само ако је $f_1 = f_2 = \cdots = f_p = -f_{p+1} = -f_{p+2} = \cdots = -f_n$ $(n = 2p)$. □

Коментар 3.1.10. *За* $F(d_i, d_j) = 1$, $F(d_i, d_j) = \sqrt{d_i d_j}$, $F(d_i, d_j) = d_i + d_j$ *и* $F(d_i, d_j) = d_i d_j$, *из* (3.39), *респективно се добијају следеће неједнакости*

$$
\begin{aligned}
RE(G) &\geqslant \frac{4R_{-1}}{f_1 - f_n}\,, \\
\mathcal{E}(G) &\geqslant \frac{4m}{f_1 - f_n}\,, \\
\mathcal{R}Z_1E(G) &\geqslant \frac{8(SDD + m)}{f_1 - f_n}\,, \\
\mathcal{R}Z_2E(G) &\geqslant \frac{4Zg_2}{f_1 - f_n}\,.
\end{aligned} \tag{3.42}
$$

Како је за Рандићеве сопствене вредности испуњено $f_1 - f_n \leqslant 2$, *неједнакост* (3.42) *је боља од неједнакости* (3.1).

Теорема 3.1.31. [134] *Нека је* G *прост граф са* $n \geqslant 2$ *чворова који је различит од простог графа. Тада је*

$$\mathcal{R}\mathcal{E}_{TI}(G) \geqslant \sqrt{2\operatorname{tr}((\mathcal{R}A)^2)}. \tag{3.43}$$

Једнакост важи ако и само ако је $f_1 = -f_n$, $f_2 = f_3 = \cdots = f_{n-1} = 0$.

Доказ. Узимајући у обзир (3.27), добијамо да је

$$0 = \left(\sum_{i=1}^{n} f_i \right)^2 = \sum_{i=1}^{n} f_i^2 + 2 \sum_{i<j} f_i f_j \, .$$

Како је

$$\sum_{i=1}^{n} f_i^2 = -2 \sum_{i<j} f_i f_j ,$$

тј.

$$\sum_{i=1}^{n} f_i^2 = 2 \left| \sum_{i<j} f_i f_j \right| ,$$

следи да је

$$\begin{aligned} (\mathcal{RE}_{TI}(G))^2 = \left(\sum_{i=1}^{n} |f_i| \right)^2 &= \sum_{i=1}^{n} |f_i|^2 + 2 \sum_{i<j} |f_i| \, |f_j| \\ &\geqslant \sum_{i=1}^{n} |f_i|^2 + 2 \left| \sum_{i<j} f_i f_j \right| = 2 \sum_{i=1}^{n} |f_i|^2 = 2\mathrm{tr}((\mathcal{R}A)^2), \end{aligned} \tag{3.44}$$

што даје тражени резултат (3.43).

Ако је $f_1 = -f_n$, $f_2 = f_3 = \cdots = f_{n-1} = 0$, тада је $\mathcal{RE}_{TI}(G) = 2|f_1|$ и $\sqrt{2\mathrm{tr}((\mathcal{R}A)^2)} = 2|f_1|$, па једнакост важи у (3.43).

Претпоставимо сада да једнакост важи у (3.43). Тада једнакост важи у (3.44), што значи да $f_i f_j$ морају бити истог знака за $1 \leqslant i < j \leqslant n$. Следи да је $f_1 = -f_n$, $f_2 = f_3 = \cdots = f_{n-1} = 0$. □

Коментар 3.1.11. *За* $F(d_i, d_j) = \sqrt{d_i d_j}$, *из* (3.43) *добија се неједнакост*

$$\mathcal{E}(G) \geqslant 2\sqrt{m} \, ,$$

која је доказана у [92].

3.2 Границе за резолвентну енергију

Сада ћемо изложити неке резултате добијене у току израде дисертације, у којима су одређене границе за резолвентну енергију графа у зависности од броја чворова, броја грана и нултости графа.

Теорема 3.2.1. [68] *Нека је G граф са n чворова и m грана. Тада је*

$$\frac{n^3}{n^3-2m} \leqslant ER(G) \leqslant 1+\frac{2m(2n-1)}{n^2(n^2-2m)}\,. \tag{3.45}$$

Једнакост на левој страни важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или (под условом да је n парно) $G \cong \frac{n}{2}K_2$. Једнакост на десној страни важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$.

Доказ. Доња граница у (3.45). Важи да је

$$ER(G)=\frac{1}{n}\sum_{k\geqslant 0}\frac{M_k(G)}{n^k} \geqslant \frac{1}{n}\sum_{k\geqslant 0}\frac{M_{2k}(G)}{n^{2k}}\,,$$

при чему једнакост важи ако и само ако је G бипартитан. Даље је

$$\begin{aligned}
\frac{1}{n}\sum_{k\geqslant 0}\frac{M_{2k}(G)}{n^{2k}} &= \frac{1}{2n}\left[\sum_{k\geqslant 0}\frac{M_k(G)}{n^k}+\sum_{k\geqslant 0}(-1)^k\frac{M_k(G)}{n^k}\right]\\
&= \frac{1}{2n}\left[\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{1-\frac{\lambda_i}{n}}+\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{1+\frac{\lambda_i}{n}}\right]\\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{1-(\frac{\lambda_i}{n})^2} \geqslant \frac{1}{n}\,\frac{n^2}{\sum\limits_{i=1}^{n}\left(1-(\frac{\lambda_i}{n})^2\right)},
\end{aligned}\tag{3.46}$$

где смо користили специјалан случај Cauchy-Schwarz-ове неједнакости, тј.

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{x_i} \geqslant \frac{n^2}{\sum\limits_{i=1}^{n}x_i}\,,$$

при чему једнакост важи ако и само ако је $x_1=x_2=\cdots=x_n$.

Израз на десној страни релације (3.46) се сада трансформише у

$$\frac{1}{n}\,\frac{n^4}{\sum\limits_{i=1}^{n}(n^2-\lambda_i^2)}=\frac{n^3}{n^3-\sum\limits_{i=1}^{n}\lambda_i^2}\,,$$

одакле, како је $M_2(G)=2m$, следи доња граница у (3.45).

Једнакост важи ако и само ако је граф G бипартитан и ако његове сопствене вредности задовољавају услове $\lambda_1^2=\lambda_2^2=\cdots=\lambda_n^2$. На основу леме 1.2.2 закључујемо да је $G \cong \overline{K}_n$ или $G \cong \frac{n}{2}K_2$ (под условом да је n парно).
Горња граница у (3.45). Како је $M_0(G)=n$ и $M_1(G)=0$, следи да је

$$\begin{aligned}
ER(G) &= \frac{1}{n}\left[\sum_{k\geqslant 0}\frac{M_{2k}(G)}{n^{2k}}+\sum_{k\geqslant 0}\frac{M_{2k+1}(G)}{n^{2k+1}}\right]\\
&= \frac{1}{n}\left[n+\sum_{k\geqslant 1}\frac{M_{2k}(G)}{n^{2k}}+\sum_{k\geqslant 1}\frac{M_{2k+1}(G)}{n^{2k+1}}\right]\\
&= 1+\frac{1}{n}\sum_{k\geqslant 1}\left[\frac{\sum\limits_{i=1}^{n}(\lambda_i)^{2k}}{n^{2k}}+\frac{\sum\limits_{i=1}^{n}(\lambda_i)^{2k+1}}{n^{2k+1}}\right]\\
&\leqslant 1+\frac{1}{n}\sum_{k\geqslant 1}\left[\frac{\sum\limits_{i=1}^{n}(\lambda_i)^{2k}}{n^{2k}}+\frac{n-1}{n}\,\frac{\sum\limits_{i=1}^{n}(\lambda_i)^{2k}}{n^{2k}}\right], \qquad (3.47)
\end{aligned}$$

при чему смо користили чињеницу да је $n-1 \geqslant \lambda_i$.

Једнакост важи једино ако је $\lambda_i = 0$ или је $\lambda_i = n-1$ $(i=1,2,\ldots,n)$, тј. ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$.

Израз на десној страни релације (3.47) се сада трансформише у

$$\begin{aligned}
1+\frac{1}{n}\cdot\frac{2n-1}{n}\sum_{k\geqslant 1}\frac{\sum\limits_{i=1}^{n}\lambda_i^{2k}}{n^{2k}} &\leqslant 1+\frac{2n-1}{n^2}\sum_{k\geqslant 1}\left(\frac{\sum\limits_{i=1}^{n}\lambda_i^{2}}{n^2}\right)^k\\
= \quad 1+\frac{2n-1}{n^2}\sum_{k\geqslant 1}\left(\frac{2m}{n^2}\right)^k &= 1+\frac{2n-1}{n^2}\left[\sum_{k\geqslant 0}\left(\frac{2m}{n^2}\right)^k-1\right]\\
= \quad 1+\frac{2n-1}{n^2}&\left(\frac{1}{1-\frac{2m}{n^2}}-1\right),
\end{aligned}$$

одакле директно следи горња граница у (3.45).

На основу леме 1.2.2, једнакост важи ако и само ако је $G = \overline{K}_n$. □

Ако је познат број сопствених вредности графа G које су једнаке нули, тј. нултост графа G, тада се доња граница у (3.45) може побољшати.

Последица 3.2.1. [68] *Нека је G граф са n чворова и m грана, и n_0 сопствених вредности једнаких нули. Тада је*

$$ER(G) \geqslant \frac{n_0}{n}+\frac{n(n-n_0)^2}{n^2(n-n_0)-2m}\,. \qquad (3.48)$$

Доказ. У доказу теореме 3.2.1 је показано да је $ER(G) \geqslant \dfrac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n}\dfrac{1}{1-\left(\frac{\lambda_i}{n}\right)^2}$. Ако означимо са $\sum\limits_{\lambda\neq 0}$ сумирање по свим не-нула сопственим вредностима, добијамо

$$\begin{aligned} ER(G) &\geqslant \frac{n_0}{n} + \frac{1}{n} \sum_{\lambda \neq 0} \frac{1}{1 - \left(\frac{\lambda_i}{n}\right)^2} \\ &\geqslant \frac{n_0}{n} + \frac{1}{n} \frac{(n-n_0)^2}{\sum\limits_{\lambda \neq 0} \left(1 - \left(\frac{\lambda_i}{n}\right)^2\right)} = \frac{n_0}{n} + \frac{1}{n} \cdot \frac{(n-n_0)^2}{n - n_0 - \frac{2m}{n^2}}, \end{aligned}$$

одакле неједнакост (3.48) директно следи. □

Ако је G бипартитан граф са непарним бројем чворова, тада је $n_0 \geqslant 1$ [25]. За такав граф је

$$ER(G) \geqslant \frac{1}{n} + \frac{n(n-1)^2}{n^2(n-1) - 2m}.$$

Ако је граф G бипартитан, тада се горња граница у (3.45) може побољшати.

Последица 3.2.2. [68] *Нека је G бипартитан граф са n чворова и m грана. Тада је*

$$ER(G) \leqslant 1 + \frac{2m}{n(n^2 - m)}. \tag{3.49}$$

Једнакост важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или $G \cong K_{a,b} \cup \overline{K}_{n-a-b}$, где је $K_{a,b}$ комплетан бипартитан граф такав да је $ab = m$.

Доказ. Пошто је G бипартитан, тада је $M_{2k+1}(G) = 0$ за свако $k \geqslant 0$ и $\sum\limits_{+} \lambda_i^2 = m$, где $\sum\limits_{+}$ представља сумирање по свим позитивним сопственим вредностима одговарајућег графа. Коришћењем леме 1.4.1, под претпоставком да је $n \geqslant 3$, важи да је

$$\begin{aligned} ER(G) &= \frac{1}{n} \sum_{k \geqslant 0} \frac{M_{2k}(G)}{n^{2k}} = 1 + \frac{1}{n} \sum_{k \geqslant 1} \frac{\sum\limits_{i=1}^{n} (\lambda_i)^{2k}}{n^{2k}} \\ &= 1 + \frac{2}{n} \sum_{k \geqslant 1} \frac{\sum\limits_{+} (\lambda_i^2)^k}{(n^2)^k} \leqslant 1 + \frac{2}{n} \sum_{k \geqslant 1} \left(\frac{\sum\limits_{+} (\lambda_i)^2}{n^2} \right)^k \\ &= 1 + \frac{2}{n} \sum_{k \geqslant 1} \left(\frac{m}{n^2} \right)^k = 1 + \frac{2}{n} \left[\sum_{k \geqslant 0} \left(\frac{m}{n^2} \right)^k - 1 \right] \\ &= 1 + \frac{2}{n} \left(\frac{1}{1 - \frac{m}{n^2}} - 1 \right), \end{aligned}$$

одакле директно следи (3.49).

Једнакост у (3.49) важи ако и само ако граф G нема више од једне позитивне сопствене вредности. Ако G нема позитивне сопствене вредности, тада су све његове сопствене вредности једнаке нули, одакле следи да је $G = \overline{K}_n$. Ако граф G има тачно једну позитивну сопствену вредност, тада на основу леме 1.2.2, и како је G бипартитан, он мора садржати комплетан бипартитан граф $K_{a,b}$ и имати $n-a-b$ изолованих чворова, где је $ab = m$. $\square$

У наставку ће бити наведени још неки резултати у којима се одређују нове границе за резолвентну енергију. Највећи део тих резултата је садржан у раду [133].

Подсетимо се да су $\dfrac{1}{n-\lambda_i}, i = 1, \dots, n$, сопствене вредности матрице $\mathcal{R}_A(n) = (nI_n - A)^{-1}$, одакле следи да је $\det(\mathcal{R}_A(n)) = \prod\limits_{i=1}^{n} \dfrac{1}{n-\lambda_i}$.

За резолвентну енергију графа показали смо да важи

$$ER(G) \geqslant 1, \tag{3.50}$$

при чему једнакост важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$.

У наставку излагања показаћемо да је

$$ER(G) \geqslant n(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}, \tag{3.51}$$

а након тога ћемо искористити неједнакости (3.50) и (3.51) у циљу добијања нових граница за резолвентну енергију. Конкретно, разматраћемо доње и горње границе за $ER(G)-1$ и $ER(G)-n(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}$ које зависе од $n, \lambda_1, \lambda_n, \det \mathcal{R}_A(n)$. Прво ћемо доказати једну лему која ће нам бити потребна за каснија разматрања.

Лема 3.2.1. [133] *Нека је G граф са n чворова и сопственим вредностима $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$. Тада је*

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\lambda_i^2}{n-\lambda_i} = n^2(ER(G) - 1). \tag{3.52}$$

Доказ. Користећи чињеницу да је $\sum\limits_{i=1}^{n} \lambda_i = 0$, добијамо

$$\begin{aligned}
n^2(ER(G)-1) &= n^2\left(\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{n-\lambda_i} - \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{n}\right) = n^2 \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{1}{n-\lambda_i} - \frac{1}{n}\right) \\
&= n^2 \sum_{i=1}^{n} \frac{\lambda_i}{n^2 - n\lambda_i} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\lambda_i(n^2 - n\lambda_i) + n\lambda_i^2}{n^2 - n\lambda_i} \\
&= \sum_{i=1}^{n} \lambda_i + \sum_{i=1}^{n} \frac{n\lambda_i^2}{n(n-\lambda_i)} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\lambda_i^2}{n-\lambda_i}.
\end{aligned}$$

$\square$

Лема 3.2.2. [133] *За сваки реалан број k, такав да је* $\dfrac{1}{n-\lambda_1} \geqslant k \geqslant (\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}$, *важи неједнакост*

$$ER(G) \geqslant k + (n-1)\left(\frac{\det \mathcal{R}_A(n)}{k}\right)^{\frac{1}{n-1}}. \tag{3.53}$$

Доказ. Посматрајмо функцију

$$f(x) = x + (n-1)\left(\frac{\det \mathcal{R}_A(n)}{x}\right)^{\frac{1}{n-1}}, \ x > 0.$$

Како је

$$f'(x) = 1 - \left(\frac{\det \mathcal{R}_A(n)}{x^n}\right)^{\frac{1}{n-1}},$$

следи да је $f(x)$ неопадајућа функција за $x \geqslant (\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}$.

На основу неједнакости између аритметичке и геометријске средине добија се да је $(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}} \leqslant \dfrac{1}{n-\lambda_1}$, одакле следи да је $f\left(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}\right) \leqslant f\left(\dfrac{1}{n-\lambda_1}\right)$.

На основу неједнакости између аритметичке и геометријске средине следи да је

$$\begin{aligned}
f\left(\frac{1}{n-\lambda_1}\right) &= \frac{1}{n-\lambda_1} + (n-1)\left(\frac{\det \mathcal{R}_A(n)}{\frac{1}{n-\lambda_1}}\right)^{\frac{1}{n-1}} \\
&= \frac{1}{n-\lambda_1} + (n-1)\left(\frac{\prod_{i=1}^{n} \frac{1}{n-\lambda_i}}{\frac{1}{n-\lambda_1}}\right)^{\frac{1}{n-1}} \\
&= \frac{1}{n-\lambda_1} + (n-1)\left(\prod_{i=2}^{n}\left(\frac{1}{n-\lambda_i}\right)\right)^{\frac{1}{n-1}} \\
&\leqslant \frac{1}{n-\lambda_1} + \sum_{i=2}^{n} \frac{1}{n-\lambda_i} = ER(G).
\end{aligned}$$

Дакле, за сваки реалан број k, такав да је $\dfrac{1}{n-\lambda_1} \geqslant k \geqslant (\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}$, важе неједнакости

$$ER(G) \geqslant f\left(\frac{1}{n-\lambda_1}\right) \geqslant f(k) \geqslant f\left((\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}\right),$$

одакле се добија неједнакост (3.53). $\square$

Коментар 3.2.1. [133] *Како је* $f\left(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}\right) = n\,(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}$, *из* (3.53) *може се закључити да је*

$$ER(G) \geqslant n(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}. \tag{3.54}$$

Неједнакост (3.54) *се такође може доказати коришћењем неједнакости између аритметичке и геометријске средине. Једнакост у* (3.54) *важи ако и само ако је* $G \cong \overline{K}_n$. *Неједнакост* (3.54) *је боља од неједнакости* (3.50).

Како је $\lambda_1 \geqslant \dfrac{2m}{n}$ [26], следи да је $\dfrac{1}{n-\lambda_1} \geqslant \dfrac{n}{n^2-2m}$. Коришћењем десне стране неједнакости (3.45), тј. неједнакости

$$ER(G) \leqslant 1 + \frac{2m(2n-1)}{n^2(n^2-2m)},$$

може се закључити да је

$$(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}} \leqslant \frac{1}{n} ER(G) \leqslant \frac{n^2(n^2-2m)+2m(2n-1)}{n^3(n^2-2m)}.$$

Лако се показује да из $\dfrac{n^2(n^2-2m)+2m(2n-1)}{n^3(n^2-2m)} \leqslant \dfrac{n}{n^2-2m}$, следи да је $\dfrac{1}{n-\lambda_1} \geqslant \dfrac{n}{n^2-2m} \geqslant (\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}$.

Коментар 3.2.2. [133] *Како је* $\dfrac{1}{n-\lambda_1} \geqslant \dfrac{n}{n^2-2m} \geqslant (\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}$, *за* $k = \dfrac{1}{n-\lambda_1}$ *и* $k = \dfrac{n}{n^2-2m}$, *респективно, из* (3.53) *добијају се следеће неједнакости*

$$ER(G) \geqslant \frac{1}{n-\lambda_1} + (n-1) \cdot ((n-\lambda_1) \det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n-1}}, \tag{3.55}$$

$$ER(G) \geqslant \frac{n}{n^2-2m} + (n-1) \left(\frac{n^2-2m}{n} \det \mathcal{R}_A(n) \right)^{\frac{1}{n-1}}. \tag{3.56}$$

Теорема 3.2.2. [133] *Нека је G прост граф са n чворова. Тада је*

$$ER(G) \geqslant 1 + \frac{1}{n} |\det A|^{\frac{2}{n}} (\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}. \tag{3.57}$$

Једнакост важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$.

Доказ. На основу неједнакости између аритметичке и геометријске средине и (3.52) следи да је

$$n^2(ER(G)-1) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\lambda_i^2}{n-\lambda_i} \geqslant n \left(\prod_{i=1}^{n} \frac{\lambda_i^2}{n-\lambda_i} \right)^{\frac{1}{n}} = n |\det A|^{\frac{2}{n}} (\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}.$$

Једнакост важи ако и само ако је $\dfrac{\lambda_1^2}{n-\lambda_1} = \dfrac{\lambda_2^2}{n-\lambda_2} = \cdots = \dfrac{\lambda_n^2}{n-\lambda_n}$, одакле следи да је $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_n$. На основу леме 1.2.2 следи да је $G \cong \overline{K}_n$. $\square$

У наставку ћемо разматрати границе за $ER(G) - n(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}$ и $ER(G) - 1$.

Теорема 3.2.3. [133] *Нека је G граф са n чворова, $n > 1$, и сопственим вредностима $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$. Тада је*

$$ER(G) - n(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}} \geqslant \frac{\left(\sqrt{n-\lambda_n} - \sqrt{n-\lambda_1}\,\right)^2}{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)}, \tag{3.58}$$

$$ER(G) - n(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}} \leqslant n^2\alpha(n) \cdot \frac{\left(\sqrt{n-\lambda_n} - \sqrt{n-\lambda_1}\,\right)^2}{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)}, \tag{3.59}$$

при чему је $\alpha(n) = \dfrac{1}{n}\left\lfloor\dfrac{n}{2}\right\rfloor\left(1 - \dfrac{1}{n}\left\lfloor\dfrac{n}{2}\right\rfloor\right) = \dfrac{1}{4}\left(1 - \dfrac{(-1)^{n+1}+1}{2n^2}\right)$.
Једнакост у обе неједнакости (3.58) и (3.59) важи ако и само ако је G празан граф.

Доказ. Доња граница у (3.58). Доказ следи из неједнакости (1.25) за $a_i = \dfrac{1}{n-\lambda_i}$, $i = 1, \ldots, n$.
Горња граница у (3.59). За $a_i = b_i = \dfrac{1}{\sqrt{n-\lambda_i}}, i = 1, \ldots, n$, $A = B = \dfrac{1}{\sqrt{n-\lambda_1}}, a = b = \dfrac{1}{\sqrt{n-\lambda_n}}$, на основу неједнакости (1.28), добијамо да је

$$ER(G) - \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\sqrt{n-\lambda_i}}\right)^2 \leqslant n^2\alpha(n)\frac{\left(\sqrt{n-\lambda_n} - \sqrt{n-\lambda_1}\,\right)^2}{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)}.$$

Користећи леву страну неједнакости (1.29) добијамо да је

$$ER(G) \leqslant \frac{1}{n}\left((n-1)ER(G) + n(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}\right) + n\alpha(n)\frac{(\sqrt{n-\lambda_n} - \sqrt{n-\lambda_1})^2}{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)},$$

одакле следи доказ.

На основу леме 1.4.4, једнакост у (3.58) важи ако и само ако је $\dfrac{1}{n-\lambda_2} = \dfrac{1}{n-\lambda_3} = \cdots = \dfrac{1}{n-\lambda_{n-1}} = \sqrt{\dfrac{1}{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)}}$, тј. ако и само ако је $\lambda_2 = \lambda_3 = \cdots = \lambda_{n-1} = n - \sqrt{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)}$.

Ако је $\lambda_n = \lambda_1$, тада је $n - \sqrt{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)} = \lambda_1$, одакле следи да је $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_n$. На основу леме 1.2.2, следи да је G празан граф.

Ако је $\lambda_n < \lambda_1$ тада граф G има три различите сопствене вредности

$$\left\{\lambda_1, \left[n - \sqrt{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)}\,\right]^{n-2}, \lambda_n\right\}.$$

Како је $n - \sqrt{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)} > 0$, следи да је овај други случај немогућ, јер је тада $|\lambda_n| > \lambda_1$.

Једнакост у (3.59) важи ако и само ако је $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_n$, одакле следи да је G празан граф. □

Последица 3.2.3. [133] *Нека је G бипартитан граф са n чворова, и сопственим вредностима $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$. Тада је*

$$ER(G) - n(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}} \geqslant \frac{2(n - \sqrt{n^2 - \lambda_1^2}\,)}{n^2 - \lambda_1^2}, \tag{3.60}$$

$$ER(G) - n(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}} \leqslant n^2\alpha(n)\frac{2(n - \sqrt{n^2 - \lambda_1^2}\,)}{n^2 - \lambda_1^2}. \tag{3.61}$$

Једнакост у обе неједнакости важи ако и само ако је G празан граф.

Теорема 3.2.4. [133] *Нека је G граф са n чворова, $n > 1$, и сопственим вредностима $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$. Тада је*

$$\frac{(\lambda_1 - \lambda_n)^2}{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)(2n-\lambda_1-\lambda_n)} \leqslant ER(G) - 1 \leqslant \alpha(n)\frac{(\lambda_1 - \lambda_n)^2}{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)}, \tag{3.62}$$

при чему је $\alpha(n) = \frac{1}{n}\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor \left(1 - \frac{1}{n}\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor\right) = \frac{1}{4}\left(1 - \frac{(-1)^{n+1}+1}{2n^2}\right)$.
Једнакост на левој страни неједнакости (3.62) *важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$, а једнакост на десној страни неједнакости* (3.62) *важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или (под условом да је n парно) $G \cong \frac{n}{2}K_2$.*

Доказ. Доња граница у (3.62). Лева страна неједнакости (3.62) добија се из (1.27) за $p_i = n - \lambda_i, a_i = b_i = \dfrac{1}{n-\lambda_i}, i = 1, 2, \ldots, n.$

Горња граница у (3.62). За $a_i = \dfrac{1}{n-\lambda_i}, i = 1, 2, \ldots, n, r = \dfrac{1}{n-\lambda_n}, R = \dfrac{1}{n-\lambda_1}$, неједнакост (1.24) се трансформише у неједнакост

$$n^2 ER(G) \leqslant \left(1 + \alpha(n) \cdot \frac{(\lambda_1 - \lambda_n)^2}{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)}\right) \cdot n^2,$$

одакле следи доказ.

Једнакост на левој страни неједнакости (3.62) важи ако и само ако је

$$\frac{1}{n-\lambda_2} = \frac{1}{n-\lambda_3} = \cdots = \frac{1}{n-\lambda_{n-1}} = \frac{\frac{1}{n-\lambda_1} + \frac{1}{n-\lambda_n}}{2}.$$

Слично као у теореми 3.2.3, може се закључити да је $G \cong \overline{K}_n$ или да граф G има три различите сопствене вредности

$$\left\{\lambda_1, \left[\frac{\lambda_1+\lambda_n}{2} + \frac{(\lambda_1-\lambda_n)^2}{4(n - \frac{\lambda_1+\lambda_n}{2})}\right]^{n-2}, \lambda_n\right\}.$$

Други случај је немогућ, јер из $\dfrac{\lambda_1+\lambda_n}{2} + \dfrac{(\lambda_1-\lambda_n)^2}{4\left(n - \dfrac{\lambda_1+\lambda_n}{2}\right)} > 0$, следи да је $|\lambda_n| > \lambda_1$.

Једнакост на десној страни неједнакости (3.62) важи ако и само ако је $\frac{1}{n-\lambda_1} = \frac{1}{n-\lambda_2} = \cdots = \frac{1}{n-\lambda_n}$ или $\frac{1}{n-\lambda_1} = \frac{1}{n-\lambda_2} = \cdots = \frac{1}{n-\lambda_k} \geqslant \frac{1}{n-\lambda_{k+1}} = \cdots = \frac{1}{n-\lambda_n}$ за $k = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$. На основу леме 1.2.2, у првом случају је $G \cong \overline{K}_n$, а у другом је $G \cong \frac{n}{2}K_2$ (под условом да је n парно). □

Последица 3.2.4. [133] *Нека је G бипартитан граф са $n > 1$ чворова и сопственим вредностима $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$. Тада је*

$$\frac{2\lambda_1^2}{n(n^2-\lambda_1^2)} \leqslant ER(G) - 1 \leqslant \alpha(n)\frac{4\lambda_1^2}{n^2-\lambda_1^2}\,. \tag{3.63}$$

Једнакост на левој страни важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$, док једнакост на десној страни важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или (под условом да је n парно) $G \cong \frac{n}{2}K_2$.

Теорема 3.2.5. [133] *Нека је G граф са n чворова, $n > 1$, и сопственим вредностима $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$. Тада је*

$$ER(G) - 1 \leqslant -\frac{\lambda_1\lambda_n}{(n-\lambda_n)(n-\lambda_1)}. \tag{3.64}$$

Једнакост важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или $G \cong kK_s$ за неке k и s, $1 \leqslant k \leqslant n-1$, такве да је $n = ks$.

Доказ. Из неједнакости (1.30) за $a_i = \frac{1}{n-\lambda_i}, i = 1, \ldots, n$, $r = \frac{1}{n-\lambda_n}, R = \frac{1}{n-\lambda_1}$, $p_i = \frac{1}{n}$, следи да је

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{n} \cdot \frac{1}{n-\lambda_i} + rR\sum_{i=1}^{n} \frac{\frac{1}{n}}{\frac{1}{n-\lambda_i}} \leqslant \frac{1}{n-\lambda_n} + \frac{1}{n-\lambda_1},$$

тј.

$$\frac{1}{n}ER(G) + \frac{1}{(n-\lambda_n)(n-\lambda_1)} \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(n-\lambda_i) \leqslant \frac{2n-\lambda_1-\lambda_n}{(n-\lambda_n)(n-\lambda_1)}.$$

Како је $\sum_{i=1}^{n}(n-\lambda_i) = n^2$, последња неједнакост се трансформише у неједнакост

$$\frac{1}{n}ER(G) + \frac{n}{(n-\lambda_n)(n-\lambda_1)} \leqslant \frac{2n-\lambda_1-\lambda_n}{(n-\lambda_n)(n-\lambda_1)},$$

одакле следи доказ.

Једнакост у (3.64) важи ако и само ако је $\frac{1}{n-\lambda_1} = \frac{1}{n-\lambda_2} = \cdots = \frac{1}{n-\lambda_n}$ или $\frac{1}{n-\lambda_1} = \frac{1}{n-\lambda_2} = \cdots = \frac{1}{n-\lambda_k} \geqslant \frac{1}{n-\lambda_{k+1}} = \cdots = \frac{1}{n-\lambda_n}$ за неко k, $1 \leqslant k \leqslant n-1$. У првом случају је $G \cong \overline{K}_n$, док је у другом случају $G \cong kK_s$, за неке k и s, $1 \leqslant k \leqslant n-1$, такве да је $n = ks$. □

Последица 3.2.5. [133] *Нека је G бипартитан граф са n чворова и сопственим вредностима $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$. Тада је*

$$ER(G) - 1 \leqslant \frac{\lambda_1^2}{n^2 - \lambda_1^2}, \tag{3.65}$$

при чему једнакост важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или (под условом да је n парно) $G \cong \frac{n}{2}K_2$.

У наставку ћемо изложити неке нове доње и горње границе за Лапласову и ненегативну Лапласову резолвентну енергију. У ту сврху подсетимо се да су $\dfrac{1}{n+1-\mu_i}$ и $\dfrac{1}{2n-1-q_i}$, $i = 1, 2, \ldots, n$, сопствене вредности матрица $\mathcal{R}_L(n+1) = ((n+1)I_n - L)^{-1}$ и $\mathcal{R}_Q(2n-1) = ((2n-1)I_n - Q)^{-1}$, респективно, одакле следи да је $\det(\mathcal{R}_L(n+1)) = \displaystyle\prod_{i=1}^{n} \frac{1}{n+1-\mu_i}$ и $\det(\mathcal{R}_Q(2n-1)) = \displaystyle\prod_{i=1}^{n} \frac{1}{2n-1-q_i}$.

Изложићемо најпре неке нове доње границе за $RL(G)$ и $RQ(G)$.

Теорема 3.2.6. *Нека је G граф са n чворова. Тада је*

$$RL(G) \geqslant n \det(\mathcal{R}_L(n+1))^{\frac{1}{n}}, \tag{3.66}$$

$$RQ(G) \geqslant n \det(\mathcal{R}_Q(2n-1))^{\frac{1}{n}}. \tag{3.67}$$

Једнакост у обе неједнакости важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$.

Доказ. На основу неједнакости (1.23) за $p_i = 1, a_i = b_i = \dfrac{1}{\sqrt{n+1-\mu_i}}, i = 1, 2, \ldots, n$, добијамо неједнакост

$$n \cdot RL(G) \geqslant \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{n+1-\mu_i}} \right)^2.$$

Сада доказ следи на основу десне стране неједнакости (1.29). Доказ неједнакости (3.67) је аналоган.

Једнакост у обе неједнакости важи, на основу лема 1.4.2 и 1.4.8 и коментара 1.2.2, ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$. □

Теорема 3.2.7. *Нека је G граф са n чворова. Тада је*

$$RL(G) \geqslant \frac{n^2}{n^2 + n - 2m} \tag{3.68}$$

и

$$RQ(G) \geqslant \frac{n^2}{2n^2 - n - 2m}. \tag{3.69}$$

Доказ. Из неједнакости (3.66) следи да је $RL(G) \geqslant n \det(\mathcal{R}_L(n+1))^{\frac{1}{n}} \geqslant \dfrac{n}{n+1-\mu_1}$. Како је $\mu_1 \geqslant \dfrac{2m}{n-1}$ [26], следи да је $\dfrac{n}{n+1-\mu_1} \geqslant \dfrac{n(n-1)}{(n-1)(n+1)-2m}$. Сада, с обзиром на то да је $\dfrac{n(n-1)}{(n-1)(n+1)-2m} \geqslant \dfrac{n^2}{n(n+1)-2m}$, следи да важи неједнакост (3.68).

Користећи неједнакост (3.67) следи да је

$$RQ(G) \geqslant n \det(\mathcal{R}_Q(2n-1))^{\frac{1}{n}} \geqslant \frac{n}{2n-1-q_1}.$$

Како је $q_1 \geqslant \mu_1 \geqslant \dfrac{2m}{n-1}$ [21], следи да је $\dfrac{n}{2n-1-q_1} \geqslant \dfrac{n(n-1)}{(2n-1)(n-1)-2m}$. Сада важи да је $\dfrac{n}{2n-1-q_1} \geqslant \dfrac{n(n-1)}{(2n-1)(n-1)-2m} \geqslant \dfrac{n^2}{(2n-1)n-2m}$, одакле добијамо (3.69). □

Теорема 3.2.8. *Нека је G граф са n чворова. Тада је*

$$RL(G) \geqslant n \det(\mathcal{R}_L(n+1))^{\frac{1}{n}} + \frac{(\sqrt{n+1-\mu_1} - \sqrt{n+1-\mu_n})^2}{(n+1-\mu_1)(n+1-\mu_n)}, \tag{3.70}$$

$$RQ(G) \geqslant n \det(\mathcal{R}_Q(2n-1))^{\frac{1}{n}} + \frac{(\sqrt{2n-1-q_1} - \sqrt{2n-1-q_n})^2}{(2n-1-q_1)(2n-1-q_n)}. \tag{3.71}$$

Једнакост у (3.70) важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или G има три различите Лапласове сопствене вредности

$$\{\mu_n, [n+1-\sqrt{(n+1-\mu_1)(n+1-\mu_n)}]^{n-2}, \mu_1\}.$$

Једнакост у (3.71) важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или G има три различите ненегативне Лапласове сопствене вредности

$$\{q_n, [2n-1-\sqrt{(2n-1-q_1)(2n-1-q_n)}]^{n-2}, q_1\}.$$

Доказ. Користећи неједнакост (1.25) за $a_i = \dfrac{1}{n+1-\mu_i}, i = 1, \ldots, n$, добијамо да важи (3.70). Доказ неједнакости (3.71) је аналоган.

На основу леме 1.4.4 једнакост у (3.70) важи ако и само ако је $\mu_2 = \mu_3 = \cdots = \mu_{n-1} = n+1-\sqrt{(n+1-\mu_1)(n+1-\mu_n)}$, тј. ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или G има три различите Лапласове сопствене вредности

$$\{\mu_n, [n+1-\sqrt{(n+1-\mu_1)(n+1-\mu_n)}]^{n-2}, \mu_1\}.$$

Слично, на основу леме 1.4.4, једнакост у (3.71) важи ако и само ако је $q_2 = q_3 = \cdots = q_{n-1} = 2n-1-\sqrt{(2n-1-q_1)(2n-1-q_n)}$, односно ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или G има три различите ненегативне Лапласове сопствене вредности $\{q_n, [2n-1-\sqrt{(2n-1-q_1)(2n-1-q_n)}]^{n-2}, q_1\}$. □

Теорема 3.2.9. *Нека је G граф са n чворова и m грана. Тада је*

$$RL(G) \geqslant \frac{n^2}{n^2+n-2m} + \frac{(\mu_1-\mu_n)^2}{(n+1-\mu_1)(n+1-\mu_n)(2n+2-\mu_1-\mu_n)}, \tag{3.72}$$

$$RQ(G) \geqslant \frac{n^2}{2n^2-n-2m} + \frac{(q_1-q_n)^2}{(2n-1-q_1)(2n-1-q_n)(4n-2-q_1-q_n)}. \tag{3.73}$$

Једнакост у обе неједнакости важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или G има три различите Лапласове (односно ненегативне Лапласове сопствене вредности) дате са $\{\mu_n, [\frac{\mu_1+\mu_n}{2}]^{n-2}, \mu_1\}$, односно $\{q_n, [\frac{q_1+q_n}{2}]^{n-2}, q_1\}$, редом.

Доказ. На основу неједнакости (1.26) за $a_i = n+1-\mu_i, p_i = \frac{1}{n}, i = 1,\ldots,n, Q_1 = R_n = \frac{1}{n}$, добијамо (3.72) и аналогно (3.73).

На основу леме 1.4.5 једнакост у (3.72) важи ако и само ако је $\mu_2 = \mu_3 = \cdots = \mu_{n-1} = \frac{\mu_1+\mu_n}{2}$, одакле следи да једнакост важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или G има три различите Лапласове сопствене вредности дате са $\{\mu_n, [\frac{\mu_1+\mu_n}{2}]^{n-2}, \mu_1\}$.

Слично, на основу леме 1.4.5 закључујемо да у (3.73) важи једнакост ако и само ако је $q_1 = q_2 = \cdots = q_{n-1} = \frac{q_1+q_n}{2}$, односно ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или G има три различите ненегативне Лапласове сопствене вредности дате са $\{q_n, [\frac{q_1+q_n}{2}]^{n-2}, q_1\}$. □

У наставку ћемо изложити неке нове горње границе за $RL(G)$ и $RQ(G)$.

Теорема 3.2.10. *Нека је G граф са n чворова. Тада је*

$$RL(G) \leqslant n(\det \mathcal{R}_L(n+1))^{\frac{1}{n}} + n^2\alpha(n)\frac{(\sqrt{n+1-\mu_1}-\sqrt{n+1-\mu_n})^2}{(n+1-\mu_1)(n+1-\mu_n)}, \tag{3.74}$$

$$RQ(G) \leqslant n(\det \mathcal{R}_Q(2n-1))^{\frac{1}{n}} + n^2\alpha(n)\frac{(\sqrt{2n-1-q_1}-\sqrt{2n-1-q_n})^2}{(2n-1-q_1)(2n-1-q_n)}, \tag{3.75}$$

где је $\alpha(n) = \dfrac{1}{n}\left\lfloor\dfrac{n}{2}\right\rfloor\left(1-\dfrac{1}{n}\left\lfloor\dfrac{n}{2}\right\rfloor\right) = \dfrac{1}{4}\left(1-\dfrac{(-1)^{n+1}+1}{2n^2}\right)$.
Једнакост у обе неједнакости важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$.

Доказ. Користећи неједнакост (1.28) и десну страну неједнакости (1.29) за $a_i = b_i = \dfrac{1}{\sqrt{n+1-\mu_i}}, i = 1,\ldots,n, A = B = \dfrac{1}{\sqrt{n+1-\mu_1}}, a = b = \dfrac{1}{\sqrt{n+1-\mu_n}}$, добијамо (3.74). Доказ за (3.75) је аналоган.

Једнакост у обе неједнакости важи, на основу лема 1.4.7 и 1.4.8 и коментара 1.2.2, ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$. □

Теорема 3.2.11. *Нека је G граф са n чворова и m грана. Тада је*

$$RL(G) \leqslant \frac{n^2}{n^2+n-2m}\left(1+\alpha(n)\frac{(\mu_1-\mu_n)^2}{(n+1-\mu_1)(n+1-\mu_n)}\right), \tag{3.76}$$

$$RQ(G) \leqslant \frac{n^2}{2n^2-n-2m}\left(1+\alpha(n)\frac{(q_1-q_n)^2}{(2n-1-q_1)(2n-1-q_n)}\right). \tag{3.77}$$

где је $\alpha(n) = \frac{1}{n}\left\lfloor\frac{n}{2}\right\rfloor\left(1-\frac{1}{n}\left\lfloor\frac{n}{2}\right\rfloor\right) = \frac{1}{4}\left(1-\frac{(-1)^{n+1}+1}{2n^2}\right)$.
Једнакост у обе неједнакости важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ *или (под условом да је* n *парно)* $G \cong \frac{n}{2}K_2$.

Доказ. Ако у неједнакост (1.24) ставимо $a_i = \dfrac{1}{n+1-\mu_i}, i = 1,\ldots,n, r = \dfrac{1}{n+1-\mu_n}$, $R = \dfrac{1}{n+1-\mu_1}$ добијамо да важи (3.76).

На основу леме 1.4.3 једнакост у (3.76) важи ако и само ако је $\mu_1 = \mu_2 = \cdots = \mu_n$ или је $\mu_1 = \mu_2 = \cdots = \mu_k \geqslant \mu_{k+1} = \cdots = \mu_n$ за $k = \lfloor\frac{n}{2}\rfloor$. Имајући у виду коментар 1.2.2, закључујемо да једнакост у (3.76) важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или (под условом да је n парно) $G \cong \frac{n}{2}K_2$.

Слично, на основу леме 1.4.3 једнакост у (3.77) важи ако и само ако је $q_1 = q_2 = \cdots = q_n$ или је $q_1 = q_2 = \cdots = q_k \geqslant q_{k+1} = \cdots = q_n$ за $k = \lfloor\frac{n}{2}\rfloor$. Имајући у виду коментар 1.2.2, закључујемо да једнакост у (3.77) важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или (под условом да је n парно) $G \cong \frac{n}{2}K_2$. □

Теорема 3.2.12. *Нека је* G *граф са* n *чворова и* m *грана. Тада је*

$$RL(G) \leqslant \frac{2m+n(n+1)-n(\mu_1+\mu_n)}{(n+1-\mu_1)(n+1-\mu_n)}, \tag{3.78}$$

$$RQ(G) \leqslant \frac{2m+n(2n-1)-n(q_1+q_n)}{(2n-1-q_1)(2n-1-q_n)}. \tag{3.79}$$

Једнакост у обе неједнакости важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ *или* $G \cong kK_s$ *за неке* k *и* s, $1 \leqslant k \leqslant n-1$, *такве да је* $n = ks$.

Доказ. Имајући у виду да је $\sum\limits_{i=1}^{n}\mu_i = \sum\limits_{i=1}^{n}q_i = 2m$, неједнакости (3.78) и (3.79) произилазе из неједнакости (1.30) за $a_i = \dfrac{1}{n+1-\mu_i}, r = \dfrac{1}{n+1-\mu_n}, R = \dfrac{1}{n+1-\mu_1}$, $p_i = \dfrac{1}{n}$, $i = 1,2,\ldots,n$ и $a_i = \dfrac{1}{2n-1-q_i}, r = \dfrac{1}{2n-1-q_n}, R = \dfrac{1}{2n-1-q_1}, p_i = \dfrac{1}{n}$, $i = 1,2,\ldots,n$, респективно.

На основу леме 1.4.3, једнакост у (3.78) важи ако и само ако је $\mu_1 = \mu_2 = \cdots = \mu_n$ или је $\mu_1 = \mu_2 = \cdots = \mu_k \geqslant \mu_{k+1} = \cdots = \mu_n$, за неко k, $1 \leqslant k \leqslant n-1$. Имајући у виду коментар 1.2.2, закључујемо да једнакост у (3.78) важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или $G \cong kK_s$ за неке k и s, $1 \leqslant k \leqslant n-1$, такве да је $n = ks$.

Слично, на основу леме 1.4.3, једнакост у (3.79) важи ако и само ако је $q_1 = q_2 = \cdots = q_n$ или је $q_1 = q_2 = \cdots = q_k \geqslant q_{k+1} = \cdots = q_n$, за неко k, $1 \leqslant k \leqslant n-1$. Имајући у виду коментар 1.2.2, закључујемо да једнакост у (3.78) важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$ или $G \cong kK_s$ за неке k и s, $1 \leqslant k \leqslant n-1$, такве да је $n = ks$. □

Теорема 3.2.13. [115] *Нека је G повезан граф са n чворова. Тада је*

$$RL(G) \leqslant \frac{n(\overline{d}+1)}{n+1}, \tag{3.80}$$

где је $\overline{d}$ просечан степен чворова у графу G који је цео број.

Коментар 3.2.3. *Како је $\overline{d} = \dfrac{2m}{n}$, следи да се неједнакост (3.80) може трансформисати у неједнакост*

$$RL(G) \leqslant \frac{2m+n}{n+1}. \tag{3.81}$$

Горња граница (3.78) је боља од (3.80).

Наиме, како је у случају повезаног графа $\mu_n = 0$, добијамо да је

$$\frac{2m+n(n+1)-n\mu_1}{(n+1-\mu_1)(n+1)} \leqslant \frac{2m+n}{n+1} \Leftrightarrow \frac{2m+n(n+1)-n\mu_1}{(n+1-\mu_1)(n+1)} \leqslant \frac{(2m+n)(n+1-\mu_1)}{(n+1)(n+1-\mu_1)},$$

$$\Leftrightarrow 2m+n(n+1)-n\mu_1 \leqslant (2m+n)(n+1-\mu_1) \Leftrightarrow \mu_1 \leqslant n.$$

Последња неједнакост је увек тачна.

Коментар 3.2.4. *На основу изложених нових доњих и горњих граница за $RL(G)$ и $RQ(G)$, добијамо следеће неједнакости*

$$\begin{aligned}\frac{(\sqrt{n+1-\mu_1}-\sqrt{n+1-\mu_n})^2}{(n+1-\mu_1)(n+1-\mu_n)} &\leqslant RL(G) - n(\det \mathcal{R}_L(n+1))^{\frac{1}{n}}\\ &\leqslant n^2\alpha(n)\frac{(\sqrt{n+1-\mu_1}-\sqrt{n+1-\mu_n})^2}{(n+1-\mu_1)(n+1-\mu_n)},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{(\sqrt{2n-1-q_1}-\sqrt{2n-1-q_n})^2}{(2n-1-q_1)(2n-1-q_n)} &\leqslant RQ(G) - n(\det \mathcal{R}_Q(2n-1))^{\frac{1}{n}}\\ &\leqslant n^2\alpha(n)\frac{(\sqrt{2n-1-q_1}-\sqrt{2n-1-q_n})^2}{(2n-1-q_1)(2n-1-q_n)},\end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned}&\frac{(\mu_1-\mu_n)^2}{(n+1-\mu_1)(n+1-\mu_n)(2n+2-\mu_1-\mu_n)} \leqslant RL(G) - \frac{n^2}{n^2+n-2m}\\ &\leqslant \frac{n^2}{n^2+n-2m}\left(\alpha(n)\frac{(\mu_1-\mu_n)^2}{(n+1-\mu_1)(n+1-\mu_n)}\right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&\frac{(q_1-q_n)^2}{(2n-1-q_1)(2n-1-q_n)(4n-2-q_1-q_n)} \leqslant RQ(G) - \frac{n^2}{2n^2-n-2m}\\ &\leqslant \frac{n^2}{2n^2-n-2m}\left(\alpha(n)\frac{(q_1-q_n)^2}{(2n-1-q_1)(2n-1-q_n)}\right).\end{aligned}$$

Глава 4

Екстремални графови у односу на резолвентну енергију графа

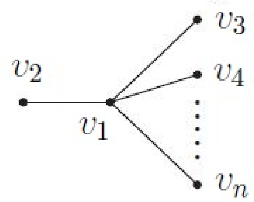
Резолвентна енергија графа се може дефинисати преко спектралних момената, тј. важи да је

$$ER(G) = \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{+\infty}\frac{M_k(G)}{n^k}.$$

Ако за два графа G_1 и G_2 важи да је $M_k(G_1) \leqslant M_k(G_2)$ за свако $k \in \mathbb{N}_0$, тада је $ER(G_1) \leqslant ER(G_2)$, а како $M_k(G)$ представља број затворених шетњи дужине k у графу G, закључујемо да је од интереса посматрати број затворених шетњи за упоређивање вредности резолвентне енергије датих графова. Изложићемо анализу броја шетњи у графу и њихов утицај на вредност резолвентне енергије графа. Представићемо резултате из радова [68] и [3]. Такође, приказаћемо и резултате који се односе на Лапласову резолвентну и ненегативну Лапласову резолвентну енергију.

4.1 Стабла

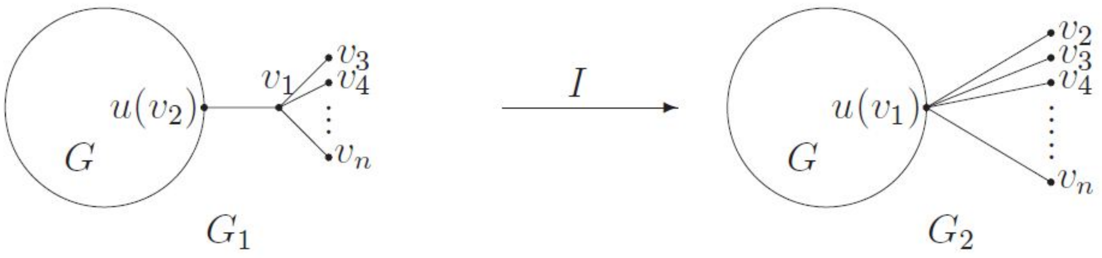
Разматраћемо стабла са n чворова.



Слика 4.1: Звезда S_n

Лема 4.1.1. [41] *Нека је S_n звезда са n чворова $v_1, v_2, \ldots, v_n$ и центром v_1, приказана на слици 4.1. Тада постоји инјекција $\xi_1 : W_{2k}(v_2) \to W_{2k}(v_1)$, при чему ξ_1 није сирјекција за $n \geqslant 3$ и $k \geqslant 1$, где су са $W_{2k}(v_1)$ и $W_{2k}(v_2)$ означени скупови* *затворених шетњи дужине $2k$ који почињу и завршавају се у чвору v_1, односно v_2, звезде S_n, респективно.*

Доказ. Нека је $\xi_1 : W_{2k}(v_2) \to W_{2k}(v_1)$ пресликавање дефинисано тако да за сваку затворену шетњу $w = v_2 v_1 v_{i_1} \cdots v_{i_{2k-3}} v_1 v_2$ из $W_{2k}(v_2)$ важи да је $\xi_1(w) = v_1 v_2 v_1 v_{i_1} \cdots v_{i_{2k-3}} v_1$. Овако дефинисано пресликавање је инјекција која није сирјекција за $n \geqslant 3$ и $k \geqslant 1$, јер не постоји $w \in W_{2k}(v_2)$ тако да је $\xi_1(w) = v_1 v_3 v_1 v_3 v_1 \cdots v_3 v_1 \in W_{2k}(v_1)$. □



Слика 4.2: Трансформација I

Лема 4.1.2. [41] *Нека је u неизоловани чвор простог графа G. Ако су графови G_1 и G_2 добијени од графа G идентификовањем чвора v_2, односно центра v_1 звезде S_n, респективно, са чвором u, што је илустровано на слици 4.2, тада је $M_{2k}(G_1) < M_{2k}(G_2)$ за $n \geqslant 3$ и $k \geqslant 2$.*

Доказ. Нека је са $W_{2k}(G)$ означен скуп свих затворених шетњи дужине $2k$ у графу G. Тада је $W_{2k}(G_i) = W_{2k}(G) \cup W_{2k}(S_n) \cup A_i$, где A_i је скуп затворених шетњи дужине $2k$ у графу G_i, таквих да свака од њих садржи бар једну грану из $E(G)$ и бар једну грану из $E(S_n)$, $i = 1, 2$. Дакле, $M_{2k}(G_i) = |W_{2k}(G)| + |W_{2k}(S_n)| + |A_i| = M_{2k}(G) + M_{2k}(S_n) + |A_i|$. Очигледно, довољно је показати да је $|A_1| < |A_2|$.

Нека је $\eta_1 : A_1 \to A_2$ пресликавање дефинисано са $\eta_1(w) = (w - w \cap S_n) \cup \xi_1(w \cap S_n)$ за сваку затворену шетњу $w \in A_1$, тј. $\eta_1(w)$ је затворена шетња дужине $2k$ у A_2 добијена од w заменом сваког њеног максималног (v_2, v_2)-дела у S_n (који је затворена шетња од v_2 у S_n) са њеном сликом при пресликавању ξ_1. На пример,

$$\begin{aligned}&\eta_1(u_0 u_1 \cdots u_r \underline{v_2 v_1 v_3 v_1 v_2} u'_1 \cdots u'_s \underline{v_2 v_1 v_4 v_1 v_2 v_1 v_5 v_1 v_2} u''_1 \cdots u''_t u_0)\\ &= u_0 u_1 \cdots u_r \underline{v_1 v_2 v_1 v_3 v_1} u'_1 \cdots u'_s \underline{v_1 v_2 v_1 v_4 v_1 v_2 v_1 v_5 v_1} u''_1 \cdots u''_t u_0,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&\eta_1(\underline{\underline{v_3 v_1 v_2}} u_1 \cdots u_r \underline{v_2 v_1 v_4 v_1 v_2} u'_1 \cdots u'_s \underline{\underline{v_2 v_1 v_4 v_1 v_3}})\\ &= \underline{\underline{v_3 v_1}} u_1 \cdots u_r \underline{v_1 v_2 v_1 v_4 v_1} u'_1 \cdots u'_s \underline{\underline{v_1 v_2 v_1 v_4 v_1 v_3}},\end{aligned}$$

где су $u_0, u_1, \ldots, u_r, u'_1, \ldots, u'_s, u''_1, \ldots, u''_t$ чворови у G.

На основу леме 4.1.1, ξ_1 је инјекција и овако дефинисана функција η_1 је такође инјекција. Међутим, не постоји $w \in A_1$ тако да $\eta_1(w) \in A_2$ и $\eta_1(w)$ не пролази граном $v_1 v_2$ у G_2. Дакле, η_1 није сирјекција и важи да је $|A_1| < |A_2|$, одакле следи да је $M_{2k}(G_1) < M_{2k}(G_2)$. □

Слика 4.3: Пут P_n

Лема 4.1.3. [41] *Нека је $P_n = v_1 v_2 \cdots v_n$ пут са n чворова (слика 4.3). Тада постоји инјекција $\xi_2 : W'_{2k}(v_1) \to W'_{2k}(v_t)$ и ξ_2 није сирјекција за $n \geqslant 4, 1 < t < n$ и $k \geqslant 1$, где су $W'_{2k}(v_1)$ и $W'_{2k}(v_t)$ скупови затворених шетњи дужине $2k$ које почињу и завршавају се у v_1 и v_t у P_n, респективно.*

Доказ. Дефинишимо најпре функцију $f : \{v_1, v_2, \ldots, v_t\} \to \{v_1, v_2, \ldots, v_t\}$ са $f(v_i) = v_{t-i+1}$, $i = 1, 2, \ldots, t$. Тада можемо помоћу функције f успоставити бијекцију између скупа затворених шетњи дужине $2k$ које почињу и завршавају се у чвору v_1 пута $P_t = v_1 v_2 \cdots v_t$ и скупа затворених шетњи дужине $2k$ које почињу и завршавају се у чвору v_t пута $P_t = v_1 v_2 \cdots v_t$.

Нека је даље дефинисана функција $\xi_2 : W'_{2k}(v_1) \to W'_{2k}(v_t)$ за свако $w \in W'_{2k}(v_1)$ на следећи начин:

(i) Ако је $w \in W'_{2k}(v_1)$ пут у $P_t = v_1 v_2 \cdots v_t$, тј. w не пролази граном $v_t v_{t+1}$, тада је $\xi_2(w) = f(w)$;

(ii) Ако $w \in W'_{2k}(v_1)$ пролази граном $v_t v_{t+1}$, тада w можемо записати као $w = w_1 \cup w_2 \cup w_3$, где је w_1 први (v_1, v_t)-део шетње w, w_3 је последњи (v_t, v_1)-део шетње w, и остатак w_2 је унутрашњи максимални (v_t, v_t)-део шетње w, тј. w је затворена шетња која почиње и завршава у чвору v_1, тако што најпре пролази путем w_1 од v_1 до v_t, затим пролази путем w_2 од v_t до v_t, и на крају пролази путем w_3 од v_t до v_1; тада је $\xi_2(w) = w_1^{-1} \cup w_3^{-1} \cup w_2$, тј. $\xi_2(w)$ је затворена шетња која почиње и завршава се у чвору v_t, тако што најпре пролази путем w_1^{-1} од v_t до v_1, затим пролази путем w_3^{-1} од v_1 до v_t и на крају пролази путем w_2 од v_t до v_t.

У случају пута $P_6 = v_1 v_2 v_3 v_4 v_5 v_6$, за $t = 3$

$$w = v_1 v_2 v_3 v_2 v_3 v_2 v_1,$$

је затворена шетња која почиње и завршава се у чвору v_1 и не пролази граном $v_3 v_4$ у P_6, а

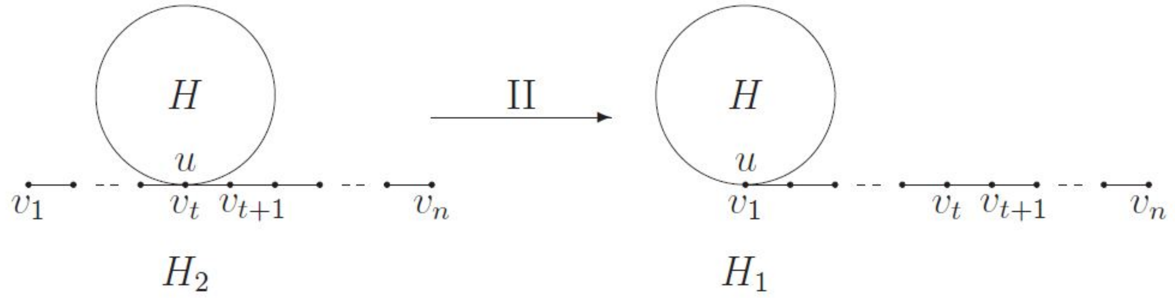
$$w' = \underline{v_1 v_2 v_3} v_2 v_1 v_2 v_3 v_4 v_5 v_4 v_3 v_2 v_1 v_2 v_3 v_4 v_3 v_2 \underline{v_3 v_2 v_1 v_2 v_1},$$

је затворена шетња која почиње и завршава се у чвору v_1 и пролази граном $v_3 v_4$ у P_6. Тада је

$$\xi_2(w) = v_3 v_2 v_1 v_2 v_1 v_2 v_3,$$

$$\xi_2(w') = \underline{v_3 v_2 v_1 v_2 v_1 v_2 v_3} v_2 v_1 v_2 v_3 v_4 v_5 v_4 v_3 v_2 v_1 v_2 v_3 v_4 v_3 v_2 v_3.$$

Овако дефинисана функција ξ_2 је инјекција, али није сирјекција, јер не постоји $w \in W'_{2k}(v_1)$ тако да је $\xi_2(w)$ затворена шетња дужине $2k$ у P_n која не пролази граном $v_t v_{t-1}$ и која почиње и завршава се у чвору v_t. $\square$



Слика 4.4: Трансформација II

Лема 4.1.4. [41] *Нека је u неизолован чвор простог графа H. Ако су H_1 и H_2 графови добијени од графа H идентификовањем чвора v_1, односно унутрашњег чвора v_t пута P_n са чвором u, респективно, као што је приказано на слици 4.4, тада је $M_{2k}(H_1) < M_{2k}(H_2)$ за $n \geqslant 3$ и $k \geqslant 2$.*

Доказ. Нека је B_i скуп затворених шетњи дужине $2k$ у H_i, при чему свака од њих садржи бар једну грану из $E(H)$ и бар једну грану из $E(P_n)$, $i = 1, 2$. Слично као у доказу леме 4.1.2 довољно је показати да је $|B_1| < |B_2|$.

Нека је $\eta_2 : B_1 \to B_2$ пресликавање дефинисано тако да за сваку шетњу $w \in B_1$ важи да је $\eta_2(w) = (w - w \cap P_n) \cup \xi_2(w \cap P_n)$, тј. $\eta_2(w)$ је затворена шетња дужине $2k$ у B_2 добијена од w заменом сваког њеног дела у P_n (који је затворена шетња која почиње и завршава се у чвору v_1 у P_n) при пресликавању ξ_2.

На основу леме 4.1.3, ξ_2 је инјекција. Следи да је η_2 такође инјекција. Функција η_2 није сирјекција, јер не постоји $w \in B_1$, тако да $\eta_2(w) \in B_2$ не пролази граном $v_t v_{t-1}$ у H_2. Дакле, $|B_1| < |B_2|$. □

Теорема 4.1.1. [68] *Нека је T стабло са n чворова различито од звезде S_n и пута P_n. Тада је*

$$ER(P_n) < ER(T) < ER(S_n).$$

Доказ. Понављајући трансформацију I, било које стабло T са n чворова се може свести на звезду S_n. На основу леме 4.1.2 следи да је $M_{2k}(T) < M_{2k}(S_n)$ за $k \geqslant 2$. Како је стабло бипартитан граф, а за бипартитне графове важи да је $M_{2k+1} = 0$ за свако $k \geqslant 0$, добија се неједнакост

$$ER(T) = \frac{1}{n} \sum_{k \geqslant 0} \frac{M_{2k}(T)}{n^k} < \frac{1}{n} \sum_{k \geqslant 0} \frac{M_{2k}(S_n)}{n^k} = ER(S_n).$$

С друге стране, понављајући трансформацију II, било које стабло са n чворова се може свести на пут P_n. На основу леме 4.1.4 важи да је $M_{2k}(T) > M_{2k}(P_n)$ за $k \geqslant 2$ и

$$ER(T) = \frac{1}{n} \sum_{k \geqslant 0} \frac{M_{2k}(T)}{n^k} > \frac{1}{n} \sum_{k \geqslant 0} \frac{M_{2k}(P_n)}{n^k} = ER(P_n).$$

Дакле, $ER(P_n) < ER(T) < ER(S_n)$. □

На основу теореме 4.1.1 и последице 2.2.1 закључујемо да важи следећа последица.

Последица 4.1.1. [68] *Нека је G повезан граф са n чворова, различит од пута P_n и комплетног графа K_n. Тада је $ER(P_n) < ER(G) < ER(K_n)$.*

Изложени резултати о екстремалним стаблима у односу на резолвентну енергију графа важе и у случају Лапласове резолвентне и ненегативне Лапласове резолвентне енергије. Наиме, како су стабла бипартитни графови, на основу последице 2.2.5 следи да је $RL(T) = RQ(T)$, за било које стабло T.

Теорема 4.1.2. [17] *Ако је T стабло са n чворова, различито од пута P_n и звезде S_n, тада је*

$$RL(P_n) < RL(T) < RL(S_n),$$
$$RQ(P_n) < RQ(T) < RQ(S_n).$$

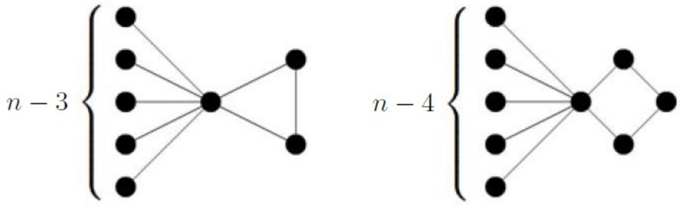
4.2 Унициклични графови

У наставку, размотримо резолвентну енергију уницикличних графова, тј. графова који садрже тачно једну контуру, користећи резултате из рада [3]. За добијање екстремалних уницикличних графова у односу на резолвентну енергију, користићемо број шетњи у графу.

Означимо са X_n уницикличан граф добијен од контуре C_3 додавањем $n-3$ висећих грана на један њен чвор, и са $\tilde{X}_n$ уницикличан граф добијен од контуре C_4 додавањем $n-4$ висећих грана на један њен чвор (слика 4.5).

Теорема 4.2.1. [45] *Нека је G уницикличан граф са $n \geqslant 4$ чворова и $G \ncong X_n, \tilde{X}_n$.*

1. *Ако је граф G бипартитан, тада је $M_k(G) \leqslant M_k(\tilde{X}_n)$, за свако $k \geqslant 0$, и $M_{k_0}(G) < M_{k_0}(\tilde{X}_n)$ за неко k_0.*
2. *Ако граф G није бипартитан (тј. G садржи непарну контуру), тада је $M_k(G) \leqslant M_k(X_n)$ за свако $k \geqslant 0$, и $M_{k_0}(G) < M_{k_0}(X_n)$ за неко k_0.*



Слика 4.5: Графови X_n и $\tilde{X}_n$

За доказ теореме 4.2.1 потребна је анализа броја шетњи у графу коју излажемо у наредним лемама. За почетак, уведимо одређену терминологију која је неопходна за поменути доказ.

За $u, v \in V(G)$ нека (u, v) означава шетњу која почиње у чвору u, а завршава се у чвору v графа G. Нека је $\mathcal{W}_k(G, u, v)$ скуп свих (u, v) - шетњи дужине k у графу G и нека је $M_k(G; u, v) = |\mathcal{W}_k(G, u, v)|$. Подсетимо се да је $M_k(G; u, v) = M_k(G; v, u)$ за све позитивне целе бројеве k.

Нека су G_1 и G_2 два графа, и нека $u_1, v_1 \in V(G_1)$, а $u_2, v_2 \in V(G_2)$. Ако је $M_k(G_1; u_1, v_1) \leqslant M_k(G_2; u_2, v_2)$ за све позитивне целе бројеве k, тада пишемо $(G_1; u_1, v_1) \preceq (G_2; u_2, v_2)$. Ако је $(G_1, u_1, v_1) \preceq (G_2, u_2, v_2)$ и постоји бар један позитиван цео број k_0 такав да је $M_{k_0}(G_1, u_1, v_1) < M_{k_0}(G_2, u_2, v_2)$, тада пишемо $(G_1; u_1, v_1) \prec (G_2, u_2, v_2)$.

Нека је $\mathcal{W}_k(G; u) = \mathcal{W}_k(G; u, u), M_k(G; u) = M_k(G; u, u)$ и $(G; u) = (G; u, u)$.

За подскуп M скупа грана графа G, $G - M$ означава граф који се добија из графа G брисањем грана из M, док за подскуп M^* скупа грана комплемента графа G, $G + M^*$ означава граф који се добија из графа G додавањем грана из M^*.

Нека је H граф (који није нужно повезан) и $u, v \in V(H)$. Претпоставимо да $w_i \in V(H)$ и $uw_i, vw_i \notin E(H)$ за $i = 1, 2, \ldots, r$, где је r позитиван цео број. Нека је $E_u = \{uw_1, uw_2, \ldots, uw_r\}$, $E_v = \{vw_1, vw_2, \ldots, vw_r\}$, $H_u = H + E_u$, $H_v = H + E_v$, $V_u = \{u, w_1, w_2, \ldots, w_r\}$ и $V_v = \{v, w_1, w_2, \ldots, w_r\}$. Очигледно, важи да је $V_u \backslash \{u\} = V_v \backslash \{v\}$. За $x_1, x_2 \in V_u$ ($x_1, x_2 \in V_v$, респективно), нека $\mathcal{T}_k(H; x_1, x_2)$ ($\mathcal{T}_k(H_v; x_1, x_2)$, респективно) означава скуп (x_1, x_2)-шетњи дужине k у H_u (H_v, респективно) које почињу и завршавају се гранама у E_u (E_v, респективно).

У радовима [46, 45], Du је са сарадницима доказао тврђења која су важна за изучавање броја затворених шетњи у графу.

Лема 4.2.1. [46] *Нека је $(H; u) \prec (H; v)$ и $(H; w_i, u) \preceq (H; w_i, v)$ за $1 \leqslant i \leqslant r$. Тада за сваки позитиван цео број k важи*

1. $|\mathcal{T}_k(H_u; u, u)| \leqslant |\mathcal{T}_k(H_v; v, v)|$;
2. $|\mathcal{T}_k(H_u; u, x_2)| \leqslant |\mathcal{T}_k(H_v; v, x_2)|$ *за* $x_2 \in V_u \backslash \{u\}$;
3. $|\mathcal{T}_k(H_u; x_1, u)| \leqslant |\mathcal{T}_k(H_v; x_1, v)|$ *за* $x_1 \in V_u \backslash \{u\}$;
4. $|\mathcal{T}_k(H_u; x_1, x_2)| \leqslant |\mathcal{T}_k(H_v; x_1, x_2)|$ *за* $x_1, x_2 \in V_u \backslash \{u\}$.

Лема 4.2.2. [46] *Ако је $(H; u) \prec (H, v)$ и $(H; w_i, u) \preceq (H; w_i, v)$ за $1 \leqslant i \leqslant r$, тада је $ER(H_u) < ER(H_v)$.*

Доказ. За позитиван цео број k, нека је $S_u(k)$ ($S_v(k)$, респективно) скуп затворених шетњи дужине k у H_u (H_v, респективно) које садрже неке гране скупа E_u (E_v, респективно). Тада је

$$\begin{aligned} M_k(H_u) &= M_k(H) + |S_u(k)|, \\ M_k(H_v) &= M_k(H) + |S_v(k)|. \end{aligned}$$

Из последње две једнакости закључујемо да је довољно доказати да је $|S_u(k)| \leqslant |S_v(k)|$ за све позитивне целе бројеве k, при чему важи строга неједнакост за неки позитиван цео број k_0.

Нека је $W \in S_u(k)$ произвољна шетња. Шетњу W можемо на јединствен начин разложити на три дела, рецимо, $W_1W_2W_3$, где је W_1 шетња у H чија дужина може бити нула, W_2 је најдужи део шетње W у H_u који почиње и завршава се гранама у E_u, и W_3 је шетња у H чија дужина може бити нула. На основу избора W_2, закључујемо да W_2 почиње у неком чвору скупа V_u и завршава се у неком чвору скупа V_u. Нека је

$$S_u^{(x_1,x_2)}(k) = \{W \in S_u(k) : W_2 \text{ је } (x_1,x_2)- \text{ шетња } \},$$

где су $x_1, x_2 \in V_u$. Тада је

$$\begin{aligned} |S_u(k)| &= \sum_{x_1,x_2\in V_u} |S_u^{(x_1,x_2)}(k)| = |S_u^{(u,u)}(k)| + \sum_{x_2\in V_u\setminus\{u\}} |S_u^{(u,x_2)}(k)| \\ &+ \sum_{x_1\in V_u\setminus\{u\}} |S_u^{(x_1,u)}(k)| + \sum_{x_1,x_2\in V_u\setminus\{u\}} |S_u^{(x_1,x_2)}(k)|. \end{aligned}$$

Слично, нека је

$$S_v^{(x_1,x_2)}(k) = \{W \in S_v(k) : W_2 \text{ је } (x_1,x_2)- \text{ шетња } \},$$

где су $x_1, x_2 \in V_v$. Тада је

$$\begin{aligned} |S_v(k)| &= \sum_{x_1,x_2\in V_v} |S_v^{(x_1,x_2)}(k)| = |S_v^{(v,v)}(k)| + \sum_{x_2\in V_v\setminus\{v\}} |S_v^{(v,x_2)}(k)| \\ &+ \sum_{x_1\in V_v\setminus\{u\}} |S_v^{(x_1,v)}(k)| + \sum_{x_1,x_2\in V_v\setminus\{v\}} |S_v^{(x_1,x_2)}(k)|. \end{aligned}$$

Сада је

$$\begin{aligned} |S_u^{(u,u)}(k)| &= \sum_{\substack{k_1+k_2+k_3=k\\ k_1,k_3\geqslant 0,k_2\geqslant 1}} \sum_{y\in V(H)} M_{k_1}(H;y,u)\cdot|\mathcal{T}_{k_2}(H_u;u,u)|\cdot M_{k_3}(H;u,y) \\ &= \sum_{\substack{k_1+k_2+k_3=k\\ k_1,k_3\geqslant 0,k_2\geqslant 1}} |\mathcal{T}_{k_2}(H_u;u,u)| \sum_{y\in V(H)} M_{k_1}(H;y,u)\cdot M_{k_3}(H;u,y) \\ &= \sum_{\substack{k_1+k_2+k_3=k\\ k_1,k_3\geqslant 0,k_2\geqslant 1}} |\mathcal{T}_{k_2}(H_u;u,u)|\cdot M_{k_1+k_3}(H;u,u). \end{aligned}$$

Слично је

$$|S_v^{(v,v)}(k)| = \sum_{\substack{k_1+k_2+k_3=k\\ k_1,k_3\geqslant 0,k_2\geqslant 1}} |\mathcal{T}_{k_2}(H_v;v,v)|\cdot M_{k_1+k_3}(H;v,v).$$

На основу леме 4.2.1 (1), важи да је $|\mathcal{T}_s(H_u;u,u)| \leqslant |\mathcal{T}_s(H_v;v,v)|$ за све позитивне целе бројеве s. Како је $(H;u) \prec (H;v)$, следи да је $M_s(H;u,u) \leqslant M_s(H;v,v)$ за све позитивне целе бројеве s, при чему важи строга неједнакост за неки позитиван цео број s_0. Отуда је $|S_u^{(u,u)}(k)| \leqslant |S_v^{(v,v)}(k)|$, при чему важи строга неједнакост за неки позитиван цео број k_0.

На основу леме 4.2.1 (2,3,4), важе неједнакости

$$
\begin{aligned}
& \sum_{x_2 \in V_u \setminus \{u\}} |S_u^{(u,x_2)}(k)| \\
= & \sum_{x_2 \in V_u \setminus \{u\}} \sum_{\substack{k_1+k_2+k_3=k \\ k_1,k_3 \geqslant 0, k_2 \geqslant 1}} |\mathcal{T}_{k_2}(H_u; u, x_2)| \cdot M_{k_1+k_3}(H; x_2, u) \\
\leqslant & \sum_{x_2 \in V_v \setminus \{v\}} |S_v^{(v,x_2)}(k)| = \sum_{x_2 \in V_v \setminus \{v\}} \sum_{\substack{k_1+k_2+k_3=k \\ k_1,k_3 \geqslant 0, k_2 \geqslant 1}} |\mathcal{T}_{k_2}(H_v; v, x_2)| \cdot M_{k_1+k_3}(H; x_2, v), \\
& \sum_{x_1 \in V_u \setminus \{u\}} |S_u^{(x_1,u)}(k)| = \sum_{x_1 \in V_u \setminus \{u\}} \sum_{\substack{k_1+k_2+k_3=k \\ k_1,k_3 \geqslant 0, k_2 \geqslant 1}} |\mathcal{T}_{k_k}(H_u; x_1, u)| \cdot M_{k_1+k_3}(H; u, x_1) \\
\leqslant & \sum_{x_1 \in V_v \setminus \{v\}} |S_u^{(x_1,v)}(k)| = \sum_{x_1 \in V_v \setminus \{v\}} \sum_{\substack{k_1+k_2+k_3=k \\ k_1,k_3 \geqslant 0, k_2 \geqslant 1}} |\mathcal{T}_{k_2}(H_v; x_1, v)| \cdot M_{k_1+k_3}(H; v, x_1), \\
& \sum_{x_1,x_2 \in V_u \setminus \{u\}} |S_u^{(x_1,x_2)}(k)| \\
& = \sum_{x_1,x_2 \in V_u \setminus \{u\}} \sum_{\substack{k_1+k_2+k_3=k \\ k_1,k_3 \geqslant 0, k_2 \geqslant 1}} |\mathcal{T}_{k_2}(H_u; x_1, x_2)| \cdot M_{k_1+k_3}(H; x_2, x_1) \\
\leqslant & \sum_{x_1,x_2 \in V_v \setminus \{v\}} |S_v^{(x_1,x_2)}(k)| \\
& = \sum_{x_1,x_2 \in V_v \setminus \{v\}} \sum_{\substack{k_1+k_2+k_3=k \\ k_1,k_3 \geqslant 0, k_2 \geqslant 1}} |\mathcal{T}_{k_2}(H_v; x_1, x_2)| \cdot M_{k_1+k_3}(H; x_2, x_1).
\end{aligned}
$$

Дакле, $|S_u(k)| \leqslant |S_v(k)|$ за све позитивне целе бројеве k, при чему важи строга неједнакост за неки позитиван цео број k_0. □

Лема 4.2.3. [45] *Нека је G уницикличан граф са јединственом контуром C. Ако је $u \in V(C)$ чвор са висећим суседом u_1 и u_2 је суседни чвор чвора u на контури C, тада је $(G; u_1) \prec (G; u_2)$.*

Доказ. Нека је k позитиван цео број. Конструишимо пресликавање $f : \mathcal{W}_k(G; u_1) \to \mathcal{W}_k(G; u_2)$ на следећи начин: за $W \in \mathcal{W}_k(G; u_1)$, нека је $f(W)$ шетња добијена од W заменом првог чвора u_1 са последњим u_2. Очигледно, $f(W) \in \mathcal{W}_k(G; u_2)$ и f је инјекција, тј. $M_k(G; u_1) \leqslant M_k(G; u_2)$. Како је $d_G(u_2) > d_G(u_1) = 1$, следи да је $M_2(G; u_1) < M_2(G; u_2)$, одакле је $(G; u_1) \prec (G; u_2)$. □

Нека је C_n контура са $n \geqslant 3$ чворова. Означимо са $\mathbb{U}(n, m)$ скуп уницикличних графова реда n који су добијени повезивањем $n - m$ висећих чворова са неким чворовима контуре C_m, где је $3 \leqslant m \leqslant n$.

Лема 4.2.4. [45] *Нека је G граф са максималном вредношћу резолвентне енергије међу свим уницикличним графовима реда n и контуром дужине $m \geqslant 3$. Тада је $G \in \mathbb{U}(n,m)$.*

Доказ. Претпоставимо да $G \notin \mathbb{U}(n,m)$. Нека је C_m јединствена контура графа G. Тада постоји бар један чвор на контури C_m, рецимо u, са бар једним суседним чвором, рецимо u_1, који није висећи и који не припада контури C_m. Нека су $v_1, v_2, \ldots, v_t$ суседни чворови чвора u_1 у графу G који су различити од u, и u_2 чвор суседан чвору u који се налази на контури C_m. Нека је $E_{u_1} = \{u_1v_1, u_1v_2, \ldots, u_1v_t\}$, $E_{u_2} = \{u_2v_1, u_2v_2, \ldots, u_2v_t\}$ и $H = G - E_{u_1}$. На основу леме 4.2.3, следи да је $(H; u_1) \prec (H; u_2)$. Сада је на основу леме 4.2.1, $ER(G) < ER(H + E_{u_2})$, што је контрадикција. □

Ако је у леми 4.2.4 граф G бипартитан, тада графови G и $H + E_{u_2}$ имају исту бипартицију.

Лема 4.2.5. [45] *Ако је G граф са максималном вредношћу резолвентне енергије међу свим бипартитним уницикличним графовима са (p,q) - бипартицијом, где је $p \geqslant q \geqslant 2$, тада је $G \in \mathbb{U}(p+q, m)$, где је $m \geqslant 4$ паран цео број.*

За два различита чвора $u, v \in V(G)$, нека је $\mathcal{W}_k(G; u, [v])$ скуп (u,u) - шетњи дужине k у графу G које садрже чвор v, и нека је $M_k(G; u, [v]) = |\mathcal{W}_k(G; u, [v])|$.

Лема 4.2.6. [45] *Нека је G стабло добијено од пута $P_t = v_1v_2 \ldots v_t$ додавањем n_i висећих чворова на чвор v_i за $i = 1, 2, \ldots, t$, при чему је $m_i \geqslant 0, t \geqslant 5$. Ако је $n_1 \leqslant n_3$, тада је*

1. $(G; v_1) \prec (G; v_3)$;

2. $(G; v_t, v_1) \preceq (G; v_t, v_3)$.

Доказ. 1. Нека је H_1 (H_2, респективно) компонента од $G - \{v_2v_3\}$ ($G - \{v_1v_2\}$, респективно) која садржи v_2. Очигледно, H_1 је прави подграф од H_2, јер је $n_1 \leqslant n_3$ и $t \geqslant 5$. Отуда је $(H_1; v_1) \prec (H_2; v_3)$ и $(H_1; v_1, v_2) \prec (H_2, v_3, v_2)$.

Нека је k позитиван цео број. Приметимо да је

$$\begin{aligned} M_k(G; v_1) &= M_k(H_1; v_1) + M_k(G; v_1, [v_3]), \\ M_K(G; v_3) &= M_k(H_2; v_3) + M_k(G; v_3, [v_1]). \end{aligned}$$

Сада је преостало још само да се покаже да је $M_k(G; v_1, [v_3]) \leqslant M_k(G; v_3, [v_1])$.

Нека је $W \in \mathcal{W}_k(G; v_1, [v_3])$ произвољна шетња. Шетњу W можемо на јединствен начин разложити на два дела W_1W_2, где је W_1 најкраћи (v_1, v_3)-део (садржи (v_1, v_2)-шетњу у H_1 и грану v_2v_3) и W_2 представља преостали (v_3, v_1)-део од W. Тада је

$$M_k(G; v_1, [v_3]) = \sum_{\substack{k_1 + k_2 = k \\ k_1, k_2 \geqslant 0}} M_{k_1 - 1}(H_1; v_1, v_2) M_{k_2}(G; v_3, v_1).$$

Слично је

$$M_k(G;v_3,[v_1]) = \sum_{\substack{k_1+k_2=k\\ k_1,k_2\geqslant 0}} M_{k_1-1}(H_2;v_3,v_2)M_{k_2}(G;v_1,v_3).$$

Како је $M_{k_2}(G;v_3,v_1) = M_{k_2}(G;v_1,v_3)$ (за све позитивне целе бројеве k_2), важи да је $M_k(G;v_1,[v_3]) \leqslant M_k(G;v_3,[v_1])$.

2. Нека су $u_1,u_2,\ldots,u_{n_1}$ ($w_1,w_2,\ldots,w_{n_3}$, респективно) висећи суседи чвора v_1 (v_3, респективно) у графу G који се не налази на путу P_t.

Нека је k позитиван цео број. Конструишимо функцију $f : \mathcal{W}_k(G;v_t,v_1) \to \mathcal{W}_k(G;v_t,v_3)$ на следећи начин. Нека је $W \in \mathcal{W}_k(G;v_t,v_1)$ произвољна шетња коју можемо на јединствен начин разложити на два дела W_1W_2, где је W_1 најдужи (v_t,v_2)-део од W, и W_2 је преостали (v_2,v_1)-део од W (за који, унутрашњи чворови, ако постоје, могу бити једино $v_1,u_1,u_2,\ldots,u_{n_1}$). Нека је $f(W)=f(W_1)f(W_2)$, где је $f(W_1)=W_1$, и $f(W_2)$ је (v_2,v_3)-шетња добијена од W_2 заменом v_1 са v_3, и u_i са w_i, за $i=1,2,\ldots,n_1$. Очигледно, $f(W)\in\mathcal{W}_k(G;v_t,v_3)$ и f је инјекција, одакле следи $M_k(G;v_t,v_1)\leqslant M_k(G;v_t,v_3)$. □

Лема 4.2.7. [45] *Нека је $G\in\mathbb{U}(n,m)$, где је $5\leqslant m\leqslant n$. Претпоставимо да је $C_m = v_1v_2\ldots v_mv_1$ јединствена контура графа G, $d_G(v_3)=\max\{d_G(v_i) : 1\leqslant i\leqslant m\}$ и $G_1 = G-\{v_1v_m\}+\{v_3v_m\}$. Тада је $ER(G) < ER(G_1)$.*

Доказ. Нека је $H = G-\{v_1v_m\}$. Како је $d_G(v_3)=\max\{d_G(v_i) : 1\leqslant i\leqslant m\}$, на основу леме 4.2.6 следи да је $(H;v_1)\prec(H;v_3)$ и $(H;v_m,v_1)\preceq(H;v_m,v_3)$. Приметимо да је $G = H+\{v_1v_m\}$ и $G_1 = H+\{v_3v_m\}$. Сада доказ следи из леме 4.2.2. □

Коментар 4.2.1. [45] *Граф G_1 у леми* 4.2.7 *је уницикличнии граф реда n са контуром дужине $m-2$.*

Нека је $C_3(n_1,n_2,n_3)$ уницикличнии граф добијен тако што се на сваки од чворова контуре $C_3 = v_1v_2v_3v_1$ дода n_i висећих грана, при чему је $n_1\geqslant n_2\geqslant n_3\geqslant 0$. Нека је $C_3(n_1,n_2)=C_3(n_1,n_2,0)$ и $C_3(n_1)=C_3(n_1,0,0)$.

Лема 4.2.8. [45] *Ако је $a\geqslant 1$ и $b\geqslant 0$, тада је $(C_3(a,b);v_3)\prec(C_3(a,b);v_1)$.*

Лема 4.2.9. [45] *Нека су n_1,n_2,n_3 ненегативни цели бројеви. Ако је $n_2\geqslant 1$, тада је $ER(C_3(n_1,n_2,n_3)) < ER(C_3(n_1+n_2,n_3))$.*

Нека је $G\in\mathbb{U}(n,3)$, при чему је $n\geqslant 4$. На основу леме 4.2.9 следи да је $ER(G)\leqslant ER(C_3(n-3))$, при чему једнакост важи ако и само ако је $G\cong C_3(n-3)$.

Нека је $C_4(n_1,n_2,n_3,n_4)$ уницикличан граф добијен од контуре $C_4 = v_1v_2v_3v_4v_1$ додавањем n_i висећих грана на чвор v_i за $i=1,2,3,4$, при чему је $n_1\geqslant n_3\geqslant 0, n_2\geqslant n_4\geqslant 0, n_1+n_3\geqslant n_2+n_4$. Нека је $C_4(n_1,n_2)=C_4(n_1,n_2,0,0)$ и $C_4(n_1)=C_4(n_1,0,0,0)$.

Лема 4.2.10. [45] *Нека су n_1,n_2,n_3,n_4 ненегативни цели бројеви.*

1. *Ако је $n_3\geqslant 1$ или $n_4\geqslant 1$, тада је $ER(C_4(n_1,n_2,n_3,n_4)) < ER(C_4(n_1+n_3,n_2+n_4))$.*

2. Ако је $n_1 \geqslant n_2 \geqslant 1$, тада је $ER(C_4(n_1, n_2)) < ER(C_4(n_1 + n_2))$.

Коришћењем претходних резултата о шетњама у уницикличним графовима, сада можемо изложити доказ теореме 4.2.1.
Доказ теореме 4.2.1. Први део теореме следи на основу лема 4.2.4, 4.2.7 и 4.2.10, а други део следи на основу лема 4.2.4, 4.2.7 и 4.2.9. □

Теорема 4.2.2. [3] *Нека је G унicикличан граф са $n \geqslant 4$ чворова. Тада је $ER(G) \leqslant ER(X_n)$, при чему једнакост важи ако и само ако је $G \cong X_n$. Специјално, ако је G бипартитан граф, тада је $ER(G) \leqslant ER(\tilde{X}_n)$, при чему једнакост важи ако и само ако је $G \cong \tilde{X}_n$.*

Доказ. Нека је G унициклчан граф. На основу теореме 4.2.1 следи да је $ER(G) \leqslant ER(X_n)$ ако G садржи непарну контуру, и $ER(G) \leqslant ER(\tilde{X}_n)$ ако G садржи парну контуру (тј. ако је G бипартитан). Једнакост важи ако и само ако је $G \cong X_n$ у случају непарне контуре, или $G \cong \tilde{X}_n$ у случају бипартитног графа.

Уницикллични граф са максималном резолвентном енергијом је сада X_n или $\tilde{X}_n$. Покажимо да је $ER(X_n) > ER(\tilde{X}_n)$, за $n \geqslant 4$. Искористимо формулу (2.8)

$$ER(X_n) = \frac{\phi'(X_n, n)}{\phi(X_n, n)}, \quad ER(\tilde{X}_n) = \frac{\phi'(\tilde{X}_n, n)}{\phi(\tilde{X}_n, n)}. \tag{4.1}$$

На основу леме 1.2.4 добијамо следеће карактеристичне полиноме

$$\begin{aligned} \phi(X_n, \lambda) &= \lambda^{n-4}(\lambda^4 - n\lambda^2 - 2\lambda + n - 3), \\ \phi(\tilde{X}_n, \lambda) &= \lambda^{n-4}(\lambda^4 - n\lambda^2 + 2n - 8). \end{aligned}$$

Дакле, важи да је

$$\begin{aligned} ER(X_n) - ER(\tilde{X}_n) &= \frac{\phi'(X_n, n)}{\phi(X_n, n)} - \frac{\phi'(\tilde{X}_n, n)}{\phi(\tilde{X}_n, n)} \\ &= \frac{\phi'(X_n, n)\phi(\tilde{X}_n) - \phi'(\tilde{X}_n)\phi(X_n, n)}{\phi(X_n, n)\phi(\tilde{X}_n)} \\ &= \frac{10n^4 - 24n^3 + 10n^2 - 4n + 16}{(n^4 - n^3 - n - 3)(n^4 - n^3 + 2n - 8)}. \end{aligned}$$

Полином $p(\lambda) = 10\lambda^4 - 24\lambda^3 + 10\lambda^2 - 4\lambda + 16$ нема реалних нула, па је бројилац $p(n)$ позитиван за свако n. Реални корени полинома $\lambda^4 - \lambda^3 - \lambda - 3$ и $\lambda^4 - \lambda^3 + 2\lambda - 8$ су мањи од 2, па је именилац позитиван за $n \geqslant 2$. Одавде следи да је $ER(X_n) - ER(\tilde{X}_n) > 0$.

Дакле, граф X_n има највећу вредност резолвентне енергије међу свим уницикличним графовима са n чворова. □

У наставку излагања разматраћемо уницикличне графове са најмањом вредношћу резолвентне енергије.

Означимо са C_n^* унициклчан граф добијен додавањем висеће гране на произвољан чвор контуре C_{n-1}.

Лема 4.2.11. [45] *Нека је G уницикличан граф са $n \geqslant 5$ чворова. Ако је $G \ncong C_n, C_n^*$, тада је тачан бар један од следећих исказа.*

1. $M_k(G) \geqslant M_k(C_n)$ *за свако* $k \geqslant 0$, *и* $M_k(G) > M_k(C_n)$ *за неко* $k_0 \geqslant 0$.

2. $M_k(G) \geqslant M_k(C_n^*)$ *за свако* $k \geqslant 0$, *и* $M_k(G) > M_k(C_n^*)$ *за неко* $k_0 \geqslant 0$.

За доказ леме 4.2.11 наводимо три леме из рада [45] чији докази су слични као у претходном делу излагања када смо разматрали уницикличне графове са максималном вредношћу резолвентне енергије, па их из тога разлога нећемо наводити.

Лема 4.2.12. [45] *Нека је $G \in \mathbb{U}(n,m)$ граф са максималним степеном чвора 3 и $\lceil n/2 \rceil \leqslant m \leqslant n-2$. Тада је $ER(G) > \min\{ER(C_n), ER(C_n^*)\}$, $n \geqslant 4$.*

Лема 4.2.13. [45] *Нека је G стабло и $v_0 \in V(G)$, при чему је $|V(G)| \geqslant 3$. За цео број $s \geqslant 1$, нека је G_s стабло добијено од стабла G додавањем пута $P_s = v_1 v_2 \dots v_s$ на чвор v_0.*

1. *Ако је $s \geqslant 2$ паран, тада је $(G_s; v_s) \prec (G_s; v_0)$, и $(G_s; u, v_s) \preceq (G_s; u, v_0)$ за $u \in V(G) \backslash \{v_0\}$.*

2. *Ако је $s \geqslant 3$ непаран, тада је $(G_s; v_{s-1}) \prec (G_s; v_0)$, и $(G_s; u, v_{s-1}) \preceq (G_s; u, v_0)$ за $u \in V(G) \backslash \{v_0\}$.*

Лема 4.2.14. [45] *Нека w произвољан чвор нетривијалног повезаног графа G. За ненегативне целе бројеве p и q, нека је $G_{p,q}$ граф добијен од графа G додавањем два пута са p и q чворова, респективно, на чвор w. Ако је $p \geqslant q \geqslant 1$, тада је $ER(G_{p,q}) > ER(G_{p+1,q-1})$.*

Сада можемо изложити доказ леме 4.2.11.
Доказ леме 4.2.11. Ако је $G \ncong C_n, C_n^*$, на основу лема 4.2.12, 4.2.13, 4.2.14 следи да се у коначном броју корака, граф G може трансформисати у C_n или C_n^*. У сваком кораку, k-ти спектрални момент се не повећава за свако k, и опада за неко k_0. $\square$

На основу леме 4.2.11, важи следећа теорема.

Теорема 4.2.3. [3] *Ако је G уницикличан граф са $n \geqslant 5$ чворова и ако је $G \ncong C_n, C_n^*$, тада је $ER(G) > \min\{ER(C_n), ER(C_n^*)\}$.*

У следећој теореми доказаћемо да контура C_n има најмању вредност резолвентне енергије међу свим уницикличним графовима са n чворова.

Теорема 4.2.4. [3] *Нека је G уницикличан граф са $n \geqslant 5$ чворова. Ако је $G \ncong C_n$, тада је $ER(G) > ER(C_n)$.*

Доказ. На основу теореме 4.2.3 довољно је доказати да је $ER(C_n) < ER(C_n^*)$. Коришћењем рачунара може се проверити да тврђење важи за графове са највише 15 чворова. Претпоставимо да је $n > 15$. Тада је

$$ER(G) = \frac{d \ln \phi(G, \lambda)}{d\lambda}\bigg|_{\lambda = n},$$

$$\begin{aligned} ER(C_n) - ER(C_n^*) &= \left(\frac{d \ln \phi(C_n, \lambda)}{d\lambda} - \frac{d \ln \phi(C_n^*, \lambda)}{d\lambda} \right) \Bigg|_{\lambda = n} \\ &= \frac{d}{d\lambda} \ln \frac{\phi(C_n, \lambda)}{\phi(C_n^*, \lambda)} \Bigg|_{\lambda = n}. \end{aligned}$$

Највећа сопствена вредност контуре C_n је 2, док је највећа сопствена вредност графа C_n^* мања од 3. Отуда, имајући у виду да C_n и C_n^* не садрже троуглове нити петоуглове, за $\lambda = n$, добијамо

$$\begin{aligned} \phi(C_n, \lambda) &= \lambda^n - n\lambda^{n-2} + b_2(C_n)\lambda^{n-4} + \cdots, \\ \phi(C_n^*, \lambda) &= \lambda^n - n\lambda^{n-2} + b_2^*(C_n)\lambda^{n-4} + \cdots. \end{aligned}$$

Важи да је

$$\frac{\phi(C_n, \lambda)}{\phi(C_n^*, \lambda)} = 1 + \frac{b_2(C_n) - b_2(C_n^*)}{\lambda^4} + O\left(\frac{1}{\lambda^6}\right),$$

одакле је

$$\ln \frac{\phi(C_n, \lambda)}{\phi(C_n^*, \lambda)} = \frac{b_2(C_n) - b_2(C_n^*)}{\lambda^4} + O\left(\frac{1}{\lambda^6}\right).$$

Сада је

$$ER(C_n) - ER(C_n^*) = -4\frac{b_2(C_n) - b_2(C_n^*)}{n^5} + O\left(\frac{1}{n^7}\right).$$

Користећи Sachs-ову теорему може се показати да је

$$b_2(C_n) = \frac{1}{2}n(n-3), \;\; b_2(C_n^*) = \frac{1}{2}(n-3)(n-4) + 2n - 7,$$

одакле за довољно велико n важи

$$ER(C_n) - ER(C_n^*) \approx -\frac{4}{n^5},$$

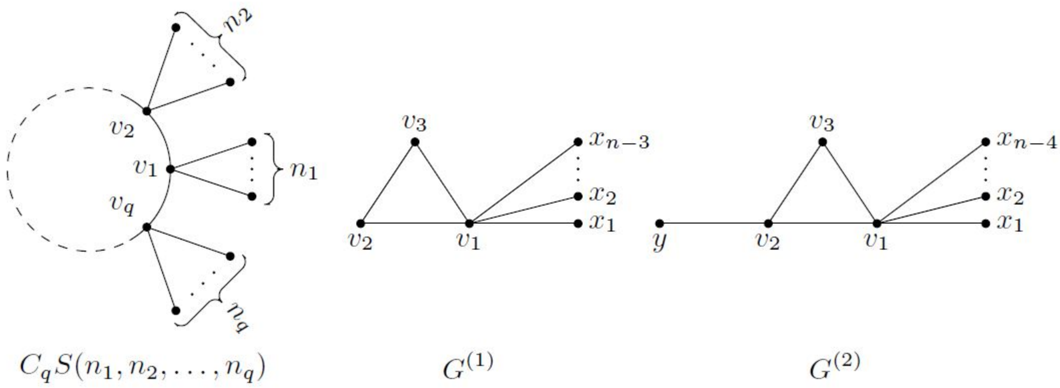
тј. $ER(C_n) < ER(C_n^*)$. □

Размотримо сада ненегативну Лапласову резолвентну енергију уницикличних графова. Ненегативна Лапласова резолвента енергија се доводи у везу са ненегативним Лапласовим Естрадиним индексом графа G, у ознаци $SLEE(G)$, који је дефинисан са [4]

$$SLEE(G) = \sum_{i=1}^{n} e^{q_i} = \sum_{k \geqslant 0} \frac{M_k(Q(G))}{k!}. \tag{4.2}$$

Посматрајући (2.10) и (4.2) можемо закључити да су графовске инваријанте $RQ(G)$ и $SLEE(G)$ растуће функције у односу на спектралне моменте $M_k(G)$. Резултати у раду [4] који се односе на екстремалне уницикличне графове у односу на $SLEE(G)$ важе и за $RQ(G)$, јер су добијени разматрањем спектралних момената $M_k(Q)$.

Нека су $C_qS(n_1, n_2, \ldots, n_q), G^{(1)}, G^{(2)}$ графови приказани на слици 4.6.



Слика 4.6: Уницикличні графови

Теорема 4.2.5. [47] *Нека је G унициклични граф са n чворова. Ако је $G \ncong G^{(1)}$, тада је*

$$SLEE(G) \leqslant SLEE(G^{(2)}) < SLEE(G^{(1)}),$$

при чему једнакост на левој страни важи ако и само ако је $G \cong G^{(2)}$.

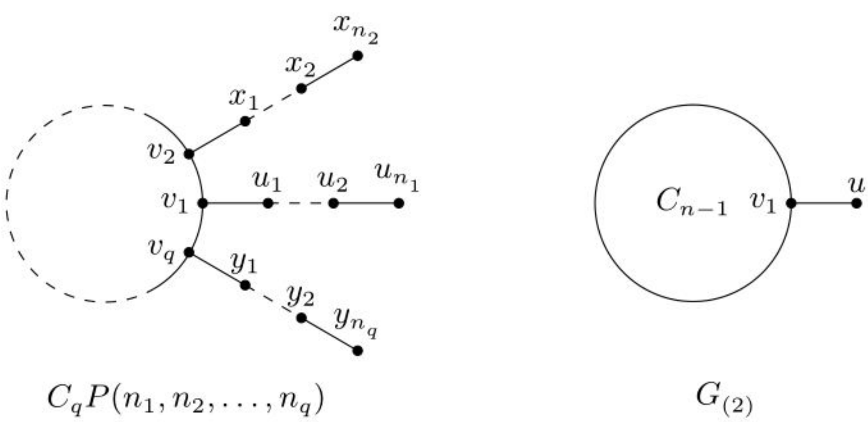
На основу теореме 4.2.5 добијамо следећи резултат.

Теорема 4.2.6. *Нека је G унициклични граф са n чворова. Ако је $G \ncong G^{(1)}$, тада*

$$RQ(G) \leqslant RQ(G^{(2)}) < RQ(G^{(1)}), \tag{4.3}$$

при чему једнакост на левој страни (4.3) важи ако и само ако је $G \cong G^{(2)}$.

Нека је $q \geqslant 3$, и $n_i \geqslant 0$, при чему је $i = 1, 2, \ldots, q$. Означимо са $C_qP(n_1, n_2, \ldots, n_q)$ граф добијен од контуре $C_q = v_1v_2 \cdots v_qv_1$ додавањем висећег пута са $n_i + 1$ чворова на чвор v_i, за свако $i = 1, 2, \ldots, q$. Граф $C_{n-1}P(1, 0, \ldots, 0)$ означаваћемо са $G_{(2)}$ (слика 4.7).



Слика 4.7: Уницикличні графови

Теорема 4.2.7. [47] *Нека је G уницикличан граф са n чворова и јединствевном контуром C_q. Ако је $q < n$, тада је*

$$SLEE(C_q) < SLEE(G_{(2)}) \leqslant SLEE(G),$$

при чему једнакост на десној страни важи ако и само ако је $G \cong G_{(2)}$ (тј. $q = n-1$).

На основу теореме 4.2.7 добијамо следећи резултат.

Теорема 4.2.8. *Нека је G уницикличан граф са n чворова и јединственом контуром C_q. Ако је $q < n$, тада*

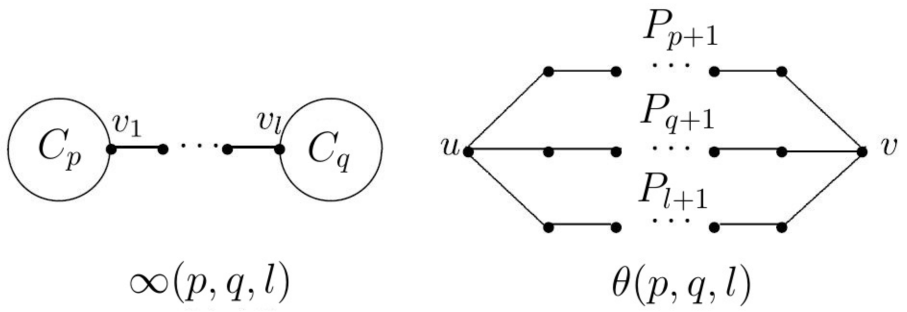
$$RQ(C_q) < RQ(G_{(2)}) \leqslant RQ(G), \tag{4.4}$$

при чему једнакост на десној страни (4.4) важи ако и само ако је $G \cong G_{(2)}$.

4.3 Бициклични графови

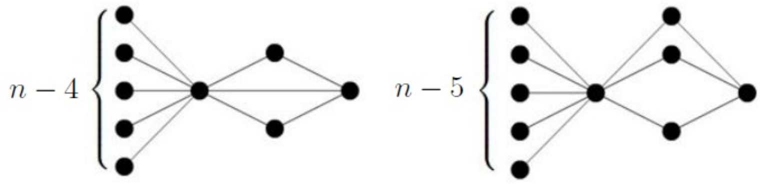
У овом одељку наводимо неке резултате везане за бицикличне графове са максималном резолвентном енергијом користећи резултате из рада [3].

На почетку, изложићемо неке основне појмове о бицикличним графовима. Бициклични граф $G = (V, E)$ је повезани прост граф који задовољава релацију $|E| = |V| + 1$. Постоје два основна типа бицикличних графова: ∞-граф и θ-граф. ∞-граф, у ознаци $\infty(p, q, l)$, добијен је од две дисјунктне контуре C_p и C_q, повезивањем једног чвора контуре C_p и једног чвора контуре C_q путем P_l дужине $l-1$ (у случају $l = 1$ дати граф се добија идентификацијом поменутих чворова). Други тип графа, θ-граф, у ознаци, $\theta(p, q, l)$, представља унију три дисјунктна пута $P_{p+1}, P_{q+1}, P_{l+1}$ дужина p, q, l, респективно, са заједничким почетним и завршним чворовима, при чему је $p \geqslant q \geqslant l \geqslant 1$ и притом највише један од бројева p, q, l може бити једнак 1. Приметимо да је било који бицикличан граф G добијен од ∞-графа или θ-графа, G_0, додавањем стабала на неке чворове графа G_0. Граф G_0 зовемо језгром графа G. На слици 4.8 приказани су графови $\infty(p, q, l)$ и $\theta(p, q, l)$.



Слика 4.8: Графови $\infty(p, q, l)$ и $\theta(p, q, l)$

Нека су Y_n и $\tilde{Y}_n$ графови приказани на слици 4.9.



Слика 4.9: Графови Y_n и $\tilde{Y}_n$

Лема 4.3.1. [3] *Нека је G бициклични граф са $n \geqslant 5$ чворова, $G \ncong Y_n, \tilde{Y}_n$. Тада важи једно од следећа два тврђења:*

1. $M_k(G) \leqslant M_k(Y_n)$ *за свако* $k \geqslant 0$ *и* $M_{k_0}(G) < M_{k_0}(Y_n)$ *за неко* $k_0 \geqslant 0$.

2. $M_k(G) \leqslant M_k(\tilde{Y}_n)$ *за свако* $k \geqslant 0$ *и* $M_{k_0}(G) < M_{k_0}(\tilde{Y}_n)$ *за неко* $k_0 \geqslant 0$.

Теорема 4.3.1. [3] *Нека је G бициклични граф са $n \geqslant 5$ чворова. Тада је $ER(G) \leqslant ER(Y_n)$, при чему једнакост важи ако и само ако је $G \cong Y_n$.*

Доказ. На основу леме 4.3.1, граф са максималном резолвентном енергијом међу свим бицикличним графовима са n чворова је Y_n или $\tilde{Y}_n$. Према томе, довољно је показати да је $ER(Y_n) > ER(\tilde{Y}_n)$, за $n \geqslant 5$. Ако са $\phi(Y_n, \lambda)$ и $\phi(\tilde{Y}_n, \lambda)$ означимо карактеристичне полиноме графова Y_n и $\tilde{Y}_n$ респективно, тада је

$$ER(Y_n) = \frac{\phi'(Y_n,\lambda)}{\phi(Y_n,\lambda)} \quad \text{и} \quad ER(\tilde{Y}_n) = \frac{\phi'(\tilde{Y}_n,\lambda)}{\phi(\tilde{Y}_n,\lambda)}.$$

На основу леме 1.2.4 следи да је

$$\begin{aligned}
\phi(Y_n,\lambda) &= \lambda^{n-4}[\lambda^4 - (n+1)\lambda^2 - 4\lambda + 2(n-4)],\\
\phi(\tilde{Y}_n,\lambda) &= \lambda^{n-4}[\lambda^4 - (n+1)\lambda^2 + 3(n-5)].
\end{aligned}$$

Према томе, важи да је

$$\begin{aligned}
ER(Y_n) - ER(\tilde{Y}_n) &= \frac{\phi'(Y_n,\lambda)}{\phi(Y_n,\lambda)} - \frac{\phi'(\tilde{Y}_n,\lambda)}{\phi(\tilde{Y}_n,\lambda)}\\
&= \frac{\phi'(Y_n,\lambda)\phi(\tilde{Y}_n,\lambda) - \phi'(\tilde{Y}_n,\lambda)\phi(Y_n,\lambda)}{\phi(Y_n,\lambda)\phi(\tilde{Y}_n,\lambda)}\\
&= \frac{16n^4 - 34n^3 + 8n^2 + 2n + 60}{(n^4 - n^3 - n^2 - 2n - 8)(n^4 - n^3 - n^2 + 3n - 15)}.
\end{aligned}$$

Полином $p(x) = 16x^4 - 34x^3 + 8x^2 + 2x + 60$ нема реалних нула, па је бројилац $p(n)$ позитиван за свако n. Реалне нуле полинома $x^4 - x^3 - x^2 - 2x - 8$ и $x^4 - x^3 - x^2 + 3x - 15$ су мање од 3, па је именилац позитиван за свако $n \geqslant 3$. Одавде следи да је $ER(Y_n) - ER(\tilde{Y}_n) > 0$. $\square$

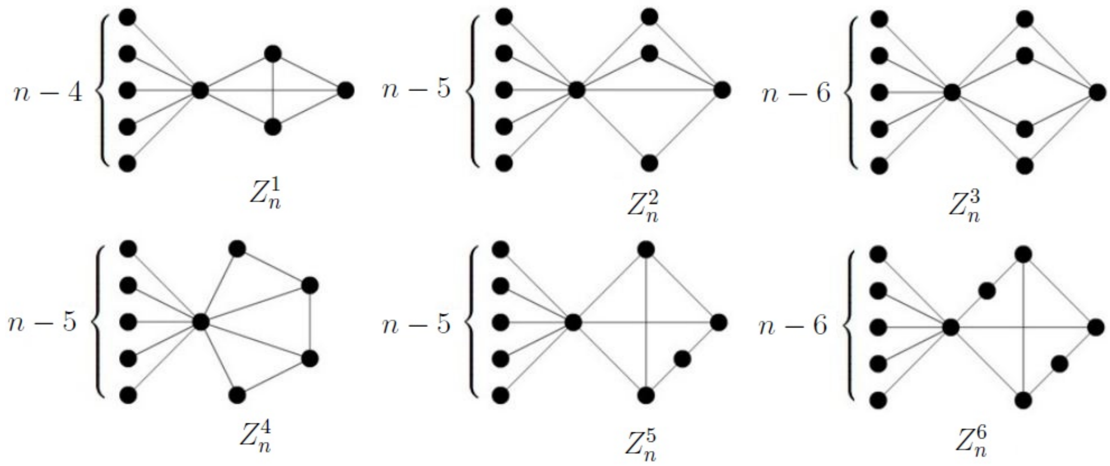
Размотримо бицикличне графове са максималном вредношћу ненегативне Лапласове резолвентне енергије. У раду [128] доказано је да бициклични граф Y_n приказан на слици 4.9 има максималну вредност ненегативног Лапласовог Естрадиног индекса. На основу (2.10) важи следећа теорема.

Теорема 4.3.2. *Међу свим бицикличним графовима реда n, највећу вредност ненегативне Лапласове резолвентне енергије има граф Y_n приказан на слици 4.9.*

4.4 Трициклични графови

У овом одељку наводимо неке резултате везане за трицикличне графове са максималном резолвентном енергијом према резултатима рада [3].

Нека су Z_n^i, $1 \leqslant i \leqslant 6$, графови приказани на слици 4.10.



Слика 4.10: Трициклични графови са максималном резолвентном енергијом

Лема 4.4.1. [3] *Нека је G трициклични граф са $n \geqslant 4$ чворова, такав да је $G \ncong Z_n^i$, за $1 \leqslant i \leqslant 6$. Тада за $i \in \{1,2,3,4,5,6\}$ важи да је $M_k(G) \leqslant M_k(Z_n^i)$ за свако $k \geqslant 0$, и $M_k(G) < M_k(Z_n^i)$ за неко $k_0 \geqslant 0$.*

Теорема 4.4.1. [3] *Нека је G трициклични граф са $n \geqslant 4$ чворова. Тада је $ER(G) \leqslant ER(Z_n^1)$, при чему једнакост важи ако и само ако је $G \cong Z_n^1$.*

Доказ. На основу леме 4.4.1, граф са максималном резолвентном енергијом међу свим трицикличним графовима са n чворова је Z_n^i, за неко $1 \leqslant i \leqslant 6$.

На основу леме 1.2.4 важи да је

$$\begin{aligned}
\phi(Z_n^1,\lambda) &= \lambda^{n-5}(\lambda^5-(n+2)\lambda^3-8\lambda^2+3(n-5)\lambda+2(n-4)) = \lambda^{n-5}f_1(\lambda)\,,\\
\phi(Z_n^2,\lambda) &= \lambda^{n-4}(\lambda^4-(n+2)\lambda^2-6\lambda+3(n-5)) = \lambda^{n-4}f_2(\lambda)\,,\\
\phi(Z_n^3,\lambda) &= \lambda^{n-4}(\lambda^4-(n+2)\lambda^2+4(n-6)) = \lambda^{n-4}f_3(\lambda)\,,\\
\phi(Z_n^4,\lambda) &= \lambda^{n-6}(\lambda^6-(n+2)\lambda^4-6\lambda^3+3(n-4)\lambda^2+2\lambda-(n-5)) = \lambda^{n-6}f_4(\lambda)\,,\\
\phi(Z_n^5,\lambda) &= \lambda^{n-5}(\lambda^5-(n+2)\lambda^3-4\lambda^2+4(n-4)\lambda+4) = \lambda^{n-5}f_5(\lambda)\,,\\
\phi(Z_n^6,\lambda) &= \lambda^{n-6}(\lambda^6-(n+2)\lambda^4+5(n-5)\lambda^2-2(n-8)) = \lambda^{n-6}f_6(\lambda)\,.
\end{aligned}$$

За $2 \leqslant i \leqslant 6$, следи да је

$$\begin{aligned} ER(Z_n^1) - ER(Z_n^i) &= \frac{\phi'(Z_n^1,\lambda)}{\phi(Z_n^1,\lambda)} - \frac{\phi'(Z_n^i,\lambda)}{\phi(Z_n^i,\lambda)} \\ &= \frac{\phi'(Z_n^1,\lambda)\phi(Z_n^i,\lambda) - \phi'(Z_n^i,\lambda)\phi(Z_n^1,\lambda)}{\phi(Z_n^1,\lambda)\phi(Z_n^i,\lambda)}\,. \end{aligned}$$

Израчунавањем резолвентних енергија добија се

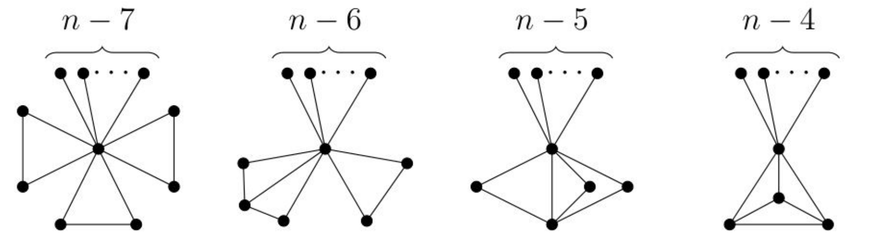
$$\begin{aligned} ER(Z_n^1) - ER(Z_n^2) &= \frac{6n^6 - 12n^5 + 42n^4 - 18n^3 - 42n - 120}{nf_1(n)f_2(n)}, \\ ER(Z_n^1) - ER(Z_n^3) &= \frac{28n^6 - 56n^5 + 44n^4 - 8n^3 + 136n^2 + 80n - 192}{nf_1(n)f_3(n)}, \\ ER(Z_n^1) - ER(Z_n^4) &= \frac{6n^8 + 40n^6 - 2n^5 - 48n^4 - 96n^3 - 188n^2 - 132n - 40}{nf_1(n)f_4(n)}, \\ ER(Z_n^1) - ER(Z_n^5) &= \frac{16n^7 - 20n^6 + 56n^5 - 40n^4 + 4n^3 - 52n^2 - 188n}{nf_1(n)f_5(n)}, \end{aligned}$$

$$ER(Z_n^1) - ER(Z_n^6) = \frac{32n^8 - 62n^7 + 30n^6 + 92n^5 + 94n^4 - 2n^3 - 432n^2 - 432n - 128}{nf_1(n)f_6(n)}.$$

Све реалне нуле полинома који се појављују у бројиоцима ових разломака су мање од 2. Осим тога, све реалне нуле полинома f_i, $1 \leqslant i \leqslant 6$, су мање од 3. На основу тога следи да су бројиоци и imeниоци у датим разломцима позитивни за $n \geqslant 3$. Према томе, важи да је $ER(Z_n^1) - ER(Z_n^i) > 0$ за $2 \leqslant i \leqslant 6$. □

На крају, наводимо резултат који се односи на трицикличне графове са максималном вредношћу ненегативне Лапласове резолвентне енергије.

Нека су H_j^n графови приказани на слици 4.11.



H_3^n	H_4^n	H_6^n	H_7^n
$(j = 3,\ n \geq 7)$	$(j = 4,\ n \geq 6)$	$(j = 6,\ n \geq 5)$	$(j = 7,\ n \geq 4)$

Слика 4.11: Трициклични графови

У раду [113] одређени су трициклични графови са максималном вредношћу ненегативног Лапласовог Естрадиног индекса. Примењујући (2.10) долазимо до следећег тврђења.

Теорема 4.4.2. *Ако је G трицикличан граф са n чворова ($n \geqslant 5$), тада*

$$RQ(G) \leqslant RQ(H_6^n) = RQ(H_7^n),$$

при чему једнакост важи ако и само ако $G \cong H_6^n$ или $G \cong H_7^n$.

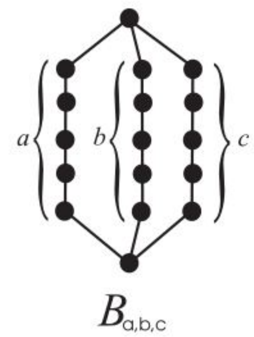
4.5 Отворени проблеми

Претпоставка 4.5.1. [68] *Нека је дат бицикличан граф* $B_{a,b,c}$ *приказан на слици 4.12. Међу свим повезаним бицикличним графовима реда* n*, графови са најмањом вредношћу резолвентне енергије су*

$$\begin{array}{lll} B_{p-1,p-1,p} & \text{ако је} & n=3p, p\geqslant 2, \\ B_{p-1,p,p} & \text{ако је} & n=3p+1, p\geqslant 1, \\ B_{p,p,p} & \text{ако је} & n=3p+2, p\geqslant 1\,. \end{array} \tag{4.5}$$

Бициклични графови са другом најмањом вредношћу резолвентне енергије су

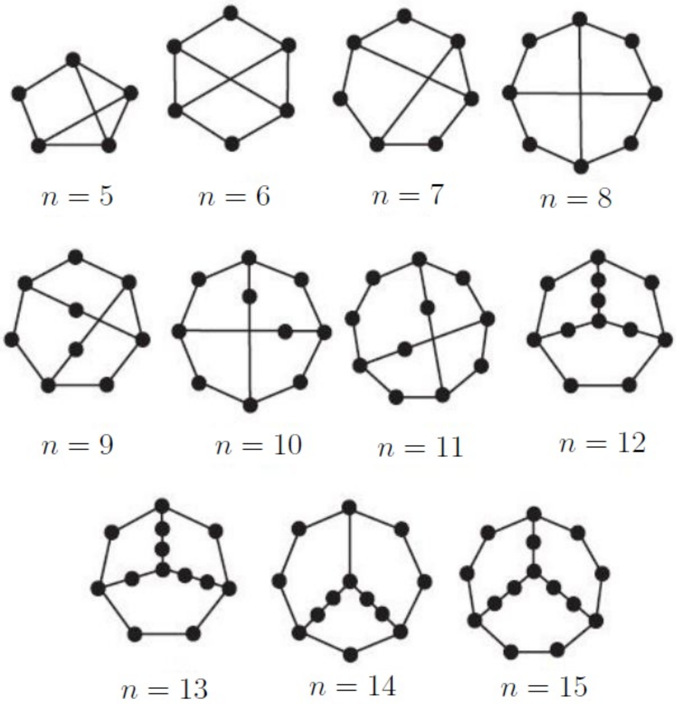
$$\begin{array}{lll} B_{p-2,p,p} & \text{ако је} & n=3p, p\geqslant 2, \\ B_{p-1,p-1,p+1} & \text{ако је} & n=3p+1, p\geqslant 2, \\ B_{p-1,p,p+1} & \text{ако је} & n=3p+2, p\geqslant 1\,. \end{array}$$



Слика 4.12: Бициклични графови са минималним вредностима за $ER(G)$

Претпоставка 4.5.2. [68] *Трициклични графови реда* n*,* $5\leqslant n\leqslant 15$*, са најмањом вредношћу резолвентне енергије приказани су на слици 4.13.*

Проблем 1. У класи свих бицикличних и трицикличних графова одредити графове који имају минималну вредност ненегативне Лапласове резолвентне енергије.
Проблем 2. Одредити екстремалне графове у односу на Лапласову резолвентну енергију у класи свих небипартитних уницикличних, бицикличних и трицикличних графова.



Слика 4.13: Трициклични графови са минималном резолвентном енергијом

Глава 5

Зависност међу енергијама

5.1 Познати резултати

За почетак, размотримо везу између енергије $\mathcal{E}(G)$ и Рандићеве енергије $RE(G)$ графа G.

Теорема 5.1.1. [16] *Нека је G граф са n чворова који нема изолованих чворова. Тада је*

$$\delta RE(G) \leqslant \mathcal{E}(G) \leqslant \Delta RE(G). \tag{5.1}$$

Доказ. У доказу ћемо користити следећи резултат.

Теорема 5.1.2. [86] *Нека су A и S квадратне матрице реда n, при чему је матрица A хермитска, а матрица S несингуларна. Означимо са S^* коњуговано-транспоновану матрицу матрице S. Нека су сопствене вредности матрица A и SS^* сортиране у нерастућем поретку, тј. $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$. За свако $k = 1, 2, \ldots, n$, постоји позитиван реалан број θ_k такав да је $\lambda_n(SS^*) \leqslant \theta_k \leqslant \lambda_1(SS^*)$ и $\lambda_k(SAS^*) = \theta_k \lambda_k(A)$.*

С обзиром на то да је $D^{-\frac{1}{2}}$ несингуларна матрица за свако $k = 1, 2, \ldots, n$, где је D дијагонална матрица чији су дијагонални елементи једнаки степенима чворова графа без изолованих чворова, на основу теореме 5.1.2 следи да постоји позитиван реалан број θ_k такав да је

$$\frac{1}{\Delta} = \lambda_n(D^{-1}) \leqslant \theta_k \leqslant \lambda_1(D^{-1}) = \frac{1}{\delta},$$

и

$$\rho_k = \lambda_k(D^{-1/2} A D^{-1/2}) = \theta_k \lambda_k(A).$$

Сада је $RE(G) = \sum\limits_{k=1}^{n} \theta_k |\lambda_k(A)|$, одакле следи доказ. □

Коментар 5.1.1. [37] *Једнакост у обе неједнакости* (5.1) *важи ако и само ако је G регуларан граф.*

Теорема 5.1.3. [35] *Нека је G граф реда n без изолованих чворова са индексом λ_1. Тада је*

$$\delta RE(G) + \lambda_1 - \delta \leqslant \mathcal{E}(G) \leqslant \Delta RE(G) + \lambda_1 - \Delta. \tag{5.2}$$

Доказ. Како је $D^{\frac{1}{2}}RD^{\frac{1}{2}} = A$, на основу теореме 5.1.2 следи да је

$$\lambda_n(D) \leqslant \theta_k \leqslant \lambda_1(D), \text{ тј. } \delta \leqslant \theta_k \leqslant \Delta,$$

и

$$\lambda_k(A) = \theta_k \lambda_k(R), \text{ тј. } \lambda_k = \theta_k \rho_k, \text{ за } k = 1, 2, \ldots, n.$$

Сада је

$$\delta|\rho_k| \leqslant \theta_k|\rho_k| \leqslant \Delta|\rho_k|,$$

тј.

$$\delta|\rho_k| \leqslant |\lambda_k| \leqslant \Delta|\rho_k|. \tag{5.3}$$

Сумирајући елементе у (5.3) за свако k, $k = 1, 2, \ldots, n$, на основу дефиниције енергије и Рандићеве енергије следи (5.1). Сумирајући елементе у (5.3) за свако k, $k = 1, 2, \ldots, n$, и узимајући у обзир да је $\rho_1 = 1$ добијамо

$$\delta(RE(G) - 1) \leqslant \mathcal{E}(G) - \lambda_1 \leqslant \Delta(RE(G) - 1).$$

□

Коментар 5.1.2. [37] *Границе* (5.2) *су боље од граница* (5.1), *јер је* $\delta \leqslant \lambda_1 \leqslant \Delta$.

Размотримо везу између енергије и Лапласове енергије графа.

Претпоставка 5.1.1. [62] *За произвољан граф* G *важи да је*

$$\mathcal{E}(G) \leqslant LE(G). \tag{5.4}$$

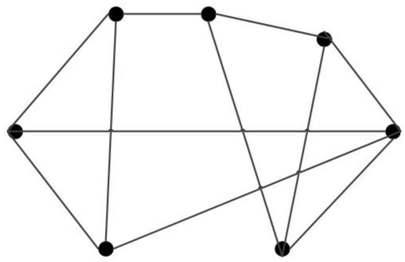
Размотримо неке закључке у вези претпоставке 5.1.1 који су наведени у [71]. Нека је KK_n граф добијен од две копије комплетног графа K_n тако што је чвор из једне копије K_n повезан граном са два чвора из друге копије од K_n. Stevanović је са сарадницима у раду [124] показао да важи обрнута неједнакост од неједнакости (5.4) за бесконачну фамилију графова G који су изоморфни са KK_n за свако $n \geqslant 8$. Директним рачуном може се показати да неједнакост (5.4) важи за све графове реда $n \leqslant 6$, док за $n = 7$ постоји само један граф (граф H_1 на слици 5.1) за који важи обрнута неједнакост од (5.4). Користећи овај граф, Liu и Liu [103] конструисали су бесконачну фамилију неповезаних графова за које важи обрнута неједнакост од (5.4). Дакле, на основу резултата из радова [124] и [103] следи да претпоставка 5.1.1 није тачна у општем случају и зато је од интереса дати карактеризацију графова за које је дата претпоставка тачна.

Коришћење резултата које је доказао Ky Fan у раду [53] показало се као успешно у налажењу везе између $\mathcal{E}(G)$ и $LE(G)$. Означимо са $s_i(X)$ сингуларне вредности и са $x_i(X)$ сопствене вредности матрице X. Тада је $s_i(X) = |x_i(X)|$.

Теорема 5.1.4. [53] *Нека су* X, Y *и* Z *квадратне матрице реда* n, *такве да је* $X + Y = Z$. *Тада је*

$$\sum_{i=1}^{n} s_i(X) + \sum_{i=1}^{n} s_i(Y) \geqslant \sum_{i=1}^{n} s_i(Z).$$

Једнакост важи ако и само ако постоји ортогонална матрица P, *таква да су матрице* PX *и* PY *позитивне семи-дефинитне.*



Слика 5.1: Граф H_1

Теорема 5.1.5. [122] *Нека је G граф са n чворова, m грана и степенима чворова $d_1, d_2, \dots, d_n$. Тада је*

$$LE(G) \leqslant \mathcal{E}(G) + \sum_{i=1}^{n} \left| d_i - \frac{2m}{n} \right|. \tag{5.5}$$

Доказ. За Лапласову матрицу важи да је $L = D - A$, што се може записати и као

$$\left(L - \frac{2m}{n} I_n \right) = (-A) + \left(D - \frac{2m}{n} I_n \right).$$

Примењујући на последњу једнакост теорему 5.1.4 следи тражено тврђење, јер је $D - \frac{2m}{n} I_n$ дијагонална матрица чије су сопствене вредности $d_i - \overline{d}$, $i = 1, 2, \dots, n$. □

Теорема 5.1.6. [122] *Ако је G бипартитан граф, тада је $LE(G) \geqslant \mathcal{E}(G)$.*

Доказ. Како је $Q = D + A$ и $L = D - A$, важи да је $Q - L = 2A$, што се може записати као

$$\left(Q - \frac{2m}{n} I_n \right) - \left(L - \frac{2m}{n} I_n \right) = 2A. \tag{5.6}$$

Као што смо у уводном делу видели, матрице Q и L у случају бипартитног графа имају исти спектар, одакле следи да је

$$\sum_{i=1}^{n} s_i \left(Q - \frac{2m}{n} I_n \right) = \sum_{i=1}^{n} s_i \left(L - \frac{2m}{n} I_n \right) = \sum_{i=1}^{n} s_i \left(- \left[L - \frac{2m}{n} I_n \right] \right) = LE(G).$$

Примењујући теорему 5.1.4 на (5.6) следи доказ. □

Теорема 5.1.7. [122] *Нека је G бипартитан граф са n чворова, m грана, степенима чворова $d_1, d_2, \dots, d_n$ и просечним степеном $\overline{d} = \dfrac{2m}{n}$. Тада је*

$$\max \left\{ \mathcal{E}(G), \sum_{i=1}^{n} |d_i - \overline{d}| \right\} \leqslant LE(G) \leqslant \mathcal{E}(G) + \sum_{i=1}^{n} |d_i - \overline{d}|.$$

У следећој теореми дато је једно побољшање за (5.5).

Теорема 5.1.8. [32] *Нека је G граф са n чворова, m грана и степенима чворова $d_1, d_2, \ldots, d_n$. Тада је*

$$LE(G) \leqslant \mathcal{E}(G) + 2\sum_{i=1}^{\sigma}\left(d_i - \frac{2m}{n}\right), \tag{5.7}$$

при чему је σ најмањи позитиван цео број који задовољава неједнакост $\mu_\sigma \geqslant \dfrac{2m}{n}$, и μ је Лапласова сопствена вредност графа G.

Аналогно Лапласовој енергији може се дефинисати енергија ненегативне Лапласове матрице Q. Енергија ненегативне Лапласове матрице графа G, у ознаци, $LE^+(G)$, дефинисана је са

$$LE^+(G) = \sum_{i=1}^{n}\left|q_i - \frac{2m}{n}\right|,$$

где су $q_i, i = 1, \ldots, n$, сопствене вредности матрице Q.

Веза између $\mathcal{E}(G), LE(G), LE^+(G)$ дата је у следеће две теореме.

Теорема 5.1.9. [62] *Нека је G повезан граф са n чворова и m грана. Тада је*

$$LE^+(G) + LE(G) \geqslant \max\left\{2\mathcal{E}(G), 2\sum_{i=1}^{n}\left|d_i - \frac{2m}{n}\right|\right\}. \tag{5.8}$$

Теорема 5.1.10. [33] *Нека је G граф са n чворова и m грана, чија матрица суседства има ранг r. Тада је*

$$LE^+(G) + LE(G) \geqslant 4\mathcal{E}(G) - \frac{4mr}{n}. \tag{5.9}$$

Једнакост важи ако и само ако је $G \cong nK_1$ или $G \cong K_2 \cup (n-2)K_1$ или $G \cong K_{n/2,n/2}$.

Означимо са H граф добијен тако што се изолован чвор повеже гранама са центрима звезда S_3 и S_4, респективно. За $n \geqslant 3$ нека S_n^+ означава унициклични граф реда n који је добијен тако што су два несуседна чвора звезде S_n спојена граном.

Коментар 5.1.3. [71] *У раду* [33], *аутори су истакли да резултати* (5.8) *и* (5.9) *нису упоредиви. Некада је бољи резултат* (5.9) *него* (5.8), *али не увек. Резултат* (5.9) *је бољи од резултата* (5.8) *за графове H и $K_{3,5}$, док је резултат* (5.8) *бољи од резултата* (5.9) *за графове S_8 и S_8^+.*

Подсетимо се да је граф грана, тј. линијски граф, у ознаци L_G, графа $G = (V, E)$ граф чији је скуп чворова скуп E и код кога су два чвора суседна ако и само ако одговарајуће гране у графу G имају заједнички чвор.

У следећим теоремама дајемо везу између енергије графова G и L_G.

Теорема 5.1.11. [34] *Нека је G граф са n чворова и $m \geqslant 1$ грана. Тада* *(а)* *За* $m < n$ *важи да је*

$$\mathcal{E}(L_G) \leqslant LE^+(G) + \frac{4m}{n} - 4,$$

при чему једнакост важи ако и само ако је $G \cong K_2 \cup (n-2)K_1$ $(n \geqslant 2)$ *или* $G \cong K_3 \cup (n-3)K_1$ $(4 \leqslant n \leqslant 6)$ *или* $G \cong K_{1,i-1} \cup (n-i)K_1$ $\left(\lceil \frac{n}{2} \rceil + 1 \leqslant i \leqslant n\right)$.

(б) *За* $m > n$, *важи да је*

$$\mathcal{E}(L_G) \geqslant LE^+(G) + \frac{4m}{n} - 4,$$

при чему једнакост важи ако и само ако је $G \cong K_4$ *или* $G \cong K_4 - e$ *или* $G \cong K_4 \cup K_1$ *или* $G \cong K_4 \cup K_2$.

(в) $LE^+(G) = \mathcal{E}(G)$ *ако и само ако је* $m = n$.

Последица 5.1.1. [34] *Нека је* G *граф са* n *чворова и* $m \geqslant 1$ *грана. Тада је*

$$\mathcal{E}(L_G) = LE^+(G) + \frac{4m}{n} - 4$$

ако и само ако је $m = n$ *или* $G \cong K_2 \cup (n-2)K_1$ $(n \geqslant 2)$ *или* $G \cong K_3 \cup (n-3)K_1$ $(4 \leqslant n \leqslant 6)$ *или* $G \cong K_{1,i-1} \cup (n-i)K_1$ $\left(\lceil \frac{n}{2} \rceil + 1 \leqslant i \leqslant n\right)$ *или* $G \cong K_4$ *или* $G \cong K_4 - e$ *или* $G \cong K_4 \cup K_1$ *или* $G \cong K_4 \cup K_2$.

Последица 5.1.2. [73] *Нека је* G *граф са* n *чворова и* $m \geqslant 1$ *грана.*

(а) *Ако је* $m < n$, *тада је* $\mathcal{E}(L_G) < LE^+(G)$.

(б) *Ако је* $m > n$, *тада је* $\mathcal{E}(L_G) > LE^+(G)$.

(в) *Ако је* $m = n$, *тада је* $\mathcal{E}(L_G) = LE^+(G)$.

Последица 5.1.3. [34] *Нека је* T *стабло реда* n *са* p *висећих чворова. Тада је*

$$\mathcal{E}(L_T) \leqslant LE^+(T) - 2\left(1 - \frac{p}{n}\right).$$

У раду [34], аутори су добили доњу и горњу границу за $\mathcal{E}(L_G)$.

Теорема 5.1.12. [34] *Нека је* G *граф са* n *чворова и* $m \geqslant 1$ *грана. Тада је*

$$\mathcal{E}(G) - 2p - 4s \leqslant \mathcal{E}(L_G) \leqslant \mathcal{E}(G) + 4m - 4n + 2p + 4s,$$

где су p *и* s *број висећих и изолованих чворова у графу* G, *респективно.*

Последица 5.1.4. [34] *Нека је* G *граф са* n *чворова,* m *грана и минималним степеном чворова* $\delta \geqslant 1$. *Тада је*

$$\mathcal{E}(G) - 2p \leqslant \mathcal{E}(L_G) \leqslant \mathcal{E}(G) + 4m - 4n + 2p,$$

где је p *број висећих чворова у графу* G.

Последица 5.1.5. [34] *Нека је G граф са n чворова и минималним степеном чворова $\delta \geqslant 2$. Тада је*

$$\mathcal{E}(G) \leqslant \mathcal{E}(L_G) \leqslant \mathcal{E}(G) + 4m - 4n.$$

Коришћењем теореме 5.1.11 (a) и теореме 5.1.12, успостављена је релација између енергије ненегативне Лапласове матрице и (обичне) енергије графа.

Теорема 5.1.13. [34] *Нека је G граф са n чворова и m грана $(m < n)$ са p висећих и s изолованих чворова. Тада је*

$$LE^{+}(G) > \mathcal{E}(G) - \frac{4m}{n} - 2p - 4s + 4.$$

У следећој теореми дата је веза између $\mathcal{E}(L_G)$ и првог Загребачког индекса $Zg_1(G) = M_1(G) = \sum_{i=1}^{n} d_i^2$.

Теорема 5.1.14. [34] *Нека је G повезан граф са n чворова, $m \geqslant 1$ грана и првим Загребачким индексом Zg_1. Тада је*

$$\mathcal{E}(L_G) \leqslant 2m-2n-2+\frac{Zg_1(G)}{m}+\sqrt{(n-1)\left(\left(1+\frac{4}{m}\right)Zg_1(G) - \frac{Zg_1(G)^2}{m^2} - 6m + 4n - 4\right)}.$$

Једнакост важи ако и само ако је $G \cong K_n$ или $G \cong K_{4,4}$.

5.2 Нови резултати

Овде ће бити изложени неки нови резултати којима се успоставља веза између енергије и резолвентне енергије графа. Већина тих резултата је садржана у раду [133].

Теорема 5.2.1. *Нека је G хипоенергетски граф. Тада је*

$$ER(G) \leqslant \frac{n-1}{n} + \frac{1}{n - \mathcal{E}(G)}.$$

Једнакост важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$.

Доказ. Нека су $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ сопствене вредности хипоенергетског графа G. За такав граф, као што је истакнуто у одељку 1.3, важи да је $\mathcal{E}(G) < n$. Из $\lambda_i \leqslant |\lambda_i|$ следи да је $\lambda_i^k \leqslant |\lambda_i|^k$ за свако $i = 1, \ldots, n$ и свако $k \in \mathbb{N}$. Користећи лему 1.4.1, закључујемо да је $\sum\limits_{i=1}^{n} |\lambda_i|^k \leqslant \left(\sum\limits_{i=1}^{n} |\lambda_i| \right)^k$, за свако $k \in \mathbb{N}$.

$$\begin{aligned}
ER(G) &= \frac{1}{n} \sum_{k \geqslant 0} \frac{\sum\limits_{i=1}^{n} \lambda_i^k}{n^k} = 1 + \frac{1}{n} \sum_{k \geqslant 1} \frac{\sum\limits_{i=1}^{n} \lambda_i^k}{n^k} \\
&\leqslant 1 + \frac{1}{n} \sum_{k \geqslant 1} \frac{\sum\limits_{i=1}^{n} |\lambda_i|^k}{n^k} \leqslant 1 + \frac{1}{n} \sum_{k \geqslant 1} \left(\frac{\mathcal{E}(G)}{n} \right)^k \\
&= 1 + \frac{1}{n} \left(\sum_{k \geqslant 0} \left(\frac{\mathcal{E}(G)}{n} \right)^k - 1 \right) = 1 + \frac{1}{n} \left(\frac{1}{1 - \frac{\mathcal{E}(G)}{n}} - 1 \right) \\
&= \frac{n-1}{n} + \frac{1}{n - \mathcal{E}(G)}.
\end{aligned}$$

Ако је $G \cong \overline{K}_n$, тада је $\mathcal{E}(G) = 0$ и $ER(G) = 1$, па једнакост важи.

Ако важи једнакост $ER(G) = \dfrac{n-1}{n} + \dfrac{1}{n - \mathcal{E}(G)}$, тада је $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_n = 0$, одакле следи да је $G \cong \overline{K}_n$. □

Теорема 5.2.2. *Нека је G хиперенергетски граф. Тада је*

$$ER(G) < \mathcal{E}(G).$$

Доказ. За $n = 1$, једини граф је K_1, а он је хипоенергетски. За $n > 1$, на основу последице 2.2.3 и чињенице да за хиперенергетски граф важи да је $\mathcal{E}(G) \geqslant n$, следи да је

$$ER(G) \leqslant \frac{2n}{n+1} < n \leqslant \mathcal{E}(G).$$

□

Теорема 5.2.3. [133] *Нека је G прост граф са n чворова и m грана. Тада је*

$$\mathcal{E}^2(G)\left(\frac{1}{ER(G)}+\frac{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)}{n^2}\right)\leqslant 2m(2n-\lambda_1-\lambda_n). \tag{5.10}$$

Једнакост важи ако и само ако је $G\cong\overline{K}_n$.

Доказ. За $p_i=\dfrac{\lambda_i^2}{2m}$, $a_i=n-\lambda_i$, $i=1,2,\ldots,n$, $r=n-\lambda_1$ и $R=n-\lambda_n$, неједнакост (1.30) се трансформише у неједнакост

$$\sum_{i=1}^{n}\lambda_i^2(n-\lambda_i)+(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)\sum_{i=1}^{n}\frac{\lambda_i^2}{n-\lambda_i}\leqslant 2m(2n-\lambda_1-\lambda_n). \tag{5.11}$$

Из неједнакости (1.32), за $r=1$, $x_i=|\lambda_i|$, $a_i=\dfrac{1}{n-\lambda_i}$, $i=1,2,\ldots,n$, добијамо неједнакост

$$\sum_{i=1}^{n}\lambda_i^2(n-\lambda_i)\geqslant\frac{\left(\sum\limits_{i=1}^{n}|\lambda_i|\right)^2}{\sum\limits_{i=1}^{n}\dfrac{1}{n-\lambda_i}},$$

тј.

$$\sum_{i=1}^{n}\lambda_i^2(n-\lambda_i)\geqslant\frac{\mathcal{E}^2(G)}{ER(G)}. \tag{5.12}$$

За $r=1$, $x_i=|\lambda_i|$, $a_i=n-\lambda_i$, $i=1,2,\ldots,n$, из неједнакости (1.32) следи да је

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{\lambda_i^2}{n-\lambda_i}\geqslant\frac{\left(\sum\limits_{i=1}^{n}|\lambda_i|\right)^2}{\sum\limits_{i=1}^{n}(n-\lambda_i)},$$

тј.

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{\lambda_i^2}{n-\lambda_i}\geqslant\frac{\mathcal{E}^2(G)}{n^2}. \tag{5.13}$$

Сада неједнакост (5.10) следи из неједнакости (5.11), (5.12) и (5.13).

Једнакост важи ако и само ако једнакост важи у (5.11), (5.12) и (5.13). Имајући у виду леме 1.4.9 и 1.4.11, лако се може закључити да су наведени услови задовољени ако и само ако граф G има тачно једну сопствену вредност, односно када је $G\cong\overline{K}_n$. $\square$

Последица 5.2.1. [133] *Нека је G прост граф са n чворова и m грана. Тада је*

$$\mathcal{E}^2(G)\leqslant\left(2m(2n-\lambda_1-\lambda_n)-n(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)|\det A|^{\frac{2}{n}}(\det\mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}\right)ER(G).$$

Једнакост важи ако и само ако је $G\cong\overline{K}_n$.

Доказ. Користећи неједнакост између аритметичке и геометријске средине добијамо да је

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\lambda_i^2}{n-\lambda_i} \geqslant n\left(\prod_{i=1}^{n} \frac{\lambda_i^2}{n-\lambda_i}\right)^{\frac{1}{n}} = n|\det A|^{\frac{2}{n}}(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}.$$

На основу последње неједнакости и неједнакости (5.11) и (5.12), добијамо тражени резултат. □

Последица 5.2.2. [133] *Нека је G прост граф са n чворова и m грана. Тада је*

$$\mathcal{E}^2(G) \leqslant \frac{n^2\left(2m(2n-\lambda_1-\lambda_n)\det \mathcal{R}_A(n)^{\frac{1}{n}} - n|\det A|^{\frac{2}{n}}\right)}{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}}.$$

Једнакост важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$.

Доказ. Како је

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2(n-\lambda_i) \geqslant n\left(\prod_{i=1}^{n} \lambda_i^2(n-\lambda_i)\right)^{\frac{1}{n}} = \frac{n|\det A|^{\frac{2}{n}}}{(\det \mathcal{R}_A(n))^{\frac{1}{n}}},$$

на основу неједнакости (5.11) и (5.13) добија се тражена неједнакост. □

Последица 5.2.3. [133] *Нека је G прост граф са n чворова и m грана. Тада је*

$$\frac{\mathcal{E}^2(G)}{ER(G)} + n^2(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)(ER(G)-1) \leqslant 2m(2n-\lambda_1-\lambda_n), \tag{5.14}$$

при чему једнакост важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$.

Доказ. На основу релације (3.52) и неједнакости (5.11) и (5.12) добија се тражена неједнакост.

Једнакост важи ако и само ако важи једнакост у (5.11) и (5.12). На основу леме 1.4.9, једнакост у (5.11) важи ако и само ако је $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_n$ или је $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_k \geqslant \lambda_{k+1} = \cdots = \lambda_n$, за неко k, $1 \leqslant k \leqslant n-1$, одакле следи да је $G \cong \overline{K}_n$ или $G \cong kK_s$ за неке k и s, такве да је $1 \leqslant k \leqslant n-1$ и $n = ks$. Како једнакост у (5.12) важи ако и само ако је $|\lambda_1|(n-\lambda_1) = |\lambda_2|(n-\lambda_2) = \cdots = |\lambda_n|(n-\lambda_n)$, непосредно се закључује да једнакост у (5.14) важи ако и само ако је G празан граф. □

Последица 5.2.4. [133] *Нека је G прост граф са n чворова и m грана. Тада је*

$$\mathcal{E}(G) \leq n^2\sqrt{ER(G)-1}, \tag{5.15}$$

при чему једнакост важи ако и само ако је $G \cong \overline{K}_n$.

Доказ. Неједнакост (5.15) следи директно из (3.52) и (5.13). Једнакост у (5.15) важи ако и само ако је $\frac{|\lambda_1|}{n-\lambda_1} = \frac{|\lambda_2|}{n-\lambda_2} = \cdots = \frac{|\lambda_n|}{n-\lambda_n}$, одакле се лако може закључити да је $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_n$, тј. G је празан граф. □

Последица 5.2.5. [133] *Нека је G бипартитан граф са n чворова и m грана. Тада је*

$$\mathcal{E}^2(G)\left(\frac{1}{ER(G)}+\frac{n^2-\lambda_1^2}{n^2}\right)\leqslant 4mn, \tag{5.16}$$

при чему једнакост важи ако и само ако је $G\cong\overline{K}_n$.

Теорема 5.2.4. [133] *Нека је G прост граф са n чворова и m грана. Тада је*

$$\mathcal{E}^4(G)\leqslant\frac{n^2m^2(2n-\lambda_1-\lambda_n)^2ER(G)}{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)}. \tag{5.17}$$

Једнакост важи ако и само ако је $G\cong\overline{K}_n$.

Доказ. За $p_i=\dfrac{\lambda_i^2}{2m}$, $a_i=n-\lambda_i$, $R=n-\lambda_n$, $r=n-\lambda_1$, $i=1,2,\dots,n$, неједнакост (1.31) се трансформише у неједнакост

$$\sum_{i=1}^{n}\lambda_i^2(n-\lambda_i)\sum_{i=1}^{n}\frac{\lambda_i^2}{n-\lambda_i}\leqslant\frac{m^2(2n-\lambda_1-\lambda_n)^2}{(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)}. \tag{5.18}$$

На основу неједнакости (5.12),(5.13) и (5.18) следи доказ за неједнакост (5.17).

Имајући у виду случајеве једнакости у релацијама (1.31), (5.12) и (5.13), лако се може закључити да једнакост у (5.17) важи ако и само ако је G празан граф. □

Последица 5.2.6. [133] *Нека је G прост граф са n чворова и m грана. Тада је*

$$\mathcal{E}(G)\leqslant\frac{m(2n-\lambda_1-\lambda_n)}{n}\sqrt{\frac{ER(G)}{(ER(G)-1)(n-\lambda_1)(n-\lambda_n)}}, \tag{5.19}$$

при чему једнакост важи ако и само ако је $G\cong\overline{K}_n$.

Доказ. Доказ следи из (3.52), (5.12) и (5.18). □

Последица 5.2.7. [133] *Нека је G бипартитан граф са n чворова и m грана. Тада је*

$$\mathcal{E}^4(G)\leqslant\frac{4n^4m^2ER(G)}{n^2-\lambda_1^2}, \tag{5.20}$$

при чему једнакост важи ако и само ако је $G\cong\overline{K}_n$.

Литература

[1] E. Andrade, H. Gomes, M. Robbiano, Spectra and Randić spectra of caterpillar graphs and applications to the energy, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 77 (2017) 61-75.

[2] S. Alikhani, N. Ghanbari, Randić energy of specific graphs, *Appl. Math. Comput.* 269 (2015) 722-730.

[3] L. E. Allem, J. Capaverde, V. Trevisan, I. Gutman, E. Zogić, E. Glogić, Resolvent Energy of Unicyclic, Bicyclic and Tricyclic Graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 77 (2017) 95-104.

[4] S. K. Ayyaswamy, S. Balachandran, Y. B. Venkatakrishnan, I. Gutman, Signless Laplacian Estrada index, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 66 (2011) 785-794.

[5] A. T. Balaban, I. Motoc, D. Bonchev, O. Mekenyan, Topological indices for structure-activity corrections, *Topics Curr. Chem.* 114 (1983) 21-55.

[6] M. Benzi, P. Boito, Quadrature rule-based bounds for functions of adjacency matrices, *Linear Algebra Appl.* 433 (2010) 637-652.

[7] M. Biernacki, H. Pidek et C. Ryll-Nardzewski, Sur une inegalite entre des integrales definies, *Annales Univ. Mariae Curie -Sklodowska*, A 4 (1950) 1-4.

[8] B. Borovićanin, E. Zogić, On Randić energy of a graph, The 14th Serbian Mathematical Congress (14th SMAK), Kragujevac, May 16-19, 2018.

[9] B. Borovićanin, E. Zogić, Some new bounds on Randić energy, The 5th International Conference, CONTEMPORARY PROBLEMS OF MATHEMATICS, MECHANICS AND INFORMATICS (CPMMI 2018), State University of Novi Pazar, June 17-19, 2018.

[10] S. Bozkurt, A. Gungor, I. Gutman, Randić spectral Radius and Randić energy, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 64 (2010) 239-250.

[11] S. Bozkurt, A. Gungor, I. Gutman, A. Cevik, Randić matrix and Randić energy, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 64 (2010) 321-334.

[12] S.B. Bozkurt, D. Bozkurt, Sharp Upper Bounds for Energy and Randić Energy, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 70 (2013) 669-680.

[13] P. Biler, A. Witkowski, *Problems in Mathematical Analysis*, Marcel Dekker, New York, 1990.

[14] S. Butler, *Eigenvalues and Structures of Graphs*, PhD Dissertation, University of California, 2008.

[15] M.S. Cavers, *The Normalized Laplacian Matrix and General Randic Index of Graphs*, PhD Dissertation, University of Regina, 2010.

[16] M. Cavers, S. Fallat, S. Kirkland, On the normalized Laplacian energy and general Randić index R_1 of graphs, *Linear Algebra Appl.* 433 (2010) 172-190.

[17] A. Cafure, D. A. Jaume, L. N. Grippo, A. Pastine, M. D. Safe, V. Trevisan, I. Gutman, Some Results for the (Signless) Laplacian Resolvent, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 77 (2017) 105-114.

[18] A. Chang, Q. Huang, Ordering trees by their largest eigenvalues, *Linear Algebra Appl.* 370 (2003) 175-184.

[19] F.R.K. Chung, *Spectral Graph Theory*, American Mathematical Society, Providence, 1997.

[20] X. Chen, J.Quian, On Resolvent Estrada Index, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 73 (2015) 163-174.

[21] Y. Chen, L. Wang, Sharp bounds for the largest eigenvalue of the signless Laplacian of a graph, *Linear Algebra Appl.* 433 (2010) 908-913.

[22] S. Chen, H. Deng, Extremal $(n, n+1)$-graphs with respected to zerothorder general Randić index, *J. Math. Chem.* 42 (2007) 555-564.

[23] V. Cirtoaje, The Best Lower Bound Depended on Two Fixed Variables for Jensen's Inequality with Ordered Variables, *J. Inequal. Appl.* 2010 (2010) 1-12.

[24] D. Cvetković, *Graphs and their spectra* (*Thesis*), Univ. Beograd, Publ. Elektrotehn. Fak. Ser. Mat. Fiz., No. 354 - No. 356 (1971), 1-50.

[25] D. Cvetković, *Teorija grafova i njene primene*, Naučna knjiga, Beograd, 1990.

[26] D. Cvetković, M. Doob, H. Sachs, *Spectra of Graphs Theory and Application, third ed.*, Johann Ambrosius Barth Verlag, Heidelberg, Leipzig, 1995.

[27] D. Cvetković, I. Gutman, The algebraic multiplicity of the number zero in the specturm of a bipartitie graph, *Mat. Vesnik* (*Beograd*) 9 (1972) 141-150.

[28] D. Cvetković, P. Rowlinson, S. Simić, *An Introduction to the Theory of Graph Spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, 2009.

[29] D. Cvetković, P. Rowlinson, S. Simić, Signless Laplacian of finite graphs, *Linear Algebra Appl.* 423 (2007) 155-171.

[30] D. Cvetković, S. Simić, Towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian I, *Publ. Inst. Math. Beograd* 85(99) (2009) 19-33.

[31] K. C. Das, S. A. Mojallal, I. Gutman, Improving McClellands lower bound for energy, *MATCH Commum. Math. Comput. Chem.* 70 (2013) 663-668.

[32] K. C. Das, S. A. Mojallal, On energy and Laplacian energy of graphs, *El. J. Lin. Algebra* 31 (2016) 167-186.

[33] K. C. Das, S. A. Mojallal, Relation between energy and (signless) Laplacian energy of graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 74 (2015) 359-366.

[34] K. C. Das, S. A. Mojallal, Relation between signless Laplacian energy, energy of graph and its line graph, *Linear Algebra Appl.* 493 (2016) 91-107.

[35] K. C. Das, S. Sorgun, I. Gutman, On Randić energy, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 73 (2015) 81-92.

[36] K. C. Das, S. Sorgun, On Randić energy of graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 72 (2014) 227-238.

[37] K. C. Das, S. Sorgun, K. Xu, On Randić Energy of Graphs, in: I. Gutman, X. Li (Eds.), *Graph Energies - Theory and Applications*, Univerzitet u Kragujevcu 2016, 111-122.

[38] K. C. Das, S. Sun, Extremal graphs for Randić energy, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 77 (2017) 77-84.

[39] K. C. Das, S. Sun, I. Gutman, Normalized Laplacian eigenvalues and Randić energy of graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 77 (2017) 45-59.

[40] M. Dehmer, F. Emmert-Streib, *Quantitative Graph Theory*, CRC Press, 2015.

[41] H. Deng, A proof of a conjecture on the Estrada index, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 62 (2009) 599-606.

[42] D. de Caen, An upper bound on the sum of squares of degrees in a graph, *Discrete Math.* 185 (1998) 245-248.

[43] J. B. Diaz, F. T. Metcalf, Stronger forms of a class of inequalities of G. Pólya-G. Szegö, and L. V. Kantorovich, *Bull. Amer. Math. Soc.* 69 (1963) 415-418.

[44] S. Dragomir, A generaization of Grüss's inequaity in inner product spaces and applications, *J. Math. Anal. Appl.* 237 (1999) 74-82.

[45] Z. Du, B. Zhou, The Estrada index of unicyclic graphs, *Linear Algebra Appl.* 436 (2012) 3149-3159.

[46] Z. Du, Z. Liu, On the Estrada and Laplacian Estrada indices of graphs, *Linear Algebra Appl.* 435 (2011) 2065-2076.

[47] H.R. Ellahi, R. Nasiri, G. H. Fath-Tabar A. Gholami, The Signless Laplacian Estrada Index of Unicyclic Graphs, *Math. Interdisc. Res.* 2 (2017) 155-167.

[48] E. Estrada, Characterization of 3D molecular structure, *Chem. Phys. Lett.* 319 (2000) 713- 718.

[49] E. Estrada, J.A. Rodriguez-Velazquez, Subgraph centrality in complex networks, *Phys. Rev.* E 71 (2005) 056-103.

[50] E. Estrada, J.A. Rodriguez-Velazquez, Spectral measures of bipartivity in complex networks, *Phys. Rev.* E 72 (2005) 046-105.

[51] E. Estrada, D. J. Higham, Network properties revealed through matrix functions, *SIAM Rev.* 52 (2010) 696-714.

[52] A. Farrugia, The increase in the resolvent energy of a graph due to the addition of a new edge, *Appl. Math. Comput.* 321 (2018) 25-36.

[53] K. Fan, Maximum properties and inequalities for the eigenvalues of completely continuous operators, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 37 (1951) 760-766.

[54] B. Furtula, I. Gutman, Comparing energy and Randić energy, *Maced. J. Chem. Chem. Engin.* 32 (2013) 117-123.

[55] F. Gantmacher, *The Theory of Matrices*, Chelsea Pub. Co., 1960.

[56] R. Gu, X. Li, J. Liu, Note on three results on Randić energy and incidence energy, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 73 (2015) 61-71.

[57] I. Gutman, The energy of a graph: Old and new results, in: A. Betten, A. Kohnert, R. Laue, A. Wassermann (Eds.), *Algebraic Combinatorics and Applications,* Springer-Verlag, Berlin, 2001, 196-211.

[58] I. Gutman, *Uvod u hemijsku teoriju grafova*, Prirodno-matematički fakultet u Kragujevcu, 2003.

[59] I. Gutman, The energy of a graph, *Ber. Math. Statist. Sekt. Forschungsz. Graz* 103 (1978) 1-22.

[60] I. Gutman, Acyclic systems with extremal Huckel π-electron energy, *Theor. Chim. Acta* 45 (1977) 79-87.

[61] I. Gutman, Degree-based topological indices, *Croat. Chem. Acta*, 86 (2013) 351–361.

[62] I. Gutman, N. M. M. de Abreu, C. T. M. Vinagre, A. S. Bonifacio, S. Radenković, Relation between energy and Laplacian energy, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 59 (2008) 343-354.

[63] I. Gutman, K. Das, B. Furtula, E. Milovanović, I. Milovanović, Generalizations of Szökefalvi Nagy and Chebyshev inequalities with applications in spectral graph theory, *Appl. Math. Comput.* 313 (2017) 235–244.

[64] I. Gutman, B. Furtula, X. Chen, J. Qian, Graphs with Smallest Resolvent Estrada Indices, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 73 (2015) 267-270.

[65] I. Gutman, B. Furtula, Ş. Bozkurt, On Randić energy, *Linear Algebra Appl.* 442 (2014) 50-57.

[66] I. Gutman, M. Ghorbani Some properties of Narumi-Katayama index, *Appl. Math. Lett.* 25 (2012) 1435-1438.

[67] I. Gutman, X. Li, J. Zhang, Graph energy, in: M. Dehmer, F. Emmert-Streib (Eds.), *Analysis of Complex Networks. From Biology to Linguistics,* Wiley-VCH,Weinheim, 2009, 145-174.

[68] I. Gutman, B. Furtula, E. Zogić, E. Glogić, Resolvent energy of graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 75 (2016) 279-290.

[69] I. Gutman, B. Furtula, E. Zogić, E. Glogić, Resolvent energy of graphs, Spectra of graphs and applications 2016, May 18-20, 2016, Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade, Serbia.

[70] I. Gutman, B. Furtula, *Recent Results in the Theory of Randić Index*, Univerzitet u Kragujevcu, 2008.

[71] I. Gutman, B. Furtula, K. C. Das, E. Milovanović, I. Milovanović, *Bounds in Chemical Graph Theory - Mainstreams*, Univerzitet u Kragujevcu, 2017.

[72] I. Gutman, X. Li, *Graph Energies - Theory and Applications*, Univerzitet u Kragujevcu, 2016.

[73] I. Gutman, M. Robbiano, E. A. Martins, D. M. Cardoso, L. Medina, O. Rojo, Energy of line graphs, *Linear Algebra Appl.* 433 (2010) 1312-1323.

[74] I. Gutman, B. Ruščić, N. Trinajstić, C.F. Wilcox, Jr., *Graph Theory and Molecular Orbitals. XII. Acyclic Polyenes*, Chem. Phys. 62 (9) (1975) 3399-3405.

[75] I. Gutman, N. Trinajstić, *Graph theory and molecular orbitals. Total π-electron energy of alternant hydrocarbons*, Prirodno-matematički fakultet u Kragujevcu, 2003.

[76] I. Gutman, S. Wagner, The matching energy of a graph, *Discrete Appl. Math.* 160 (2012) 2177-2187.

[77] I. Gutman, B. Zhou, Laplacian energy of a graph, *Linear Algebra Appl.* 414 (2006) 29-37.

[78] E. Glogić, E. Zogić, N. Glišović, Remarks on the upper bound for the Randić energy of bipartite graphs, *Discrete Appl. Math.* 221 (2017) 67-70.

[79] R. Grone, R. Merris, V. S. Sunder, The Laplacian spectrum of a graph, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 11 (1990) 218-238.

[80] F. Harary, The determinant of the adjacency matrix of a graph, *SIAM Rev.* 4 (1962) 202-210.

[81] G. Indulal, I. Gutman, A. Vijayakumar, On distance energy of graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 60 (2008) 461-472.

[82] O. Ivanviuc, J. Devillers, *in: Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and QSPR, J. Devillers, A.T. Balaban*, Gordon and Breach, Amsterdam 1999.

[83] G.H.Hardy , J.E.Littlewood, G.Polya, *Inequalities*, Cambridge University Press, England, 1952.

[84] J. He, Y. Liu, J. Tian, Note on the Randić energy of graphs, *Kragujevac J. Math.* 42(2) (2018) 209-215.

[85] P. Henrici, Two remarks on the Kantorovich inequality, *Amer. Math. Montly* 68 (1961) 904-906.

[86] R.A. Horn, C.R. Johnson *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, Cambridge, 1985.

[87] M. Hofmeister, On the two largest eigenvalues of trees, *Linear Algebra Appl.* 260 (1997) 43-59.

[88] H. Kober, On the arithmetic and geometric means and on Hölder's inequality, *Proc. Amer. Math. Soc.* 9 (1958) 452-459.

[89] J. Li, J. M. Guo, W. C. Shiu, A note on Randić energy, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 74 (2015) 389-398.

[90] J. Li, J. M. Guo, W. C. Shiu, *Bounds on normalized Laplacian eigenvalues of graphs*, J. Ineq. Appl. 2014 (2014) # 316 (8 pp.)

[91] X. Li. Y. Shi, A survey on the Randić index, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 59 (2008) 127-156.

[92] X. Li. Y. Shi, I. Gutman, *Graph Energy*, Springer, New York, 2012.

[93] W. Lin, X. Guo, Ordering trees by their largest eigenvalues, *Linear Algebra Appl.* 418 (2006) 450-456.

[94] X. Li, J. Wang, Randić energy and Randić eigenvalues, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 73 (2015) 73-80.

[95] L. Lovasz, J. Pelikan, On the eigenvalues of trees, *Period. Math. Hungar.* 3 (1973) 175-182.

[96] L. Lovasz, *Combinatorial Problems and Exercises (2nd ed.)*, North-Holland, Amsterdam 1993.

[97] A. Lupas, Inequalities for the roots of a class of polynomials, *Univ. Beograd. Publ. Elektrotehn. Fak. Ser. Mat. Fiz.* NQ 577-NQ 598 (1977) 79-85.

[98] A. Lupas, A remark on the Schweitzer and Kantorovich inequality, *Univ. Beograd. Publ. Elektrotehn. Fak. Ser. Mat. Fiz.* NQ 381-409 (1972) 13-15.

[99] X. Li, Y. Yang, Sharp Bounds for the General Randić Index, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 51 (2004) 155-166.

[100] X. Li, I. Gutman, *Mathematical Aspects of Randić-type Molecular Structure Descriptors*, Univerzitet u Kragujevcu, 2006.

[101] J. Li, J. M. Guo, W. C. Shiu, A Note on the Randić energy *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 74 (2015) 389-398.

[102] B.L. Liu, Y.F. Huang, J.F. Feng, A Note on the Randić Spectral Radius, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 68 (2012) 913-916.

[103] J. Liu, B. Liu, On the relation between energy and Laplacian energy, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 61 (2009) 403-406.

[104] A. D. Maden, New bounds on the incidence energy, Randić energy and Randić Estrada index, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 74 (2015) 367-387.

[105] B.J. McClelland, Properties of the latent roots of a matrix: The estimation of π-electron energies, *J. Chem. Phys.*, 54 (1971) 640-643.

[106] D. S. Mitrinović, P. Vasić, *Analytic Inequalities*, Springer, Berlin, 1970.

[107] D. S. Mitrinović, J. E. Pečarić, A. M. Fink, *Classical and new inequalities in analysis*, Springer, Dordrecht, 1993.

[108] I. Milovanović, E. Milovanović, I. Gutman, Upper bounds for some graph energies, *Appl. Math. Comput.* 289 (2016) 435-443.

[109] I. Ž. Milovanović, E. I. Milovanović, Remarks on the energy and minimum dominating energy of graph, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 75 (2016) 305–314.

[110] I. Ž. Milovanović, E. I. Milovanović, A. Zakić, A short note on graph energy, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 72 (2014) 179-182.

[111] B. Mohar, Some applications of Laplace eigenvalues of graphs, in: G. Hahn, G. Sabidussi (Eds.), *Graph Symmetry*, Kluwer, Dordrecht, 1997, 225-275.

[112] B. Mohar, The Laplacian spectrum of graphs, in: Y. Alavi, G. Chartrand, O. R. Oellermann, A. J. Schwenk (Eds.), *Graph Theory, Combinatorics, and Applications*, Wiley, New York, 1991, 871-898.

[113] R. Nasiri, H.R.Ellahi, The signless Laplacian Estrada index of tricyclic graphs, *Australas. J. Combin.* 69 (1) (2017) 259-270.

[114] V. Nikiforov, The energy of graphs and matrices, *J.Math. Anal. Appl.* 326 (2007) 1472-1475.

[115] J. Palacios, More Inequalities for Laplacian Indices by Way of Majorization, *Iranian J. Math. Chem.* 9 (1) (2018) 17-24.

[116] L. Pogliani, From molecular connectivity indices to semiempirical connectivity terms: Recent trends in graph theoretical descriptors, *Chem. Rev.* 100 (2000) 3827-3858.

[117] J. Radon, Theorie und Anwendungen der absolut additiven Mengenfunktionen, *Sitzungsber. Acad. Wissen. Wien* 122 (1913) 1295-1438.

[118] M. Randić, On characterization of molecular branching, *J. Am. Chem. Soc.* 97 (1975) 6609-6615.

[119] M. Randić, The connectivity index 25 years after, *J. Mol. Graphics Modell.* 20 (2001) 19-35.

[120] M. Randić, On history of the Randić index and emerging hostility toward chemical graph theory, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 59 (2008) 5-124.

[121] B. C. Rennie, On a class of inequalities, *J. Austral. Math. Soc.* 3 (1963) 442-448.

[122] W. So, M. Robbiano, N. M. M. De Abreu, I. Gutman, Application of a theorem by Ky Fan in the theory of graph energy, *Linear Algebra Appl.* 432 (2010) 2163-2169.

[123] J. R. Schott, *Matrix Analysis for Statistics*, Wiley, New York, 1997.

[124] D. Stevanović, I. Stanković, M. Milošević, More on the relation between energy and Laplacian energy of graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 61 (2009) 395-401.

[125] N.Trinajstić, *Chemical Graph Theory*, CRC Press, 1992.

[126] D. Veljan, *Kombinatorika sa teorijom grafova*, Školska knjiga, Zagreb 1989.

[127] D. Vukičević, Bond additive modelling 2. Mathematical properties of max-min redeg index, *Croat. Chem. Acta.* 83 (2010) 261-273.

[128] K. Wang, W. Ning, M. Lu, On the signless Laplacian Estrada index of bicyclic graphs, *Discrete Appl. Math.* 235 (2018) 169-174.

[129] C. Xiaodan, Q. Jianguo, Bounding the Resolvent Estrada Index of a Graph, *J. Math. Study* 45 (2) Jun 2012.

[130] W. Yi, F. Yizheng, T. Yingying, On graphs with three distinct Laplacian eigenvalues, *Appl. Math. J. Chin. Univ.* B 22 (2007) 478-484.

[131] E. Zogić, B. Borovićanin, Some New Bounds on Randić Energy, *Kragujevac J. Math.* 43(3) (2019) 393-398.

[132] E. Zogić, B. Borovićanin, I. Milovanović, E. Milovanović On bounds of eigenvalues of Randić vertex-degree-based adjacency matrix, *Scientific Publications of the State University of Novi Pazar, Ser. A: Appl. Math. Inform. and Mech.* 10(1) (2018) 33-40.

[133] E. Zogić, B. Borovićanin, E. Glogić, I. Milovanović, E. Milovanović, On resolvent energy, resolvent Estrada and resolvent signless Laplacian Estrada indices, *Discrete Appl. Math.* submitted.

[134] E. Zogić, B. Borovićanin, E. Milovanović , I. Milovanović, Randić degree-based energy of graphs, The 5th International Conference, CONTEMPORARY PROBLEMS OF MATHEMATICS, MECHANICS AND INFORMATICS (CPMMI 2018), State University of Novi Pazar, June 17-19, 2018.

[135] E. Zogić, Applications of some analytic inequalities in obtaining bounds for the resolvent energy of graphs, The 14th Serbian Mathematical Congress (14th SMAK), Kragujevac, May 16-19, 2018.

[136] E. Zogić, E. Glogić, New Bounds for the Resolvent Energy of Graphs, *Scientific Publications of the State University of Novi Pazar, Ser. A: Appl. Math. Inform. and Mech.* 9(2) (2017), 187-191.

[137] B. Zhou, On Estrada index, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 60 (2008) 485-492.

[138] B. Zhou, I. Gutman, T. Aleksić, A Note on Laplacian Energy of Graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 60 (2008) 441-446.

Биографија

Емир Х. Зогић рођен је 19.02.1988. у Новом Пазару. Основну школу"Стефан Немања" и Гимназију завршио је у Новом Пазару. Основне академске студије на смеру Математика на Департману за математичке науке Државног универзитета у Новом Пазару уписао је 2007., а завршио 2011. године са просечном оценом 9,08. Мастер академске студије математике на Математичком факултету Универзитета у Београду уписао је 2011., а завршио 2013. године, где је одбранио мастер рад под насловом "Илустрација опште идеје закона реципроцитета преко квадратног, кубног и биквадратног." Докторске академске студије математике уписао је 2014. године на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу, где је положио све испите предвиђене планом и програмом са просечном оценом 9,28. На Државном универзитету у Новом Пазару радио је као сарадник-демонстратор од 2011. до 2013. године, затим је од 2013. до 2016. године био ангажован као сарадник у настави, а од 2016. године ради као асистент.

До сада има објављена 3 рада са SCI листе, од чега 2 рада у часопису категорије M21a и 1 рад у часопису категорије M22, као и 3 рада у националним часописима, од чега 1 рад у часопису M51 категорије и 2 рада у часопису категорије M52. Осим тога, коаутор је поглавља у монографији националног значаја (категорија M45) и има 7 саопштења на скуповима међународног значаја штампана у изводу (M34), што укупно чини 14 библиографских јединица.

Монографије, посебна поглавља у научним књигама (M45)

1. I. Gutman, B. Furtula, E. Zogić, E. Glogić, *Resolvent energy*, In: Energies of Graphs - Theory and Applications (I. Gutman, X. Li, Eds.), Mathematical Chemistry Monographs, MCM17, Univ. Kragujevac, Kragujevac, 2016, pp. 277-290. (ISBN 978-86-6009-033-3)

Научни радови објављени у научним часописима међунарнодног значаја (M20)

2. I. Gutman, B. Furtula, E. Zogić, E. Glogić, *Resolvent Energy of Graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 75 (2016), 279-290. (ISSN 0340-6253, IF(2016)=3,139), M21a

3. L. E. Allem, J. Capaverde, V. Trevisan, I. Gutman, E. Zogić, E. Glogić, *Resolvent Energy of Unicyclic, Bicyclic and Tricyclic Graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 77 (2017), 95-104. (ISSN 0340-6253, IF(2016)=3,139), M21a

4. E. Glogić, E. Zogić, N. Glišović, *Remarks on the upper bound for the Randić energy of bipartite graphs*, Discrete Appl. Math., 221 (2017) 67-70. (ISSN 0166-218X, IF(2016)=0.956), M22

Научни радови објављени у научним часописима националног значаја (M50)

5. E. Zogić, B. Borovićanin, *Some New Bounds on Randić Energy*, Kragujevac J. Math., 43 (3) (2019) 393-398. (ISSN 2406-3045) M51
6. E. Zogić, E. Glogić, *New Bounds for the Resolvent Energy of Graphs*, Scientific Publications of the State University of Novi Pazar, Ser A: Appl. Math. Inform. and Mech. 9 (2) (2017) 187-191. (ISSN 2466-3778) M52
7. E. Zogić, B. Borovićanin, I. Milovanović, E. Milovanović, *On bounds of eigenvalues of Randić vertex-degree-based adjacency matrix*, Scientific Publications of the State University of Novi Pazar, Ser A: Appl. Math. Inform. and Mech. 10 (1) (2018) 33-40. (ISSN 2466-3778) M52

Саопштења на међународним научним скуповима штампана у изводу (M34)

8. E. Glogić, E. Zogić, *Comparative analysis of interconnection networks*, Third International Conference CPMMI 2014, CONTEMPORARY PROBLEMS OF MATHEMATICS, MECHANICS AND INFORMATICS, June 16-17, 2014, State University of Novi Pazar, Novi Pazar, Serbia
9. I. Gutman, B. Furtula, E. Zogić, E. Glogić, *Resolvent energy of graphs*, Spectra of graphs and applications 2016, May 18-20, 2016, Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade, Serbia
10. E. Glogić, E. Zogić, N. Glišović, *Remarks on the upper bound for Randić index of bipartite graphs*, Fourth International Conference CPMMI 2016, CONTEMPORARY PROBLEMS OF MATHEMATICS, MECHANICS AND INFORMATICS, June 19-21, 2016, State University of Novi Pazar, Novi Pazar, Serbia
11. E. Zogić, *Applications of some analytic inequalities in obtaining bounds for the resolvent energy of graphs*, The 14th Serbian Mathematical Congress (14th SMAK), May 16-19, 2018, Kragujevac, Serbia
12. B. Borovićanin, E. Zogić, *On Randić energy of a graph*, The 14th Serbian Mathematical Congress (14th SMAK), May 16-19, 2018, Kragujevac, Serbia
13. E. Zogić, B. Borovićanin, E. Milovanović, I. Milovanović, *Randić degree-based energy of graphs*, The 5th International Conference CPMMI 2018, CONTEMPORARY PROBLEMS OF MATHEMATICS, MECHANICS AND INFORMATICS, June 17-19, 2018, State University of Novi Pazar, Novi Pazar, Serbia
14. B. Borovićanin, E. Zogić, *Some new bounds on Randić energy*, The 5th International Conference CPMMI 2018, CONTEMPORARY PROBLEMS OF MATHEMATICS, MECHANICS AND INFORMATICS, June 17-19, 2018, State University of Novi Pazar, Novi Pazar, Serbia

MATCH
Communications in Mathematical and in Computer Chemistry

MATCH Commun. Math. Comput. Chem. **75** (2016) 279-290

ISSN 0340 - 6253

Resolvent Energy of Graphs

Ivan Gutman[1,2], **Boris Furtula**[1,*],
Emir Zogić[2], **Edin Glogić**[2]

[1] *Faculty of Science, University of Kragujevac, Kragujevac, Serbia*
gutman@kg.ac.rs , furtula@kg.ac.rs

[2] *State University of Novi Pazar, Novi Pazar, Serbia*
ezogic@np.ac.rs , edinglogic@np.ac.rs

(Received June 8, 2015)

Abstract

The resolvent energy of a graph G of order n is defined as $ER = \sum_{i=1}^{n}(n-\lambda_i)^{-1}$, where $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ are the eigenvalues of G. We establish a number of properties of ER. In particular, we establish lower and upper bounds for ER and characterize the trees, unicyclic, and bicyclic graphs with smallest and greatest ER.

1 Introduction

Let $\mathbf{M}$ be a square matrix of order n. In linear algebra, the *resolvent matrix* $\mathcal{R}_{\mathbf{M}}(z)$ of $\mathbf{M}$ plays an important role [25]. It is defined as

$$\mathcal{R}_{\mathbf{M}}(z) = \left(z\,\mathbf{I}_n - \mathbf{M}\right)^{-1}$$

where $\mathbf{I}_n$ is the unit matrix of order n and z a complex variable. As easily seen, $\mathcal{R}_{\mathbf{M}}(z)$ is also a matrix of order n, that exists for all values of z except when z coincides with an eigenvalue of $\mathbf{M}$.

In this paper, we are concerned with simple graphs, that is graphs without directed, multiple, or weighted edges, and without self–loops. Let G be such a graph, possessing n vertices and m edges, and let $\mathbf{A} = \mathbf{A}(G)$ be its $(0,1)$-adjacency matrix.

MATCH
Communications in Mathematical and in Computer Chemistry

MATCH Commun. Math. Comput. Chem. **77** (2017) 95-104

ISSN 0340 - 6253

Resolvent Energy of Unicyclic, Bicyclic and Tricyclic Graphs

Luiz Emilio Allem[1], **Juliane Capaverde**[1], **Vilmar Trevisan**[1], **Ivan Gutman**[2,3], **Emir Zogić**[3], **Edin Glogić**[3]

[1] *Instituto de Matemática, UFRGS, Porto Alegre, RS, 91509–900, Brazil*
emilio.allem@ufrgs.br, juliane.capaverde@ufrgs.br, trevisan@mat.ufrgs.br

[2] *Faculty of Science, University of Kragujevac, Kragujevac, Serbia*
gutman@kg.ac.rs

[3] *State University of Novi Pazar, Novi Pazar, Serbia*
ezogic@np.ac.rs , edinglogic@np.ac.rs

(Received December 26, 2015)

Abstract

The resolvent energy of a graph G of order n is defined as $ER = \sum_{i=1}^{n}(n-\lambda_i)^{-1}$, where $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ are the eigenvalues of G. In a recent work [Gutman et al., *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **75** (2016) 279–290] the structure of the graphs extremal w.r.t. ER were conjectured, based on an extensive computer–aided search. We now confirm the validity of some of these conjectures.

1 Introduction

Let G be a graph on n vertices, and let $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ be its eigenvalues, that is, the eigenvalues of the adjacency matrix of G. The resolvent energy of G is defined in [3, 4] as

$$ER(G) = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{n-\lambda_i}\,. \tag{1}$$

Discrete Applied Mathematics 221 (2017) 67–70

Contents lists available at ScienceDirect

Discrete Applied Mathematics

journal homepage: www.elsevier.com/locate/dam

Remarks on the upper bound for the Randić energy of bipartite graphs

Edin Glogić*, Emir Zogić, Nataša Glišović

State University of Novi Pazar, Novi Pazar, Serbia

ARTICLE INFO

Article history:
Received 27 July 2016
Received in revised form 20 November 2016
Accepted 8 December 2016
Available online 19 January 2017

Keywords:
Graph spectrum
Graph energy
Randić matrix
Randić energy

ABSTRACT

Let $G = (V, E)$, $V = \{1, 2, \ldots, n\}$ be a simple graph without isolated vertices, with $n (n \geq 3)$ vertices and m edges, whose vertex degrees are given in the following form $d_1 \geq d_2 \geq \cdots \geq d_n > 0$. If A is the adjacency matrix, the Randić matrix $R = \|R_{ij}\|$ is defined in the following way

$$R_{ij} = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{d_i d_j}} & \text{if } v_i \text{ and } v_j \text{ are adjacent,} \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

The eigenvalues of matrix R, $\rho_1 \geq \rho_2 \geq \cdots \geq \rho_n$, are called the Randić eigenvalues of graph G. The Randić energy of graph G, denoted by RE, is defined in the following way:

$$RE = RE(G) = \sum_{i=1}^{n} |\rho_i|.$$

In this paper, upper bounds for graph invariant RE have been studied.

1. Introduction

Let G be a simple connected graph on the vertex set $V = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ and edge set E. For $v_i \in V$, the degree of the vertex v_i, denoted by d_i, is the number of the vertices adjacent to v_i. Let A be the adjacency matrix of G and D is the diagonal matrix, whose diagonal elements are vertex degrees.

The Randić matrix of G is the $n \times n$ matrix $R = \|R_{ij}\|$ which is defined in the following way

$$R_{ij} = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{d_i d_j}} & \text{if } v_i \text{ and } v_j \text{ are adjacent,} \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Let $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ be the eigenvalues of matrix A [5] and $\rho_1 \geq \rho_2 \geq \cdots \geq \rho_n$ the eigenvalues of matrix R, which are called the Randić eigenvalues.

The (ordinary) energy $E(G)$ of graph G is defined as the sum of the absolute values of its eigenvalues:

$$E = E(G) = \sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|.$$

* Corresponding author.
E-mail address: edinglogic@np.ac.rs (E. Glogić).

http://dx.doi.org/10.1016/j.dam.2016.12.005
0166-218X/

Образац 1

ИЗЈАВА АУТОРА О ОРИГИНАЛНОСТИ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

Ја, Емир Зогић, изјављујем да докторска дисертација под насловом:

Неке особине резолвентне и Рандићеве енергије графа

која је одбрањена на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу представља *оригинално ауторско дело* настало као резултат *сопственог истраживачког рада*.

Овом Изјавом такође потврђујем:

- да сам *једини аутор* наведене докторске дисертације,
- да у наведеној докторској дисертацији *нисам извршио/ла повреду* ауторског нити другог права интелектуалне својине других лица,
- да умножени примерак докторске дисертације у штампаној и електронској форми у чијем се прилогу налази ова Изјава садржи докторску дисертацију истоветну одбрањеној докторској дисертацији.

У Крагујевцу, 9.10.2018. године,

потпис аутора

Образац 2

ИЗЈАВА АУТОРА О ИСКОРИШЋАВАЊУ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

Ја, Емир Зогић,

☑ дозвољавам

☐ не дозвољавам

Универзитетској библиотеци у Крагујевцу да начини два трајна умножена примерка у електронској форми докторске дисертације под насловом:

Неке особине резолвентне и Рандићеве енергије графа

која је одбрањена на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу, и то у целини, као и да по један примерак тако умножене докторске дисертације учини трајно доступним јавности путем дигиталног репозиторијума Универзитета у Крагујевцу и централног репозиторијума надлежног министарства, тако да припадници јавности могу начинити трајне умножене примерке у електронској форми наведене докторске дисертације путем *преузимања*.

Овом Изјавом такође

☑ дозвољавам

☐ не дозвољавам[1]

[1] Уколико аутор изабере да не дозволи припадницима јавности да тако доступну докторску дисертацију користе под условима утврђеним једном од *Creative Commons* лиценци, то не искључује право припадника јавности да наведену докторску дисертацију користе у складу са одредбама Закона о ауторском и сродним правима.

припадницима јавности да тако доступну докторску дисертацију користе под условима утврђеним једном од следећих *Creative Commons* лиценци:

1) Ауторство

2) Ауторство - делити под истим условима

3) Ауторство - без прерада

4) Ауторство - некомерцијално

5) Ауторство - некомерцијално - делити под истим условима

6) Ауторство - некомерцијално - без прерада[2]

У Крагујевцу, 9.10.2018. године,

Zogić Ema

потпис аутора

[2] Молимо ауторе који су изабрали да дозволе припадницима јавности да тако доступну докторску дисертацију користе под условима утврђеним једном од *Creative Commons* лиценци да заокруже једну од понуђених лиценци. Детаљан садржај наведених лиценци доступан је на: http://creativecommons.org.rs/