



**УНИВЕРЗИТЕТ
У НИШУ**

**Универзитетска
Библиотека
"Никола Тесла"**

**UNIVERSITY
OF NIŠ**

**University
Library
"Nikola Tesla"**



**ДИГИТАЛНИ
РЕПОЗИТОРИЈУМ
УНИВЕРЗИТЕТА
У НИШУ**

**Библиотека
Дисертације**

**DIGITAL
REPOSITORY
OF THE UNIVERSITY
OF NIŠ**

Ph.D. Theses

UNIVERZITET U NIŠU
PRIRODNO MATEMATIČKI FAKULTET



DOKTORSKA DISERTACIJA

**Ekstremalni problemi i algoritmi za
grafovske invarijante bazirane na
sopstvenim vrednostima i
rastojanjima**

ALEKSANDAR ILIĆ

Niš, decembar 2010.

Sadržaj

1	Uvod	3
2	Osnovni pojmovi i primene	7
2.1	Formalne definicije	7
2.2	Spektralna teorema	9
2.3	Matrica susedstva i Laplasova matrica	11
2.4	PageRank i EdgeRank algoritam	12
2.5	Problem balansiranja opterećenja i integralni grafovi	13
2.6	Spektralna klasterizacija podataka	16
2.7	Grafovski energija	17
3	Laplasovi koeficijenti	19
3.1	Glavne teoreme i problemi	20
3.2	Uređenje stabala modifikovanom Laplasovom energijom	22
3.2.1	Dokaz Teoreme 3.2.2 i Teoreme 3.2.1	24
3.3	Transformacije i zvezdolika stabla	27
3.4	Stabla sa datim brojem listova i uparivajućim brojem	30
3.5	Stabla sa fiksiranim dijametrom i radijusom	33
3.6	Laplasovi koeficijenti unickličnih grafova	37
3.6.1	γ and τ transformacije	40
3.6.2	LEL kod unickličnih grafova	43
4	Spektralni radijus matrice rastojanja	47
4.1	Zvezda S_n ima najmanji spektralni radijus matrice rastojanja	48
4.2	Stabla sa fiksiranim najvećim stepenom	48
4.2.1	Nove transformacije stabla	53
4.3	Stabla sa fiksiranim uparivajućim brojem	56
4.4	Grafovi sa fiksiranim hromatskim brojem	58
4.5	Granice za ρ kod generalnih grafova	60
4.6	Granice za ρ kod bipartitnih grafova	61
4.7	Donje i gornje granice za DE	63
5	Integralni cirkulantni grafovi	67
5.1	Preliminarni rezultati	68
5.2	Energija unitarnih Kejljevih grafova	70
5.3	Spektralna matrica rastojanja ICG-a	72
5.4	Energija rastojanja unitarnih Kejljevih grafova	73
5.5	Tri-ekvienergetski grafovi	75
5.6	Klase integralnih cirkulantnih grafova	77
5.7	Energija po modulu 4	79
5.7.1	Slučaj n neparan	80

5.7.2	Slučaj n paran	81
5.8	Minimum energije integralnih cirkulantnih grafova	82
6	Estradin indeks	85
6.1	Osnovne osobine	85
6.2	Grafske transformacije	88
6.2.1	Stabla sa fiksiranim maksimalnim stepenom	91
6.2.2	Stabla sa savršenim uparivanjima	92
6.3	Laplasov Estradin indeks	93
6.4	O broju trajektorija i korekciji teoreme	96
6.4.1	Kontraprimeri	96
6.4.2	Gornja i donja granica za ograničene Dikove puteve	97
6.4.3	Funkcija generatriše za ograničene Dikove puteve	100
7	Stepen-rastojanje invarijanta	101
7.1	Hemingovi grafovi i kanonska reprezentacija	102
7.2	Formula za računanje DD indeksa	103
7.3	Primene na hemijske grafove	105
7.4	Linearni algoritam za benzenoidne sisteme	107
7.5	Formule za složene grafove	108
7.6	Grafske transformacije	112
7.7	Uniciklični grafovi	113
7.7.1	Maksimum stepen-rastojanje invarijante među unicikličnim grafovima	114
7.7.2	Minimum stepen-rastojanje invarijante među unicikličnim grafovima	115
7.8	Biciklični grafovi	117
8	Omega polinom i Cluj–Niš indeks	121
8.1	Omega polinom	121
8.2	Broj <i>ops</i> puteva i primeri	122
8.3	Topološki indeksi i diskriminativna sposobnost	123
8.4	Omotič matrice i polinomi	125
8.5	Super Cluj–Niš indeks	128
8.6	Dalja istraživanja	131
9	Konstrukcija hamiltonovih grafova sa ograničenim Δ i D	135
9.1	Algoritam i korektnost	136
9.2	Broj dodatih grana za $\Delta = 3$	138
9.3	Dalja poboljšanja i analize	140
10	Prilozi	143
10.1	Householderova metoda za određivanje sopstvenih vrednosti	143
10.2	MATHEMATICA kod za integralne cirkulantne grafove	149
10.3	Korišćeni softver	150
10.3.1	AutoGraphiX	150
10.3.2	newGRAPH	151
10.3.3	nauty	151
11	Zaključak	153
	Literatura	154

Zahvalnica

Najveću zahvalnost dugujem mojim roditeljima, bratu i Nataši koji su oduvek bili uz mene i bez čije podrške ova disertacija ne bi bila moguća.

Zahvaljujem se mentoru Draganu Stevanoviću na uloženom trudu i na interesantnim problemima koje je predlagao; profesoru Mircea V. Diudea-i i njegovoj grupi za istraživačku posetu na Univerzitetu Babes-Bolyai iz Kluža, kao i na stalnu motivaciju i inspiraciju u radu; profesoru Sandi Klačaru za istraživačku posetu na Univerzitetu u Ljubljani, odličnu saradnju i puno novih ideja.

Profesorima Draganu Uroševiću i Nenadu Mladenoviću za upoznavanje sa novim metodama kombinatorne optimizacije i podršku sa projekta 144007 Ministarstva nauke i tehnološkog razvoja.

Posebno se zahvaljujem akademiku Ivanu Gutmanu za pomoć u hemijskoj teoriji grafova; akademiku Dragošu Cvetkoviću i profesoru Slobodanu Simiću za pomoć oko spektralne teorije grafova.

Takođe zahvalnost dugujem Borislavu Agapievu i Igoru Kabilju za zajednički rad na razvijanju novih algoritama distribuiranog internet pretraživača Wowd.

Ova disertacija je i plod saradnje sa inostranim naučnicima Matthias Dehmer (Austrija), Lihua Feng, Guihai Yu, Bo Zhou (Kina), Patrick W. Fowler (Velika Britanija) i Ali R. Ashrafi (Iran).

Zahvaljujem se profesorima Miroslavu Ćiriću, Draganu Đorđeviću, Predragu Stanimiroviću i Branimiru Todoroviću na svemu što su me naučili tokom studiranja na Prirodno matematičkom fakultetu; učiteljici Milunki Bosić, nastavnici matematike Dragici Zlatanović i razrednom starešini Branku Jovanoviću, kao i Slavoljubu Milosavljeviću i Branislavu Popoviću iz Društva matematičara Srbije za ljubav prema matematici i informatici, i na velikoj pažnji koju su mi posvetili.

Zahvaljujem se profesorima i prijateljima Milošu Milosavljeviću i Marku Miloševiću za stalnu motivaciju i pripreme na srednjoškolskim i studentskim takmičenjima iz matematike i informatike; kolegama i koautorima Milanu Bašiću, Đorđu Krtiniću, Marjanu Milanoviću, Nikoli Milosavljeviću, Marku Petkoviću, Stefanu Stanimiroviću i Ivanu Stankoviću za nesebičnu pomoć tokom izrade ove doktorske disertacije.

U Nišu, decembar 2010.

Glava 1

Uvod

*Ako ljudi ne veruju da je matematika jednostavna,
to je zato što ne shvataju koliko je život komplikovan.
John von Neumann (1903 – 1957)*

Teorija grafova je relativno mlada oblast matematike. Najveći napredak dostignut je poslednjih decenija, zahvaljujući savremenoj računarskoj tehnologiji. Graf je matematička struktura koja se koristi pri modeliranju relacija između objekata nekog skupa.

Najstariji problem u teoriji grafova jeste problem Kenigsberških mostova. Naime, švajcarski matematičar Ojler (Leonhard Euler) je 1736. godine naišao na sledeći problem: grad Kenigsberg leži na obalama i na dva ostrva reke Pregel, koji su povezani sa sedam mostova. Pitanje je bilo, da li je moguće obići sve mostove tačno jednom, polazeći iz bilo koje tačke.

Glavni zadaci ove doktorske disertacije su proučavanje grafovskih invarijanti, koje su bazirane na sopstvenim vrednostima i matrici rastojanja. Osim toga, disertacija predstavlja značajan doprinos u hemijskoj teoriji grafova i izučavanju topoloških indeksa, poput energije i njenih modifikacija. Takođe, predstavljeni su i algoritmi za računanje nekih grafovskih invarijanti, kao i konstrukcije grafova sa određenim svojstvima.

Topološki indeksi i grafovske invarijante bazirane na sopstvenim vrednostima i rastojanjima između čvorova su veoma zastupljeni u matematičkoj hemiji. Njima se modeliraju razne osobine molekula i njihovih veza. Mnogi indeksi ostvaruju odličnu korelaciju između fizičkih, hemijskih, termodinamičkih i bioloških parametara hemijskih jedinjenja. Wienerov indeks je jedna od najstarijih i najpoznatijih grafovskih invarijanti. Definisana je 1947. godine kao zbir rastojanja između svih parova čvorova,

$$W(G) = \sum_{u,v \in V} d(u,v),$$

gde $d(u,v)$ predstavlja najkraće rastojanje između čvorova u i v (teorijski rezultati i primene prikazane su u [80]). U radu su detaljno analizirane dve modifikacije ovog indeksa (za nove topološke indekse videti monografiju [108]).

U spektralnoj i algebarskoj teoriji, grafovi se izučavaju koristeći sopstvene vrednosti matrice M , koja na neki način opisuje svaki graf. Tako se može govoriti o matrici susedstva A , Laplasovoj matrici L , matrici rastojanja D , neoznačenoj Laplasovoj matrici Q , i drugima [47]. Spektri grafova i odgovarajući sopstveni vektori imaju značajne primene kod modeliranja i pretraživanja Interneta, obrada slika i prepoznavanja oblika, klasterizaciji podataka, u multiprocesorskim povezujućim mrežama, u socijalnim mrežama, u matematičkoj hemiji, ekonomiji i drugim naukama [48].

Jedan od najilustrativnijih primera je Google PageRank algoritam, koji je zasnovan na iterativnom postupku nalaženja najveće sopstvene vrednosti matrice susedstva. Naime, stranice na Internetu se rangiraju na osnovu međusobnih linkova, a važnost neke stranice je proporcionalna odgovarajućoj komponenti Peronovog sopstvenog vektora. U radu se analiziraju koeficijenti Laplasovog

karakterističnog polinoma i najveća sopstvena vrednost matrice rastojanja, kao i dve invarijante koje su bazirane na spektru grafova - energija i Estradin indeks.

Disertacija se sastoji od uvoda, devet poglavlja i zaključka.

Drugo poglavlje sadrži osnovne definicije iz teorije grafova, kao i nekoliko primena spektara grafova u rangiranju stranica sa Web-a, balansiranju opterećenja u multiprocesorskim sistemima, klasterizaciji grafova i grafovskoj energiji.

U trećem poglavlju se analizira karakteristični polinom Laplasove matrice (eng. Laplacian matrix),

$$P(L(G), \mu) = \det(\mu I_n - L(G)) = \sum_{k=0}^n (-1)^k c_k \mu^{n-k}.$$

Laplasova matrica ima nenegativne realne sopstvene vrednosti $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_{n-1} \geq \mu_n = 0$. Iz Vietovih formula koeficijent c_k je simetrični polinom reda $n - 1$, a za stabla koeficijent c_{n-2} je upravo Wienerov indeks. Mohar u [195] uvodi uređenje stabala na osnovu Laplasovih koeficijenata, koristeći relaciju između Laplasovih koeficijenata i broja uparivanja grafa dobijenog potpodelom grana grafa G . Modifikovana Laplasova energija (eng. Laplacian-like energy) je definisana kao

$$LEL(G) = \sum_{i=1}^n \sqrt{\mu_i},$$

koja je analogna grafovskoj energiji. Stevanović u [228] dokazuje da ukoliko važi $c_k(G) \leq c_k(H)$ za svako $k = 0, 1, \dots, n$ za dva grafa G i H sa n čvorova, tada je $LEL(G) \leq LEL(H)$. U radu se daje korektan dokaz ovog tvrđenja pomoću kompleksne analize [149]. Takođe se razmatraju stabla sa fiksiranim dijametrom, radijusom, maksimalnim uparivanjem, brojem visećih čvorova i analizira se relacija uređenja [147, 142, 138]. Na kraju se pomoću Kelmansove teoreme analiziraju Laplasovi koeficijenti kod unicikličnih grafova i postavljaju neke hipoteze [229].

U četvrtom poglavlju se analizira matrica rastojanja (eng. distance matrix), koja ima realne sopstvene vrednosti. Energija rastojanja (eng. distance energy) je definisana kao suma apsolutnih vrednosti sopstvenih vrednosti matrice rastojanja. Za stabla i neke specijalne tipove grafova, energija rastojanja je jednaka dvostruko vrednosti spektralnog radijusa matrice rastojanja. U radu se uvode dve generalne transformacije grafova koje povećavaju ili smanjuju spektralni radijus matrice rastojanja. Dokazuje se da među stablima sa fiksiranim maksimalnim stepenom čvorova, metla $B_{n,\Delta}$ (sastavljena od zvezde $S_{\Delta+1}$ i puta dužine $n - \Delta + 1$ koji je vezan za proizvoljni viseći čvor zvezde) ima maksimalan spektralni radijus matrice rastojanja [230]. Na osnovu kompjuterske pretrage među stablima do 22 čvora, postavlja se hipoteza za minimalni slučaj. Takođe, među stablima sa fiksiranim uparivajućim brojem i među grafovima sa fiksiranim hromatskim brojem određuju se jedinstveni grafovi koji imaju minimalni spektralni radijus rastojanja. U radu se pokazuju gornje i donje granice za energiju rastojanja za generalne i bipartitne grafove, poboljšavajući već postojeće nejednakosti [268].

Neka su $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ sopstvene vrednosti matrice susedstva. U petom poglavlju se bavimo energijom grafova, koja je definisana kao suma apsolutnih vrednosti sopstvenih vrednosti matrice susedstva

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

To je parametar koji proizilazi iz Hikelove molekulske orbitalne aproksimacije za totalnu π -elektronsku energiju. Nedavno su uvedene razne modifikacije grafovске energije, kao što su Laplasova i energija rastojanja. Do sada su konstruisani parovi ili familije nekospektralnih grafova koji imaju jednaku energiju, ali su sve konstrukcije bazirane na kompozicijama i linijskim grafovima. Integralni cirkulantni graf $ICG_n(D)$ ima skup čvorova $Z_n = \{0, 1, \dots, n - 1\}$ i dva čvora a i b su susedna ako i samo ako je $\gcd(a - b, n) \in D$, gde je $D = \{d_1, d_2, \dots, d_k\}$ skup delioca od n . Ovi grafovi su simetrični, imaju celobrojne sopstvene vrednosti i igraju značajnu ulogu u modeliranju kvantnih

mreža koje podržavaju savršen transfer (eng. perfect state transfer). U radu se prezentuju parovi integralnih cirkulantnih grafova sa jednakom energijom [138]. Osim toga su konstruisane familije od k hiperenergetskih nekospektralnih integralnih cirkulantnih grafova sa jednakom energijom i n čvorova, za svako fiksirano k . Takođe se prikazuju tri-ekvienergetski parovi nekospektralnih grafova, koji imaju jednaku energiju, Laplasovu energiju i energiju rastojanja [144] i daju eksplicitne formule za običnu energiju i energiju rastojanja unitarnih Kejljevih grafova (eng. unitary Cayley graphs) [140]. Verifikacija rezultata je vršena u programskom paketu MATHEMATICA.

U šestom poglavlju se proučava novi topološki Estradin indeks (eng. Estrada index)

$$EE(G) = \sum_{i=1}^n e^{\lambda_i}.$$

Ovu grafovsku invarijantu je uveo Ernesto Estrada 2000. godine [85], pri analizi preklapanja molekula proteina i mere centralnosti kompleksnih mreža. Proučavanje matematičkih osobina Estradinog indeksa je počelo nedavno. U radu se dokazuje da zvezda i put imaju najveći i najmanji Estradin indeks među svim stablima sa n čvorova, koristeći spektralne momente (odnosno brojeve šetnji u grafu). Takođe, među hemijskim grafovima se određuje jedinstveno stablo sa minimalnim Estradinim indeksom i podržava hipoteza za maksimum [151]. Uz to, analizira se broj ograničenih puteva u celobrojnoj mreži koji se sastoje od koraka $(1, 1)$ i $(1, -1)$ i ne seku prave $y = m$ i $y = -k$, i koriguje se Teorema 3.2 iz [193]. Analogno se definiše Laplasov Estradin indeks (eng. Laplacian Estrada index), koristeći Laplasove sopstvene vrednosti [155]. Kako su Estradin indeks linijskog grafa i Laplasov Estradin indeks usko povezani, određuju se ekstremalna stabla sa najmanjom i najvećom vrednošću $LEE(G)$.

Sedmo poglavlje je posvećeno stepen-rastojanje indeksu (eng. degree-distance), koji se definiše kao

$$DD(G) = \sum_{u,v \in V} (deg(u) + deg(v)) \cdot d(u, v).$$

Ovu težinsku modifikaciju Wienerovog indeksa su uveli Dobrynin i Kochetova [81], i nezavisno Gutman pod terminom Šulcov indeks [101]. U nizu radova određeni su grafovi sa minimalnim i maksimalnim stepen-rastojanje indeksom, kao i asimptotske granice za grafove sa datim brojem čvorova i dijametrom. Posebna pažnja je posvećena unicikličnim i bicikličnim grafovima. U radu se prikazuju ekstremalni uniciklični grafovi sa fiksiranom dužinom ciklusa i time se uvodi novi pristup u razmatranju invarijante $DD(G)$. Takođe, kompletno se rešava i hipoteza iz [238] vezana za maksimum kod bicikličnih grafova. Stepen-rastojanje indeks se analizira na parcijalnim kockama (koje uključuju stabla, benzenoidne sisteme, itd.) i prezentuje se linearan algoritam za računanje ove invarijante kod parcijalnih kocki [148].

U osmom poglavlju se analizira Omega polinom i uvodi novi Cluj–Niš super indeks. Skup naspramnih ili topološki paralelnih grana u okviru iste zatvorene oblasti planarnog grafa formiraju trake koje se nazivaju naspramne trake ili *ops* (eng. opposite strips). Ako je $m(G, s)$ broj *ops* traka dužine s , tada je Omega polinom (eng. Omega polynomial) je definisan sa [69]

$$\Omega(G, x) = \sum_s m(G, s) \cdot x^s,$$

za opisivanje cikličnih molekularnih struktura, naročito onih koje su povezane sa nanostrukturama. U ovom delu se navode teoretski aspekti ovog polinoma i *ops* traka u obliku puteva i ciklusa, sa ilustrativnim primerima na Platonovim telima [73]. Diskriminativna sposobnost topoloških mera je presudna u strukturalnoj karakterizaciji mreža (odnosi se na istraživanje njihove snage diskriminacije koja pokazuje koliko se mogu razlikovati neizomorfne mreže). U pogledu biološke i hemijske analize grafova, visoko diskriminativna mera je jako poželjna, jer se tada mogu otkriti manje strukturne promene unutar date mreže. U ovom delu, diskriminativna snaga novog super indeksa (koji

je baziran na matricama omotača i polinomima) je testirana na molekularnim i sintetičkim strukturama. Kao rezultat, novi deskriptor može jedinstveno razlikovati grafove u reprezentativnom skupu grafova. S obzirom na činjenicu da je većina postojećih topoloških grafovskih invarijanti degenerativna, novi Cluj–Niš indeks je dobra polazna tačka za dalja istraživanja u kontekstu mrežne analize. Posebno naglašavamo da će samo oni indeksi sa malom složenosti izračunavanja imati potencijal da se primenjuju za analizu kompleksnih sistema.

Distribuirane mreže (eng. distributed networks) sa bar jednim hamiltonovim ciklusom su proširenja mreža sa strukturom prstena i intenzivno se koriste u dizajniranju i implementaciji lokalnih mreža i u paralelnoj arhitekturi računara. Inspirisani jednim od otvorenih problema u preglednom članku Bermonda i drugih [22], u devetom poglavlju se predlaže algoritam za konstrukciju hamiltonovih grafova sa n čvorova, maksimalnim stepenom Δ i dijametrom $O(\log n)$ (za svako n i Δ). Broj grana u grafovima je asimptotski ograničen sa $(2 - \frac{1}{\Delta-1} - \frac{(\Delta-2)^2}{(\Delta-1)^3})n$. Specijalno, konstruišemo familiju hamiltonovih grafova sa dijametrom najviše $2\lfloor \log_2 n \rfloor$, maksimalnim stepenom 3 i najviše $1 + 11n/8$ grana. Na kraju se prezentuju eksperimentalni rezultati i predlažu dalji pravci istraživanja.

U desetom poglavlju se daju izvorni kod Householder-ove metode za određivanje sopstvenih vrednosti, kod za energiju integralnih cirkulantnih grafova i pregled korišćenog softvera u disertaciji.

U zaključku prezentujemo najznačajnije doprinose i sumiramo rezultate ove doktorske disertacije. Takođe predlažemo dalje pravce istraživanja i nekoliko hipoteza iz spektralne i hemijske teorije grafova.

Glava 2

Osnovni pojmovi i primene

2.1 Formalne definicije

Na početku dajemo neke osnovne definicije iz teorije grafova (pratimo knjige [47, 50, 97, 105, 246]).

Definicija 2.1.1 Graf G (eng. graph) je uređeni par (V, E) , gde je $E \subseteq \binom{V}{2}$ (skup svih dvoelementnih podskupova skupa V). Elementi skupa V se zovu čvorovi (eng. vertex), a elementi skupa E grane (eng. edge) grafa G . Graf $G = (V, E)$ je usmeren ili digraf, ako su grane usmerene tj. $e = u \rightarrow v$. Multigraf je specijalna vrsta grafa, kada je dozvoljeno više različitih grana koje spajaju dva čvora, kao i grane koje spajaju čvor sa samim sobom.

U ovom radu se bavimo samo neorijentisanim grafovima bez petlji i višestrukih grana (prosti grafovi).

Definicija 2.1.2 Dva čvora grafa u i v su susedna ako su spojena granom $e = uv$. Pod okolinom čvora $v \in V$ grafa $G = (V, E)$ (eng. neighborhood) podrazumeva se skup $N(v) = \{u \in V : uv \in E\}$ suseda čvora v . Stepen čvora v (eng. degree) je broj suseda čvora v , $\deg(v) = |N(v)|$. Najmanji stepen grafa G je $\delta = \min_{v \in V} \deg(v)$, a najveći stepen grafa G je $\Delta = \max_{v \in V} \deg(v)$.

Definicija 2.1.3 Graf $G' = (V', E')$ je podgraf (eng. subgraph) grafa $G = (V, E)$, ako važi $V' \subseteq V$ i $E' \subseteq E \cap \binom{V'}{2}$. Graf $G' = (V', E')$ je indukovani podgraf (eng. induced subgraph) grafa $G = (V, E)$, ako važi $V' \subseteq V$ i $E' = E \cap \binom{V'}{2}$.

Iako sasvim logične pojmove puta, ciklusa i rastojanja između čvorova, definisaćemo precizno.

Definicija 2.1.4 Šetnja (eng. walk) W dužine k u grafu G je niz $v_0, e_1, v_1, e_2, v_2, \dots, e_k, v_k$ čvorova i grana tako da je $e_i = v_{i-1}v_i$ za $i = 1, 2, \dots, k$. Čvorovi v_0 i v_k su krajnji čvorovi šetnje W . Šetnja je zatvorena ukoliko je $v_0 = v_k$. Staza (eng. trail) je šetnja u kojoj se nijedna grana ne ponavlja. Put (eng. path) je šetnja u kojoj se nijedan čvor ne ponavlja. Ciklus (eng. cycle) je zatvorena staza u kojoj se nijedan čvor ne ponavlja, izuzev prvog i poslednjeg.

Čvorovi u i v grafa G su povezani ako u G postoji put čiji su krajnji čvorovi baš u i v . Za graf G kažemo da je *povezan* (eng. connected) ako su svaka dva njegova čvora povezana - u suprotnom je graf nepovezan i može se podeliti na komponente povezanosti.

Definicija 2.1.5 Ako su čvorovi u i v grafa G povezani, tada je rastojanje $d(u, v)$ od čvora u do čvora v jednako dužini najkraćeg puta između čvorova u i v . Ekscentricitet čvora v je jednak maksimalnom rastojanju od v do svih ostalih čvorova $\varepsilon(v) = \max_{u \in V} d(u, v)$. Dijametar grafa G je najveće rastojanje između neka dva čvora grafa $D(G) = \max_{u, v \in V} d(u, v)$, dok se radijus grafa G definiše kao najmanji ekscentricitet među čvorovima $r(G) = \min_{v \in V} \varepsilon(v)$.

Čvorovi minimalnog ekscentriciteta formiraju centar grafa. Stablo ima jedan ili dva centralna čvora (u drugom slučaju govorimo o bicentru). Tada važi

$$D(T) = \begin{cases} 2r(T) - 1 & \text{ako } T \text{ ima bicentar} \\ 2r(T) & \text{ako } T \text{ ima centar.} \end{cases}$$

Graf G je r -regularan, $r \in N$, ako je stepen svakog čvora jednak r , tj. $\delta = \Delta = r$. *Kompletan graf* sa n čvorova (eng. complete graph) je graf K_n , $n \in N$, sa skupom čvorova $\{1, 2, \dots, n\}$, i za svako $1 \leq i, j \leq n$ važi $\{i, j\} \in E$. Graf $G = (V, E)$ je *bipartitan* (eng. bipartite graph) ako postoji particija $\{A, B\}$ skupa čvorova $V = A \cup B$, $A \cap B = \emptyset$, tako da za svaku granu $e \in E$ važi da ona spaja čvor iz A sa čvorom iz B . Graf G je *planaran* (eng. planar) ako se može nacrtati u ravni, tako da se nikoje dve grane ne seku.

Definicija 2.1.6 *Uniju grafova* $G_1 = (V_1, E_1)$ i $G_2 = (V_2, E_2)$ definišemo kao graf $G_1 \cup G_2 = (V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2)$. *Spajanje* (eng. join) grafova $G_1 \vee G_2$ se dobija od grafa $G_1 \cup G_2$, tako što spojimo granom svaki čvor iz grafa G_1 sa svakim čvorom iz G_2 . *Komplement* \overline{G} grafa $G = (V, E)$ je graf $\overline{G} = (V, \binom{V}{2} \setminus E)$, dakle on sadrži tačno one grane koje graf G nema.

Definicija 2.1.7 *Neka je* G *prost graf*, $v \in V$ *proizvoljan čvor* i $e = uv$ *proizvoljna grana*. Graf $G' = G - v$ je dobijen brisanjem čvora v i svih grana koje su susedne sa njim. Graf $G - e$ dobijamo kada iz grafa G uklonimo granu $e = uv$.

Definicija 2.1.8 *Povezan graf bez ciklusa naziva se stablo* (eng. tree). *Graf koji ne sadrži cikluse, tj. graf čija je svaka komponenta povezanosti stablo, naziva se šuma* (eng. forest). *Čvor stepena 1 u grafu* G *naziva se list ili viseći čvor* (eng. leaf ili pendant vertex).

Teorema 2.1.9 *Sledeći uslovi su ekvivalentni za graf* T *sa* n *čvorova:*

- (i) T je povezan graf i ne sadrži cikluse;
- (ii) T je povezan graf i ima $n - 1$ granu;
- (iii) T ne sadrži cikluse i ima $n - 1$ granu;
- (iv) T ne sadrži cikluse, dok $T + e$ sadrži tačno jedan ciklus za svako $e \in \binom{V}{2} \setminus E$;
- (v) Za svaki par čvorova $u, v \in V$, postoji tačno jedan put između u i v u grafu T ;
- (vi) T je povezan graf, koji izbacivanjem bilo koje grane postaje nepovezan.

Stabla imaju višestruku primenu u različitim oblastima nauke (pri parsiranju, kompresiji, za sortiranje i pretraživanje podataka). Svako stablo možemo nacrtati, tako što fiksiramo koren stabla, a zatim crtamo sve njegove direktne susede u sledećem nivou, pa onda susede na rastojanju 2 u sledećem nivou i tako dalje. Ovo se radi algoritmom pretrage u širinu (eng. Breadth First Search). Kako do svakog čvora postoji jedinstven put od korena, dubinu stabla definišemo kao najveće rastojanje od korena do ostalih čvorova. Vrlo važna struktura podataka u programiranju je korensko binarno stablo, gde svaki čvor ima najviše dva potomka.

Definicija 2.1.10 *Razapinjuće stablo* $T = (V, E')$ (eng. spanning tree) je podgraf grafa $G = (V, E)$, koji je stablo i sadrži sve čvorove i neke njegove grane, tj. $E' \subseteq E$.

Lema 2.1.11 *Neka je* T *stablo sa najvećim stepenom* $\Delta \geq 2$. *Tada* T *sadrži bar* Δ *listova.*

Za dva grafa sa istim brojem čvorova, koji su povezani "na isti način" kažemo da su izomorfna (eng. isomorphic).

Definicija 2.1.12 Grafovi G i H sa skupom čvorova $V = \{1, 2, \dots, n\}$ su izomorfni, ako postoji permutacija tj. bijekcija $p : V \rightarrow V$ čvorova V , tako da je $(u, v) \in E(G)$ ako i samo ako je $(p(u), p(v)) \in E(H)$. Tada pišemo $G \cong H$.

Definicija 2.1.13 Graf je unicikličan ako je povezan i sadrži tačno jedan ciklus, odnosno $n + 1$ granu. Graf je bicikličan ako je povezan i sadrži tačno dva ciklusa, odnosno $n + 2$ grane.

Sada ćemo definisati još neke složenije grafovske invarijante.

Definicija 2.1.14 Graf G je k -povezan, ako ne postoji skup od $k - 1$ čvorova čijim se uklanjanjem graf raspada na nekoliko komponenti (odnosno čvorna povezanost je $\geq k$). Čvor $v \in V$ grafa G se naziva artikulacioni čvor (eng. articulation vertex) ako $G - v$ ima više komponenti povezanosti od G . Grana $e \in E$ grafa G se naziva most (eng. bridge), ako $G - e$ ima više komponenti povezanosti od G .

Prema tome, povezani graf je 1-povezan, a 2-povezani graf (eng. biconnected graph) ne sadrži artikulacioni čvor.

Definicija 2.1.15 Skup čvorova S u grafu G je nezavisan, ako nikoja dva čvora iz S nisu povezana granom. Broj nezavisnosti $\alpha(G)$ je maksimalna veličina nezavisnog skupa grafa G .

Definicija 2.1.16 Uparivanje M je skup nesusednih grana grafa G – nikoje dve grane ne dele zajednički čvor. Maksimalno uparivanje je uparivanje sa najvećim brojem grana, dok je uparivajući broj upravo veličina maksimalnog uparivanja. Čvor v je uparen ako je incidentan sa granom koja je u uparivanju; inače je čvor neuparen. Čvor je perfektno uparen ako je uparen u svim maksimalnim uparivanjima grafa G .

Linearni algoritam za konstruisanje najvećeg uparivanja u stablu je grabljiv i zasnovan na matematičkoj indukciji. Naime, uzmemo proizvoljan list v i uparimo ga sa njegovim roditeljem w . Oba čvora uklonimo iz stabla i preostali deo rešavamo indukcijom. Za više detalja o implementaciji videti [43]. Lako se pokazuje da ukoliko stablo ima savršeno uparivanje, tada je ono jedinstveno.

Definicija 2.1.17 Hromatski broj grafa G je najmanji broj boja $\chi(G)$ potrebnih da se oboje čvorovi grafa G , tako da nikoja dva susedna čvora nemaju istu boju – odnosno najmanja vrednost χ , za koju je graf χ -obojiv. Klika broj grafa G predstavlja veličinu najvećeg kompletnog podgraфа grafa G i označava se sa $\omega(G)$.

Iz definicije direktno sledi nejednakost $\chi(G) \geq \omega(G)$.

2.2 Spektralna teorema

Tehnike iz teorije grupa i linearne algebre su nezamenljive u proučavanju strukture i enumeracije grafova.

Definicija 2.2.1 Sopstvena vrednost (eng. eigenvalue) matrice A je realan broj λ , ako matična jednačina

$$A \cdot \mathbf{x} = \lambda \cdot \mathbf{x}$$

ima netrivialno rešenje, koje nazivamo sopstveni vektor (eng. eigenvector). Sopstvene vrednosti grafa su sopstvene vrednosti matrice susedstva.

Spektar grafa (eng. graph spectrum) je skup sopstvenih vrednosti matrice susedstva, zajedno sa njihovim algebarskim višestrukostima. Skup svih sopstvenih vektora operatora A za sopstvenu vrednost λ , zajedno sa nula vektorom, u oznaci V_λ , naziva se sopstveni potprostor za λ . Višestrukost za sopstvenu vrednost λ je jednaka $n - \text{rang}(\lambda I - A)$. Ako su različite sopstvene vrednosti matrice A takve da važi $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_k$, a njihove višestrukosti $m(\lambda_1), m(\lambda_2), \dots, m(\lambda_k)$, tada spektar grafa označavamo sa:

$$\text{Spec}_G = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \dots & \lambda_k \\ m(\lambda_1) & m(\lambda_2) & \dots & m(\lambda_k) \end{pmatrix}$$

Sopstvene vrednosti $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ su nule karakterističnog polinoma (eng. characteristic polynomial) matrice A

$$P(x; A) = \det(xI - A) = (-1)^n \det(A - xI) = \prod_{i=1}^n (x - \lambda_i).$$

Kako je $P(x; A)$ moničan polinom sa celobrojnim koeficijentima, sve njegove racionalne nule su celobrojne – pa su sopstvene vrednosti matrice susedstva ili iracionalne ili celobrojne. U radu ćemo označavati sa $P(x; G)$ karakteristični polinom matrice susedstva grafa G . Ako je dat moničan polinom, vrlo je teško odrediti da li je on karakterističan polinom nekog grafa. Dva grafa su *kospektralna* ako njihove matrice susedstva imaju iste sopstvene vrednosti. Kospektralni grafovi ne moraju da budu izomorfni, ali su izomorfni grafovi uvek kospektralni.

Teorema 2.2.2 *Slične matrice A i B imaju iste karakteristične polinome. Obrat ne važi.*

Teorema 2.2.3 (Spektralna teorema) *Realna simetrična matrica A ima samo realne sopstvene vrednosti i n ortonormalnih sopstvenih vektora.*

Sledeća teorema (eng. Courant-Fischer Theorem), iako vrlo jednostavna je jedan od alata koji ćemo najčešće koristiti.

Teorema 2.2.4 (Rejljev odnos (eng. Rayleigh quotient)) *Neka su $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_k$ neke sopstvene vrednosti realne simetrične matrice A sa odgovarajućim ortonormiranim sopstvenim vektorima $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_k$. Tada za svaku nenula linearnu kombinaciju $\mathbf{y} = \sum_{i=1}^k a_i \mathbf{x}_i$, važi Rejljev odnos:*

$$\lambda_1 \geq \frac{\mathbf{y}^\top \mathbf{A} \mathbf{y}}{\mathbf{y}^\top \mathbf{y}} \geq \lambda_k$$

Jednakost važi ako i samo ako je \mathbf{y} sopstveni vektor koji odgovara λ_1 ili λ_k , respektivno.

Dokaz. Kako su vektori \mathbf{x}_i ortonormirani, važi $\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j = \delta_{ij}$.

$$\mathbf{y}^\top \mathbf{y} = \left(\sum_{i=1}^k a_i \mathbf{x}_i \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^k a_i \mathbf{x}_i \right) = \sum_{i=1}^k a_i^2.$$

$$\mathbf{y}^\top \mathbf{A} \mathbf{y} = \left(\sum_{i=1}^k a_i \mathbf{x}_i \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^k A \cdot a_i \mathbf{x}_i \right) = \left(\sum_{i=1}^k a_i \mathbf{x}_i \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^k a_i \lambda_i \mathbf{x}_i \right) = \sum_{i=1}^k \lambda_i a_i^2.$$

Iz poslednjih jednakosti sledi:

$$\lambda_1 = \frac{\sum_{i=1}^k \lambda_i a_i^2}{\sum_{i=1}^k a_i^2} \geq \frac{\sum_{i=1}^k \lambda_i a_i^2}{\sum_{i=1}^k \lambda_i} = \frac{\mathbf{y}^\top \mathbf{A} \mathbf{y}}{\mathbf{y}^\top \mathbf{y}} \geq \frac{\sum_{i=1}^k \lambda_k a_i^2}{\sum_{i=1}^k \lambda_i} = \lambda_k,$$

gde važi znak jednakosti ako i samo ako je $a_i = 0$, kada god je $\lambda_i \neq \lambda_1$ odnosno $\lambda_i \neq \lambda_k$ za levu ili desnu stranu. ■

Teorema 2.2.5 (Teorema o preplitanju) Neka je A realna simetrična matrica. Matrica A' se sastoji od prvih $n - 1$ kolona i prvih $n - 1$ vrsta matrice A . Ako su sopstvene vrednosti za A i A' redom $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ i $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_{n-1}$, tada važi nejednakost:

$$\lambda_1 \geq \mu_1 \geq \lambda_2 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \lambda_{n-1} \geq \mu_{n-1} \geq \lambda_n.$$

Teorema 2.2.6 (Teorema Peron-Frobenijusa) Neka je $A = [a_{ij}]$ ireducibilna simetrična nenegativna matrica dimenzija $n \times n$. Ako je $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ spektar matrice A , tada važi:

- (i) $\lambda_1 > 0$,
- (ii) Odgovarajući sopstveni vektor za λ_1 ima sve strogo pozitivne komponente,
- (iii) $\lambda_1 \geq |\lambda_i|$ za $i = \overline{2, n}$,
- (iv) λ_1 je prosta sopstvena vrednost,
- (v) $\lambda_n = -\lambda_1$ ako i samo ako se A svodi na formu (B je kvadratna matrica)

$$\begin{bmatrix} 0 & B^\top \\ B & 0 \end{bmatrix}.$$

2.3 Matrica susedstva i Laplasova matrica

Grafovi se obično predstavljaju grafički crtanjem tačke za svaki čvor i linije između dva čvora koji su susedni. Postoji mnogo načina da se graf predstavi u memoriji računara. Struktura podataka koja se koristi zavisi od osobina grafa i algoritma koji primenjujemo. Teoretski se mogu razlikovati dinamičke i matricne strukture, ali se u praksi koriste u kombinaciji. Ukoliko se koristi *lista suseda* (eng. neighbor list), tada za svaki čvor v čuvamo listu čvorova koji su susedni sa njim. Ukoliko se radi o *matrici susedstva* (eng. adjacency matrix) - tada se koristi matrica A dimenzija $n \times n$, gde je n broj čvorova u grafu. Element a_{ij} je jednak broju grana koje polaze iz čvora i , a završavaju se u čvoru j . Kod težinskih grafova na polju (i, j) se nalazi težina grane koja povezuje čvorove i i j . Ako je graf prost i neusmeren, matrica je simetrična sastavljena samo od 0 i 1, a na glavnoj dijagonali se nalaze nule.

Teorema 2.3.1 U prostom grafu G , broj puteva dužine k koji spajaju čvorove v_i i v_j jednak je elementu $a_{ij}^{(k)}$, tj. elementu na poziciji (i, j) u matrici A^k .

Definicija 2.3.2 Linijski graf (eng. line graph) $\mathcal{L}(G)$ je multigraf koji za čvorove ima skup grana grafa G , a dva čvora e i f iz $\mathcal{L}(G)$ su povezana ako i samo ako su grane e i f susedne u grafu G .

Teorema 2.3.3 Za svaku sopstvenu vrednost μ_k matrice $L(G)$ važi nejednakost:

$$0 \leq \mu_k \leq \max_{(v_i v_j) \in E} [deg(v_i) + deg(v_j)] = M.$$

Dokaz. Ako je $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]^\top$, tada važi:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^\top L(G) \mathbf{x} &= \mathbf{x}^\top D(G) \mathbf{x} - \mathbf{x}^\top A(G) \mathbf{x} = \sum_{i=1}^n deg(v_i) \cdot x_i^2 - 2 \sum_{(v_i v_j) \in E} x_i x_j \\ &= \sum_{(v_i v_j) \in E} (x_i - x_j)^2 \geq 0. \end{aligned}$$

Dakle, matrica $L(G)$ je nenegativno semidefinitna. Sada za sopstvenu vrednost μ matrice L dobijamo $\lambda \mathbf{x}^\top \mathbf{x} = \mathbf{x}^\top L \mathbf{x} \geq 0$, pa za $\mathbf{x} \neq 0$ sledi $\mu \geq 0$.

Neka je C incidentna matrica dimenzija $n \times m$, za koju važi $c_{ij} = 1$ ako i samo ako je čvor v_i susedan sa granom e_j , a inače 0. Tada važi:

$$C \cdot C^\top = D(G) + A(G) \quad \text{i} \quad C^\top \cdot C = 2I + A(\mathcal{L}(G)).$$

Grana $v_i v_j$ je susedna sa tačno $\deg(v_i) + \deg(v_j) - 2$ drugih grana. Sve sopstvene vrednosti matrice A su manje ili jednake od maksimalne sume po vrsti apsolutnih vrednosti elemenata, tj.

$$\mu \leq \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|.$$

Prema tome, sopstvene vrednosti matrice $A(\mathcal{L}(G))$ su manje ili jednake od $M-2$. Po prethodnoj lemi, matrice CC^\top i $C^\top C$ imaju iste nenula sopstvene vrednosti, pa zaključujemo da njihove sopstvene vrednosti pripadaju segmentu $[0, M]$. Kao posledicu dobijamo da su sopstvene vrednosti matrice linijskog grafa $A(\mathcal{L}(G))$ ograničene sa -2 i $M-2$.

Sada orijentišimo grane grafa G , tako što u svakoj koloni matrice C zamenimo jednu jedinicu sa -1 . Za dobijenu matricu C važi:

$$C \cdot C^\top = D(G) - A(G) \quad \text{i} \quad C^\top \cdot C = 2I + A(\mathcal{L}(G)),$$

gde je $A(\mathcal{L}(G))$ matrica formirana zamenom nekih jedinica sa -1 kod matrice $A(\mathcal{L}(G))$. Nijedna sopstvena vrednost ove matrice $A(\mathcal{L}(G))$ nije veća od $M-2$, zbog sličnog uslova kao i za $A(\mathcal{L}(G))$. Zato su sopstvene vrednosti matrica $C \cdot C^\top$ i $C^\top C$ ograničene odozgo brojem M . Dakle, sopstvene vrednosti matrice $L(G) = D(G) - A(G)$ su manje ili jednake od M , što je i trebalo dokazati. ■

Za vektor $\mathbf{x} = [1, 1, \dots, 1]^\top$ dobijamo da je $L\mathbf{x} = 0$, pa je najmanja sopstvena vrednost Laplasove matrice $\mu_n = 0$. Višestrukost ove nule u spektru je jednaka broju povezanih komponenti grafa G . Proizvod svih Laplasovih sopstvenih vrednosti je jednak $\det L = 0$, dok je zbir svih Laplasovih sopstvenih vrednosti po Vietovim formulama jednak $\sum_{i=1}^n \mu_i = 2m$.

2.4 PageRank i EdgeRank algoritam

Najveća sopstvena vrednost grafa se naziva spektralni radijus ili indeks grafa. Vektor koji odgovara najvećoj sopstvenoj vrednosti grafa (Peronov vektor) je baza za *PageRank* algoritam koji koristi Google, <http://www.google.com/>, pri pretraživanju. Akademsko citiranje radova se primenilo na Web, uglavnom kao prebrojavanje linkova koji vode do određene stranice. Ovo daje aproksimaciju o kvalitetu ili važnosti neke stranice. PageRank produbljuje ovu ideju tako što ne broji linkove od svih stranica podjednako, nego to radi uz normalizaciju broja stranica koje polaze iz jednog čvora. Algoritam je razvijen na Stanford Univerzitetu u Americi 1995. godine [29].

Pretpostavimo da na stranicu A ukazuju linkovi T_1, T_2, \dots, T_n i da je parametar d faktor otkaza između 0 i 1. Neka je N ukupan broj stranica, i neka je $C(A)$ broj linkova koji odlaze iz čvora A . Tada se rang stranice A računa po formuli:

$$PR(A) = \frac{1-d}{N} + d \left(\frac{PR(T_1)}{C(T_1)} + \frac{PR(T_2)}{C(T_2)} + \dots + \frac{PR(T_n)}{C(T_n)} \right).$$

PageRank formira funkciju raspodele na skupu stranica, ali se vrši normalizacija zbog numeričke stabilnosti. PageRank vrednosti stranica se mogu izračunati prostim iterativnim algoritmom i odgovaraju komponentama u Peronovom vektoru matrice susedstva Web-a. Takođe, možemo dovoljno precizno izračunati PageRank za preko 100 miliona stranica za nekoliko minuta na prosečnom personalnom računaru.

Ovaj algoritam je zasnovan na modelu "slučajnog surfera", koji polazi od neke stranice u Webu i prelazi direktnim linkovima sa stranice na stranicu. Verovatnoća da će osoba nastaviti surfovanje

u svakom koraku upravo predstavlja faktor otkaza d (obično se uzima $d = 0.85$). U ovom slučaju rang stranica predstavlja upravo verovatnoću da se surfer nađe na zadatoj stranici. Google koristi uniformnu raspodelu za linkove kod svake stranice.

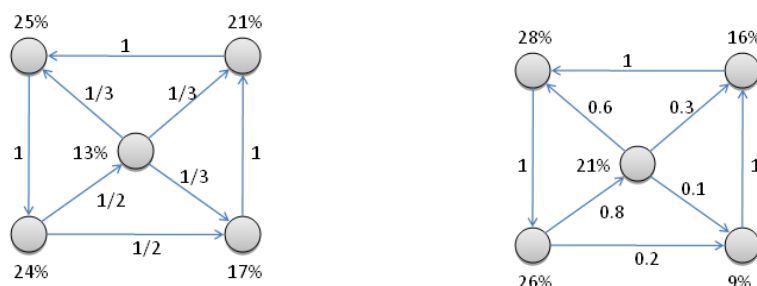
Model slučajnog surfera je aproksimacija modela "stvarnog surfera", jer Google nema pristupa istoriji stranica svakog korisnika. EdgeRank algoritam koji je patentirao distribuirani pretrživač Wowd, <http://www.wowd.com/>, koristi ovaj model uz i to pomoću sledećih parametara

- verovatnoća početka surfovanja sa određene stranice (ukupan broj direktnih poseta ove stranice),
- verovatnoća završavanja surfovanja na određenoj stranici;
- verovatnoća praćenja određenog linka sa stranice.

U ovom algoritmu, težinu grane AB aproksimira sa

$$e(A, B) = \frac{c(A, B)}{\sum_{T \in N(A)} c(A, T)},$$

gde $c(A, B)$ označava broj klikova korisnika sa stranice A ka stranici B . Izračunavanje rešenja ovog matičnog sistema je slično kao i kod PageRank algoritma (vidi Sliku 2.1).



Slika 2.1: Primer PageRank i EdgeRank raspodela verovatnoća.

2.5 Problem balansiranja opterećenja i integralni grafovi

U ovoj sekciji ćemo prezentovati neke argumente za primenu integralnih grafova kod balansiranja opterećenja (eng. load balancing) u multiprocesorima.

Primitimo da svaka celobrojna sopstvena vrednost dozvoljava bazu koja se sastoji od celobrojnih sopstvenih vektora (videti [44]), odnosno za integralne grafove postoji integralna baza sopstvenih vektora za ceo prostor. Dakle, u integralnim grafovima problem balansiranja opterećenja za multiprocesore (baziran na spektralnim tehnikama) može se izvršavati u celobrojnoj aritmetici. Ova mogućnost je napomenuta u [45], a ovde je više razrađujemo.

Prvo ćemo opisati problem opterećenja u nekim detaljima. Pretpostavimo da je multiprocesorski sistem modeliran integralnim grafom G . Čvorovi grafa G odgovaraju procesorima, dok grane predstavljaju linkove između procesora. Posao koji se treba izvršiti u multiprocesorskom sistemu je podeljen na delove koji su dodeljeni određenim procesorima za obradu. Drugim rečima, ceo posao se sastoji od broja elementarnih jedinica (modula), tako da svaki procesor dobija neki broj jedinica za izvršavanje. Matematički, distribucija jedinica među procesorima se može posmatrati kao vektor \mathbf{x} čije su komponente nenegativni celi brojevi (težine čvorova grafa G).

Vektor \mathbf{x} se obično menja tokom izvršavanja posla u sistemu, jer su neke jedinice obrađene, dok nove jedinice dolaze. Naravno, bilo bi optimalno da broj jedinica koji je dodeljen svakom procesoru

bude jednak, tj. da vektor \mathbf{x} bude celobrojni umnožak jediničnog vektora \mathbf{j} . Kako ovo nije uvek moguće, razumno je da procesori sa više dodeljenih jedinica (ili sa većim opterećenjem) šalju neke jedinice susednim procesorima kako bi distribucija opterećenja bila uniformna. Ovo je takozvani *dinamički problem balansiranja opterećenja*, koji je veoma važan u upravljanju multiprocesorskim sistemima. Problem balansiranja opterećenja zahteva dizajniranje algoritama za prebacivanje jedinica među procesorima u cilju postizanja uniformne distribucije (videti [65] za više informacija o ovom problemu).

Mi ćemo prezentovati *ad hoc* algoritam za balansiranje opterećenja koji je baziran na sopstvenim vrednostima i sopstvenim vektorima matrice susedstva regularnog integralnog grafa. U ovoj fazi, mi ne tvrdimo da je naš algoritam bolji od postojećih, već samo želimo da istaknemo da računanje u celobrojnoj aritmetici može ponuditi neke prednosti.

Jedna ideja za generisanje *integralne baze sopstvenih vektora* (tj. baze koja se sastoji od sopstvenih vektora sa celobrojnim komponentama) se može uzeti iz teorije star particija grafa (videti [50], Poglavlje 7).

Definicija 2.5.1 *Neka je G graf sa n čvorova i m različitih sopstvenih vrednosti μ_1, \dots, μ_m . Particija $X_1 \cup \dots \cup X_m$ skupa čvorova $V(G)$ grafa G je star particija grafa G ako za svaki $i \in \{1, \dots, m\}$, μ_i nije sopstvena vrednost grafa $G - X_i$.*

Poznato je da za svaki graf postoji bar jedna star particija (polinomijalni algoritam za konstruisanje star particije je opisan u [49]). Dakle, predlažemo sledeći algoritam za generisanje integralnih sopstvenih vektora:

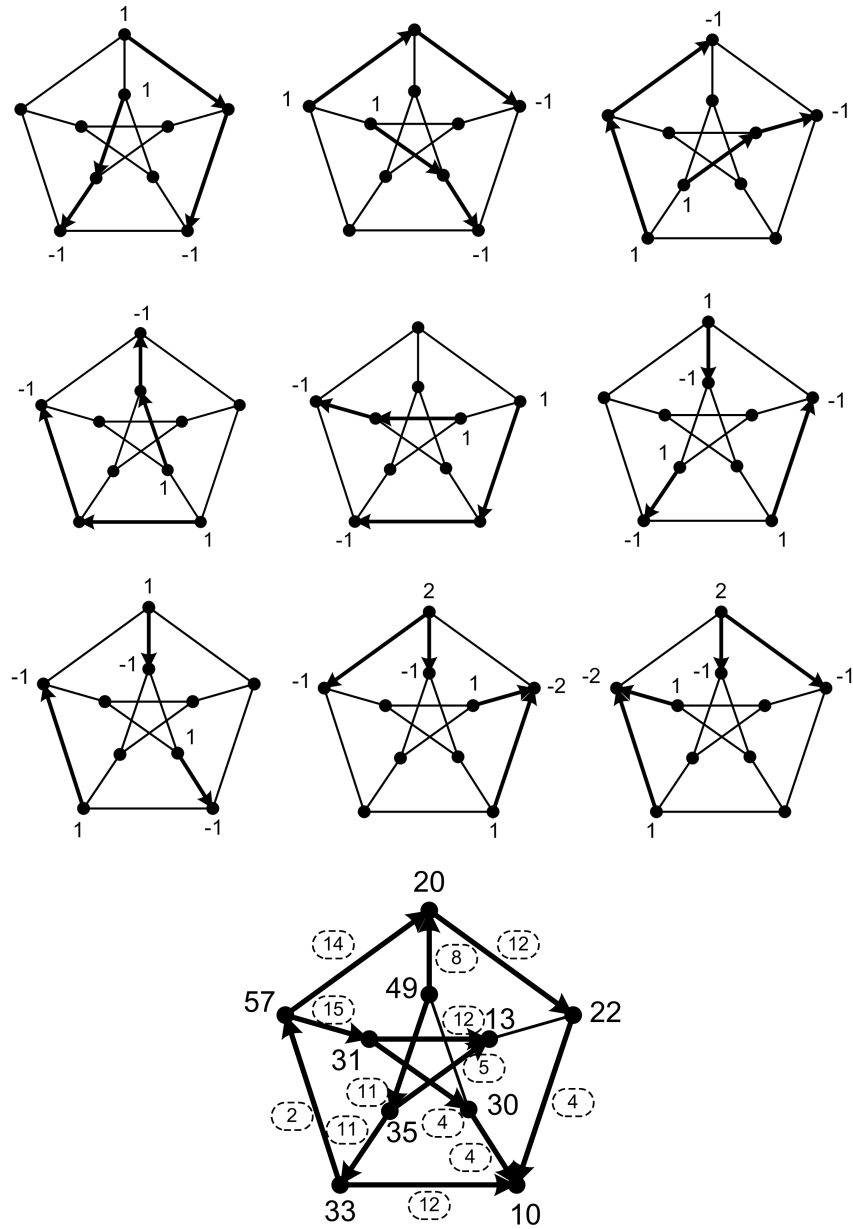
Algoritam 2.5.2 *Za svaki čvor $v \in X_i$ podgraf od G koji je indukovano skupom čvorova $(V(G) \setminus X_i) \cup \{v\}$ (nazovimo ga $H_i + v$) ima μ_i kao prostu sopstvenu vrednost. Ako je G integralan graf, tada je μ_i ceo broj i odgovarajući sopstveni vektor grafa $H_i + v$ se može odabrati da bude integralan (po Kramerovom pravilu za rešavanje sistema jednačina preko determinanti). Proširujući ga nulama za komponente koje odgovaraju čvorovima iz $X_i \setminus \{v\}$, dobijamo n -dimenzionalni integralni vektor koji je sopstveni vektor od G upravo za μ_i . Time dobijamo n linearno nezavisnih integralnih sopstvenih vektora grafa G .*

Konstruisani sopstveni vektori ne moraju biti međusobno ortogonalni u okviru fiksiranog sopstvenog prostora. Međutim, sopstveni vektori za vrednosti μ_i koji se dobijaju predloženim algoritmom imaju bar $k_i - 1$ komponenti koje su jednake 0, gde je k_i ($= |X_i|$) višestrukost sopstvene vrednosti μ_i . Nepotrebno je reći da integralne komponente, koje uključuju mnogo nula, predstavljaju prednost ovog pristupa. Konstruisana baza se može transformisati u ortogonalnu integralnu bazu, ali se u tom slučaju ukupan broj nenula komponenta u rezultujućoj bazi može povećati.

Pre formalnog opisivanja algoritma za balansiranje opterećenja, ilustrovaćemo ga na jednom primeru. Sve star particije Petersenovog grafa su date u [50] na stranama 180–181. Koristeći prvu star particiju, konstruisali smo 10 nezavisnih integralnih sopstvenih vektora Petersenovog grafa (videti Sliku 2.2).

Podsetimo se da je $3, 1^5, (-2)^4$ spektar Petersenovog grafa. Neka $\mathbf{v}_0, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_9$ predstavlja integralnu bazu sopstvenih vektora, gde je \mathbf{v}_0 jedinični (sve komponente jednake 1) vektor koji odgovara sopstvenoj vrednosti 3, dok su $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_5$ i $\mathbf{v}_6, \dots, \mathbf{v}_9$ sopstveni vektori koji odgovaraju vrednostima 1 i -2 , redom. Vektori $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_9$ su dati na prvih 9 kopija Petersenovog grafa na Slici 2.2. Suma komponenti u svakom vektoru je jednaka 0, jer su svi ortogonalni na jedinični vektor. Samo su nenula komponente ovih vektora označene na slici (oznake čvorova od 1, 2, \dots , 10 su iste za sve kopije Petersenovog grafa).

Pretpostavimo da *balansirajući protok* prikazuje kako premeštamo jedinice od izvora (čvorovi sa pozitivnim težinama) do ušća (čvorovi sa negativnim težinama) kako bi transformisali odgovarajući sopstveni vektor na 0-vektor.



Slika 2.2: Integralni sopstveni vektori i balansiranje opterećenja u Petersenovom grafu.

Za svaki sopstveni vektor $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_9$ jedan od najjednostavnijih balansirajućih protoka je prikazan direktnim zadebljanim granama koje povezuju nenula komponente odgovarajućeg sopstvenog vektora (videti prvih 9 kopija Petersenovog grafa na Slici 2.2). U našem primeru, vrednost protoka kroz sve zadebljane grane je jednaka 1 i smer je predstavljen strelicom. Kroz ostale grane nema protoka. Balansirajući protok se može posmatrati kao vektor čija je dimenzija jednaka broju grana u grafu G (15 u našem primeru), pod uslovom da su grane numerisane i da je svaka grana orijentisana u proizvoljnom (ali fiksiranom) smeru. Neka su $\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_9$ balansirajući protočni vektori koji odgovaraju sopstvenim vektorima $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_9$.

Deseta kopija Petersenovog grafa sa Slike 2.2 sadrži inicijalnu distribuciju opterećenja među procesorima koji su predstavljeni kao težine čvorova. Razlika između odgovarajućeg vektora opterećenja \mathbf{x} i vektora uniformne distribucije opterećenja $30\mathbf{v}_0$ se može predstaviti kao linearna kombinacija

$$\mathbf{x} - 30\mathbf{v}_0 = 11\mathbf{v}_1 + 4\mathbf{v}_2 + 5\mathbf{v}_3 - 12\mathbf{v}_5 - 5\mathbf{v}_8 - 3\mathbf{v}_9.$$

Rezultujući balansirajući protočni vektor \mathbf{b} je dat u istoj kopiji Petersenovog grafa (kao težine grana). On je dobijen korišćenjem gornje linearne kombinacije balansirajućih protočnih vektora $\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_9$, tj.

$$\mathbf{b} = 11\mathbf{b}_1 + 4\mathbf{b}_2 + 5\mathbf{b}_3 - 12\mathbf{b}_5 - 5\mathbf{b}_8 - 3\mathbf{b}_9.$$

Kada se protok realizuje, svaki čvor će imati opterećenje 30.

Time smo definisali protok opterećenja preko grana Petersenovog grafa. Određene količine protoka se posmatraju algebarski, imajući u vidu znak protoka. Naime, protok kroz granu ij na kraju ima nenegativnu vrednost koja se šalje ili iz čvora i u čvor j ili obrnuto.

Ovaj primer se može generalizovati za sve regularne integralne grafove, jer jedinični vektor uvek odgovara najvećoj sopstvenoj vrednosti; dakle suma komponenti ostalih sopstvenih vektora je takođe jednaka 0 (zbog ortogonalnosti sa jediničnim vektorom).

Algoritam 2.5.3 *Za dati integralni regularni graf G sa n čvorova i e grana, koristeći Algoritam 2.5.2 odredimo integralnu bazu sopstvenih vektora $B = \{\mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_{n-1}\}$ grafa G . Za svaki sopstveni vektor $\mathbf{v}_i \in B$ koji je različit od $\mathbf{v}_0 = \mathbf{j}$ (vektor sa svim komponentama 1), definišimo ad hoc e -dimenzionalan balansirajući protočni vektor \mathbf{b}_i . Predstavimo razliku vektora opterećenja i vektora uniformne distribucije kao linearnu kombinaciju vektora iz B . Formirajmo identičnu linearnu kombinaciju od balansirajućih protočnih vektora \mathbf{b}_i kako bi dobili konačan protok opterećenja \mathbf{b} .*

Primedba 2.5.4 *Kada biramo balansirajuće protočne vektore \mathbf{b}_i u prethodnom primeru, cilj nam je bio da minimizujemo broj grana sa nenula protokom, umesto ℓ_2 -optimalnost [65]. Međutim, mogu se koristiti različite baze sopstvenih prostora i za svaki sopstveni vektor balansirajući protok se može definisati na više načina. Ove činjenice ukazuju da bi trebalo dalje proučavati balansiranje opterećenja u integralnim grafovima i naći (ukoliko je moguće) optimalne planove protoka u odnosu na zadati kriterijum.*

Predloženi pristup preko sopstvenih vektora se može produžiti na povezujuće mreže koje su konstruisane primenom nekih operacija na jednostavnijim mrežama. Na primer, u [244] su proučavani direktan proizvod dva Petersenova grafa i slične kompleksne mreže. U proizvodu dva grafa, sopstveni vektori su Kronekerovi proizvodi sopstvenih vektora polaznih grafova (videti [47], strane 70–71), pa se i balansirajući protok može lako konstruisati.

Za neregularne grafove, koristićemo Laplasovu matricu umesto matrice susedstva. Podsetimo se da je matrica $L = D - A$ Laplasova matrica grafa G , gde je A matrica susedstva i D dijagonalna matrica sa stepenima čvorova. Sada je jedinični vektor sopstveni vektor koji odgovara najmanjoj Laplasovoj sopstvenoj vrednosti (u bilo kom grafu).

Graf je Laplasov integralni ako su sve njegove Laplasove sopstvene vrednosti integralne. Kod Laplasovih integralnih grafova, opet možemo konstruisati bazu sopstvenih vektora koja je celobrojna. Laplasovi integralni grafovi su generalno češći od integralnih grafova. Dalja analiza integralnih grafova i njihovih primena u topologiji multiprocesorskih sistema su obećavajuća tema za buduća istraživanja.

2.6 Spektralna klasterizacija podataka

Klasterizacija se bavi nalaženjem najboljeg načina za particionisanje čvorova grafa G . Spektralnu klasterizaciju je uveo Fiedler sedamdesetih godina, ali je metoda postala popularna posle 1990. godine [204]. Ovaj problem je usko povezan sa problemom minimalne bisekcije grafa

$$\min cut(A, B) = \frac{\mathbf{p}^\top L \mathbf{p}}{4}, \quad \mathbf{p}^\top \mathbf{j} = 0,$$

gde je \mathbf{p} vektor particija ($p_v = 1$ ako $v \in A$, inače $p_v = -1$), a \mathbf{j} vektor sa svim jedinicama. Podsetimo se da za proizvoljnu sopstvenu vrednost μ Laplasove matrice sa sopstvenim vektorom \mathbf{x} važi

$$\mu = \frac{\sum_{e=(u,v)} (x(u) - x(v))^2}{\sum_{v \in V} x^2(v)}.$$

Neka su sopstvene vrednosti Laplasove matrice $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_{n-1} \geq \mu_n = 0$. Tada se sopstvena vrednost $\mu = \mu_{n-1}$ naziva algebarska povezanost grafa G , a odgovarajući sopstveni vektor *Fiedlerov vektor*. Iz Teoreme o preplitanju sledi $\mu_{n-1}(G - e) \leq \mu_{n-1}(G)$.

Algoritam 1: Biparticija grafa G .

Ulaz: Graf G .

Izlaz: Biparticija (V^+, V^-) .

```

1 Izračunati sopstveni vektor  $\mathbf{x}$  koji odgovara sopstvenoj vrednosti  $\mu_{n-1}$  grafa  $G$ ;
2 for  $v \in V(G)$  do
3   | if  $\mathbf{x}[v] < 0$  then
4   |   | čvor  $v$  ide u particiju  $V^-$ ;
5   |   end
6   | else
7   |   | čvor  $v$  ide u particiju  $V^+$ ;
8   |   end
9 end
10 return  $(V^+, V^-)$ ;
```

Lema 2.6.1 *Neka je $G = (V, E)$ graf, tako da je $V^+ \cup V^-$ particija čvorova grafa G . Definišimo vektor kolonu \mathbf{x} tako da je $x_v = 1$ ako čvor v pripada V^+ , i $x_v = -1$ ako čvor pripada V^- . Tada je broj grana koje povezuju V^+ i V^- jednak*

$$\text{cut}(V^+, V^-) = \frac{1}{4} \mathbf{x}^\top \cdot L(G) \cdot \mathbf{x} = \frac{\sum_{e=(u,v)} (x_u - x_v)^2}{4}.$$

Pomoću ove leme možemo tražiti particiju grafa sa $|V^+| = |V^-|$ uz minimizaciju $\mathbf{x}^\top \cdot L(G) \cdot \mathbf{x}$. Iz Rejljevog odnosa sledi

$$\mu_{n-1} = \min_{\mathbf{x} \neq 0, \mathbf{x}^\top \mathbf{j} = 0} \frac{\mathbf{x}^\top \cdot L \cdot \mathbf{x}}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}}.$$

Ovaj metod se može poboljšati uzimanjem $n\alpha$ čvorova sa najvećim i $n\alpha$ čvorova sa najmanjim Fiedlerovim komponentama, gde je α zadati parametar, i računanjem minimalnog reza (odnosno maksimalnog protoka [43]) u novodobijenom grafu sa izvorom i ušćem. Ovakvi algoritmi se koriste za grupisanje prijatelja u socijalnim mrežama (npr. Facebook ili Twitter).

2.7 Grafovska energija

Kvantno-mehanička teorija je nastala početkom 20. veka. Erich Hückel je primenio ovu teoriju za objašnjavanje jedne od najvećih zagonetki organske hemije – izuzetno velike hemijske i termodinamičke stabilnosti benzena. Ta metoda je danas poznata pod imenom Hikelova molekularno-orbitalna teorija, a može se primeniti i na druge konjugovane π -elektronske sisteme.

Ukupna π -elektronska energija u HMO teoriji se dobija sabiranjem energija pojedinačnih π -elektrona. Zbog Paulijevog principa isključenja, samo dva π -elektrona imaju najnižu moguću energiju, koja je jednaka $\alpha + \lambda_1\beta$. Sledeća dva π -elektrona imaju energije $\alpha + \lambda_2\beta$, itd (α i β su parametri

iz aproksimacije Hamiltonovog operatora $H = \alpha I_n + \beta A$). Ako broj elektrona u j -toj molekularnoj orbitali označimo sa g_j , onda je ukupna π -elektronska energija jednaka

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

Budući da $\sum_{j=1}^n g_j$ označava ukupan broj elektrona n , jedini netrivialni deo izraza je $\sum_{j=1}^n g_j \lambda_j$. Ukupna energija nije direktno merljiva veličina, ali se može dovesti u vezu sa eksperimentalno dostupnim termohemijskim podacima, posebno sa entalpijom. Za ogromnu većinu konjugovanih molekula, sve vezivne orbitale su popunjene sa po dva π -elektrona, a prazne su sve antivezivne orbitale. Dakle, dobijamo sledeću aproksimaciju

$$\sum_{j=1}^n g_j \lambda_j = 2 \sum_{\lambda_j > 0} \lambda_j.$$

Sledeću definiciju energije je predložio Gutman [100].

Definicija 2.7.1 *Veličina $2 \sum_{\lambda_j > 0} \lambda_j$ se označava sa $E = E(G)$. Kako je zbir sopstvenih vrednosti grafa G jednak nuli, dobijamo alternativnu definiciju*

$$E(G) = \sum_{j=1}^n |\lambda_j|.$$

Do danas ima više od 200 radova koji se bave matematičkim i hemijskim osobinama grafovske energije. Kako je $E(G)$ simetrična funkcija svih sopstvenih vrednosti, ova definicija je doprinela da se mnogi matematičari počnu baviti energijom grafova. Još jedno težište istraživanja energije je zavisnost E od molekulske strukture (ili od strukture grafa).

U nastavku dajemo nekoliko interesantnih matematičkih rezultata o energiji grafova [30].

Teorema 2.7.2 (Coulsonova integralna formula) *Neka je G prost graf sa n čvorova, i neka je $P(G, \lambda)$ njegov karakteristični polinom. Tada važi*

$$E(G) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \left[n - \frac{i x P(G, ix)}{P(G, ix)} \right] dx.$$

Teorema 2.7.3 (McClelland granica) *Neka je G graf sa n čvorova i m grana. Tada važi $E(G) \leq \sqrt{2mn}$, sa jednakošću ako i samo ako je G graf bez grana ili su sve komponente grafa izomorfne sa P_2 .*

Teorema 2.7.4 *Ako je T stablo sa n čvorova, različito od zvezde S_n i puta P_n , tada važi*

$$E(S_n) < E(T) < E(P_n).$$

Napomenimo da uprkos intenzivnom istraživanju grafovima sa najvećom energijom u klasi svih grafova sa n čvorova, ovo pitanje i dalje ostaje otvoreno. U [177] autori su dokazali granicu

$$E(G) \leq \frac{n}{2}(1 + \sqrt{n}),$$

sa jednakošću ako i samo ako je G jako regularan graf sa parametrima $k = \frac{n+\sqrt{n}}{2}$, $\lambda = \frac{n+2\sqrt{n}}{4}$ i $\mu = \frac{n+2\sqrt{n}}{4}$. Ranije se verovalo da kompletan graf K_n ima najveću energiju $2n - 2$ među svim grafovima sa n čvorova. Godsil je početkom osamdesetih godina konstruisao primer grafa sa n čvorova i energijom većom od $2n - 2$. Tada su grafovi G sa $E(G) > 2n - 2$ nazvani *hiperenergetski* (eng. hyperenergetic). Gutman i drugi [103] su konstruisali hiperenergetske grafove za svako $n \geq 9$ uklanjanjem grana koje formiraju zvezdu iz K_n .

Nedavno je Nikiforov [198] generalizovao koncept grafovske energije za proizvoljnu matricu M – energija $E(M)$ je jednaka sumi singularnih sopstvenih vrednosti matrice M . Singularne sopstvene vrednosti realne (ne nužno kvadratne) matrice M su koreni sopstvenih vrednosti kvadratne matrice MM^\top , gde M^\top označava transponovanu matricu.

Glava 3

Laplasovi koeficijenti

Neka je $G = (V, E)$ prost graf sa $n = |V|$ čvorova i $m = |E|$ grana. Laplasov karakteristični polinom $P(L(G), \mu)$ grafa G je karakteristični polinom Laplasove matrice $L(G) = D(G) - A(G)$,

$$P(L(G), \mu) = \det(\mu I_n - L(G)) = \sum_{k=0}^n (-1)^k c_k \mu^{n-k}.$$

Laplasova matrica $L(G)$ ima nenegativne sopstvene vrednosti

$$n \geq \mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_{n-1} \geq \mu_n = 0.$$

Iz Vietovih formula,

$$c_k = \sigma_k(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1}) = \sum_{\substack{I \subseteq \{1, 2, \dots, n-1\}, \\ |I|=k}} \prod_{i \in I} \mu_i \quad (3.1)$$

je simetričan polinom reda $n - 1$. Posebno, $c_0 = 1$, $c_1 = 2n$, $c_n = 0$ i $c_{n-1} = n\tau(G)$, gde $\tau(G)$ predstavlja broj razapinjućih stabala grafa G [191]. Za un ciklične grafove koeficijent c_{n-1} je jednak n puta veličina ciklusa grafa G . Ako je G stablo, koeficijent c_{n-2} je jednak Wienerovom indeksu,

$$c_{n-2}(T) = W(T) = \sum_{u, v \in V} d(u, v),$$

dok je c_{n-3} jednak modifikovanom hiper-Wienerovom indeksu [104]. Wienerov indeks se smatra jednim od najkorišćenijih topoloških indeksa uz jake korelacije sa mnogim fizičkim i hemijskim osobinama molekularnih jedinjenja. Ogromna većina hemijskih primena Wienerovog indeksa se bavi acikličnim grafovima. Za najnovije rezultate videti [80, 252, 263].

Neka je $m_k(G)$ broj uparivanja grafa G sa tačno k nezavisnih grana. Na primer, $m_0(G) = 1$, $m_1(G) = |E(G)|$ i $m_k(G) = 0$ za $k > \frac{n}{2}$.

Energija grafa je parametar koji proizilazi iz Hikelovog molekularnog modela za totalnu π -elektron energiju i definiše se kao suma apsolutnih vrednosti sopstvenih vrednosti matrice susedstva grafa (za pregledni članak videti [103]). Energija stabla T se može izraziti pomoću Kulsonove integralne formule (eng. Coulson integral formula) kao

$$E(T) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{1}{x^2} \ln \left(1 + \sum_{k=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} m_k(T) \cdot x^{2k} \right) dx.$$

Činjenica da je $E(T)$ strogo monotono rastuća funkcija za svaki od brojeva uparivanja $m_k(T)$ uvodi kvazi-uređenje na skupu svih stabala kod merenja energije.

Neoznačena Laplasova matrica grafa G je definisana sa $Q(G) = D(G) + A(G)$ [47]. Matrica $Q(G)$ je realna matrica sa nenegativnim sopstvenim vrednostima $\mu'_1 \geq \mu'_2 \geq \dots \geq \mu'_n \geq 0$ (videti

[52, 53, 220] za više detalja). Gutman i drugi u [111] i [162] su nedavno uveli energiju incidencije $IE(G)$ grafa G , definisanu kao suma singularnih sopstvenih vrednosti matrice incidencije. Sledi

$$IE(G) = \sum_{k=1}^n \sqrt{\mu'_k}.$$

Modifikovana Laplasova energija grafa G [118], ili kratko LEL, je definisana na sledeći način:

$$LEL(G) = \sum_{k=1}^{n-1} \sqrt{\mu_k}.$$

Ovaj koncept je uveden u [184], gde je pokazano da LEL ima slične osobine kao molekularna energija grafova [100]. U [231] je pokazano da LEL odlično opisuje svojstva koja se najčešće pominju kod molekularnih deskriptora (oktanski broj, entropija, zapremina, AF parametar, tačka ključanja, tačka topljenja, logP). U skupu policikličnih aromatičnih hidrokarbona, LEL daje rezultate slične Randićevom indeksu i daleko bolje rezultate od Wienerovog indeksa.

Posebno, ako je G bipartitan graf, spektri matrica $Q(G)$ i $L(G)$ se podudaraju, i imamo $IE(G) = LEL(G)$. U [112] autori su ukazali na neke dalje relacije između IE i LEL , i dokazali gornje i donje granice za IE , uključujući i linijske grafove.

Stevanović i Ilić u [229] su posmatrali osobine Laplasovih koeficijenata unicykličnih grafova preko Kelmans-ove teoreme. Guo je u [104] prezentovao nekoliko uređenja stabala na osnovu Laplasovog spektralnog radijusa. Autori u [146] su generalizovali rezultate iz [183] i [245], koji su dokazali da je gusenica $C_{n,d}$ jedinstveno stablo sa n čvorova i dijametra d koje minimizuje Wienerov indeks (odnosno koeficijent c_{n-2}). X. D. Zhang i drugi u [259] su dokazali da $C_{n,d}$ ima minimalne Laplasove koeficijente samo za specijalne slučajeve $d = 3$ i $d = 4$, dok je Ilić u [139] dokazao tvđenje za sve $2 \leq d \leq n - 1$. U [142, 147] autori su prezentovali stabla sa minimalnim Laplasovim koeficijentima i fiksiranim brojem visećih čvorova ili uparivajućim brojem.

3.1 Glavne teoreme i problemi

Graf potpodele $S(G)$ grafa G se dobija umetanjem novih čvorova stepena dva na svaku granu grafa G . Zhou i Gutman [264] su dokazali sledeću relaciju:

Teorema 3.1.1 *Neka je G bipartitan graf sa n čvorova i m grana, i neka je $S(G)$ njegov graf potpodele. Tada važi*

$$P(S(G), \lambda) = \lambda^{m-n} P(L(G), \lambda^2).$$

Dokaz. Neka je skup čvorova grafa G $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ i skup grana $\{e_1, e_2, \dots, e_m\}$. Ako je B matrica incidencije grafa G , tada važi

$$B \cdot B^\top = D(G) + A(G) = L(G),$$

$$A(S(G)) = \begin{bmatrix} 0 & B \\ B^\top & 0 \end{bmatrix}.$$

Dalje sledi

$$P(S(G), \lambda) = \det(\lambda I_{n+m} - A(S(G))) = \det \begin{pmatrix} \lambda I_n & -B \\ B^\top & \lambda I_m \end{pmatrix} = \lambda^{m-n} \det(\lambda^2 I_n - BB^\top).$$

Kako je G bipartitan graf, matrice $D(G) + A(G)$ i $D(G) - A(G)$ imaju isti spektar, čime je teorema dokazana. ■

U slučaju acikličnih grafova, karakteristični polinom matrice susedstva zadovoljava sledeći identitet [47]

$$P(A(G), \lambda) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^k m_k(G) \lambda^{2n-k}.$$

Kombinovanjem ove relacije sa prethodnom teoremom sledi važna relacija:

$$c_k(T) = m_k(S(T)), \quad 0 \leq k \leq n. \quad (3.2)$$

Na osnovu ovog identiteta, Mohar [195], i Zhou i Gutman [264] su nezavisno dokazali da za svako stablo T sa n čvorova važi

$$c_k(S_n) \leq c_k(T) \leq c_k(P_n), \quad k = 0, 1, 2, \dots, n, \quad (3.3)$$

Laplasovi koeficijenti c_k se mogu izraziti u terminima struktura podstabala grafa G pomoću sledećeg rezultata Kelmans-a [165]. Neka je F razapinjuća šuma grafa G sa komponentama T_i , $i = 1, 2, \dots, k$, koje imaju n_i čvorova, i neka je $\gamma(F) = \prod_{i=1}^k n_i$.

Teorema 3.1.2 (Kelmans-ova teorema) *Laplasov koeficijent c_{n-k} grafa G je dat sa*

$$c_{n-k} = \sum_{F \in \mathcal{F}_k} \gamma(F),$$

gde je \mathcal{F}_k skup svih razapinjućih šuma grafa G sa tačno k komponenti.

Neka su T_1 i T_2 dva stabla sa n čvorova. Označimo sa r (odnosno s) najmanji (odnosno najveći) ceo broj takav da je $c_r(T_1) \neq c_r(T_2)$ (odnosno $c_s(T_1) \neq c_s(T_2)$). Dva parcijalna uređenja se mogu definisati na sledeći način. Ako je $c_r(T_1) < c_r(T_2)$, kažemo da je T_1 manje od T_2 i označavamo $T_1 \prec^1 T_2$. Ako je $c_s(T_1) < c_s(T_2)$, kažemo da je T_1 manje od T_2 i označavamo $T_1 \prec^2 T_2$. Sada možemo uvesti i relacije \prec_c i \preceq_c na skupu stabala sa n čvorova pomoću

$$G \preceq_c H \quad \Leftrightarrow \quad c_k(G) \leq c_k(H), \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

$$G \prec_c H \quad \Leftrightarrow \quad G \preceq_c H \text{ i } c_k(G) < c_k(H) \text{ za neko } 1 \leq k \leq n-1.$$

Nedavno je Mohar na svojoj stranici [194] postavio probleme o uređivanju stabala pomoću Laplasovih koeficijenata.

Problem 3.1.3 *Da li postoje dva stabla T_1 i T_2 sa n čvorova, tako da važi $T_1 \prec^1 T_2$ i $T_2 \prec^2 T_1$?*

Problem 3.1.4 *Da li postoje dva stabla T_1 i T_2 sa n čvorova, tako da važi $T_1 \prec^1 T_2$ i $T_1 \prec^2 T_2$, ali da postoji indeks i takav da je $c_i(T_1) > c_i(T_2)$?*

Problem 3.1.5 *Neka je \mathfrak{T}_n skup svih stabala sa n čvorova. Koliko veliki mogu biti lanci i antilanci stabala po parovima nekosppektralnih u Laplasovom smislu?*

Problem 3.1.6 *Neka je $U(T, T')$ skup svih stabala Z sa $n = |T| = |T'|$ čvorova, tako da Z majorira T i T' simultano. Za koja stabla T i T' skup $U(T, T')$ ima tačno jedan minimalni element, tj. kada su svi minimalni elementi iz $U(T, T')$ kospektralni?*

3.2 Uređenje stabala modifikovanom Laplasovom energijom

Stevanović je u [228] pokazao vezu između LEL energije i Laplasovih koeficijenata.

Teorema 3.2.1 *Neka su G i H dva grafa sa n čvorova. Ako $c_k(G) \leq c_k(H)$ važi za sve $k = 1, 2, \dots, n-1$ tada je $LEL(G) \leq LEL(H)$. Štaviše, ako važi stroga nejednakost $c_k(G) < c_k(H)$ za neko $1 \leq k \leq n-1$, tada važi $LEL(G) < LEL(H)$.*

Dokazaćemo da ova teorema ostaje na snazi, ali da je autorov dokaz netačan. Pratimo originalnu liniju dokaza iz [228], ali ispravljamo suštinsku relaciju (3.5).

Premestimo se na opštiju postavku problema i posmatrajmo sledeći otvoren skup u \mathbb{R}^n

$$\mathcal{X} = \{(x_1, x_2, \dots, x_n) : n > x_1 > x_2 > \dots > x_{n-1} > x_n > 0\}.$$

Neka \mathcal{C} označava skup koeficijenata polinoma koji imaju korene u \mathcal{X} ,

$$\begin{aligned} \mathcal{C} &= \{(c_1, c_2, \dots, c_{n-1}, c_n) : \exists (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathcal{X} \\ &P(x) = x^n - c_1 x^{n-1} + c_2 x^{n-2} - \dots + (-1)^{n-1} c_{n-1} x + (-1)^n c_n \\ &= (x - x_1)(x - x_2) \cdot \dots \cdot (x - x_n)\}. \end{aligned}$$

Neka je $F : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{C}$ bijekcija definisana Vietovim formulama (3.1). Ova funkcija predstavlja koeficijente polinoma iz \mathcal{C} preko korena polinoma iz \mathcal{X} . Kako je svaka koordinata vektorske funkcije F polinom, zaključujemo da je F neprekidna funkcija. Simetrični polinomi su neprekidno diferencijabilne funkcije, pa imamo

$$\frac{\partial c_k}{\partial x_j} = \sum_{\substack{j \in I \subseteq \{1, 2, \dots, n-1\}, \\ |I|=k}} \prod_{i \in I \setminus \{j\}} x_i. \quad (3.4)$$

Neka je $F^{-1} : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{X}$ inverzno preslikavanje od F . Jakobijan preslikavanja F je dat sa

$$J_F = \left[\frac{\partial c_i}{\partial x_j} \right]_{i,j=1,n} = \begin{bmatrix} \frac{\partial c_1}{\partial x_1} & \frac{\partial c_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial c_1}{\partial x_{n-1}} & \frac{\partial c_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial c_2}{\partial x_1} & \frac{\partial c_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial c_2}{\partial x_{n-1}} & \frac{\partial c_2}{\partial x_n} \\ \frac{\partial c_3}{\partial x_1} & \frac{\partial c_3}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial c_3}{\partial x_{n-1}} & \frac{\partial c_3}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial c_n}{\partial x_1} & \frac{\partial c_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial c_n}{\partial x_{n-1}} & \frac{\partial c_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

U [228] Stevanović ima sledeći identitet

$$\frac{\partial LEE}{\partial c_k} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial LEE}{\partial \mu_i} \cdot \frac{\partial \mu_i}{\partial c_k} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial LEE / \partial \mu_i}{\partial c_k / \partial \mu_i}. \quad (3.5)$$

To je netačno, pošto ne možemo koristiti činjenicu da su parcijalni izvodi $\frac{\partial \mu_i}{\partial c_k}$ i $\frac{\partial c_k}{\partial \mu_i}$ međusobno recipročni (c_k je funkcija od n promenljivih). Ovu grešku možemo ilustrovati i na primeru Laplasovog Estradinog indeksa [155, 262] koji je definisan sa

$$LEE(G) = \sum_{k=1}^n e^{\mu_k}.$$

Naime, izvod $\frac{\partial LEE}{\partial c_k}$ je strogo pozitivan, pošto je $\frac{\partial LEE}{\partial c_k} = e^{\mu_i} > 0$. Dakle, prema jednačini (3.5), ova funkcija je rastuća po svakoj koordinati c_k . Ovaj zaključak je očigledno netačan – iz nejednakosti (3.3) imamo $LEE(S_n) < LEE(P_n)$, a sa druge strane

$$LEE(P_n) = \sum_{k=1}^n e^{2+2 \cos \frac{k\pi}{n}} < e^n + 1 + (n-2)e = LEE(S_n),$$

pošto za $n > 5$ imamo $ne^4 < e^n$.

Greška se može ispraviti nalaženjem Jakobijana inverza F^{-1} . Neka je

$$\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2) \cdot \dots \cdot (x - x_n)$$

polinom sa n realnih različitih korena x_1, x_2, \dots, x_n . Sledeća teorema je glavni rezultat ove sekcije.

Teorema 3.2.2 *Jakobijan preslikavanja F^{-1} je jednak*

$$J_{F^{-1}} = \left[(-1)^{j-1} \frac{x_i^{n-j}}{\omega'(x_i)} \right]_{i,j=\overline{1,n}}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{x_1^{n-1}}{\omega'(x_1)} & -\frac{x_1^{n-2}}{\omega'(x_1)} & \dots & (-1)^{n-2} \frac{x_1}{\omega'(x_1)} & (-1)^{n-1} \frac{1}{\omega'(x_1)} \\ \frac{x_2^{n-1}}{\omega'(x_2)} & -\frac{x_2^{n-2}}{\omega'(x_2)} & \dots & (-1)^{n-2} \frac{x_2}{\omega'(x_2)} & (-1)^{n-1} \frac{1}{\omega'(x_2)} \\ \frac{x_3^{n-1}}{\omega'(x_3)} & -\frac{x_3^{n-2}}{\omega'(x_3)} & \dots & (-1)^{n-2} \frac{x_3}{\omega'(x_3)} & (-1)^{n-1} \frac{1}{\omega'(x_3)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \frac{x_n^{n-1}}{\omega'(x_n)} & -\frac{x_n^{n-2}}{\omega'(x_n)} & \dots & (-1)^{n-2} \frac{x_n}{\omega'(x_n)} & (-1)^{n-1} \frac{1}{\omega'(x_n)} \end{bmatrix}$$

Pre dokaza Teoreme 3.2.2, dokazaćemo nekoliko pomoćnih tvrđenja.

Lema 3.2.3 *Za svako $2 \leq i \leq n$ i $1 \leq j \leq n$ važi:*

$$\frac{\partial c_i}{\partial x_j} = c_{i-1} - x_j \cdot \frac{\partial c_{i-1}}{\partial x_j}.$$

Dokaz. Primitimo da iz jednakosti (3.4), $\partial c_i / \partial x_j$ je polinom stepena $i - 1$ od promenljivih $x_1, x_2, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_n$. Na desnoj strani imamo sumu proizvoda svih $(i - 1)$ -torki koje ne sadrže x_j . Ovaj skup možemo dobiti ako posmatramo skup svih $(i - 1)$ -torki i oduzmemo one koje sadrže x_j . ■

Lema 3.2.4 *Neka je $\omega(x)$ polinom sa realnim koeficijentima stepena n , koji ima realne različite nule x_1, x_2, \dots, x_n . Za svaki prirodni broj $0 \leq k \leq n - 2$ važi:*

$$\sum_{i=1}^n \frac{x_i^k}{\omega'(x_i)} = 0.$$

Dokaz. Posmatrajmo racionalnu funkciju $f(z)$ kompleksne promenljive z , definisane sa

$$f(z) = \frac{z^k}{\omega(z)}.$$

Poređenjem stepena dobijamo procenu $|f(z)| \leq \frac{C}{|z|^2}$ za neku konstantu C i dovoljno veliko $|z|$. Za integral po kružnici S_R radijusa R sa centrom u koordinatnom početku dobijamo

$$|I| = \left| \int_{S_R} f(z) dz \right| \leq \int_{S_R} |f(z)| dz \leq \int_{S_R} \frac{C}{|z|^2} dz = \frac{2\pi C}{R},$$

za dovoljno veliko R . Sa druge strane, koristeći Košijevu teoremu o reziduumima [215] dobijamo:

$$I = \int_{S_R} f(z) dz = 2\pi i \sum_{i=1}^n \text{Res}(x_i, f) = 2\pi i \sum_{i=1}^n \frac{x_i^k}{\omega'(x_i)}.$$

Dakle, za dovoljno veliki radijus R važi nejednakost:

$$\left| \sum_{i=1}^n \frac{x_i^k}{\omega(x_i)} \right| \leq \frac{C}{R}.$$

Uzimajući graničnu vrednost kada $R \rightarrow \infty$, tražena suma je jednaka nuli. ■

Lema 3.2.5 *Neka je $\omega(x)$ polinom sa realnim koeficijentima stepena n sa različitim realnim nulama x_1, x_2, \dots, x_n . Tada je*

$$\sum_{i=1}^n \frac{x_i^{n-1}}{\omega'(x_i)} = 1.$$

Dokaz. Posmatramo funkciju

$$f(z) = \frac{z^{n-1}}{\omega(z)} - \frac{1}{z} = \frac{z^n - \omega(z)}{z\omega(z)}.$$

Slično kao u dokazu prethodne teoreme imamo procenu $|f(z)| \leq \frac{C}{|z|^2}$. Koristeći osobinu aditivnosti integrala i

$$\int_{S_R} \frac{dz}{z} = \int_0^{2\pi} \frac{iRe^{i\phi} d\phi}{Re^{i\phi}} = 2\pi i,$$

dobijamo traženi rezultat. ■

Za $i \geq 1$ označimo sa $s_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$ stepenu sumu i -tog reda

$$s_i = \sum_{k=1}^n \frac{x_k^i}{\omega'(x_k)}.$$

Njutnovi identiteti [226] (takođe poznati kao Newton-Girard formule) daju relacije koje povezuju stepene sume i elementarne simetrične polinome,

$$k \cdot c_k = \sum_{i=1}^k (-1)^{i-1} c_{k-i} \cdot s_i. \quad (3.6)$$

Za $k > n$, po definiciji je $c_k = 0$. Već smo dokazali da je $s_0 = s_1 = \dots = s_{n-2} = 0$ i $s_{n-1} = 1$. Za $k = 2, \dots, n+1$, važi

$$(n+k-1)c_{n+k-1} = c_{n+k-2}s_1 - c_{n+k-3}s_2 + \dots + (-1)^{n-1}c_{k+1}s_{n-2} \\ + (-1)^{n-2}c_k s_{n-1} + (-1)^{n-1}c_{k-1}s_n + \dots + (-1)^{n+k-2}c_0 s_{n+k-1},$$

ili ekvivalentno

$$c_k \cdot s_{n-1} - c_{k-1} \cdot s_n + c_{k-2} \cdot s_{n+1} - \dots + (-1)^{k-1} \cdot c_1 \cdot s_{n+k-2} + (-1)^k \cdot s_{n+k-1} = 0. \quad (3.7)$$

3.2.1 Dokaz Teoreme 3.2.2 i Teoreme 3.2.1

Tvrđenje Teoreme 3.2.2 je ekvivalentno sa

$$J_F \cdot J_{F^{-1}} = J_{F^{-1}} \cdot J_F = I_n = [\delta_{i,j}]_{i,j=\overline{1,n}},$$

gde je I_n jedinična matrica reda n . Dakle, pokazaćemo sledeće jednakosti za svako $1 \leq i, j \leq n$,

$$\sum_{k=1}^n (-1)^{k-1} \frac{x_i^{n-k}}{\omega'(x_i)} \cdot \frac{\partial c_k}{\partial x_j} = \delta_{i,j} \quad (3.8)$$

$$\sum_{k=1}^n \frac{\partial c_i}{\partial x_k} \cdot \frac{x_k^{n-j}}{\omega'(x_k)} = (-1)^{j-1} \cdot \delta_{i,j}. \quad (3.9)$$

Definišimo polinome $\omega_i(x)$, $i = 1, 2, \dots, n$ sa

$$\omega_i(x) = (x - x_1)(x - x_2) \cdot \dots \cdot (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdot \dots \cdot (x - x_n).$$

Koristeći izvod proizvoda imamo

$$\omega'(x) = \sum_{i=1}^n \omega_i(x).$$

Dokaz relacije (3.8) sledi iz identiteta (slučaj $i = j$):

$$\begin{aligned} \omega'(x_i) &= \omega_i(x_i) \\ &= (x_i - x_1)(x_i - x_2) \cdot \dots \cdot (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdot \dots \cdot (x_i - x_n) \\ &= \frac{\partial c_1}{\partial x_i} \cdot x_i^{n-1} - \frac{\partial c_2}{\partial x_i} \cdot x_i^{n-2} + \frac{\partial c_3}{\partial x_i} \cdot x_i^{n-3} - \dots + (-1)^{n-2} \frac{\partial c_{n-1}}{\partial x_i} \cdot x_i + (-1)^{n-1} \frac{\partial c_n}{\partial x_i}. \end{aligned}$$

Za $i \neq j$, slično dobijamo

$$0 = \omega_j(x_i) = \sum_{k=1}^n (-1)^{k-1} x_i^{n-k} \cdot \frac{\partial c_k}{\partial x_j}.$$

Kako je prva vrsta u J_F jednaka $(1, 1, 1, \dots, 1)$, iz Leme 3.2.4 i Leme 3.2.5 sledi da je prva vrsta u proizvodu matrica $J_F \cdot J_{F^{-1}}$ upravo $(1, 0, 0, \dots, 0)$. Za vrste $i = 2, 3, \dots, n$ koristimo matematičku indukciju uz pomoć Leme 3.2.3,

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n \frac{\partial c_i}{\partial x_k} \cdot \frac{x_k^{n-j}}{\omega'(x_k)} &= \sum_{k=1}^n \left(c_{i-1} - x_k \cdot \frac{\partial c_{i-1}}{\partial x_k} \right) \cdot \frac{x_k^{n-j}}{\omega'(x_k)} \\ &= c_{i-1} \cdot \sum_{k=1}^n \frac{x_k^{n-j}}{\omega'(x_k)} - \sum_{k=1}^n \frac{\partial c_{i-1}}{\partial x_k} \cdot \frac{x_k^{n-j+1}}{\omega'(x_k)}. \end{aligned}$$

Za $j > 1$, ova suma je jednaka $-(-1)^{j-1} \delta_{i-1, j-1} = (-1)^j \delta_{i,j}$. Slučaj $j = 1$ moramo posmatrati nezavisno.

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n \frac{\partial c_i}{\partial x_k} \cdot \frac{x_k^{n-1}}{\omega'(x_k)} &= c_{i-1} s_{n-1} - \sum_{k=1}^n \frac{\partial c_{i-1}}{\partial x_k} \cdot \frac{x_k^n}{\omega'(x_k)} \\ &= c_{i-1} s_{n-1} - c_{i-2} s_n + \sum_{k=1}^n \frac{\partial c_{i-2}}{\partial x_k} \cdot \frac{x_k^{n+1}}{\omega'(x_k)}. \end{aligned}$$

Primenom ove zamene i puta i korišćenjem identiteta (3.7), dobijamo da je prvi element u i -toj vrsti jednak nuli. Time je induktivni dokaz relacije (3.9) završen. ■

Sada dajemo generalnu metodu za određivanje znaka specijalnih suma koje razmatramo. Neka je f bilo koja glatka funkcija i neka je

$$P(x) = c_0 x^{n-1} + c_1 x^{n-2} + \dots + c_{n-2} x + c_{n-1}$$

interpolacioni polinom za f u tačkama x_1, x_2, \dots, x_n stepena $n - 1$. Koristeći Lagranžovu interpolacionu teoremu sledi

$$P(x) = \sum_{i=1}^n f(x_i) \cdot \frac{(x - x_1)(x - x_2) \cdot \dots \cdot (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdot \dots \cdot (x - x_n)}{\omega'(x_i)}.$$

Suma

$$S = \sum_{i=1}^n \frac{f(x_i)}{\omega'(x_i)} = \sum_{i=1}^n \frac{P(x_i)}{\omega'(x_i)}$$

je jednaka koeficijentu uz najveći stepen u polinomu P . Iz Tejlorovog razvoja polinoma $P(x)$ dobijamo

$$S = \sum_{i=1}^n \frac{f(x_i)}{\omega'(x_i)} = c_1 = \frac{1}{(n-1)!} P^{(n-1)}(x).$$

Kako $f(x) - P(x)$ ima n realnih korena, po Rolovoj teoremi zaključujemo da $f^{(n-1)}(x) - P^{(n-1)}(x)$ ima bar jedan realan koren. Dakle, za neko ξ u intervalu koji sadrži sve x_i -ove imamo

$$S = \frac{1}{(n-1)!} f^{(n-1)}(\xi).$$

Ako funkcija $f^{(n-1)}(x)$ očuvava znak, možemo jedinstveno odrediti znak sume S .

Sada sledi dokaz Teoreme 3.2.1. Posmatrajmo otvoren skup u \mathbb{R}^{n-1}

$$\mathcal{M} = \{(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1}) : n > \mu_1 > \mu_2 > \dots > \mu_{n-1} > 0\}.$$

Neka \mathcal{C} predstavlja skup svih koeficijenata polinoma koji imaju korene u skupu \mathcal{M} ,

$$\begin{aligned} \mathcal{C} &= \{(c_1, c_2, \dots, c_{n-1}) : (\exists(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1}) \in \mathcal{M}) \\ &P(x) = x^{n-1} - c_1 x^{n-2} + c_2 x^{n-3} - \dots + (-1)^{n-1} c_{n-1} \\ &= (x - \mu_1)(x - \mu_2) \dots (x - \mu_{n-1})\}. \end{aligned}$$

Modifikovana Laplasova energija $LEL : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$, definisana kao

$$LEL(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1}) = \sqrt{\mu_1} + \sqrt{\mu_2} + \dots + \sqrt{\mu_{n-1}} + 0,$$

se može posmatrati kao implicitna funkcija koeficijenata iz \mathcal{C} . Po definiciji, za svako k , $1 \leq k \leq n$, dobijamo

$$\frac{\partial LEL}{\partial c_k} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial LEL}{\partial \mu_i} \cdot \frac{\partial \mu_i}{\partial c_k} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{2\sqrt{\mu_i}} \cdot \frac{\partial \mu_i}{\partial c_k}.$$

Dakle,

$$\frac{\partial LEL}{\partial c_k} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{\mu_i}} \cdot (-1)^{k-1} \cdot \frac{\mu_i^{n-1-k}}{\omega'(\mu_i)} = \frac{(-1)^{k-1}}{2} \sum_{i=1}^n \frac{\mu_i^{n-1-k}}{\omega'(\mu_i) \sqrt{\mu_i}}.$$

Neka je $f(x) = x^{n-k-\frac{3}{2}}$ i po prethodnim razmatranjima potrebno je odrediti znak $(n-2)$ -og izvoda funkcije f .

$$f^{(n-2)}(x) = \left(x^{n-k-\frac{3}{2}}\right)^{(n-1)} = \left(n-k-\frac{3}{2}\right) \left(n-k-\frac{5}{2}\right) \dots \left(\frac{3}{2}-k\right) x^{1/2-k}.$$

To znači da je znak funkcije $f^{(n-2)}(x)$ upravo jednak $(-1)^{k-1}$, i najzad

$$\frac{\partial LEL}{\partial c_k} > 0.$$

Sledi da je modifikovana Laplasova energija strogo rastuća funkcija na \mathcal{C} po svakoj koordinati.

Do sada smo posmatrali samo slučaj sa različitim sopstvenim vrednostima. Ostaje da posmatramo zatvorenje skupa \mathcal{M}

$$\overline{\mathcal{M}} = \{(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1}) : n \geq \mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_{n-1} \geq 0\}.$$

Njegova slika preko jednačina (3.1) je skup $\overline{\mathcal{C}}$ koeficijenata polinoma koji ima korene u $\overline{\mathcal{M}}$. Prethodni dokaz se ne može primeniti na skupu $\overline{\mathcal{M}}$, jer F nije injektivno preslikavanje, ali se lako može proširiti koristeći neprekidnost.

Neka su date dve tačke x_1 i x_2 iz $\overline{\mathcal{M}} \setminus \mathcal{M}$ takve da je $c_k(x_1) < c_k(x_2)$ za neko $k \in \{1, 2, \dots, n-1\}$, $c_j(x_1) = c_j(x_2)$ za $j \neq k$ i $LEL(x_1) > LEL(x_2)$. Funkcije c_k i LEL su neprekidne, pa možemo naći disjunktne sfere

$$B_1(x_1, \varepsilon) = \{x \mid \|x - x_1\| < \varepsilon\} \quad \text{i} \quad B_2(x_2, \varepsilon) = \{x \mid \|x - x_2\| < \varepsilon\}$$

tako da važi $c_k(x) < c_k(y)$ i $LEL(x) > LEL(y)$ za sve $x \in B_1(x_1, \varepsilon)$ i $y \in B_2(x_2, \varepsilon)$. Skup $\overline{\mathcal{M}} \setminus \mathcal{M}$ ima nepraznu unutrašnjost, pa postoje tačke $x' \in B_1(x_1, \varepsilon) \cap \mathcal{M}$ i $y' \in B_2(x_2, \varepsilon) \cap \mathcal{M}$ tako da važi $c_k(x') < c_k(y')$ i $LEL(x') > LEL(y')$. Površni $c_j(x) = C_j$ (za $j \neq k$ i neke konstante C_j) mogu biti proizvoljno blizu površi koje prolaze kroz tačke x_1 i x_2 zbog neprekidnosti. Dakle, sledi da takve površi imaju zajedničkih tačaka sa $B_1(x_1, \varepsilon)$ i $B_2(x_2, \varepsilon)$ – i možemo odabrati x' i y' tako da važi $c_j(x') = c_j(y')$ za svako $j \neq k$.

Ovo je kontradikcija sa prvim delom dokaza zbog $x', y' \in \mathcal{M}$. Najzad, modifikovana Laplasova energija LEL , koja je strogo rastuća na \mathcal{C} po svakoj koordinati, mora takođe biti strogo rastuća i na zatvorenu $\overline{\mathcal{C}}$. ■

3.3 Transformacije i zvezdolika stabla

Sledeća teorema je dokazana u [146].

Teorema 3.3.1 *Neka je w čvor netrivialnog povezanog grafa G . Za nenegativne brojeve p i q , neka $G(p, q)$ predstavlja graf dobijen dodavanjem dva viseća puta $P = wv_1v_2 \dots v_p$ i $Q = wu_1u_2 \dots u_q$ dužina p i q , redom. Ako je $p \geq q \geq 1$, tada*

$$c_k(G(p, q)) \leq c_k(G(p+1, q-1)), \quad k = 0, 1, 2, \dots, n.$$

Mi ćemo primeniti ove transformacije na zvezdolika stabla. U [91, 94] autori su pokazali da su zvezdolika stabla određena Laplasovim spektrom, odnosno da ne postoje dva stabla sa jednakim Laplasovim koeficijentima.

Definicija 3.3.2 *Zvezdoliko stablo $S(n_1, n_2, \dots, n_k)$ je stablo sastavljeno od korena v i visećih puteva P_1, P_2, \dots, P_k dužina n_1, n_2, \dots, n_k koji polaze od čvora v . Ukupan broj čvorova stabla $S(n_1, n_2, \dots, n_k)$ je $n = n_1 + n_2 + \dots + n_k + 1$. Zvezdoliko stablo $BS_{n,k}$ je balansirano ako svi putevi imaju skoro jednake dužine, odnosno $|n_i - n_j| \leq 1$ za svako $1 \leq i < j \leq k$.*

Neka su $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ i $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ dva niza brojeva dužine n . Kažemo da x majorira y i pišemo $x \succ y$ ako elementi ovih nizova zadovoljavaju sledeće uslove:

- (i) $x_1 \geq x_2 \geq \dots \geq x_n$ i $y_1 \geq y_2 \geq \dots \geq y_n$,
- (ii) $x_1 + x_2 + \dots + x_k \geq y_1 + y_2 + \dots + y_k$, za svako $1 \leq k < n$,
- (iii) $x_1 + x_2 + \dots + x_n = y_1 + y_2 + \dots + y_n$.

Teorema 3.3.3 *Neka su p i q nizovi dužine $k \geq 2$, tako da je $p \prec q$. Tada*

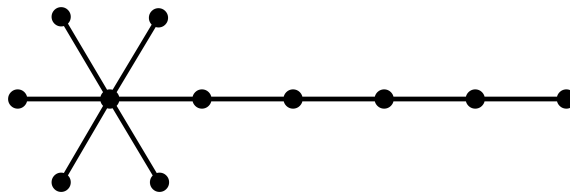
$$S(p) \preceq_c S(q). \tag{3.10}$$

Dokaz. Neka n označava broj čvorova u stablima $S(p)$ i $S(q)$, $n = p_1 + p_2 + \dots + p_k = q_1 + q_2 + \dots + q_k$. Dokaz ćemo izvesti matematičkom indukcijom po veličini niza k . Za $k = 2$, direktno primenjujemo transformaciju iz Teoreme 3.3.1 na stablo $S(q)$ nekoliko puta, sve dok ne dobijemo stablo $S(p)$.

Dalje pretpostavimo da nejednakost (3.10) važi za sve dužine koje su manje ili jednake od k . Ako postoji indeks $1 \leq m < k$ takav da je $p_1 + p_2 + \dots + p_m = q_1 + q_2 + \dots + q_m$, tada možemo primeniti induktivnu hipotezu na delove $S(q_1, q_2, \dots, q_m)$ i $S(q_{m+1}, q_{m+2}, \dots, q_k)$, gde u svakom koraku smanjujemo sve Laplasove koeficijente i dobijamo stabla $S(p_1, p_2, \dots, p_m)$ i $S(p_{m+1}, p_{m+2}, \dots, p_k)$.

Inače, imamo stroge nejednakosti $p_1 + p_2 + \dots + p_m < q_1 + q_2 + \dots + q_m$ za svako $1 \leq m < k$. Sada možemo transformisati stablo $S(p_1, p_2, \dots, p_k)$ u $S(p_1 + 1, p_2, \dots, p_{r-1}, p_r - 1, p_{r+1}, \dots, p_k)$, gde je r najveći indeks takav da je $p_r \neq 1$. Uslov $p \prec q$ je očuvan, i dalje možemo nastaviti istim postupkom gde u svakom koraku simultano smanjujemo sve Laplasove koeficijente. ■

Metla $B_{n,\Delta}$ je stablo koje se sastoji od zvezde $S_{\Delta+1}$ i puta dužine $n - \Delta - 1$ koji je susedan sa jednim listom zvezde (videti Sliku 3.1). U [182] je dokazano da među stablima sa maksimalnim stepenom jednakim Δ , metla $B_{n,\Delta}$ jedinstveno minimizuje najveću sopstvenu vrednost matrice susedstva. Takođe u [228] je dokazano da među stablima sa ograničenim stepenom Δ , metla ima minimalni Wienerov indeks i modifikovanu Laplasovu energiju. U [251] je dokazano da metla ima minimalnu energiju među stablima sa fiksiranim dijametrom.



Slika 3.1: Metla $B_{11,6}$.

Kanonski primer majorizacije je

Posledica 3.3.4 Neka je $T = S(n_1, n_2, \dots, n_k)$ zvezdoliko stablo sa n čvorova i k visećih puteva. Tada za svako k važi

$$c_k(B_{n,k}) \geq c_k(T) \geq c_k(BS_{n,k}).$$

Leva jednakost važi ako i samo ako je $T \cong B_{n,k}$, dok desna jednakost važi ako i samo ako je $T \cong BS_{n,k}$.

Posledica 3.3.5 Neka je $T \not\cong B_{n,\Delta}$ proizvoljno stablo sa n čvorova i maksimalnim stepenom Δ . Tada

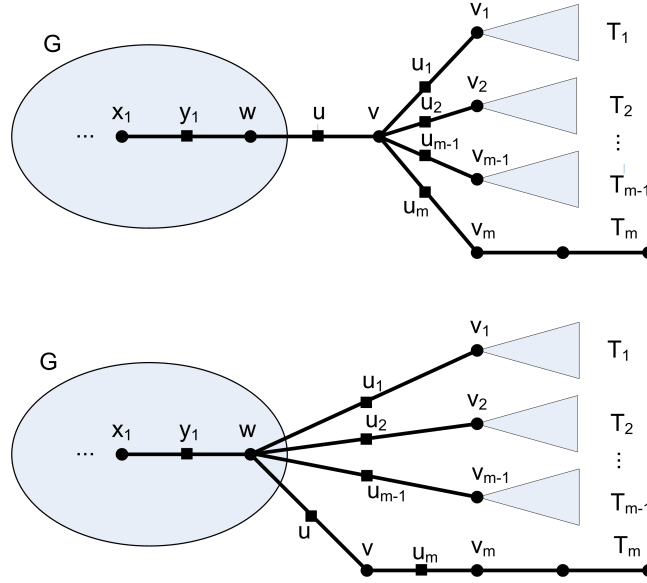
$$c_k(B_{n,\Delta}) \geq c_k(T), \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

Gornju nejednakost možemo proširiti korišćenjem Teoreme 3.3.1,

$$c_k(S_n) = c_k(B_{n,n-1}) \leq c_k(B_{n,n-2}) \leq \dots \leq c_k(B_{n,3}) \leq c_k(B_{n,2}) = c_k(P_n),$$

za svako $k = 0, 1, \dots, n$. Sledi da metla $B_{n,3}$ ima druge najveće Laplasove koeficijente među stablima sa n čvorova.

Definicija 3.3.6 Neka je T proizvoljno stablo sa centralnim čvorom kao korenom. Neka je v čvor stepena $m+1$ koji nije centar stabla T , tako da je w roditelj čvora v i T_1, T_2, \dots, T_m su podstabla ispod v sa korenima v_1, v_2, \dots, v_m . Pretpostavimo da je stablo T_m zapravo put. Novo stablo T' formiramo brisanjem grana $vv_1, vv_2, \dots, vv_{m-1}$ iz T i dodavanjem novih grana $wv_1, wv_2, \dots, wv_{m-1}$. Kažemo da je T' dobijeno ρ transformacijom od stabla T .



Slika 3.2: ρ transformacija stabla T na čvoru v .

Ova transformacija očuvava broj listova u stablu T i ne smanjuje dijametar.

Teorema 3.3.7 Za ρ transformaciju $T' = \rho(T, v)$ i $0 \leq k \leq n$ važi

$$c_k(T) \geq c_k(T'). \quad (3.11)$$

Dokaz. Koeficijenti c_0, c_1, c_{n-1} i c_n su konstantni za sva stabla sa n čvorova, što je već i rečeno ranije. U daljem dokazu pretpostavimo da je $2 \leq k \leq n - 2$. Neka je G deo stabala T i T' , koji se dobija brisanjem čvorova visećih stabala T_1, T_2, \dots, T_m (vidi Sliku 3.2).

Neka su u i u_1, u_2, \dots, u_m čvorovi potpodele grana vw i vv_1, vv_2, \dots, vv_m , redom. Konstruisaćemo injekciju iz skupa \mathcal{M}' k -uparivanja stabla $S(T')$ u skup \mathcal{M} k -uparivanja stabla $S(T)$. Podelimo skup k -uparivanja potpodele grafa $S(T')$ na dva disjunktna podskupa \mathcal{M}'_1 i \mathcal{M}'_2 . Skup \mathcal{M}'_1 sadrži k -uparivanja bez grana iz skupa $\{wu_1, wu_2, \dots, wu_{m-1}\}$, dok skup \mathcal{M}'_2 sadrži sva ostala k -uparivanja iz $S(T')$. Analogno, podelimo skup k -uparivanja grafa potpodele $S(T)$ na dva disjunktna podskupa \mathcal{M}_1 i \mathcal{M}_2 . Skup \mathcal{M}_1 sadrži sva k -uparivanja bez grana iz skupa $\{vu_1, vu_2, \dots, vu_{m-1}\}$, dok skup \mathcal{M}_2 sadrži sva ostala k -uparivanja iz $S(T)$.

Postoji očigledna bijekcija između skupova \mathcal{M}'_1 i \mathcal{M}_1 , uzimanjem istih k -uparivanja (pošto su razložena stabla izomorfna). Primetimo da u ovom slučaju nismo uzimali grane iz skupa $\{wu_1, wu_2, \dots, wu_{m-1}\}$ u k -uparivanjima potpodele stabla $S(T')$ i grane iz $\{vu_1, vu_2, \dots, vu_{m-1}\}$ u k -uparivanjima potpodele stabla $S(T)$.

Neka je dato k -uparivanje $M' \in \mathcal{M}'_2$ koje sadrži granu wu_i . Konstruisaćemo odgovarajuće uparivanje $M \in \mathcal{M}_2$, tako da je $vu_i \in M$. Neka put T_m ima q čvorova. Graf potpodele stabla T' se razlaže na sledeće delove

$$S(T_1) \cup \{u_1v_1\}, S(T_2) \cup \{u_2v_2\}, \dots, S(T_i), \dots, S(T_{m-1}) \cup \{u_{m-1}v_{m-1}\}, \quad P_{2q+2}, S(G) \setminus \{w\},$$

dok se graf potpodele stabla T razlaže na

$$S(T_1) \cup \{u_1v_1\}, S(T_2) \cup \{u_2v_2\}, \dots, S(T_i), \dots, S(T_{m-1}) \cup \{u_{m-1}v_{m-1}\}, \quad P_{2q}, S(G) \cup \{uw\}.$$

Zaključujemo da su sve povezane komponente, osim zadnje dve, međusobno izomorfne. Dakle, imamo trivijalnu bijekciju u okviru svake od tih komponentata. Ako je $vu \in M'$, tada stavimo da grana wu pripada M . Po uzimanju ovih grana u $(k-1)$ -uparivanjima, imamo identične komponente

u oba grafa i trivijalnu bijekciju. Sada smo redukovali problem na sledeći: broj k -uparivanja u uniji $S(G) \cup P_{2q}$ je veći ili jednak od broja k -uparivanja u grafu $(S(G) \setminus w) \cup P_{2q+1}$.

Posmatrajmo najduži put u grafu $S(G)$ koji polazi iz čvora w i završava se u nekom čvoru grafa $S(G)$. Neka je ovaj put $wy_1x_1y_2x_2 \dots y_px_p$, gde su y_1, y_2, \dots, y_p čvorovi potpodele grana stepena 2. Iz pretpostavke, ovaj put je duži od puta T_m , ili ekvivalentno $p \geq q$. Jednakost se dostiže ako i samo ako su oba čvora w i v centri stabla T .

Ako grana vu_m ne pripada uparivanju M' , možemo konstruisati odgovarajuće uparivanje M koristeći iste grane kao iz M' . Time ne uzimamo ni jednu granu u M koja je susedna sa w u grafu potpodele $S(G)$. Ako uzmemo neku od ovih dodatnih grana, različitih od wy_1 , dobićemo strogu nejednakost u (3.11) – zato što ima više uparivanja u $S(T)$ nego u $S(T')$.

Dakle, pretpostavimo da grana vu_m pripada M' i neka grana wy_1 pripada uparivanju M . Postoje dva slučaja razmatranjem grane y_1x_1 . Ako $y_1x_1 \notin M'$, tada uzimamo iste grane iz M' u skup M , kao u prethodnom slučaju. Inače, grana y_1x_1 pripada uparivanju M' i tada uzimamo granu $u_mv_m \in M$.

Korišćenjem ovog algoritma, dobijamo problem manjih dimenzija. Kako je $p \geq q$, dolazimo do grafova $S(G') \cup P_2$ i $(S(G') \setminus x_i) \cup P_3$, gde je koren grafa $S(G')$ čvor x_i . Ako prva grana puta P_3 pripada uparivanju M' , tada stavimo $x_iy_{i+1} \in M$. Ako $y_{i+1}x_{i+1}$ ne pripada M' , tada imamo injekciju; inače $y_{i+1}x_{i+1} \in M'$ i uzimamo jedinu granu iz P_2 u M . Sada je očigledno da je broj k -uparivanja grafa $S(G') \setminus \{x_i, y_{i+1}\}$ veći ili jednak od broja k -uparivanja u $S(G') \setminus \{x_i, y_{i+1}, x_{i+1}\}$.

Ovim se završava induktivni dokaz nejednakosti $c_k(T) \geq c_k(T')$. ■

3.4 Stabla sa datim brojem listova i uparivajućim brojem

U ovom delu posmatramo stabla sa n čvorova i k listova. Za $k = 2$ put P_n je jedinstveno stablo sa tačno dva lista, dok je za $k = n - 1$ zvezda S_n jedinstveno stablo sa $n - 1$ listova. U daljim razmatranjima, pretpostavićemo da je $3 \leq k \leq n - 2$.

Teorema 3.4.1 *Među stablima sa n čvorova i $2 \leq k \leq n - 1$ listova, balansirano zvezdoliko stablo $BS_{n,k}$ ima minimalne Laplasove koeficijente c_i , za svako $i = 0, 1, \dots, n$.*

Dokaz. Neka je T korensko stablo sa n čvorova i k listova. Ako postoji više čvorova stepena većeg od dva, takvih da su samo viseći putevi ispod njih – odaberemo onaj koji se nalazi najdalje od centra stabla i primenimo ρ -transformaciju. Time ne povećavamo Laplasove koeficijente, dok broj listova ostaje isti. Višestrukom primenom ρ -transformacija, dobijamo stablo koje sadrži tačno jedan čvor stepena većeg od dva. Sada možemo primeniti Posledicu 3.3.4 da bi dobili balansirano zvezdoliko stablo $BS_{n,k}$. ■

Ako postoje dva čvora stepena većeg od dva u stablu T , tada za neki indeks $2 \leq k \leq n - 2$ važi stroga nejednakost $c_k(T) > c_k(T')$ u Teoremi 3.3.7. Kako zvezdolika stabla nisu kospektralna u Laplasovom smislu [200], imamo sledeću posledicu.

Posledica 3.4.2 *Među stablima sa n čvorova i k listova, $BS_{n,k}$ je jedinstveno stablo koje minimizuje modifikovanu Laplasovu energiju.*

Sada možemo produbiti relaciju (3.3) i podržati uređenje stabala na osnovu Laplasovih koeficijenata [259],

$$c_k(S_n) = c_k(BS(n, n - 1)) \leq c_k(BS(n, n - 2)) \leq \dots \leq c_k(BS(n, 3)) \leq c_k(BS(n, n - 2)) = c_k(P_n),$$

za svako $k = 0, 1, \dots, n$. Sledi da $BS(n, n - 1)$ ima druge najmanje vrednosti Laplasovih koeficijenata među stablima sa n čvorova.

Neka je T stablo sa n čvorova i $0 \leq p \leq n - 2$ čvorova stepena dva (p je manje ili jednako od $n - 2$, jer svako stablo sadrži bar dva lista).

Posmatramo ρ -transformaciju stabla $T' = \rho(T, v)$, koristeći istu notaciju kao u Definiciji 3.3.6. Čvor v ima stepen veći od dva, dok čvor w ima stepen veći ili jednak dva. Među čvorovima na visećim putevima stabla T , postoji tačno

$$S = (n_1 - 1) + (n_2 - 1) + \dots + (n_m - 1) = \sum_{i=1}^m n_i - m$$

čvorova stepena dva. Ako w ima stepen dva, tada će posle transformacije čvor v imati stepen dva, pa će broj čvorova stepena dva ostati isti u stablu T' .

Inače pretpostavimo da važi $\deg(w) > 2$. Možemo primeniti transformaciju iz Posledice 3.3.4, i dobiti novo stablo T'' sa $m + 1$ visećih puteva susednih sa w sa dužinama $n_1, n_2, \dots, n_m, 1$. Time ćemo simultano smanjiti sve Laplasove koeficijente, dok će broj čvorova stepena dva u stablima T i T'' biti isti.

Višestrukom primenom ovih transformacija, eventualno dobijamo zvezdoliko stablo. Balansiranjem ovakvog stabla korišćenjem Posledice 3.3.4 dobijamo jedinstveno ekstremalno stablo $BS_{n,n-1-p}$.

Teorema 3.4.3 *Među stablima sa n čvorova i $0 \leq p \leq n - 2$ čvorova stepena dva, balansirano zvezdoliko stablo $BS_{n,n-1-p}$ ima najmanje Laplasove koeficijente c_i , za svako $i = 0, 1, \dots, n$.*

Analogno Teoremi 3.2.1, imamo

Posledica 3.4.4 *Među stablima sa n čvorova i p čvorova stepena dva, $BS_{n,n-1-p}$ je jedinstveno stablo koje minimizuje modifikovanu Laplasovu energiju.*

Prirodno bi bilo rešavati problem karakterizacije grafova sa n čvorova i fiksiranim brojem listova sa maksimalnim Laplasovim koeficijentima. Za $k = n - 2$, imamo duple zvezde $DS(p, q)$ (dobijene spajanjem centara zvezde S_p i S_q sa $p + q + 2 = n$). Iz [259] sledi da stablo $T(\lfloor \frac{n}{2} \rfloor - 1, \lceil \frac{n}{2} \rceil - 1)$ ima maksimalne Laplasove koeficijente među stablima sa n čvorova i $n - 2$ lista. Za $k = 3$, imamo stabla sa tačno jednim granajućim čvorom v (stepena većeg ili jednako od 3) i tri viseća puta koja su susedna sa v . Po Teoremi 3.3.7, zaključujemo da stablo $S(n - 3, 1, 1)$ sa dužinama visećih puteva $n - 3, 1$ i 1 ima maksimalne Laplasove koeficijente među stablima sa n čvorova i 3 lista.

Proverili smo sva stabla do 22 čvora i klasifikovali ih – za svaku trojku (n, k, i) pronađeni su ekstremalni grafovi sa n čvorova, brojem listova k koji minimizuju koeficijent c_i . Takođe, pronađena su i ekstremalna stabla sa n čvorova i k listova koji maksimizuju modifikovanu Laplasovu energiju. Rezultat je očigledan: stabla koja maksimizuju Wienerov indeks su različita od onih koja maksimiziraju modifikovani hiper-Wienerov indeks. Stabla koja maksimizuju Wienerov indeks su okarakterisana u sledećoj teoremi iz [80].

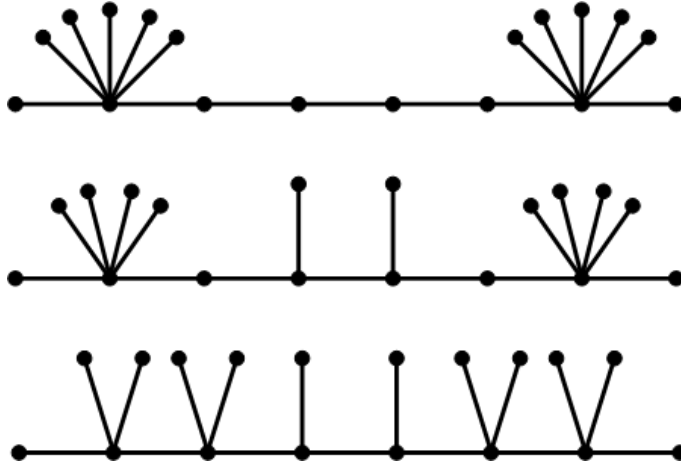
Teorema 3.4.5 *Ako je T stablo sa n čvorova i k listova, $2 \leq k \leq n$, tada*

$$W(BS_{n,k}) \leq W(T) \leq W(D(n, \lfloor k/2 \rfloor, \lceil k/2 \rceil)).$$

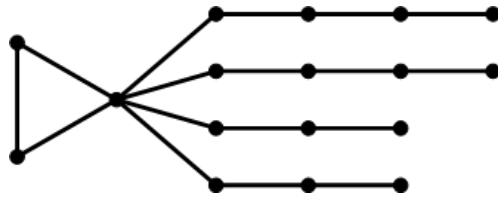
Jednakost u donjoj granici važi ako i samo ako $T \cong BS_{n,k}$, dok jednakost u gornjoj granici važi ako i samo ako $T \cong D(n, \lfloor k/2 \rfloor, \lceil k/2 \rceil)$.

Sledeća tri grafa na Slici 3.3 su ekstremalna za $n = 18$ čvorova i $k = 12$ listova; prvi graf je jedinstveno stablo koje maksimizira Wienerov indeks $c_{16} = 599$, drugi graf je jedinstveno stablo koje maksimizira modifikovani hiper-Wienerov indeks $c_{15} = 6624$, i treći graf je jedinstveno stablo koje maksimizira modifikovanu Laplasovu energiju $LEL = 21.401179$.

Takođe smo proverili sve unicyklične grafove sa ≤ 22 čvorova i fiksiranim brojem listova i zaključili:



Slika 3.3: Grafovi sa $n = 18$ i $k = 12$ koji maksimiziraju c_{16} , c_{15} i LEL.



Slika 3.4: Ekstremalni uniciklični graf $BS'_{17,4}$.

Hipoteza 3.4.6 Među unicikličnim grafovima sa n čvorova graf $BS'_{n,k}$, dobijen od $BS_{n-2,k}$ dodavanjem trougla kod granajućeg čvora, ima minimalne Laplasove koeficijente c_k , $k = 0, 1, \dots, n$.

Ovaj ekstremalni graf je predvidiv, jer graf dobijen od zvezde S_n sa dodatnom granom koja spaja dva proizvoljna lista, ima minimalne Laplasove koeficijente među unicikličnim grafovima. Graf $BS'_{n,k}$ nije bipartitan i zato se mora koristiti kombinatorna interpretacija Laplasovih koeficijenata preko Kelmansove teoreme [47] i pristup sličan kao iz [229].

Teorema 3.4.7 Među stablima sa n čvorova i uparivajućim brojem $1 \leq m \leq \frac{n}{2}$, balansirano zvezdoliko stablo $BS_{n,n-m}$ ima najmanje Laplasove koeficijente c_i , za svako $i = 0, 1, \dots, n$.

Dokaz. Neka je T proizvoljno stablo sa n čvorova i uparivajućim brojem m . Pretpostavimo da T ima k listova. Tada važi

$$k \leq m + n - 2m = n - m,$$

jer svaka grana iz uparivanja može imati najviše jedan čvor stepena jedan. Po Teoremi 3.4.1, imamo $c_i(T) \geq c_i(BS_{n,k})$, a koristeći Teoremu 3.3.3, sledi $c_i(BS_{n,k}) \leq c_i(BS_{n,n-m})$. Najzad, $c_i(T) \geq c_i(BS_{n,n-m})$ za svako $i = 0, 1, \dots, n$ sa jednakošću ako i samo ako je $T \cong BS_{n,n-m}$. ■

Analogno Teoremi 3.2.1, imamo

Posledica 3.4.8 Među stablima sa n čvorova i uparivajućim brojem m , $BS_{n,n-m}$ je jedinstveno stablo koje minimizuje modifikovanu Laplasovu energiju.

Posledica 3.4.9 Među stablima sa $n \geq 6$ čvorova i savršenim uparivanjem, sledi

$$LEL(G) \geq \sqrt{2} + \left(\frac{n}{2} - 2\right) \left(\sqrt{\frac{3 + \sqrt{5}}{2}} + \sqrt{\frac{3 - \sqrt{5}}{2}} \right) + \frac{\sqrt{n + 4 + \sqrt{n^2 + 16}}}{2} + \frac{\sqrt{n + 4 - \sqrt{n^2 + 16}}}{2},$$

sa jednakošću ako i samo ako je $G \cong BS_{n,n/2}$.

Dokaz. Iz prethodne posledice sledi $LEL(G) \geq LEL(BS_{n,n/2})$ sa jednakošću ako i samo ako je $G \cong BS_{n,n/2}$. Ostaje da procenimo modifikovanu Laplasovu energiju koristeći jednostavne manipulacije determinanti Laplasove matrice grafa $BS_{n,n/2}$,

$$P(BS_{n,n/2}, \mu) = \begin{vmatrix} \mu - 1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & \mu - 2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \mu - 1 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \mu - 2 & \dots & 0 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \mu - 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \dots & 1 & \mu - n/2 \end{vmatrix}$$

$$= (\mu^2 - 3\mu + 1)P(BS_{n-2,n/2-1}, \mu) - (\mu^2 - 3\mu + 1)^{n/2-2}(\mu - 1)((\mu - 1)^2 - 1).$$

Za početne vrednosti imamo $P(BS_{2,1}, \mu) = \mu(\mu - 2)$ i $P(BS_{4,2}, \mu) = \mu(\mu - 2)(\mu^2 - 4\mu + 2)$. Po matematičkoj indukciji sledi da za svako $n \geq 2$ važi

$$P(BS_{n,n/2}, \mu) = \mu(\mu - 2) \left(\mu^2 - \left(\frac{n}{2} + 2 \right) \mu + \frac{n}{2} \right) (\mu^2 - 3\mu + 1)^{n/2-2}.$$

Najzad za $n \geq 6$ rešavanjem kvadratne jednačine dobijamo tačnu vrednost za $LEL(BS_{n,n/2})$. ■

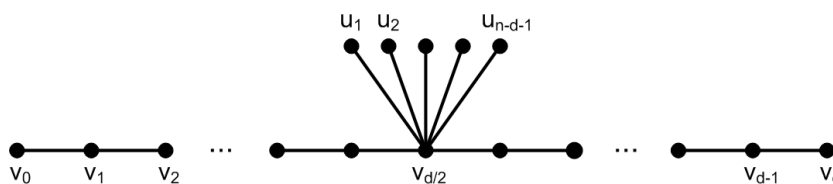
Broj nezavisnosti grafa G , koji označavamo sa $\alpha(G)$, je veličina najvećeg nezavisnog skupa grafa G . Kako je u bipartitnom grafu zbir broja nezavisnosti i uparivajućeg broja jednak n , imamo

Posledica 3.4.10 *Među stablima sa n čvorova i brojem nezavisnosti α , $BS_{n,\alpha}$ je jedinstveno stablo sa minimalnim LEL .*

3.5 Stabla sa fiksiranim dijametrom i radijusom

Definicija 3.5.1 *Neka je $C(a_1, a_2, \dots, a_{d-1})$ gusenica (eng. caterpillar) koji se dobija od puta P_d sa čvorovima $\{v_0, v_1, \dots, v_d\}$ dodavanjem a_i listova čvorovima v_i , $i = 1, 2, \dots, d - 1$. Jasno, $C(a_1, a_2, \dots, a_{d-1})$ ima dijаметar d i $n = d + 1 + \sum_{i=1}^{d-1} a_i$.*

Radi jednostavnosti, označimo sa $C_{n,d} = C(0, \dots, 0, a_{\lfloor d/2 \rfloor}, 0, \dots, 0)$. U [219] pokazano je da gusenica $C_{n,d}$ ima najmanji spektralni radijus među grafovima sa fiksiranim dijametrom.



Slika 3.5: Gusenica $C_{n,d}$.

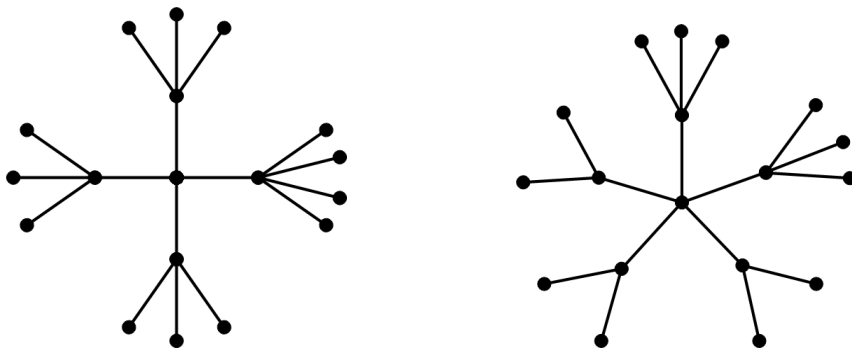
Teorema 3.5.2 *Među stablima sa n čvorova i fiksiranim dijametrom d , gusenica $C_{n,d}$ ima minimalne Laplasove koeficijente c_k , za svako $k = 0, 1, \dots, n$.*

Dokaz. Neka je $P = v_0v_1v_2 \dots v_d$ put u T maksimalne dužine. Svaki čvor v_i sa puta P je koren stabla T_i sa $a_i + 1$ čvorova, koji ne sadrže druge čvorove puta P . Primijenimo σ -transformaciju na stabla T_1, T_2, \dots, T_{d-1} više puta i smanjimo koeficijente c_k , sve dok ne dobijemo gusenicu $C(a_0, a_1, a_2, \dots, a_d)$.

Neka je $1 \leq r \leq d - 1$ najmanji indeks takav da $a_r > 0$, i analogno neka je $1 \leq s \leq d - 1$ najveći indeks takav da je $a_s > 0$. Primenimo ρ -transformaciju na čvor v_r ili čvor v_s i dobijamo gusenicu sa manjim Laplasovim koeficijentima pomeranjem listova ka centralnom čvoru puta $v_{\lfloor d/2 \rfloor}$. Višestrukom primenom ovog algoritma, najzad dobijamo ekstremalno stablo $C_{n,d}$. ■

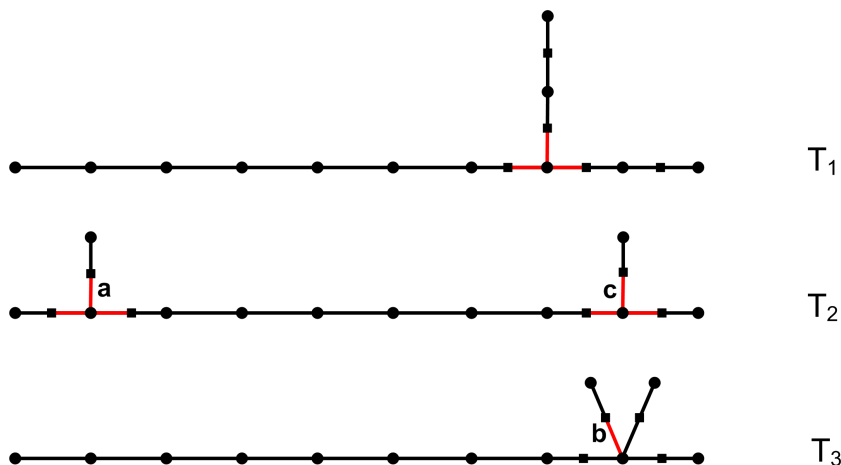
U [146], autori su posmatrali povezane grafove sa n čvorova i fiksiranim radijusom $r > 1$ i dokazali da je $C_{n,2r-1}$ ekstremalni graf sa minimalnim Laplasovim koeficijentima. Primitimo da u radu [146] ne stoji uslov $r > 1$, pošto za $r = 1$ graf $C_{n,2r-1}$ nije ni definisan – ali je očigledno da je zvezda S_n jedino stablo sa radijusom 1.

Bilo bi interesantno okarakterisati stabla sa n čvorova sa fiksiranim dijametrom i maksimalnim Laplasovim koeficijentima. Proverili smo sva stabla do 22 čvora i za svaku trojku (n, d, k) odredili ekstremalna stabla sa n čvorova i fiksiranim dijametrom d koji maksimizira koeficijent c_k . Rezultat je zanimljiv – ekstremalna stabla nisu izomorfna (videti Sliku 3.6).



Slika 3.6: Grafovi sa $n = 18$ i $d = 4$ koji maksimizuju c_{16} i c_{15} .

Za $d = n - 2$, maksimalni Laplasovi koeficijenti se dostižu za metlu $B_{n,3}$. Za $d = n - 3$, imamo tri potencijalna ekstremalna stabla sa Slike 3.7 (na osnovu transformacija iz Teoreme 3.3.1 i Teoreme 3.3.7).



Slika 3.7: Ekstremalna stabla za $d = n - 3$ (kvadratići predstavljaju čvorove potpodele).

Lako se može dokazati da važi $T_3 \preceq_c T_2$. Naime, posmatrajmo dve markirane grane u potpodeli stabla – $a \in E(S(T_2))$ i $b \in E(S(T_3))$. Neka je M proizvoljno k -uparivanje grafa $S(T_3)$. Konstruisaćemo odgovarajuće k -uparivanje M' od $S(T_2)$ i dokazati da $c_k(T_3) \leq c_k(T_2)$. Ako M ne sadrži granu b , tada je $M' = M$ takođe k -uparivanje stabla $S(T_2) \setminus \{a\}$. Ako M sadrži granu b , tada uzmimo granu a u odgovarajuće uparivanje M' od $S(T_2)$. Po izbacivanju grana a i b sa njihovim incidentnim granama iz $S(T_2)$ i $S(T_3)$, razloženi graf od $S(T_3)$ je podgraf razloženog grafa $S(T_2)$.

Primetimo da crvena grana $c \in E(S(T_2))$ ne pripada ni jednom konstruisanom uparivanju M' , pa sledi da u ovom slučaju imamo injekciju iz skupa k -uparivanja grafa $S(T_3)$ koja sadrže granu b u skup svih k -uparivanja grafa $S(T_2)$ koja sadrže granu a . Najzad, sledi $c_k(T_3) < c_k(T_2)$ za $n > 7$ i $2 \leq k \leq n - 2$.

Laplasov koeficijent $c_2(T)$ je jednak (videti [91]):

$$c_2(T) = 2n^2 - 5n + 3 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n d_i^2 = 2n^2 - 5n + 3 - \frac{1}{2} M_1(T),$$

gde je $M_1(T)$ prvi Zagrebački indeks [106, 150]. Očigledno, imamo

$$M_1(T_2) - M_1(T_1) = (3^2 + 1^2) - (2^2 + 2^2) = 2.$$

što znači da je $c_2(T_1) > c_2(T_2)$ za $n > 7$. Sa druge strane, za Wienerov indeks $W(T)$ sledi

$$\begin{aligned} W(T_2) - W(T_1) &= (2(1 + 2 + \dots + (n - 4)) + (n - 3) + 2) + n - 3 \\ &\quad - (2(1 + 2 + 3 + \dots + (n - 5)) + (n - 4) + 2 + 3) + n - 1 \\ &= 2n - 14, \end{aligned}$$

što povlači $c_{n-2}(T_2) > c_{n-2}(T_1)$ za $n > 7$. Dakle, za $n > 7$ parovi (T_1, T_2) predstavljaju beskonačnu familiju primera za Problem 3.1.3.

Možemo izračunati sve Laplasove koeficijente stabala T_1 i T_2 , posmatranjem nekoliko slučajeva koje uključuju crvene grane na Slici 3.7 (crvene grane su susedne sa čvorovima stepena većeg od dva). U [146] autori su pokazali da za svako $0 \leq k \leq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$, broj uparivanja sa k grana za put P_n je upravo $m_k(P_n) = m(n, k) = \binom{n-k}{k}$. Po uzimanju nekih nezavisnih crvenih grana u k -uparivanje, razloženi graf je unija jednog dugačkog puta i nekog broja puteva dužina 2, 3 ili 4. Koristeći paket MATHEMATICA [212], dobijamo

$$\begin{aligned} c_k(T_1) &= 6 \binom{2n-9-k}{k-2} + 8 \binom{2n-9-k}{k-1} + \binom{2n-9-k}{k} \\ &\quad + 11 \binom{2n-8-k}{k-3} + 21 \binom{2n-8-k}{k-2} + 6 \binom{2n-7-k}{k-4} \\ &\quad + 20 \binom{2n-7-k}{k-3} + \binom{2n-6-k}{k-5} + 5 \binom{2n-6-k}{k-4}, \end{aligned}$$

i

$$\begin{aligned} c_k(T_2) &= \binom{2n-11-k}{k-2} + 2 \binom{2n-11-k}{k-1} + \binom{2n-11-k}{k} \\ &\quad + 4 \binom{2n-10-k}{k-3} + 12 \binom{2n-10-k}{k-2} + 8 \binom{2n-10-k}{k-1} \\ &\quad + 6 \binom{2n-9-k}{k-4} + 24 \binom{2n-9-k}{k-3} + 22 \binom{2n-9-k}{k-2} \\ &\quad + 4 \binom{2n-8-k}{k-5} + 20 \binom{2n-8-k}{k-4} + 24 \binom{2n-8-k}{k-3} \\ &\quad + \binom{2n-7-k}{k-6} + 6 \binom{2n-7-k}{k-5} + 9 \binom{2n-7-k}{k-4}. \end{aligned}$$

Posle jednostavnih transformacija, razlika $c_k(T_2) - c_k(T_1)$ je jednaka

$$2 \cdot \frac{(2n-9-k)!}{(k-2)!(2n-2k-3)!} \cdot P(n, k),$$

i znak izraza $c_k(T_2) - c_k(T_1)$ zavisi samo od sledeće funkcije

$$P(n, k) = -408 - 788k - 120k^2 - 13k^3 + 3k^4 + 844n + 639kn + 81k^2n - 4k^3n - 466n^2 - 186kn^2 - 6k^2n^2 + 104n^3 + 16kn^3 - 8n^4.$$

Za veliko n , možemo izvršiti smenu $x = \frac{k}{n}$ i zanemariti sabirke stepena manjeg od 4, da bi dobili polinom četvrtog stepena

$$P(x) = 3x^4 - 4x^3 - 6x^2 + 16x - 8.$$

Ovaj polinom ima tačno jedan pozitivan koren $x_0 \approx 0.771748$, i zato za Laplasove koeficijente c_k važi asimptotska procena $c_k(T_1) > c_k(T_2)$ za $k < nx_0$, i $c_k(T_2) > c_k(T_1)$ za $k > nx_0$.

Koristićemo seriju ρ -transformacija, kako bi dobili niz stabala sa n čvorova dužine m

$$S_n \cong T_0 \preceq_c T_1 \preceq_c T_2 \preceq_c \dots \preceq_c T_{m-1} \preceq_c T_m \cong P_n.$$

Glavna ideja je pomerati po jedan list koji je prikazan za centralni čvor gusenice $C_{n,d}$ na krajnji čvor v_0 . Ovo zahteva $\lfloor \frac{d}{2} \rfloor$ transformacija da bi dobili gusenicu $C_{n,d+1}$, i u svakom koraku smanjujemo sve Laplasove koeficijente simultano. Polazeći od zvezde S_n i završavajući sa putem P_n , imamo ukupno

$$\begin{aligned} m &= \left\lfloor \frac{2}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{3}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{4}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{5}{2} \right\rfloor + \dots + \left\lfloor \frac{n-2}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{n-1}{2} \right\rfloor \\ &= 1 + 1 + 2 + 2 + \dots + \left\lfloor \frac{n-2}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{n-1}{2} \right\rfloor \end{aligned}$$

stabala. Najzad, zaključujemo da je dužina niza stabala jednaka $m = \lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor \cdot \lfloor \frac{n-2}{2} \rfloor$, što je proporcionalno sa $\frac{n^2}{4}$.

n	Broj stabala	Broj parova tipa 1	Broj parova tipa 2	Svi parovi	Procenat
3	1	0	0	0	0.00
4	2	0	0	0	0.00
5	3	0	0	0	0.00
6	6	0	0	0	0.00
7	11	0	0	0	0.00
8	23	7	0	7	2.77
9	47	56	0	56	5.18
10	106	476	5	481	8.64
11	235	2786	22	2808	10.21
12	551	18857	230	19087	12.60
13	1301	117675	1756	119431	14.12
14	3159	786721	15203	801924	16.08
15	7741	5030105	109075	5139180	17.15
16	19320	33888050	894946	34782996	18.64
17	48629	225026865	6467585	231494450	19.58
18	123867	1543675765	50926955	1594602720	20.79

Tabela 3.1: Primeri za Problem 3.1.3 i Problem 3.1.4.

U Tabeli 3.1 za svako n između 3 i 18, predstavljamo broj stabala sa n čvorova, broj parova stabala koja daju pozitivan odgovor na Problem 3.1.3 i Problem 3.1.4, kao i broj svih neuporedivih parova i procenat parova stabala sa n čvorova koji nisu uporedivi.

Zaključujemo da se najmanji par stabala koji daje pozitivan odgovor na Problem 3.1.3 javlja na 8 čvorova, dok se najmanji par stabala za Problem 3.1.4 javlja na 10 čvorova. U [259] autori nisu

prezentovali najmanji primer za Problem 3.1.3. Neka su T_1 i T_2 dva stabla sa 8 čvorova prikazani na Slici 3.8. Očigledno je $T_1 \prec^1 T_2$ i $T_2 \prec^2 T_1$, jer

$$P(T_1, \lambda) = -8x + 65x^2 - 190x^3 + 267x^4 - 196x^5 + 75x^6 - 14x^7 + x^8$$

i

$$P(T_2, \lambda) = -8x + 66x^2 - 188x^3 + 259x^4 - 190x^5 + 74x^6 - 14x^7 + x^8.$$



Slika 3.8: Stabla T_1 i T_2 .

Primetimo da procenat neuporedivih parova stabala raste brzo. Bilo bi interesantno odrediti graničnu vrednost kada n teži beskonačnosti.

3.6 Laplasovi koeficijenti unickličnih grafova

Definicija 3.6.1 Neka je G povezan graf sa $n \geq 3$ čvorova i neka je $e = uv$ neviseća grana grafa G koja nije sadržana ni u jednom trouglu. Ako je $N(v) \setminus \{u\} = \{v_1, v_2, \dots, v_s\}$ za $s \geq 1$, definišemo sledeći graf

$$G' = \alpha(G, u, v) = G - vv_1 - vv_2 - \dots - vv_s + uv_1 + uv_2 + \dots + uv_s.$$

Kažemo da je G' dobijen α -transformacijom grafa G .

Ova transformacija očigledno smanjuje veličinu ciklusa u grafu G . Lako se vidi da je α -transformacija generalizacija σ -transformacije iz [229].

Teorema 3.6.2 Neka je G povezan graf, a uv neviseća grana grafa G koja nije sadržana ni u jednom trouglu. Ako je $G' = \alpha(G, u, v)$ tada za svako $0 \leq k \leq n$ važi

$$c_k(G) \geq c_k(G').$$

Ako uv nije most, tada jednakost važi ako i samo ako je $k \in \{0, 1, n-1, n\}$. Inače jednakost važi ako i samo ako je $k \in \{0, 1, n\}$.

Dokaz. Očigledno za $k = 0, 1, n$ važi jednakost.

Slučaj 1. Neka je $k = n-1$. Označimo sa \mathcal{F} i \mathcal{F}' skup razapinjućih stabala grafova G i G' redom. Neka je T' proizvoljno stablo iz \mathcal{F}' i neka je $N_G(v) \cup N_{T'}(u) = \{v_1, v_2, \dots, v_s\}$. Definišimo stablo T iz G na sledeći način $V(T) = V(G)$ i

$$E(T) = E(T') - uv_1 - uv_2 - \dots - uv_s + vv_1 + vv_2 + \dots + vv_s.$$

Tada je T takođe razapinjuće stablo grafa G .

Sada možemo definisati preslikavanje razapinjućih stabala $f : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F}'$ na osnovu preslikavanja $T' \mapsto T$. Kako je f injekcija, sledi $\tau(G) = |\mathcal{F}| \geq |\mathcal{F}'| = \tau(G')$. Ako je uv most grafa G , tada za svako $T \in \mathcal{F}$ imamo $\alpha(T, u, v) \in \mathcal{F}'$ i $f(\alpha(T, u, v)) = T$, odakle sledi da je f bijekcija i $\tau(G) = \tau(G')$. Ako uv nije most, tada postoji razapinjuće stablo T_1 grafa G koje ne sadrži granu uv . Za svako $T' \in \mathcal{F}'$ imamo $f(T') \neq T_1$, pošto $uv \in E(f(T'))$ i $uv \notin E(T_1)$. U ovom slučaju f nije surjektivno i $\tau(G) > \tau(G')$.

Slučaj 2. Neka je $2 \leq k \leq n - 2$. Dokazaćemo da važi nejednakost $c_{n-k}(G) > c_{n-k}(G')$. Neka \mathcal{F}_k i \mathcal{F}'_k označavaju skupove svih razapinjućih šuma sa tačno k komponenti.

Posmatramo proizvoljnu razapinjuću šumu F' iz \mathcal{F}'_k i neka je T' komponenta koja sadrži čvor u . Neka je $N_G(u) \cup N_{T'}(u) = \{v_1, v_2, \dots, v_r\}$, gde je $0 \leq r \leq \min\{|V(T')| - 1, \deg_G(v) - 1\}$. Definišemo šumu F sa $V(F) = V(G)$ i

$$E(F) = E(F') - uv_1 - uv_2 - \dots - uv_r + vv_1 + vv_2 + \dots + vv_r.$$

Neka je $f : \mathcal{F}_k \rightarrow \mathcal{F}'_k$ preslikavanje takvo da važi $F' \mapsto F$, i definišimo $\mathcal{F}_k^* = f(\mathcal{F}'_k) = \{f(F') \mid F' \in \mathcal{F}'_k\}$.

Ukoliko grana uv pripada $E(F')$, tada važi $uv \in E(T')$ i $F \in \mathcal{F}_k$, pa imamo stabla sa jednakim brojem čvorova i $\gamma(F) = \gamma(F')$. Pretpostavimo dalje da $uv \notin E(F')$. Kako je uv viseća grana u grafu G' , čvor v mora biti izolovan čvor u šumi F' . Nije teško zaključiti da je F razapinjuća šuma grafa G i da je broj komponenti jednak $k - 1$ ili k . Pretpostavimo da je broj stabala u F jednak $k - 1$. U tom slučaju, čvorovi u i v pripadaju jednom stablu u F i kako postoji put koji spaja čvorove v_i i u u F , tada grana uv_i formira ciklus, što je nemoguće. Dakle, $F \in \mathcal{F}_k$.

Ako sa n_i označimo veličine komponenti šume F' (osim T' i $\{v\}$), $i = 1, 2, \dots, k - 2$, tada imamo

$$\begin{aligned} \gamma(F) - \gamma(F') &= ((|V(T')| - r') \cdot (r' + 1) - |V(T')| \cdot 1) \prod_{i=1}^{k-2} n_i \\ &= r' (|V(T')| - r' - 1) \prod_{i=1}^{k-2} n_i, \end{aligned}$$

gde je r' veličina komponente F' koja sadrži čvor v . Tada $\gamma(F) - \gamma(F') \geq 0$ sledi iz očigledne procene $|V(T')| \geq r' + 1$ i $r' \geq 0$. Ako je $|V(T')| > r' + 1$ i $r' \geq 1$, tada važi $\gamma(F) - \gamma(F') > 0$. Najzad dobijamo

$$c_{n-k}(G') = \sum_{F' \in \mathcal{F}'_k} \gamma(F') < \sum_{F \in \mathcal{F}_k^*} \gamma(F) \leq \sum_{F \in \mathcal{F}_k} \gamma(F) = c_{n-k}(G).$$

Time je dokaz završen. ■

Neka je w čvor povezanog grafa G . Kažemo da je put $P = wv_1v_2 \dots v_p$ viseći put dužine p susedan sa w , ako unutrašnji čvorovi v_1, v_2, \dots, v_{p-1} imaju stepen dva, dok je čvor v_p list. Graf $G \setminus P$ je graf dobijen od G brisanjem čvorova v_1, v_2, \dots, v_p sa puta P .

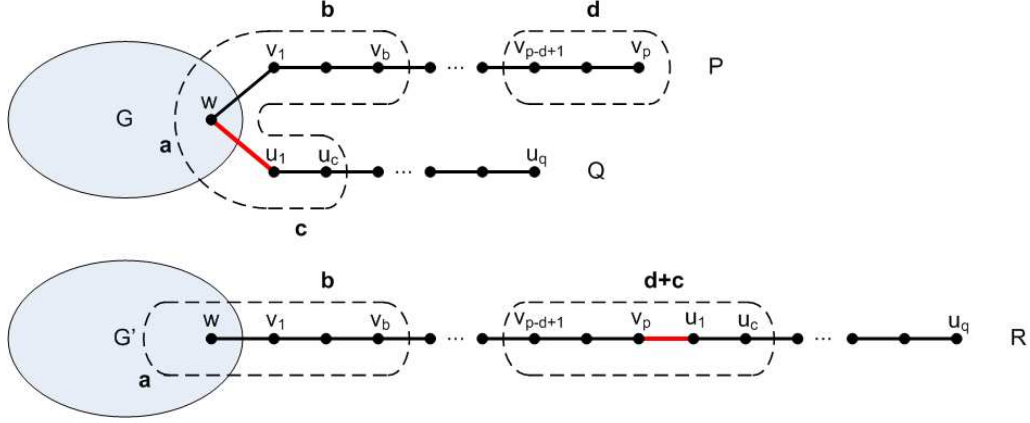
Definicija 3.6.3 Neka je $\deg(w) \geq 3$ i neka su $P = wv_1v_2 \dots v_p$ i $Q = wu_1u_2 \dots u_q$ viseći putevi dužina $p \geq 1$ i $q \geq 1$, redom, koji su susedni sa w . Formirajmo novi graf $G' = \pi(G, w, P, Q)$ brisanjem puteva P i Q , i zamenom sa putem $R = wv_1v_2 \dots v_pu_1u_2 \dots u_q$ dužine $p + q$, tako što obrišemo granu wu_1 i dodamo granu v_pu_1 . Kažemo da je G' π -transformacija grafa G .

Teorema 3.6.4 Neka je $G' = \pi(G, w, P, Q)$. Tada za svako $k = 0, 1, \dots, n$ važi

$$c_k(G) \leq c_k(G'), \tag{3.12}$$

sa jednakošću ako i samo ako $k \in \{0, 1, n - 1, n\}$.

Dokaz. Laplasovi koeficijenti $c_0 = 1$ i $c_n = 0$ su konstantni, dok broj grana i $c_1 = 2m$ ostaju nepromenjeni posle π -transformacije. Svako razapinjuće stablo grafa G sadrži oba puta P i Q , i slično svako razapinjuće stablo grafa G' sadrži viseći put R . To znači da G i G' imaju jednak broj razapinjućih stabala i $c_{n-1} = n\tau(G) = n\tau(G') = c_{n-1}(G')$.



Slika 3.9: π -transformacija na čvoru w grafa G .

Dalje pretpostavimo $2 \leq k \leq n - 2$. Posmatramo koeficijent c_{n-k} i proizvoljnu razapinjuću šumu F grafa G sa k povezanih komponenti (stabala). Neka čvor w pripada stablu T iz F koje sadrži a , $a \geq 1$, čvorova iz $G \setminus (P \cup Q)$ (uključujući i w), prvih b , $0 \leq b \leq p$, čvorova puta P i prvih c , $0 \leq c \leq q$, čvorova puta Q .

Ako je $b = p$, tada je T' stablo formirano od T brisanjem grane wu_1 i dodavanjem grane v_pu_1 . Šuma F' grafa G' koja odgovara F je data sa

$$F' = (F \setminus T) \cup \{T'\},$$

i očigledno $\gamma(F) = \gamma(F')$.

Sa druge strane, ako je $b \leq p - 1$, neka je T' podstablo od T sa $a + b$ čvorova koje ne sadrži granu wu_1 , i neka je T'' ostatak od T . Osim toga, stablo S iz F koje sadrži poslednji čvor na putu P je takođe put sa d , $1 \leq d \leq p - b$, čvorova. Neka je S' unija stabala S i T'' . Šuma F' grafa G' koja odgovara F je data sa

$$F' = (F \setminus \{S, T\}) \cup \{S', T'\}.$$

Ova korespondencija je očigledno injekcija.

Dalje, posmatramo podskup \mathcal{F}^* razapinjućih stabala F grafa G sa k komponenti koje se podudaraju na $G \setminus (T \cup S)$ (deo šume F na P između T i S može biti transliran), i za koje je zbir $b + d = M$ fiksiran. Za takve šume važi

$$\gamma(F) = |T| \cdot |S| \cdot \prod_{i=1}^{k-2} n_i = (a + b + c)dN,$$

za neku konstantu N . Kako je $a \geq 1$ i $d \geq 1$, odgovarajuća razapinjuća šuma F' grafa G' takođe sadrži k stabala, pa imamo

$$\gamma(F') = |T'| \cdot |S'| \cdot \prod_{i=1}^{k-2} n_i = (a + b)(c + d)N.$$

Suma brojeva $\gamma(F)$ za šume iz \mathcal{F}^* , podeljena sa N , je jednaka

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &= \sum_{b=0}^{M-1} (a + b + c)d = \sum_{b=0}^{M-1} (a + b + c)(M - b) \\ &= \sum_{b=0}^{M-1} (a + b)(M - b) + c \sum_{b=0}^{M-1} (M - b) \\ &= \sum_{b=0}^{M-1} (a + b)(M - b) + c \sum_{b=1}^M b. \end{aligned}$$

Sa druge strane, odgovarajuća suma za graf G' je jednaka

$$\begin{aligned} \mathcal{S}' &= \sum_{b=0}^{M-1} (a+b)(c+d) = \sum_{b=0}^{M-1} (a+b)(c+M-b) \\ &= \sum_{b=0}^{M-1} (a+b)(M-b) + c \sum_{b=0}^{M-1} (a+b) \\ &= \sum_{b=0}^{M-1} (a+b)(M-b) + cMa + c \sum_{b=0}^{M-1} b. \end{aligned}$$

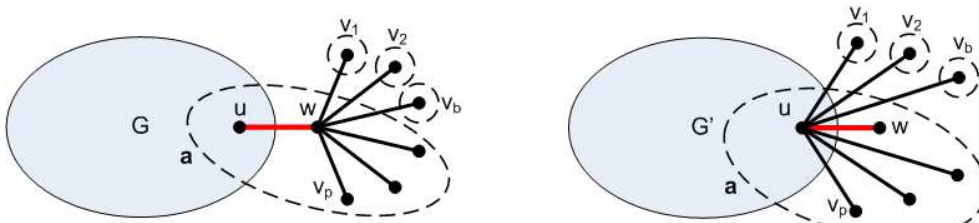
Dakle, $\mathcal{S}' - \mathcal{S} = cM(a-1) \geq 0$. Kako je $\deg(w) \geq 3$, sledi da $G \setminus (P \cup Q)$ ima druge čvorove osim w i zato postoji podskup \mathcal{F}^* razapinjućih stabala grafa G za koje je $a > 1$ (i $cM > 0$). Nejednakost $c_{n-k}(G) \leq c_{n-k}(G')$ sledi direktno iz Kelmansove formule sumiranjem po svim mogućim podskupovima \mathcal{F}^* razapinjućih šuma sa k komponenti grafa G . ■

Definicija 3.6.5 Neka je w čvor stepena $p+1$ grafa $G \not\cong S_n$, takav da su wv_1, wv_2, \dots, wv_p viseće grane incidentne sa w , i neka je u sused čvora w koji je različit od v_1, v_2, \dots, v_p . Formirajmo graf $G' = \sigma(G, w)$ brisanjem grana wv_1, wv_2, \dots, wv_p i dodavanjem novih grana uv_1, uv_2, \dots, uv_p . Kažemo da je G' σ -transformacija grafa G .

Teorema 3.6.6 Neka je $G' = \sigma(G, w)$ σ -transformacija grafa G . Tada za svako $0 \leq k \leq n$ važi

$$c_k(G) \geq c_k(G'),$$

sa jednakošću ako i samo ako $k \in \{0, 1, n-1, n\}$.



Slika 3.10: σ -transformacija na čvoru w grafa G .

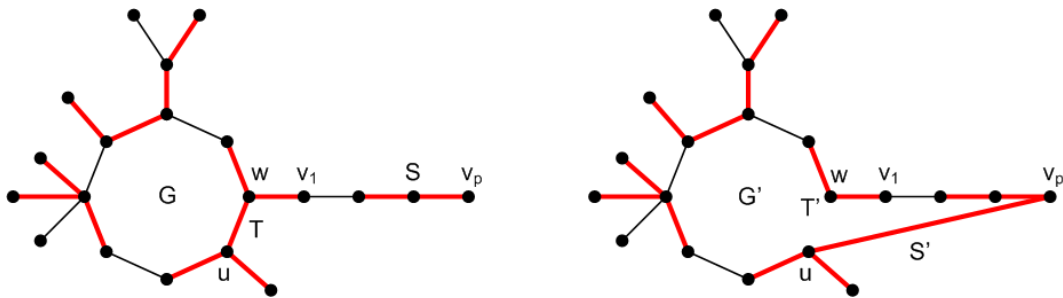
3.6.1 γ and τ transformacije

Definicija 3.6.7 Neka je w čvor ciklusa C povezanog unicikličnog grafa G . Neka G ima viseći put $P = wv_1v_2 \dots v_p$ susedan sa w . Ako je u jedan od dva suseda čvora w na C , neka je $G' = \gamma(G, w, P)$ graf dobijen od G brisanjem grane uw i dodavanjem grane uv_p . Kažemo da je G' γ -transformacija grafa G .

Teorema 3.6.8 Neka je $G' = \gamma(G, w, P)$ γ -transformacija povezanog unicikličnog grafa G . Za svako $0 \leq k \leq n$ važi

$$c_k(G) \leq c_k(G'), \quad (3.13)$$

sa jednakošću ako i samo ako $k \in \{0, 1, n\}$.



Slika 3.11: Primer γ -transformacije za $a = 3$, $b = 2$, $c = 1$ i $d = 3$.

Dokaz. Jednakost je očigledna za $c_0 = 1$, $c_1 = 2m$ i $c_n = 0$. Kako je dužina ciklusa u grafu G' veća od dužine ciklusa u G , imamo $c_{n-1}(G) < c_{n-1}(G')$.

Posmatramo koeficijent c_{n-k} i proizvoljnu razapinjuću šumu F grafa G sa k komponenti. Ako čvorovi w i v_p pripadaju istom stablu u F , tada odgovarajuće stablo u F' ima isti broj čvorova i zato je $\gamma(F) = \gamma(F')$. Inače, čvor w se nalazi u stablu T koje sadrži $a \geq 0$ čvorova grafa $G \setminus P$ sa iste strane kao i čvor u , $b \geq 1$ čvorova sa druge strane ciklusa (uključujući w) i prvih c , $0 \leq c < p$, čvorova sa puta P . Štaviše, stablo S koje sadrži poslednji čvor sa puta P je takođe put sa $d \geq 1$ čvorova.

Kada obrišemo granu uw , stablo T se deli na dva disjunktna dela – stablo T'' koje sadrži a čvorova i stablo T' sa $b + c$ čvorova. Dakle, definišemo odgovarajuću šumu $F' = (F \setminus \{T, S\}) \cup \{T', S'\}$, gde je S' unija stabala T'' i S . Zato je

$$\gamma(F') - \gamma(F) = ((a + d)(b + c) - (a + b + c)d) \cdot \prod_{i=1}^{k-2} n_i = a(b + c - d) \cdot N,$$

za konstantu $N = \prod_{i=1}^{k-2} n_i$.

Posmatramo familiju \mathcal{F}^* razapinjućih šuma grafa G koje se podudaraju na $G \setminus (T \cup S)$, sa fiksiranim vrednostima a , b i $c + d = M$. Ako sumiramo sve razlike $\gamma(F') - \gamma(F)$ za takve šume, dobijamo

$$\begin{aligned} \sum_{F \in \mathcal{F}^*} \gamma(F') - \gamma(F) &= \sum_{F \in \mathcal{F}^*} a(b + c - d) \cdot N \\ &= aN \sum_{c=0}^{M-1} (b + 2c - M) \\ &= aNM(b - 1) \geq 0. \end{aligned}$$

Kako G sadrži jedinstven ciklus, postoji bar jedna šuma F tako da je $a > 0$ i $b > 1$, pa iz Kelmansove formule sledi $c_{n-k}(G) < c_{n-k}(G')$. ■

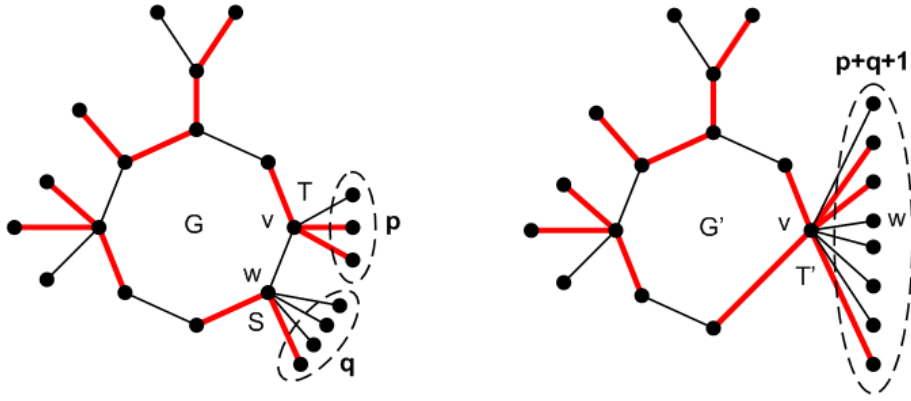
Definicija 3.6.9 Neka su v i w dva susedna čvorova sa ciklusa u unicikličnom grafu G , tako da v ima stepen $p+2$ i p visećih grana incidentnih sa v , a w ima stepen $q+2$ i q visećih grana incidentnih sa w . Graf $G' = \tau(G, v, w)$ dobijamo kontrahovanjem grane vw i dodavanjem novih visećih grana čvoru v . Kažemo da je G' τ -transformacija grafa G .

Primenom α -transformacije se lako dokazuje sledeća teorema.

Teorema 3.6.10 Neka je $G' = \tau(G, v, w)$ τ -transformacija povezanog unicikličnog grafa G . Za svako $0 \leq k \leq n$ važi

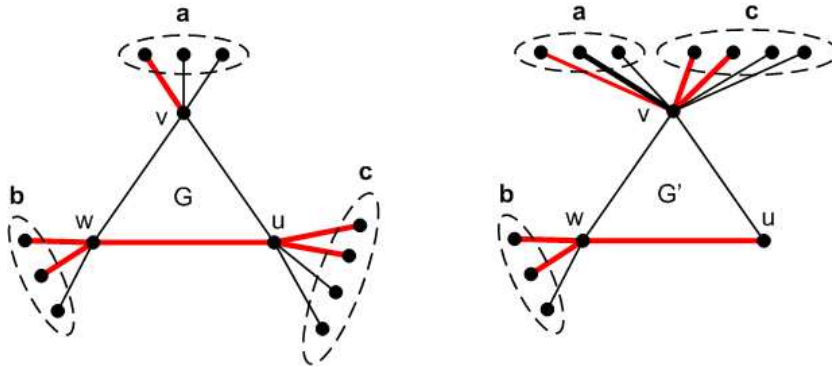
$$c_k(G) \geq c_k(G'),$$

sa jednakošću ako i samo ako je $k \in \{0, 1, n\}$.

Slika 3.12: Primer τ -transformacije za $p = 3$, $q = 4$, $a = 2$, $b = 1$ i $c = 4$.

Lema 3.6.11 *Neka su v , w i u čvorovi trougla u unicikličnom grafu $G(a, b, c)$, tako da čvor v ima $a + 2$ suseda, čvor w ima $b + 2$ suseda i čvor u ima $c + 2$ suseda, gde je $a + b + c + 3 = n$. Ako izbrišemo sve viseće grane iz čvora u i dodamo ih čvoru v dobićemo graf $G(a + c, b, 0)$. Tada za svako $k = 0, 1, \dots, n$ važi*

$$c_k(G(a, b, c)) \leq c_k(G(a + c, b, 0)).$$

Slika 3.13: Primer grafova $G(a, b, c)$ i $G(a + c, b, 0)$.

Dokaz. Jednakost očigledno važi za koeficijente c_0 , c_1 , c_{n-1} i c_n . Posmatrajmo koeficijent c_{n-k} i razapinjuće šume sa k komponenti u kojima postoji tačno x izolovanih čvorova među listovima čvora v , y izolovanih čvorova među listovima čvora w i z izolovanih čvorova među listovima čvora u . Neka je $A = a + 1 - x$, $B = b + 1 - y$ i $C = c + 1 - z$. Ako grana vu pripada šumi F , tada imamo stabla sa jednakim brojem čvorova u obe šume.

- ako grana wu pripada F , i grana vw pripada F

$$\gamma(F) = \gamma(F')$$

- ako grana wu pripada F , i grana vw ne pripada F

$$\gamma(F) - \gamma(F') = A(B + C) - (A + C - 1)(B + 1)$$

- ako grana wu ne pripada F , i grana vw pripada F

$$\gamma(F) - \gamma(F') = (A + B)C - (A + B + C - 1)$$

- ako grana wu ne pripada F , i grana vw ne pripada F

$$\gamma(F) - \gamma(F') = ABC - B(A + C - 1)$$

Po sumiranju, dovoljno je dokazati nejednakost:

$$A(B + C) + (A + B)C + ABC \geq (A + C - 1)(B + 1) + (A + B + C - 1) + B(A + C - 1)$$

$$(A - 1)(C - 1)(B + 2) \geq 0.$$

Poslednja nejednakost je očigledno tačna za pozitivne cele brojeve A , B i C . Kako su brojevi a i c veći ili jednaki od 0, za slučaj $x = z = 0$ imamo strogu nejednakost. ■

3.6.2 LEL kod unicykličnih grafova

Teorema 3.6.12 *Neka je G povezan unicykličan graf sa n čvorova i neka je k prirodan broj, $2 \leq k \leq n - 1$. Tada važi $c_k(G) \leq c_k(C_n)$ sa jednakošću ako i samo ako $G \cong C_n$.*

Dokaz. Neka je $C = u_1u_2 \dots u_k$ jedinstveni ciklus grafa G i neka su T_i stabla zakačena za u_i , $i = 1, 2, \dots, k$ (T_i ne sadrži druge čvorove sa ciklusa C). Za $i = 1, 2, \dots, k$, možemo primeniti π -transformacije na čvorove stabala T_i stepena bar tri koji se nalaze na najvećoj udaljenosti od korena u_i – sve dok T_i ne postane put. U svakom koraku smo povećavali Laplasove koeficijente grafa G po Teoremi 3.6.4. Dakle, unicykličan graf sa maksimalnim Laplasovim koeficijentima mora biti sunce graf. Sada primenjujemo γ -transformacije sve dok ne dobijemo ciklus C_n , i u isto vreme povećavamo sve Laplasove koeficijente. Dakle, ciklus C_n jedinstveno maksimizuje sve Laplasove koeficijente za $2 \leq k \leq n - 1$ među povezanim unicykličnim grafovima sa n čvorova. ■

Teorema 3.6.13 *Neka je G povezan unicykličan graf sa n čvorova i neka je k prirodan broj, $2 \leq k \leq n - 1$. Tada važi $c_k(G) \geq c_k(S'_n)$ sa jednakošću ako i samo ako $G \cong S'_n$.*

Dokaz. Neka je $C = u_1u_2 \dots u_k$ jedinstveni ciklus grafa G i neka su T_i stabla zakačena za u_i , $i = 1, 2, \dots, k$ (T_i ne sadrži druge čvorove sa ciklusa C). U svakom stablu možemo naći čvor v koji je roditelj najudaljenijeg lista od korena stabla u_i i primeniti σ -transformaciju na v . U svakom koraku smanjujemo Laplasove koeficijente, sve dok ne dobijemo graf G koji ima samo viseće grane na ciklusu – kao gusenica sa dodatnom granom koja povezuje prvi i poslednji čvor puta. Sada primenjujemo τ -transformaciju sve dok veličina ciklusa ne postane tri. Na kraju iz Leme 3.6.11 dobijamo da su svi Laplasovi koeficijenti najmanji kada su listovi susedni sa jednim čvorom trougla. Jedinstvenost ekstremalnog grafa sledi iz strogih nejednakosti kod σ - i τ - transformacija. ■

Koristeći Teoremu 3.2.1, imamo sledeće posledice.

Posledica 3.6.14 *Neka je G povezan unicykličan graf sa n čvorova. Tada $LEL(G) \leq LEL(C_n)$, sa jednakošću ako i samo ako je $G \cong C_n$.*

Posledica 3.6.15 *Neka je G povezan unicykličan graf sa n čvorova. Tada $LEL(G) \geq LEL(S'_n)$, sa jednakošću ako i samo ako je $G \cong S'_n$.*

Posledica 3.6.14 je bila hipoteza u radu [228]. Sada ćemo prikazati vezu između Posledice 3.6.14 i sledeće hipoteze autora Caporossi, Cvetković, Gutman i Hansen iz [34], koja je dobijena korišćenjem sistema AutoGraphiX [35] (koja je i služila kao inicijalna inspiracija).

Hipoteza 3.6.16 Među un cikličnim grafovima sa n čvorova, ciklus C_n ima maksimalnu energiju za $n \leq 7$, $n = 9, 10, 11, 13$ i 15 . Za ostale vrednosti n , un cikličan graf sa maksimalnom energijom je P_n^6 , gde je P_n^l un cikličan graf dobijen povezivanjem čvora sa ciklusa C_l sa listom puta P_{n-l} .

Ova hipoteza je nedavno kompletirana u [136], a do sada najjači rezultat je bio iz [132], gde su Hou, Gutman i Woo dokazali da među povezanim un cikličnim bipartitnim grafovima sa n čvorova ili C_n ili P_n^6 ima maksimalnu energiju. Zhou i Gutman [265] su pokazali da važi

$$2LEL(G) = E(S(G)).$$

gde je $S(G)$ graf potpodele bipartitnog grafa G . Ako je G un cikličan, bipartitan graf sa n čvorova, tada je graf potpodele $S(G)$ takođe un cikličan, bipartitan i ima $2n$ čvorova. Zato je

$$LEL(G) \leq \max \left\{ \frac{1}{2}E(C_{2n}), \frac{1}{2}E(P_{2n}^6) \right\} = \max \{LEL(C_n), LEL(P_n^3)\},$$

i pošto graf P_n^3 nije bipartitan, vidimo da zaista C_n dostiže maksimalnu vrednost LEL među bipartitnim un cikličnim grafovima. Međutim, ovaj pristup ne možemo koristiti za grafove koji nisu bipartitni.

Laplasove sopstvene vrednosti ciklusa C_n su $\mu_k = 2 - 2 \cos \frac{2k\pi}{n}$, gde je $k = 1, 2, \dots, n$. Dakle, modifikovana Laplasova energija ciklusa C_n je jednaka

$$\begin{aligned} LEL(C_n) &= \sum_{k=1}^n \sqrt{2 \left(1 - \cos \frac{2k\pi}{n} \right)} = 2 \sum_{k=1}^n \sin \frac{k\pi}{n} \\ &= 2 \frac{\sin \left(\frac{n+1}{2} \cdot \frac{\pi}{n} \right) \sin \left(\frac{n}{2} \cdot \frac{\pi}{n} \right)}{\sin \frac{\pi}{2n}} = 2 \cot \frac{\pi}{2n}. \end{aligned}$$

Posledica 3.6.17 Neka je G povezan un cikličan graf sa n čvorova. Tada

$$LEL(G) \leq 2 \cot \frac{\pi}{2n},$$

sa jednakošću ako i samo ako je $G \cong C_n$.

Iz Tejlorovog razvoja funkcije $\cot x$, dobijamo da za dovoljno veliko n važi

$$LEL(C_n) \sim \frac{4n}{\pi} - \frac{\pi}{6n}.$$

Posmatrajmo Laplasovu matricu grafa S'_n .

$$\begin{aligned} P(S'_n, \lambda) &= \begin{vmatrix} \lambda - (n-1) & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ 1 & \lambda - 2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 1 & \lambda - 2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \lambda - 1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots & \dots & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda - 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \lambda - 1 \end{vmatrix} = \\ &= (\lambda - 1) \cdot P(S'_{n-1}, \lambda) - \lambda(\lambda - 1)^{n-3}(\lambda - 3). \end{aligned}$$

Koristeći matematičku indukciju i jednostavne manipulacije sa determinantama dobijamo formulu $P(S'_n, \lambda) = \lambda(\lambda - n)(\lambda - 3)(\lambda - 1)^{n-3}$. Za $n = 3$, trougao $S'_3 \cong C_3$ ima sopstvene vrednosti $3, 3, 0$. Ako pretpostavimo da formula važi za $n-1$, onda iz rekurentne formule za $P(S'_n, \lambda)$ dobijamo

$$\begin{aligned} P(S'_n, \lambda) &= (\lambda - 1) \cdot \lambda(\lambda - n + 1)(\lambda - 3)(\lambda - 1)^{n-4} - \lambda(\lambda - 1)^{n-3}(\lambda - 3) \\ &= \lambda(\lambda - n)(\lambda - 3)(\lambda - 1)^{n-3}. \end{aligned}$$

To znači da je modifikovana Laplasova energija grafa S'_n jednaka $LEL(S'_n) = \sqrt{n} + \sqrt{3} + n - 3$. Laplasovi koeficijenti se mogu lako izračunati koristeći simetrične sume, jer su jedine sopstvene vrednosti koje su različite od 1 upravo n i 3 sa višestrukostima jedan.

$$c_k = (n + 3) \cdot \binom{n-3}{k-1} + 3n \cdot \binom{n-3}{k-2} + \binom{n-3}{k}.$$

Posledica 3.6.18 *Neka je G povezan un cikličan graf sa n čvorova. Tada*

$$LEL(G) \geq n + \sqrt{n} - 3 + \sqrt{3},$$

sa jednakošću ako i samo ako $G \cong S'_n$.

U [124] He i Shan su nastavili ova istraživanja i odredili ekstremalni graf sa minimalnim Laplasovim koeficijentima u klasi bicikličnih grafova. Bilo bi interesantno uvesti uređenje un cikličnih grafova sa fiksiranom dužinom ciklusa ili posmatrati šire klase grafova (sa fiksiranim hromatskim brojem, dijametrom, itd).

Glava 4

Spektralni radijus matrice rastojanja

Energija rastojanja $DE(G)$ je novi molekularni deskriptor totalne π -elektron energije [103], koji je definisan kao suma apsolutnih vrednosti sopstvenih vrednosti matrice rastojanja. *Spektralni radijus matrice rastojanja* grafa G , koji ćemo označavati sa $\rho(G)$, je najveća sopstvena vrednost matrice susedstva $D(G)$.

Grafovska invarijanta $\rho(G)$ je našla velike primene u QSPR modeliranju, što su demonstrirali Consonni i Todeschini u [42]. Za više detalja o energiji rastojanja videti [159, 205]. Balaban i drugi [13] su predložili upotrebu $\rho(G)$ kao molekularnog deskriptora, dok se u [115] spektralni radijus matrice rastojanja uspešno koristi za merenje razgranatosti alkana i modeliranje tačaka ključanja. Nedavno u [262] i [270], Zhou i Trinajstić su dokazali nekoliko gornjih i donjih granica za $\rho(G)$ uključujući broj čvorova, Wienerov i Zagrebačke indekse. Bapat i drugi u [16] su pokazali razne veze između matrice rastojanja $D(G)$ i Laplasove matrice $L(G)$. Subhi i Powers u [233] su dokazali da za $n \geq 3$ put P_n ima najveći spektralni radijus matrice rastojanja među svim stablima sa n čvorova. Stevanović i Ilić [229] su generalizovali ovaj rezultat i dokazali da među stablima sa maksimalnim stepenom Δ , metla ima najveći spektralni radijus matrice rastojanja.

Spektar stabala i unickličnih grafova imaju tačno jednu pozitivnu sopstvenu vrednost, i zato važi sledeća relacija [16]

$$DE(G) = 2\rho(G). \quad (4.1)$$

Neka je T stablo sa $n > 2$ čvorova i neka su $\rho_1 \geq \rho_2 \geq \dots \geq \rho_n$ sopstvene vrednosti matrice rastojanja uređene u neopadajući redosled. Merris je u [190] dobio sledeću nejednakost koja uključuje sopstvene vrednosti matrica $D(T)$ i $L(T)$,

$$0 > -\frac{2}{\mu_1} \geq \rho_2 \geq -\frac{2}{\mu_2} \geq \rho_3 \geq \dots \geq -\frac{2}{\mu_{n-1}} \geq \rho_n,$$

gde su $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n = 0$ Laplasove sopstvene vrednosti stabla T .

Liu [185] je okarakterisao ekstremalne grafove sa minimalnim spektralnim radijusom matrice rastojanja u tri klase grafova sa n čvorova (fiksirana čvorna povezanost, uparivajući broj i hromatski broj).

Na osnovu kompjuterske pretrage svih stabala sa ≤ 22 čvorova, može se postaviti sledeća hipoteza [232]

Hipoteza 4.0.19 *Ne postoje dva neizomorfna stabla T_1 i T_2 , tako da važi $\rho(T_1) = \rho(T_2)$.*

Ova hipoteza je skoro sigurno netačna, ali će kontraprimeri biti sa velikim brojem čvorova.

Neka je $e = (u, v)$ proizvoljna grana grafa G tako da je $G' = G - e$ takođe povezan, i neka je D' matrica rastojanja grafa $G - e$. Brisanjem grane e se ne dobijaju kraći putevi u grafu, pa važi $D_{ij} \leq D'_{ij}$ za sve $i, j \in V$. Štaviše, $1 = D_{uv} < D'_{uv}$ i po Peron-Frobenijusovoj teoremi zaključujemo

$$\rho(G) < \rho(G - e). \quad (4.2)$$

Slično dodavanjem grane smanjujemo spektralni radijus matrice rastojanja,

$$\rho(G + f) < \rho(G). \quad (4.3)$$

Nejednakost (4.3) nam odmah govori da kompletan graf K_n ima najmanji spektralni radijus matrice rastojanja, dok nejednakost (4.2) pokazuje da se maksimalni spektralni radijus dostiže za određeno stablo, pa zato nadalje ostajemo fokusirani na stabla.

4.1 Zvezda S_n ima najmanji spektralni radijus matrice rastojanja

Matrica rastojanja zvezde S_n ima formu

$$D(S_n) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 2 & \dots & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 0 & \dots & 2 & 2 \\ \dots & & & & & \\ 1 & 2 & 2 & \dots & 0 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & \dots & 2 & 0 \end{bmatrix}.$$

Neka je \mathbf{x} sopstveni vektor matrice $D(S_n)$ koji odgovara spektralnom radijusu matrice rastojanja grafa $\rho(S_n)$. Neka je a komponenta vektora \mathbf{x} koja odgovara centru zvezde S_n . Kako je $\rho(S_n)$ jednostruka sopstvena vrednost matrice $D(S_n)$, po Peron-Frobenijusovoj teoremi, koristeći simetriju i automorfizme – neka je b komponenta vektora \mathbf{x} koja odgovara svakom listu zvezde S_n . Iz matrične jednačine $D(S_n)\mathbf{x} = \rho(S_n)\mathbf{x}$ imamo sistem

$$\begin{aligned} (n-1)b &= \rho(S_n)a, \\ a + 2(n-2)b &= \rho(S_n)b, \end{aligned}$$

koji posle eliminisanja promenljivih a i b daje kvadratnu jednačinu po $\rho(S_n)$, sa pozitivnim rešenjem

$$\rho(S_n) = n - 2 + \sqrt{(n-2)^2 + (n-1)}.$$

Teorema 4.1.1 ([158]) *Neka je G povezan graf sa $n > 2$ čvorova. Tada*

$$\rho(G) \geq \frac{2W(G)}{n}, \quad (4.4)$$

sa jednakošću ako i samo ako su sume po vrstama matrice D jednake.

Za stabla sa $n \geq 3$ čvorova, u (4.4) važi stroga nejednakost. Sada, neka je $T \not\cong S_n$ proizvoljno stablo sa n čvorova. Među stablima sa $n \geq 4$ čvorova, zvezda S_n ima najmanji Wienerov indeks, dok je druga najmanja vrednost Wienerovog indeksa $n^2 - n - 2$, koja se dostiže za duplu zvezdu [82]. Dakle,

$$\rho(T) \geq \frac{2}{n}(n^2 - n - 2) > n - 2 + \sqrt{(n-2)^2 + (n-1)} = \rho(S_n),$$

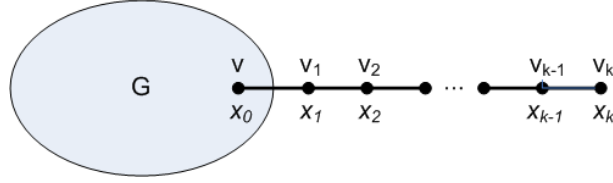
za $n \geq 4$.

4.2 Stabla sa fiksiranim najvećim stepenom

Neka je G prost graf i v jedan njegov čvor. Za $k, l \geq 0$, označimo sa $G(v, k)$ graf dobijen od $G \cup P_k$ dodavanjem grane između v i krajnjeg čvora puta P_k (vidi Sliku 4.1), i sa $G(v, k, l)$ graf dobijen od $G \cup P_k \cup P_l$ dodavanjem grana između v i krajnjih čvorova puteva P_k i P_l (vidi Sliku 4.2). Glavni doprinos ovog dokaza je pomoćno tvrđenje koje glasi: za $k \geq l \geq 1$ važi

$$\rho(G(v, k+1, l-1)) > \rho(G(v, k, l)).$$

Da bi dokazali ovu lemu, moramo uvesti nekoliko pomoćnih rezultata koji se odnose na komponente Peronovog sopstvenog vektora po putu P_k u grafu $G(v, k)$.



Slika 4.1: Peronov sopstveni vektor u grafu $G(v, k)$.

Lema 4.2.1 Neka je \mathbf{x} Peronov sopstveni vektor grafa $G(v, k)$, $k \geq 1$, koji odgovara $\rho = \rho(G(v, k))$. Neka je x_0 komponenta vektora \mathbf{x} za v , i sa x_1, x_2, \dots, x_k označimo komponente vektora \mathbf{x} po putu P_k (vidi Sliku 4.1). Ako sa S označimo sumu komponentata vektora \mathbf{x} , tada postoje konstante $a_k = a(\rho, S, x_0, k)$ i $b_k = b(\rho, S, x_0, k)$, tako da važi

$$x_i = a_k t_1^i + b_k t_2^i, \quad 0 \leq i \leq k,$$

gde je $t_{1,2} = 1 + \frac{1}{\rho} \pm \frac{\sqrt{2\rho+1}}{\rho}$.

Dokaz. Neka je D matrica rastojanja grafa $G(v, k)$. Iz jednačina za najveću sopstvenu vrednost $\rho \cdot \mathbf{x} = D \cdot \mathbf{x}$, za komponente x_{j-1} , x_j i x_{j+1} , za $1 \leq j \leq k-1$, dobijamo

$$\begin{aligned} \rho x_{j-1} &= x_j + 2x_{j+1} + \sum_{u \in G} (d_{uv} + j - 1)x_u + \sum_{i=0}^{j-2} (j - 1 - i)x_i + \sum_{i=j+2}^k (i - j + 1)x_i, \\ \rho x_j &= x_{j-1} + x_{j+1} + \sum_{u \in G} (d_{uv} + j)x_u + \sum_{i=0}^{j-2} (j - i)x_i + \sum_{i=j+2}^k (i - j)x_i, \\ \rho x_{j+1} &= 2x_{j-1} + x_j + \sum_{u \in G} (d_{uv} + j + 1)x_u + \sum_{i=0}^{j-2} (j + 1 - i)x_i + \sum_{i=j+2}^k (i - j - 1)x_i. \end{aligned}$$

Oduzimanjem imamo sledeću rekurentnu vezu

$$2\rho x_j + 2x_j = \rho x_{j-1} + \rho x_{j+1}, \quad (4.5)$$

čija karakteristična jednačina ima korene

$$t_{1,2} = 1 + \frac{1}{\rho} \pm \frac{\sqrt{2\rho+1}}{\rho}, \quad 0 < t_2 < 1 < t_1.$$

Sa druge strane, matrična jednačina za sopstvene vrednosti $\rho \mathbf{x} = D \mathbf{x}$ za komponente x_{k-1} i x_k glasi

$$\begin{aligned} \rho x_{k-1} &= x_k + \sum_{u \in G} (d_{uv} + k - 1)x_u + \sum_{i=0}^{k-2} (k - 1 - i)x_i, \\ \rho x_k &= x_{k-1} + \sum_{u \in G} (d_{uv} + k)x_u + \sum_{i=0}^{k-2} (k - i)x_i. \end{aligned}$$

Slično dobijamo,

$$\rho x_k - \rho x_{k-1} = S - 2x_k. \quad (4.6)$$

Možemo koristiti rekurentne relacije (4.5) da formalno produžimo niz x_0, x_1, \dots, x_k novim članovima x_{k+1}, x_{k+2}, \dots , tako da niz predstavlja partikularno rešenje jednačine (4.5). U tom slučaju, jednačina (4.6) se može zapisati na sledeći način

$$\rho x_{k+1} = S + \rho x_k. \quad (4.7)$$

Iz teorije o linearnim rekurentnim jednačinama, postoje konstante a_k i b_k tako da za $i \geq 0$ važi

$$x_i = a_k t_1^i + b_k t_2^i.$$

Vrednosti a_k i b_k se mogu dobiti iz graničnih uslova, tj. na osnovu vrednosti x_0 i jednačine (4.7),

$$x_0 = a_k + b_k, \quad (4.8)$$

$$S/\rho = a_k t_1^k (t_1 - 1) + b_k t_2^k (t_2 - 1). \quad (4.9)$$

Imajući u vidu $t_2 = \frac{1}{t_1}$, jednačina (4.9) je ekvivalentna sa

$$a_k - \frac{b_k}{t_1^{2k+1}} = \frac{S/\rho}{(t_1 - 1)t_1^k}. \quad (4.10)$$

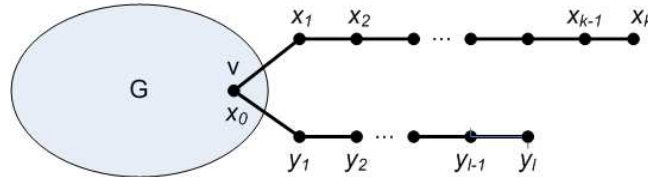
Iz (4.8) i (4.10) konačno dobijamo:

$$a_k = \frac{1}{1 + t_1^{2k+1}} \left(x_0 + \frac{S}{\rho} \frac{t_1^{k+1}}{t_1 - 1} \right), \quad (4.11)$$

$$b_k = \frac{1}{1 + t_1^{2k+1}} \left(x_0 t_1^{2k+1} - \frac{S}{\rho} \frac{t_1^{k+1}}{t_1 - 1} \right). \quad (4.12)$$

■

Prethodna lema nam dozvoljava da poredimo sume komponenti Peronovog vektora na dva viseća puta koji su susedni sa istim čvorom v .



Slika 4.2: Peronov sopstveni vektor u grafu $G(v, k, l)$.

Lema 4.2.2 Neka je \mathbf{x} Peronov sopstveni vektor grafa $G(v, k, l)$, $k, l \geq 1$, koji odgovara $\rho = \rho(G(v, k, l))$. Neka je x_0 komponenta vektora \mathbf{x} za čvor v , sa x_1, \dots, x_k označimo komponente od \mathbf{x} po putu P_k , i sa y_1, \dots, y_l označimo komponente od \mathbf{x} po putu P_l (vidi Sliku 4.2). Ako je $k \geq l$, tada

$$\sum_{i=0}^k x_i \geq \sum_{j=0}^l y_j.$$

Dokaz. Neka je S suma svih komponenti Peronovog vektora \mathbf{x} , i neka je $t = 1 + \frac{1}{\rho} + \frac{\sqrt{2\rho+1}}{\rho}$. Iz Leme 4.2.1 dobijamo

$$\begin{aligned} x_i &= a_k t^i + b_k / t^i, & 1 \leq i \leq k, \\ y_j &= a_l t^j + b_l / t^j, & 1 \leq j \leq l, \end{aligned}$$

gde su a_k, b_k, a_l i b_l dati formulama (4.11) i (4.12). Sada imamo

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k x_k &= \sum_{i=1}^k a_k t^i + b_k/t^i \\ &= a_k \frac{t(t^k - 1)}{t - 1} + b_k \frac{t^k - 1}{t^k(t - 1)} \\ &= \frac{1}{1 + t^{2k+1}} \left(x_0 \frac{t(t^{2k} - 1)}{t - 1} + \frac{S}{\rho} \frac{t(t^k - 1)(t^{k+1} - 1)}{(t - 1)^2} \right), \\ &= x_0 f(k) + \frac{S}{\rho} g(k), \end{aligned}$$

gde je

$$f(x) = \frac{t(t^{2x} - 1)}{(1 + t^{2x+1})(t - 1)} \quad \text{i} \quad g(x) = \frac{t(t^x - 1)(t^{x+1} - 1)}{(1 + t^{2x+1})(t - 1)^2}.$$

Slično,

$$\sum_{j=1}^l y_l = x_0 f(l) + \frac{S}{\rho} g(l).$$

Kako je $t > 1$, funkcije $f(x)$ i $g(x)$ imaju pozitivne prve izvode,

$$f'(x) = \frac{2t^{2x+1}(t+1)\ln t}{(t-1)(t^{2x+1}+1)^2} \quad \text{i} \quad g'(x) = \frac{t^{x+1}(t+1)(t^{2x+1}-1)\ln t}{(t-1)^2(t^{2x+1}+1)^2}.$$

Zato su funkcije $f(x)$ i $g(x)$ monotono rastuće u odnosu na x , i iz $k \geq l$ sledi $f(k) \geq f(l)$ i $g(k) \geq g(l)$. Kako su x_0, S i ρ pozitivni brojevi, konačno zaključujemo da je

$$\sum_{i=1}^k x_i = x_0 f(k) + \frac{S}{\rho} g(k) \geq x_0 f(l) + \frac{S}{\rho} g(l) = \sum_{j=1}^l y_j.$$

■

Sada smo u poziciji da dokažemo glavnu lemu.

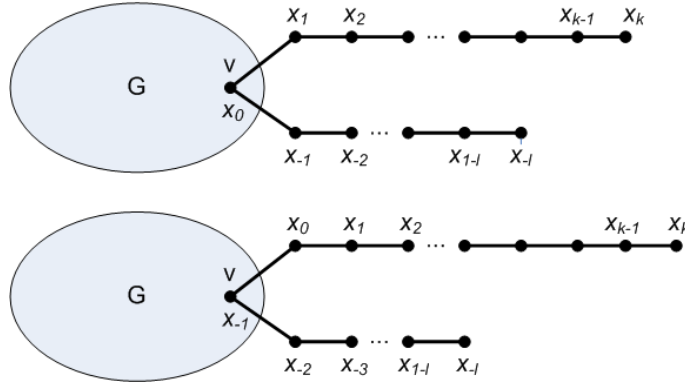
Lema 4.2.3 *Neka je G prost graf i neka je v jedan od njegovih čvorova. Ako je $k \geq l \geq 1$, tada*

$$\rho(G(v, k, l)) < \rho(G(v, k + 1, l - 1)). \quad (4.13)$$

Dokaz. Neka je D matrica rastojanja grafa $G(v, k, l)$ i neka je D^* matrica rastojanja grafa $G(v, k + 1, l - 1)$. Neka je \mathbf{x} Peronov sopstveni vektor matrice D koji odgovara $\rho(G(v, k, l))$, gde je x_0 komponenta vektora \mathbf{x} u v , x_1, \dots, x_k komponente vektora \mathbf{x} po putu P_k , i $x_{-1}, x_{-2}, \dots, x_{-l}$ komponente \mathbf{x} po putu P_l , kao što je i prikazano na Slici 4.3.

Pretpostavimo da je graf $G(v, k + 1, l - 1)$ dobijen iz grafa $G(v, k, l)$ "siftovanjem" puteva P_k i P_l za jednu poziciju preko čvora v i da svaki od čvorova "nosi" svoju x komponentu. Neka je \mathbf{x}^* vektor koji je dobijen ovim postupkom, kao što je i prikazano na Slici 4.3. Sledi da je $\mathbf{x}^{*T} \mathbf{x}^* = \mathbf{x}^T \mathbf{x}$. Sa druge strane, proizvod $\mathbf{x}^T D \mathbf{x}$ se može podeliti u tri sume

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^T D \mathbf{x} &= \sum_{u, w \in G-v} d_{uw} x_u x_w + \sum_{i=-l}^k \sum_{j=-l}^{i-1} |i - j| x_i x_j \\ &\quad + \sum_{u \in G-v} \sum_{i=-l}^k (d_{uv} + |i|) x_u x_i, \end{aligned}$$


 Slika 4.3: Grafovi $G(v, k, l)$ i $G(v, k + 1, l - 1)$.

dok se proizvod $\mathbf{x}^{*T} D^* \mathbf{x}^*$ može podeliti u četiri sume (prve dve sume odgovaraju prvim dvema sumama u proizvodu $\mathbf{x}^\top D \mathbf{x}$)

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{*T} D^* \mathbf{x}^* &= \sum_{u, w \in G-v} d_{uw} x_u x_w + \sum_{i=-l}^k \sum_{j=-l}^{i-1} |i-j| x_i x_j \\ &+ \sum_{u \in G-v} \sum_{i=0}^k (d_{uv} + |i| + 1) x_u x_i + \sum_{u \in G-v} \sum_{i=-l}^{-1} (d_{uv} + |i| - 1) x_u x_i \\ &= \mathbf{x}^\top D \mathbf{x} + \left(x_0 + \sum_{i=1}^k x_i - \sum_{i=-l}^{-1} x_i \right) \sum_{u \in G-v} x_u. \end{aligned}$$

Kako je $k \geq l \geq 1$, iz Leme 4.2.2 sledi

$$\sum_{i=1}^k x_i \geq \sum_{i=-l}^{-1} x_i,$$

i

$$\mathbf{x}^{*T} D^* \mathbf{x}^* \geq \mathbf{x}^\top D \mathbf{x} + x_0 \sum_{u \in G-v} x_u > \mathbf{x}^\top D \mathbf{x}.$$

Pošto je \mathbf{x} sopstveni vektor matrice D koji odgovara $\rho(G(v, k, l))$, iz Rejljevog odnosa imamo

$$\rho(G(v, k + 1, l - 1)) = \sup_{\mathbf{z} \neq 0} \frac{\mathbf{z}^\top D^* \mathbf{z}}{\mathbf{z}^\top \mathbf{z}} \geq \frac{\mathbf{x}^{*T} D^* \mathbf{x}^*}{\mathbf{x}^{*T} \mathbf{x}^*} > \frac{\mathbf{x}^\top D \mathbf{x}}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} = \rho(G(v, k, l)).$$

■

Dakle, dokazali smo da za $k \geq l \geq 1$ važi

$$\rho(G(v, k, l)) < \rho(G(v, k + 1, l - 1)) < \rho(G(v, k + 2, l - 2)) < \dots < \rho(G(v, k + l, 0)). \quad (4.14)$$

Neka je T stablo sa maksimalnim spektralnim radijusom matrice rastojanja među stablima sa n čvorova. Ako se u T nalazi čvor stepena bar tri, možemo posmatrati najdalji čvor od centra stabla – neka je to čvor v . Tada se T može predstaviti kao $G(v, k, l)$ za neki podgraf G , i brojeve k i l , tako da je $k \geq l \geq 1$. Za stablo $T' = G(v, k + l, 0)$ imamo $\rho(T) < \rho(T')$ po (4.14), što je kontradikcija u odnosu na izbor stabla T . Dakle, T ima maksimalni stepen dva, odnosno stablo sa najvećim spektralnim radijusom matrice rastojanja je put P_n .

Teorema 4.2.4 Neka je $T \not\cong B_{n,\Delta}$ proizvoljno stablo sa n čvorova i maksimalnim stepenom Δ . Tada

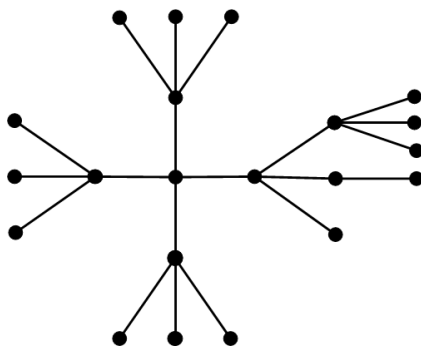
$$\rho(B_{n,\Delta}) > \rho(T).$$

Za $\Delta > 2$, možemo primeniti transformaciju iz Leme 4.2.3 na čvor stepena Δ u metli $B_{n,\Delta}$ i dobiti $B_{n,\Delta-1}$. Dakle,

$$\rho(S_n) = \rho(B_{n,n-1}) < \rho(B_{n,n-2}) < \dots < \rho(B_{n,3}) < \rho(B_{n,2}) = \rho(P_n).$$

Iz gornjeg niza, sledi da $B_{n,3}$ ima drugi maksimalni spektralni radijus rastojanja među stablima sa n čvorova.

Kompletno Δ -arno stablo se definiše na sledeći način. Polazimo od korena koji ima tačno Δ suseda. Svaki čvor koji je različit od korena, koji se ne nalazi u nekom od poslednja dva nivoa, ima tačno $\Delta - 1$ direktnih potomaka. Iako poslednji nivo ne mora biti kompletno popunjen, čvorovi se popunjavaju sleva udesno (uzastopno). Dakle, najviše jedan čvor na pretposlednjem nivou ima stepen koji nije Δ ili 1 (videti Sliku 4.4).



Slika 4.4: Kompletno stablo sa $\Delta = 4$ i $n = 21$.

U [109] autori su predložili da se ova stabla zovu *Volkmanova stabla*, jer su Volkmann i drugi u [93] okarakterisali alkane sa minimalnim Wienerovim indeksom. Volkmanova stabla takođe imaju najveći spektralni radijus [221] ili indeks ekscentrične povezanosti [145] među stablima sa maksimalnim stepenom Δ .

Kompjuterska pretraga među stablima do 22 čvora otkriva da kompletno Δ -arno stablo dostiže minimalnu vrednost spektralnog radijusa matrice rastojanja u istoj klasi stabala, pa postavljamo sledeću hipotezu.

Hipoteza 4.2.5 Kompletno Δ -arno stablo ima minimalni spektralni radijus matrice rastojanja $\rho(T)$ među stablima sa n čvorova i maksimalnim stepenom Δ .

4.2.1 Nove transformacije stabla

Neka je \mathbf{x} Peronov sopstveni vektor koji odgovara spektralnom radijusu ρ' stabla T' , i neka je S suma svih komponenti vektora \mathbf{x} . Koristeći simetriju, označimo komponente Peronovog vektora koje odgovaraju čvorovima koji nisu iz G sa a, b, c, d kao što je prikazano na Slici 4.5. Posle transformacije $T \mapsto T'$, rastojanja od čvorova sa komponentama a, b i c (osim čvora v) do svih čvorova iz G su se smanjila za 1, dok su se rastojanja od v do svih čvorova koji nisu u G povećala za 1. Neka je S' suma komponenti Peronovog vektora čvorova koji nisu u G , $S' = p(a + b) + (q + 1)c$. Kako postoji bar jedan list koji je susedan sa čvorom w u T' , imamo procenu $S' > c$. Ako je $S > S' + c$, korišćenjem Rejljevog odnosa sledi

$$\begin{aligned} \rho &\geq \frac{\mathbf{x}^\top D \mathbf{x}}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}^\top D' \mathbf{x} + 2(S - S')(S' - c) - 2c(S' - c)}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} \\ &= \frac{\mathbf{x}^\top D' \mathbf{x} + 2(S' - c)(S - S' - c)}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} > \frac{\mathbf{x}^\top D' \mathbf{x}}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} = \rho'. \end{aligned}$$

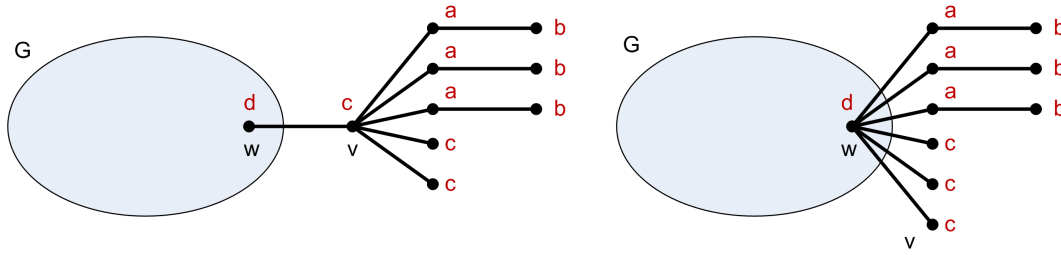
Sada pretpostavimo da važi $S \leq S' + c$. Dokazaćemo da postoji bar jedan čvor grafa G sa komponentom Peronovog vektora $e > d$ koji ima bar jedan susedan čvor koji je list. Za svaku granu uu' iz $E(G)$, za koju je u' dalje od w nego u u stablu T' , imamo

$$\rho'(x_{u'} - x_u) = S_u - S_{u'} = 2S_u - S \geq 2(S' + d) - (S' + c) = S' + 2d - c > 0$$

i konačno $x_{u'} > x_u$. To znači da svi čvorovi iz G moraju imati veću komponentu Peronovog vektora od d . Za proizvoljni list u' i njegovog suseda u , imamo

$$x_{u'} = \frac{S + \rho'x_u}{\rho' + 2} > \frac{S + \rho'd}{\rho' + 2} = c,$$

što je kontradikcija, jer je $S \geq S' + d + x_{u'} > S' + c$.



Slika 4.5: Stablo T i transformisano stablo T' .

Neka je \mathbf{x} Peronov sopstveni vektor koji odgovara spektralnom radijusu ρ'' stabla T'' , i neka je S suma svih komponenti vektora \mathbf{x} . Slično, koristeći simetriju, označimo komponente Peronovog vektora sa a, b, c, d kao na Slici 4.6. Posle transformacije $T \mapsto T''$, rastojanja od čvorova sa komponentama a, b i c do svih čvorova iz G su se smanjila za 1, osim kod čvorova v i v' , dok su se rastojanja od v i v' do svih čvorova koji nisu u G povećala za 1. Neka je S'' suma komponenti Peronovog vektora čvorova koji nisu u G , $S'' = (p+1)(a+b) + (q-1)c$. Pretpostavimo da postoji bar jedan viseći put P_3 susedan sa w u T'' . Sada imamo procenu $S'' > a+b$. Ako je $S > S'' + a+b$, korišćenjem Rejlijevog odnosa sledi

$$\begin{aligned} \rho &\geq \frac{\mathbf{x}^\top D \mathbf{x}}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}^\top D'' \mathbf{x} + 2(S - S'')(S'' - a - b) - 2(a+b)(S'' - a - b)}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} \\ &= \frac{\mathbf{x}^\top D'' \mathbf{x} + 2(S'' - a - b)(S - S'' - a - b)}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} > \frac{\mathbf{x}^\top D'' \mathbf{x}}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} = \rho''. \end{aligned}$$

Neka je sada $S \leq S'' + a + b$. Za svaku granu uu' iz G , takvu da je u' dalje od u u odnosu na w u stablu T' , imamo

$$\rho''(x_{u'} - x_u) = S_u - S_{u'} = 2S_u - S \geq 2(S'' + d) - (S'' + a + b) = S'' + 2d - a - b > 0.$$

i konačno $x_{u'} > x_u$. To znači da svi čvorovi iz G moraju imati veću komponentu Peronovog vektora od d . Za proizvoljan viseći put P_3 susedan sa u u G , sledi

$$x_u \cdot f(2) + \frac{S}{\rho''} \cdot g(2) > d \cdot f(2) + \frac{S}{\rho''} \cdot g(2) = a + b,$$

što je nemoguće, jer je $S \geq S'' + d + a + b$. Dakle, nejednakost $\rho(T) > \rho(T'')$ važi ako postoji bar jedan čvor u iz G sa visećim put P_3 . Neka sada postoje bar tri lista u grafu G . Korišćenjem softvera Wolfram MATHEMATICA [212], sledi

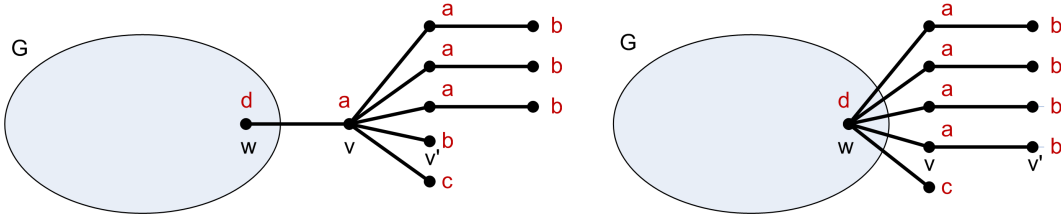
$$f(1) = g(1) = \frac{\rho}{\rho + 2}$$

$$f(2) = \frac{2\rho(\rho+1)}{\rho^2+6\rho+4} \quad \text{i} \quad g(2) = \frac{\rho(3\rho+2)}{\rho^2+6\rho+4}.$$

Za $n > 4$, imamo $\rho > 6$. Jednostavnim manipulacijama dobijamo $f(2) < 2 \cdot f(1)$ i $2 \cdot g(1) < g(2) < 3 \cdot g(1)$. Kako je $x_u > d$,

$$3 \left(x_u \cdot f(1) + \frac{S}{\rho''} \cdot g(1) \right) > d \cdot f(2) + \frac{S}{\rho''} \cdot g(2) = a + b,$$

što je kontradikcija. Najzad, preostaje slučaj kada imamo tačno dva lista sa zajedničkim susedom u G .



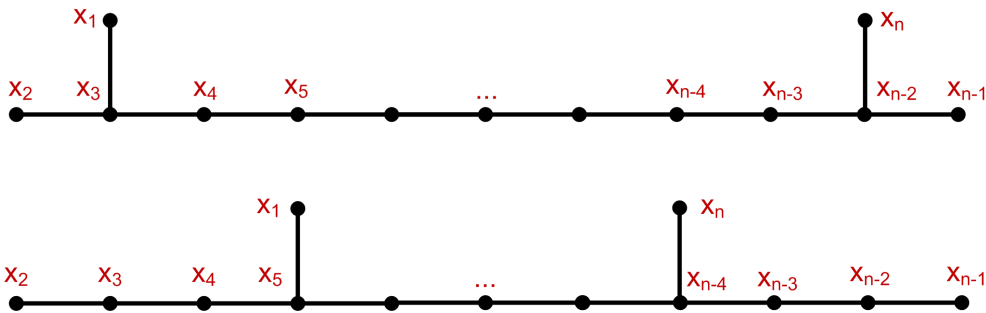
Slika 4.6: Stablo T i transformisano stablo T'' .

Neka su T i T^* stabla ilustrovana na Slici 4.7 i neka je \mathbf{x} Peronov sopstveni vektor koji odgovara spektralnom radijusu ρ^* stabla T^* . Primitimo da stabla T i T^* imaju uparivajući broj $m = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor - 1$ za $n \geq 10$.

Koristeći simetriju dobijamo $x_k = x_{n+1-k}$, $k = 1, 2, \dots, n$. Posle transformacije, rastojanja između čvorova na putu ostaju ista, dok za dva lista sa Peronovim komponentama $x_1 = x_n$ imamo

$$\begin{aligned} \rho &> \frac{\mathbf{x}^\top D \mathbf{x}}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} \\ &= \frac{\mathbf{x}^\top D^* \mathbf{x} + 2x_1 \left(-2x_2 - 2x_3 + 2 \sum_{k=5}^{n-1} x_k \right) + 2x_n \left(-2x_{n-1} - 2x_{n-2} + \sum_{k=2}^{n-4} x_k \right) + 8x_1 x_n}{x^\top x} \\ &= \frac{\mathbf{x}^\top D^* \mathbf{x} + 8x_1 x_n + 4(x_1 + x_n) \cdot \sum_{k=5}^{n-4} x_k + 4x_1 x_{n-3} + 4x_n x_4}{x^\top x} \\ &> \frac{\mathbf{x}^\top D^* \mathbf{x}}{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} = \rho^*. \end{aligned}$$

To znači da je $\rho(T) > \rho(T^*)$ za $n \geq 10$.

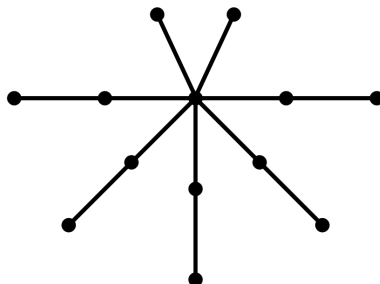


Slika 4.7: Specijalan slučaj – stabla T i T^* .

Direktnom proverom pomoću softvera Wolfram MATHEMATICA, sledi $\rho(T) > \rho(A(n, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor - 1))$ za $6 \leq n \leq 9$.

4.3 Stabla sa fiksiranim uparivajućim brojem

Definišimo stablo $A(n, m)$, $n \geq 2m$, sa n čvorova na sledeći način: $A(n, m)$ se dobija od zvezde S_{n-m+1} dodavanjem visećih grana na neke od $m - 1$ necentralnih čvorova zvezde S_{n-m+1} . Stablo $A(n, m)$ nazivamo bodlja (eng. spur) i primetimo da je njen uparivajući broj upravo m . Centar bodlje $A(n, m)$ je upravo centar zvezde S_{n-m+1} .



Slika 4.8: Bodlja $A(13, 6)$.

n/m	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
4	4.646	5.162								
5	6.606	7.459								
6	8.583	9.670	10.742							
7	10.568	11.828	13.070							
8	12.557	13.951	15.321	16.670						
9	14.550	16.050	17.521	18.967						
10	16.544	18.131	19.685	21.210	22.710					
11	18.539	20.200	21.822	23.413	24.977					
12	20.536	22.258	23.939	25.587	27.205	28.798				
13	22.533	24.308	26.040	27.737	29.403	31.041				
14	24.530	26.351	28.129	29.869	31.576	33.256	34.910			
15	26.528	28.390	30.207	31.985	33.730	35.446	37.136			
16	28.526	30.424	32.276	34.089	35.868	37.617	39.338	41.036		
17	30.524	32.454	34.338	36.182	37.991	39.770	41.522	43.248		
18	32.523	34.481	36.394	38.266	40.104	41.910	43.688	45.441	47.171	
19	34.521	36.506	38.444	40.343	42.206	44.037	45.840	47.618	49.372	
20	36.520	38.528	40.490	42.412	44.299	46.154	47.980	49.780	51.557	53.313

Tabela 4.1: Spektralni radijus matrice rastojanja bodlje $A(n, m)$.

U Tabeli 4.1 su prikazani rezultati kompjuterske pretrage za minimalni spektralni radijus matrice rastojanja među stablima sa $n = 4$ do $n = 20$ čvorova i svakim uparivajućim brojem $1 \leq m \leq \lfloor n/2 \rfloor$.

U [127] autori su dokazali da ako je T stablo sa n čvorova i uparivajućim brojem m , $n \geq 2m$, i ako je $T \neq A(n, m)$, tada

$$\lambda_1(T) < \lambda_1(A(n, m)) = \frac{1}{2} \left(\sqrt{n - m + 1 - 2\sqrt{n - 2m + 1}} + \sqrt{n - m + 1 + 2\sqrt{n - 2m + 1}} \right),$$

gde je $\lambda_1(T)$ najveća sopstvena vrednost matrice susedstva $A(T)$.

Hosoya indeks grafa je definisan kao ukupan broj nezavisnih skupova grana grafa G , $Z(G) = \sum_{k=0}^m m_k(G)$. Hou u [131] je dokazao da za proizvoljno stablo T sa n čvorova i uparivajućim brojem m važi

$$Z(T) \geq 2^{m-2}(2n - 3m + 3),$$

sa jednakošću ako i samo ako je T izomorfno sa bodljom $A(n, m)$. U [257] autori su dokazali da je energija grafa $E(T)$ minimalna upravo za $A(n, \frac{n}{2})$ u klasi stabala koje imaju savršeno uparivanje. Nedavno je Guo u [99] generalizovao ovaj rezultat i prikazao stabla sa drugom, trećom i četvrtom minimalnom energijom u istoj klasi stabala.

Pretpostavimo da u stablu T postoji viseći put dužine $p > 2$ koji polazi od čvora v . Možemo posmatrati novo stablo T^c koje ima dva viseća puta koja polaze iz v , sa dužinama 2 i $p - 2$. Uparivajući brojevi stabala T i T^c su jednaki po opisanom algoritmu, pošto u svakom koraku možemo uklanjati proizvoljnu viseću granu. Po Lemi 4.2.3, sledi $\rho(T) > \rho(T^c)$. Dakle, možemo pretpostaviti da u ekstremalnom stablu svi viseći putevi imaju dužinu jedan ili dva.

Dokazaćemo da pomoću transformacija $T \mapsto T'$, $T \mapsto T''$ i $T \mapsto T^*$, uparivajući broj može ostati isti. Koristićemo iste oznake kao u prethodnoj sekciji. Neka je v čvor stepena $p + q + 1$. Dalje, neka je w roditelj čvora v i pretpostavimo da postoje tačno p visećih puteva P_3 i q visećih puteva P_2 koji polaze iz v .

Ako je $q = 0$, tada sledi $m(T') = m(T)$, i $\rho(T') < \rho(T)$.

Ako čvor w nije savršeno uparen, tada postoji uparivanje M maksimalne kardinalnosti, tako da ni jedna grana iz M nije incidentna sa w . Dalje dobijamo

$$m(T') = m(G \setminus \{w\}) + p + 1 = m(G) + p + 1 = m(T).$$

Ako je čvor w savršeno uparen i $q > 0$, za svako uparivanje M maksimalne kardinalnosti, postoji grana iz M koja je incidentna sa w (takva grana nije vw). Očigledno

$$m(T'') = m(G) + p + 1 = m(T).$$

Sada možemo dokazati glavni rezultat ove sekcije.

Teorema 4.3.1 *Neka je T proizvoljno stablo sa $n \geq 4$ čvorova i uparivajućim brojem $1 \leq m \leq \lfloor n/2 \rfloor$. Tada važi*

$$\rho(T) \geq \rho(A(n, m)),$$

sa jednakošću ako i samo ako $T \cong A(n, m)$.

Dokaz. Ako T ima samo jedan čvor stepena većeg od dva (granajući čvor), možemo primeniti prethodno opisanu transformaciju na taj čvor i smanjiti spektralni radijus matrice susedstva, pri čemu ne menjamo uparivajući broj. Najzad svi viseći putevi će biti dužine jedan ili dva, tako da je bodlja $A(n, m)$ jedino stablo sa datim parametrima n i m .

Dakle, pretpostavimo da postoje bar dva granajuća čvora. Neka su v i u dva granajuća čvora koja su najudaljenija od centralnog čvora stabla T . Kako su samo viseći putevi dužina jedan i dva susedni sa v i u , pretpostavimo da je broj visećih puteva dužine dva koji su susedni sa v manji ili jednak od broja visećih puteva dužine dva koji su susedni sa u (u slučaju jednakosti, broj listova koji su susedni sa v je manji ili jednak od broja listova koji su susedni sa u).

Ako roditelj čvora v nije savršeno uparen u T ili ne postoje listovi susedni sa v , možemo primeniti transformaciju kojom dobijamo stablo T' sa uparivajućim brojem m i smanjujemo spektralni radijus matrice rastojanja. Ako je roditelj čvora v savršeno uparen u T ili postoje bar pet listova ili jedan viseći put dužine dva u T , možemo primeniti transformaciju kojom dobijamo stablo T'' sa uparivajućim brojem m i smanjujemo spektralni radijus matrice rastojanja. Inače, stablo T ima tačno četiri lista i možemo primeniti transformaciju iz specijalnog slučaja i dobiti stablo T^* i smanjiti $\rho(T)$. Daljom primenom ovog algoritma, dobijamo da je $A(n, m)$ jedinstveno stablo sa najmanjim spektralnim radijusom među stablima sa uparivajućim brojem m . ■

Sada možemo primeniti transformaciju iz Leme 4.2.3 na centralni čvor bodlje $A(n, m)$ i dobiti $A(n, m + 1)$. Dakle, imamo sledeći niz nejednakosti

$$\rho(S_n) \equiv \rho(A(n, 1)) < \rho(A(n, 2)) < \dots < \rho(A(n, \lfloor n/2 \rfloor)).$$

Koristeći relaciju (4.1) za stabla sledi

Posledica 4.3.2 *Među svim stablima sa n čvorova i uparivajućim brojem m , bodlja $A(n, m)$ minimizira energiju rastojanja.*

Broj nezavisnosti $\alpha(G)$ grafa G predstavlja veličinu najvećeg nezavisnog skupa čvorova. Kako u bilo kojem bipartitnom grafu zbir broja nezavisnosti i uparivajućeg broja jednak ukupnom broju čvorova [43], sledi

Posledica 4.3.3 *Među svim stablima sa n čvorova i brojem nezavisnosti α , bodlja $A(n, n - \alpha)$ minimizira energiju rastojanja.*

Teg $D(n, a, b)$ se sastoji od puta P_{n-a-b} i a listova susednih sa jednim krajem puta i b listova susednih sa drugim krajem puta P_{n-a-b} . U [54] je dokazano da

$$W(T) \leq W(D(n, \lceil \frac{n+1}{2} \rceil - m, \lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor - m)),$$

sa jednakošću ako i samo ako $G \cong D(n, \lceil \frac{n+1}{2} \rceil - m, \lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor - m)$. Na osnovu kompjuterske pretrage među stablima sa ≤ 22 čvora i jake korelacije između Wienerovog indeksa i spektralnog radijusa matrice rastojanja kod stabala, predlažemo sledeću hipotezu.

Hipoteza 4.3.4 *Među stablima sa n čvorova i fiksiranim uparivajućim brojem m , balansirani teg $D(n, \lceil \frac{n+1}{2} \rceil - m, \lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor - m)$ je jedinstveno stablo sa maksimalnim spektralnim radijusom matrice rastojanja.*

4.4 Grafovi sa fiksiranim hromatskim brojem

Lema 4.4.1 *Neka je G povezan graf sa $n \geq 3$ čvorova i neka je \mathbf{x} Peronov vektor koji odgovara spektralnom radijusu matrice rastojanja. Ako važi $N_G(v) \setminus \{u\} = N_G(u) \setminus \{v\}$ za neka dva čvora u i v , tada je $x_v = x_u$.*

Dokaz. Iz matrične jednakosti $A \cdot \mathbf{x} = \rho(G) \cdot \mathbf{x}$, za komponente u i v imamo

$$\rho \cdot x_v = d_{uv} \cdot x_u + \sum_{w \in V \setminus \{v, u\}} d_{vw} x_w$$

$$\rho \cdot x_u = d_{vu} \cdot x_v + \sum_{w \in V \setminus \{v, u\}} d_{uw} x_w.$$

Skupovi direktnih suseda čvorova u i v su jednaki, pa sledi $d_{uw} = d_{vw}$ za svaki čvor w iz $V \setminus \{v, u\}$. Oduzimanjem gornjih relacija dobijamo $(\rho - d_{vu})(x_v - x_u) = 0$. Kako je $d_{uv} = 1$ ili $d_{uv} = 2$, dobijamo $\rho > d_{vu}$ i konačno $x_v = x_u$. ■

Kompletan k -partitan graf sa particijama V_1, V_1, \dots, V_k označavamo sa $K_{|V_1|, |V_2|, \dots, |V_k|}$. Neka je $T_{n, k}$ balansirani k -partitni Turanov graf sa n čvorova (takav da važi $||V_i| - |V_j|| \leq 1$ za svako $1 \leq i, j \leq k$) [23].

Lema 4.4.2 *Neka je $G \cong K_{n_1, n_2, \dots, n_k}$ kompletan k -partitan graf. Ako je $n_i \geq n_j + 2$, tada za $G' \cong K_{n_1, n_2, \dots, n_i-1, \dots, n_j+1, \dots, n_k}$ važi*

$$\rho(G') < \rho(G).$$

Dokaz. Neka je $n'_1 = n_1, n'_2 = n_2, \dots, n'_i = n_i - 1, \dots, n'_j = n_j + 1, \dots, n'_k = n_k$. Po Lemi 4.4.1, normalizovani Peronov vektor grafa G' je oblika

$$\mathbf{x}' = \left(\underbrace{y_1, \dots, y_1}_{n_1}, \underbrace{y_2, \dots, y_2}_{n_2}, \dots, \underbrace{y_i, \dots, y_i}_{n_i-1}, \dots, \underbrace{y_j, \dots, y_j}_{n_j+1}, \dots, \underbrace{y_k, \dots, y_k}_{n_k} \right)^\top.$$

Iz matrične jednačine direktno dobijamo

$$\rho' y_i = \sum_{m=1}^k n'_m y_m + (n'_i - 2) y_i$$

$$\rho' y_j = \sum_{m=1}^k n'_m y_m + (n'_j - 2) y_j,$$

odnosno

$$n'_i - n'_j = \left(\frac{1}{y_j} - \frac{1}{y_i} \right) \sum_{m=1}^k n'_m y'_m.$$

Pošto je $n'_i > n'_j$, imamo važnu nejednakost $y_i > y_j$.

Sada pretpostavimo da važi $\rho(G') \geq \rho(G)$; tada je

$$\mathbf{x}^\top D(G') \mathbf{x} = \rho(G') \geq \rho(G) \geq \mathbf{x}^\top D(G) \mathbf{x}.$$

U grafu G' su se promenila samo rastojanja između čvorova particija V_i i V_j . Oduzimanjem sledi

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^\top (D(G') - D(G)) \mathbf{x} &= \sum_{v,u \in V} (d'_{uv} - d_{uv}) x'_u x'_v \\ &= 2y_j (y_j (n'_j - 1) - y_i n'_i) < 0, \end{aligned}$$

zbog $n'_i > n'_j - 1$. To je kontradikcija, pa važi $\rho(G') < \rho(G)$. ■

Korišćenjem relacije (4.3) lako pokazujemo da je ekstremalni graf sa minimalnim spektralnim radijusom matrice rastojanja upravo kompletan χ -partitni graf. Iz prethodne leme, direktno dobijamo

Teorema 4.4.3 *Među grafovima sa n čvorova i hromatskim brojem χ , $2 \leq \chi \leq n - 1$, Turanov graf $T_{n,\chi}$ ima minimalni spektralni radijus matrice rastojanja.*

Primedba 4.4.4 *U [185] autor je dokazao ovu teoremu, ali uz računsku grešku pri kraju dokaza Teoreme 3,*

$$x^\top (G_1) (D(G) - D(G_1)) x(G_1) = 2y_1 (-y_1 n_1 + y_2 (n_2 - 1)) > 0,$$

uz nejednakosti $n_2 - 1 > n_1$ i $y_2 > y_1$.

Split kompletan graf (eng. complete split graph) $CS(a, b)$ je definisan kao $\overline{K_a} \nabla K_b$, dobijen od kompletnog grafa K_b i nezavisnog skupa $\overline{K_a}$ dodavanjem svih grana između ova dva grafa.

Teorema 4.4.5 *Među grafovima sa n čvorova i fiksiranim brojem nezavisnosti α , split kompletan graf $CS(\alpha, n - \alpha)$ ima minimalni spektralni radijus matrice rastojanja.*

Dokaz. Neka je G^* ekstremalni graf sa n čvorova i brojem nezavisnosti α koji ima minimalni spektralni radijus matrice rastojanja. Neka je I^* nezavisan skup čvorova grafa G^* . Po relaciji (4.3) jednostavnim dodavanjem grana sledi da je G^* izomorfan sa $CS(\alpha, n - \alpha)$.

Neka je \mathbf{x} Peronov vektor koji odgovara spektralnom radijusu $\rho(G^*) = \rho$ matrice rastojanja. Zbog simetrije, možemo pretpostaviti da su komponente vektora \mathbf{x} koje odgovaraju čvorovima iz $K_{n-\alpha}$ jednake x_1 , dok su komponente vektora \mathbf{x} koje odgovaraju čvorovima iz \overline{K}_α jednake x_2 . Tada imamo

$$\begin{aligned}\rho x_1 &= (n - \alpha - 1)x_1 + \alpha x_2, \\ \rho x_2 &= (n - \alpha)x_1 + 2(\alpha - 1)x_2.\end{aligned}$$

Kombinacijom gornjih izraza, dobijamo

$$\rho^2 - (n + \alpha - 3)\rho + \alpha n - 2n - \alpha^2 + 2 = 0,$$

odnosno

$$\rho = \frac{1}{2} \left(n + \alpha - 3 + \sqrt{n^2 - 2\alpha n + 2n + 5\alpha^2 - \alpha + 1} \right).$$

■

4.5 Granice za ρ kod generalnih grafova

U ovoj sekciji dajemo donje i gornje granice za $\rho(G)$ povezanih grafova G .

Teorema 4.5.1 *Neka je G povezan graf sa n čvorova, najvećim stepenom Δ_1 i drugim najvećim stepenom Δ_2 . Tada*

$$\rho(G) \geq \sqrt{(2n - 2 - \Delta_1)(2n - 2 - \Delta_2)}$$

sa jednakošću ako i samo ako je G regularan graf sa dijametrom 1 ili 2.

Dokaz. Neka je $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^\top$ Peronov sopstveni vektor matrice rastojanja $D(G)$ koji odgovara najvećoj sopstvenoj vrednosti $\rho(G)$, uz

$$x_i = \min_{k \in V(G)} x_k \quad \text{i} \quad x_j = \min_{\substack{k \in V(G) \\ k \neq i}} x_k.$$

Iz jednačine $\rho(G) \cdot \mathbf{x} = D(G) \cdot \mathbf{x}$ za komponentu x_i imamo

$$\rho(G)x_i = \sum_{k=1}^n d_{ik} \cdot x_k \geq d_i x_j + (n - 1 - d_i)2x_j = (2n - 2 - d_i)x_j.$$

Analogno za komponentu x_j imamo

$$\rho(G)x_j = \sum_{k=1}^n d_{jk} \cdot x_k \geq d_j x_i + (n - 1 - d_j)2x_i = (2n - 2 - d_j)x_i.$$

Kombinovanjem ove dve nejednakosti, sledi

$$\rho(G) \geq \sqrt{(2n - 2 - d_i)(2n - 2 - d_j)} \geq \sqrt{(2n - 2 - \Delta_1)(2n - 2 - \Delta_2)}.$$

Jednakost važi ako i samo ako je dijametar grafa G manji ili jednak od 2, i kada su sve komponente x_i jednake. Za $d = 1$, imamo samo kompletan graf K_n . Za $d = 2$, imamo $\rho(G)x_i = d_i x_i + 2(n - 1 - d_i)x_i$ i $\rho(G) = 2n - 2 - d_i$, što znači da je G regularan graf. Obrnuto, lako se vidi da je $\rho(G) = 2n - 2 - \Delta_1$ ako je G regularan graf sa dijametrom manjim ili jednakim od 2. ■

Teorema 4.5.2 *Neka je G povezan graf sa n čvorova, minimalnim stepenom δ_1 i drugim minimalnim stepenom δ_2 . Neka je d dijametar grafa G . Tada*

$$\rho(G) \leq \sqrt{\left[dn - \frac{d(d-1)}{2} - 1 - \delta_1(d-1)\right] \left[dn - \frac{d(d-1)}{2} - 1 - \delta_2(d-1)\right]}$$

sa jednakošću ako i samo ako je G regularan graf sa dijametrom manjim ili jednakim 2.

Dokaz. Neka je $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^\top$ Peronov sopstveni vektor matrice rastojanja $D(G)$, uz

$$x_i = \max_{k \in V(G)} x_k \quad \text{i} \quad x_j = \max_{\substack{k \in V(G) \\ k \neq i}} x_k.$$

Iz jednačine $\rho(G) \cdot x = D(G) \cdot x$ za komponentu x_i imamo

$$\begin{aligned} \rho(G)x_i &\leq d_i x_j + 2x_j + 3x_j + \dots + (d-1)x_j + d[n-1-d_i-(d-2)]x_j \\ &= \left(dn - \frac{d(d-1)}{2} - 1 - d_i(d-1)\right)x_j. \end{aligned}$$

Analogno za komponentu x_j imamo

$$\begin{aligned} \rho(G)x_j &\leq d_j x_i + 2x_i + 3x_i + \dots + (d-1)x_i + d[n-1-d_j-(d-2)]x_i \\ &= \left(dn - \frac{d(d-1)}{2} - 1 - d_j(d-1)\right)x_i. \end{aligned}$$

Kombinovanjem gornjih nejednakosti, sledi

$$\begin{aligned} \rho(G) &\leq \sqrt{\left[dn - \frac{d(d-1)}{2} - 1 - d_i(d-1)\right] \left[dn - \frac{d(d-1)}{2} - 1 - d_j(d-1)\right]} \\ &\leq \sqrt{\left[dn - \frac{d(d-1)}{2} - 1 - \delta_1(d-1)\right] \left[dn - \frac{d(d-1)}{2} - 1 - \delta_2(d-1)\right]}. \end{aligned}$$

Jednakost važi ako i samo ako su sve komponente Peronovog sopstvenog vektora jednake, odnosno ako matrica $D(G)$ ima jednake sume po vrstama. Iz gornjih uslova dobijamo da za svaki čvor i postoji tačno jedan čvor j na rastojanju 2 ili i , pa je zato dijametar grafa G manji od 4. Ako bi dijametar grafa G bio tri, tada za centralni čvor s (sa ekscentricitetom dva) imamo

$$\rho(G)x_s = d_s x_s + (n-1-d_s)2x_s = \left[3n - \frac{3(3-1)}{2} - 1 - d_s(3-1)\right]x_s$$

i $d_s = n-2$ što povlači $G \cong P_4$. Kako su komponente sopstvenog vektora za $D(P_4)$ različite, zaključujemo da jednakost važi ako i samo ako je G regularan graf dijametra 1 ili 2. \blacksquare

Time smo poboljšali nejednakosti za spektralni radijus matrice rastojanja iz [56].

4.6 Granice za ρ kod bipartitnih grafova

Nejednakost (4.3) pokazuje da kompletan bipartitan graf $K_{p,q}$ ima maksimalni spektralni radijus matrice rastojanja među povezanim bipartitnim grafovima sa p čvorova u jednoj particiji i q čvorova u drugoj particiji. Spektar matrice rastojanja grafa $K_{p,q}$ se sastoji od prostih sopstvenih vrednosti $p+q-2 \pm \sqrt{p^2-pq+q^2}$, i -2 sa višestrukošću $p+q-2$. Dakle, imamo procenu $\rho(G) \geq n-2 + \sqrt{n^2-3pq}$ sa jednakošću ako i samo ako $G \cong K_{p,q}$. Ovo je takođe pokazao Das [56] koristeći drugu tehniku. Primitimo da $\rho(K_{p,q}) = p+q-2 + \sqrt{(p+q)^2-3pq}$ dostiže minimum ako i samo ako je $|p-q| \leq 1$,

Teorema 4.6.1 Među svim povezanim bipartitnim grafovima sa n čvorova, graf $K_{\lfloor n/2 \rfloor, \lceil n/2 \rceil}$ ima minimalni, a put P_n maksimalni spektralni radijus matrice rastojanja.

Sada prezentujemo jaču donju granicu za $\rho(G)$ kod bipartitnih grafova, koja uključuje maksimalne stepene u obe particije.

Teorema 4.6.2 Neka je G povezan bipartitan graf sa biparticijom $V(G) = A \cup B$, $|A| = p$, $|B| = q$ i $p + q = n$. Neka su Δ_A i Δ_B maksimalni stepeni među čvorovima iz A i B , redom. Tada

$$\rho(G) \geq n - 2 + \sqrt{n^2 - 4pq + (3q - 2\Delta_A)(3p - 2\Delta_B)},$$

sa jednakošću ako i samo ako je G kompletan bipartitan graf $K_{p,q}$ ili je G biregularan bipartitan graf gde je ekscentricitet svakog čvora jednak 3.

Dokaz. Neka je $A = \{1, 2, \dots, p\}$ i $B = \{p+1, p+2, \dots, p+q\}$ i neka je $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^\top$ Peronov sopstveni vektor matrice $D(G)$ sa

$$x_i = \min_{k \in A} x_k \quad \text{i} \quad x_j = \min_{k \in B} x_k.$$

Iz matrice jednačine $\rho(G) \cdot \mathbf{x} = D(G) \cdot \mathbf{x}$ za komponentu x_i imamo

$$\begin{aligned} \rho(G)x_i &= \sum_{k=1}^p d_{ik} \cdot x_k + \sum_{k=p+1}^{p+q} d_{ik} \cdot x_k \geq 2(p-1)x_i + d_i x_j + 3(q-d_i)x_j \\ &\geq 2(p-1)x_i + (3q - 2\Delta_A)x_j. \end{aligned}$$

Analogno za komponentnu x_j imamo

$$\begin{aligned} \rho(G)x_j &= \sum_{k=1}^p d_{jk} \cdot x_k + \sum_{k=p+1}^{p+q} d_{jk} \cdot x_k \geq d_j x_i + 3(p-d_j)x_i + 2(q-1)x_j \\ &\geq (3p - 2\Delta_B)x_i + 2(q-1)x_j. \end{aligned}$$

Kombinovanjem ove dve nejednakosti, sledi

$$(\rho(G) - 2(p-1))(\rho(G) - 2(q-1))x_i x_j \geq (3q - 2\Delta_A)(3p - 2\Delta_B)x_i x_j.$$

Kako je $x_k > 0$ za $1 \leq k \leq p+q$,

$$\rho^2(G) - 2(p+q-2)\rho(G) + 4(p-1)(q-1) - (3q - 2\Delta_A)(3p - 2\Delta_B) \geq 0.$$

Iz ove nejednakosti direktno dobijamo rezultat.

Za slučaj jednakosti, imamo $x_i = x_k$ za $k = 1, 2, \dots, p$ i $x_j = x_k$ za $k = p+1, p+2, \dots, p+q$. To znači da sopstveni vektor \mathbf{x} ima najviše dve različite komponente i da su stepeni čvorova u A jednaki Δ_A , a stepeni čvorova u B jednaki Δ_B . Ako G nije kompletan bipartitni graf, iz $p\Delta_A = q\Delta_B$ sledi $\Delta_A < q$ i $\Delta_B < p$ i ekscentricitet svakog čvora mora biti jednak 3. Time je dokaz kompletno završen. ■

Das u [56] je dokazao da

$$\rho(G) \leq \frac{1}{2} \left[d(n-2) + \sqrt{d^2 n^2 - 4pq(2d-1)} \right]$$

za parno d , i

$$\rho(G) \leq \frac{1}{2}(d-1)(n-2) + \frac{1}{2} \sqrt{(d-1)^2 n^2 + 4\delta^2 (d-1)^2 - 4pq(2d-1) - 4d(d-1)\delta n}$$

za neparno d .

Slično dokazujemo sledeću teoremu i popravljamo pomenute gornje granice za parno i neparno d .

Teorema 4.6.3 *Neka je G povezan bipartitan graf sa n čvorova, dijametrom d i biparticijom $V(G) = A \cup B$, $|A| = p$, $|B| = q$, $p + q = n$. Neka su δ_A i δ_B minimalni stepeni među čvorovima iz A i B , redom. Tada*

$$\rho(G) \leq \frac{d}{2} \left(n - 1 - \frac{d}{2} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{d^2 n^2 + 4\delta_A \delta_B (d-2)^2 - 4pq(2d-1) - 4(d-1)(d-2)(p\delta_A + q\delta_B)}$$

za parno d , i

$$\rho(G) \leq \frac{2(d-1)n + 1 - d^2}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{(d-1)^2 n^2 + 4\delta_A \delta_B (d-1)^2 + 4pq(2d-1) - 4d(d-1)(p\delta_A + q\delta_B)}$$

za neparno d .

4.7 Donje i gornje granice za DE

Neka je G povezan graf sa $n \geq 2$ čvorova. Kako je $\sum_{i=1}^n \rho_i = 0$, sledi

$$DE(G) \geq 2\rho_1$$

sa jednakošću ako i samo ako G ima tačno jednu pozitivnu sopstvenu vrednost matrice rastojanja. Dakle, donje granice za ρ_1 se mogu pretvoriti u donje granice za energiju rastojanja DE .

Neka je D_i predstavlja sumu u i -toj vrsti matrice $D(G)$, odnosno $D_i = \sum_{j=1}^n d_{ij}$, za $i = 1, 2, \dots, n$. U [270] je dokazano da važi

$$\rho(G) \geq \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n D_i^2}, \quad (4.15)$$

sa jednakošću ako i samo ako $D(G)$ ima jednake sume po vrstama.

Teorema 4.7.1 *Neka je G povezan graf sa $n \geq 2$ čvorova. Tada*

$$DE(G) \geq 2 \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n D_i^2}$$

sa jednakošću ako i samo ako G ima tačno jednu pozitivnu D -sopstvenu vrednost i $D(G)$ ima jednake sume po vrstama.

Podsetimo se da stabla [46], povezani uniciklični grafovi [16], kompletni bipartitni grafovi [46] i kompletni graf K_n imaju tačnu jednu pozitivnu D -sopstvenu vrednost. Kompletna karakterizacija takvih grafova nije poznata.

Iz (4.15) i korišćenjem nejednakosti Koši–Švarca dobijamo

$$\rho(G) \geq \frac{2W(G)}{n}$$

sa jednakošću ako i samo ako $D(G)$ ima jednake sume po vrstama. Ako sa m označimo broj grana grafa G , sledi

$$\rho(G) \geq 2(n-1) - \frac{2m}{n}$$

sa jednakošću ako i samo ako $G \cong K_n$ ili je G regularan graf dijametra dva.

Teorema 4.7.2 *Neka je G povezan graf sa $n \geq 2$ čvorova i m grana. Tada*

$$DE(G) \geq \frac{4W(G)}{n},$$

sa jednakošću ako i samo ako G ima tačno jednu pozitivnu D -sopstvenu vrednost i $D(G)$ ima jednake sume po vrstama. Štaviše,

$$DE(G) \geq 4(n-1) - \frac{4m}{n},$$

sa jednakošću ako i samo ako $G \cong K_n$ ili je G regularan graf dijametra dva sa tačno jednom pozitivnom D -sopstvenom vrednošću.

Ramane i drugi [206] su postavili hipotezu da među svim povezanim grafovima sa n čvorova, kompletan graf K_n ima najmanju energiju rastojanja (jednaku $2(n-1)$). Iz Teoreme 4.7.2 i korišćenjem očigledne nejednakosti $2m \leq n(n-1)$ ova hipoteza je tačna. Direktno rezonovanje može biti i sledeće: Kompletan graf K_n za $n \geq 2$ ima tačno jednu pozitivnu D -sopstvenu vrednost. Iz (4.3) sledi $\rho_1 \geq n-1$ i $DE(G) \geq 2\rho_1 \geq 2(n-1)$ sa jednakošću ako i samo ako $G \cong K_n$. Time je dokazana i Hipoteza 3 iz rada [33].

Za r -regularan graf G , sopstveni vektor matrice $A(G)$ koji odgovara bilo kojoj sopstvenoj vrednosti različitoj od r je ortogonalan na vektor sastavljen od svih jedinica. Ako je G regularan graf dijametra dva, tada iz identiteta $D(G) = 2J_n - 2I_n - A(G)$ sledi da su D -sopstvene vrednosti grafa G upravo

$$2n - r - 2, -\lambda_n - 2, \dots, -\lambda_2 - 2,$$

uređene u neopadajući redosled. Štaviše, regularan graf G dijametra dva ima tačno jednu pozitivnu D -sopstvenu vrednost ako i samo ako $\lambda_n \geq -2$.

Koktel graf $CP(a)$ (eng. cocktail party graph) je graf koji je dobijen brisanjem a nesusednih grana iz kompletnog grafa K_{2a} , pa je ovaj graf regularan sa stepenom $2a-2$.

Neka je G graf sa skupom čvorova $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, i neka su a_1, a_2, \dots, a_n nenegativni celi brojevi. Generalizovani linijski graf $\mathcal{L}(G; a_1, a_2, \dots, a_n)$ (eng. generalized line graph) se sastoji od disjunktne unije linijskog grafa $\mathcal{L}(G)$ i koktel grafova $CP(a_1), CP(a_2), \dots, CP(a_n)$, zajedno sa svim granama koje spajaju čvorove $\{v_i, v_j\}$ iz $\mathcal{L}(G)$ sa svakim čvorom grafova $CP(a_i)$ i $CP(a_j)$.

Kod generalizovanog linijskog grafa, najmanja sopstvena vrednost matrice susedstva je veća ili jednaka od -2 . Izuzetan graf (eng. exceptional graph) je povezan graf, različit od generalizovanog linijskog grafa, sa najmanjom sopstvenom vrednošću koja je ≥ -2 . Iz [51], graf G je regularan graf dijametra dva sa $\lambda_n \geq -2$ ako i samo ako je G koktel graf, ili je G regularan linijski graf dijametra dva, ili je G regularan izuzetan graf dijametra dva. Lista od 187 regularnih izuzetnih grafova je data u Tabeli A3 [51]. Ovi grafovi su izlistani u takvom redosledu da nije lako odrediti njihov dijametar, ali se među njima nalazi tačno 7 jako regularnih grafova (koji imaju dijametar dva).

Posledica 4.7.3 *Neka je G povezan graf sa $n \geq 2$ čvorova i m grana. Tada*

$$DE(G) \geq 4(n-1) - \frac{4m}{n},$$

sa jednakošću ako i samo ako je $G \cong K_n$, ili je G koktel graf, ili je G regularan linijski graf dijametra dva, ili je G regularan izuzetan graf dijametra dva.

Iz Teoreme 4.5.1, dobijamo

Posledica 4.7.4 *Neka je G povezan graf sa n čvorova, maksimalnim stepenom Δ_1 i sledećim maksimalnim stepenom Δ_2 . Tada*

$$DE(G) \geq 2\sqrt{(2n-2-\Delta_1)(2n-2-\Delta_2)},$$

sa jednakošću ako i samo ako je $G \cong K_n$, ili je G koktel graf, ili je G regularan linijski graf dijametra dva, ili je G regularan izuzetan graf dijametra dva.

Neka je G graf koji ne sadrži trougao C_3 ili četvorougao C_4 sa $n \geq 3$ čvorova i m grana. Iz [270] sledi

$$\rho(G) \geq 3(n-1) - \frac{2m}{n} - \frac{M_1(G)}{n}$$

sa jednakošću ako i samo ako $D(G)$ ima jednake sume po vrstama i dijametar najviše tri, odnosno

$$DE(G) \geq 2 \left(3(n-1) - \frac{2m}{n} - \frac{M_1(G)}{n} \right),$$

sa jednakošću ako i samo ako G ima tačno jednu pozitivnu D -sopstvenu vrednost i $D(G)$ ima jednake sume po vrstama i dijametar najviše tri.

Teorema 4.7.5 *Neka je G povezan bipartitni graf sa p čvorova u jednoj particiji i q čvorova u drugoj particiji. Tada*

$$DE(G) \geq 2 \left(p + q - 2 + \sqrt{p^2 + q^2 - pq} \right),$$

sa jednakošću ako i samo ako $G \cong K_{p,q}$.

Iz ove teoreme sledi i procena

$$DE(G) \geq 2 \left(n - 2 + \sqrt{n^2 - 3 \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil} \right)$$

sa jednakošću ako i samo ako $G \cong K_{\lfloor n/2 \rfloor, \lceil n/2 \rceil}$.

Neka je G povezan bipartitan graf sa biparticijom $V(G) = A \cup B$, $|A| = p$, $|B| = q$, $p + q = n$. Neka su Δ_A i Δ_B maksimalni stepeni iz A i B , redom. Iz Teoreme 4.6.2 sledi

$$DE(G) \geq 2(n-2) + 2\sqrt{n^2 - 4pq + (3q - 2\Delta_A)(3p - 2\Delta_B)},$$

sa jednakošću ako i samo ako je G kompletan bipartitan graf $K_{p,q}$ ili je G biregularan bipartitan graf sa $\varepsilon(v) = 3$ za svako $v \in V(G)$ i G ima tačno jednu pozitivnu D -sopstvenu vrednost.

Teorema 4.7.6 *Neka je G povezan graf sa n čvorova. Ako je \overline{G} takođe povezan, tada*

$$DE(G) + DE(\overline{G}) \geq 6(n-1),$$

sa jednakošću ako i samo ako su G i \overline{G} regularni grafovi dijametra dva koji imaju tačno jednu pozitivnu D -sopstvenu vrednost.

Dokaz. Dokaz sledi direktno iz Teoreme 4.7.2,

$$DE(G) + DE(\overline{G}) \geq 8(n-1) - \frac{2n(n-1)}{n} = 6(n-1).$$

■

Singularne sopstvene vrednosti kompleksne matrice X se definišu kao koreni sopstvenih vrednosti matrice XX^* , gde X^* označava konjugovanu transponovanu matricu X . Za matricu X dimenzija $n \times n$, njene singularne sopstvene vrednosti označavamo sa $s_i(X)$, $i = 1, 2, \dots, n$. Tada imamo

$$E(G) = \sum_{i=1}^n s_i(A(G))$$

$$DE(G) = \sum_{i=1}^n s_i(D(G)).$$

Lema 4.7.7 [90] *Neka su X i Y kompleksne matrice dimenzija $n \times n$. Tada važi*

$$\sum_{i=1}^n s_i(X+Y) \leq \sum_{i=1}^n s_i(X) + \sum_{i=1}^n s_i(Y).$$

Teorema 4.7.8 *Neka je G povezan graf sa n čvorova i dijametra najviše dva. Tada*

$$DE(G) \leq 2(n-1) + E(\overline{G}).$$

Dokaz. Primetimo da važi

$$D(G) = J_n - I_n + A(\overline{G}).$$

Tvrđenje direktno sledi iz Leme 4.7.7 za $X = J_n - I_n$ i $Y = A(\overline{G})$. ■

U [177] je pokazano je energija grafa sa n čvorova ograničena odozgo sa $\frac{n}{2}(\sqrt{n} + 1)$. Dakle, za povezan graf G sa n čvorova i dijametra najviše dva imamo

$$DE(G) \leq \frac{n}{2}(\sqrt{n} + 1) + 2(n-1).$$

Za $n \geq 26$, ova granica je bolja od granice date u [159]

$$DE(G) \leq \sqrt{2n(2n^2 - 2n - 3m)},$$

jer za $n \geq 26$ važi

$$\frac{n}{2}(\sqrt{n} + 1) + 2(n-1) < n\sqrt{n-1} \leq \sqrt{2n(2n^2 - 2n - 3m)}.$$

U [159], autori su dokazali da za graf G sa n čvorova, m grana i dijametra dva važi

$$DE(G) \leq \frac{1}{n}(2n^2 - 2n - 2m) + \frac{1}{n}\sqrt{(n-1)[(2n+m)(2n^2 - 4m) - 4n^2]}.$$

Ova gornja granica za zvezdu S_n je jednaka $2n - 4 + \frac{2}{n} + \frac{1}{n}\sqrt{6n^4 - 24n^3 + 34n^2 - 20n + 4}$, dok je granica iz prethodne teoreme jača za $n \geq 5$, $DE(S_n) \leq 2(n-1) + 2(n-2) = 4n - 6$.

Glava 5

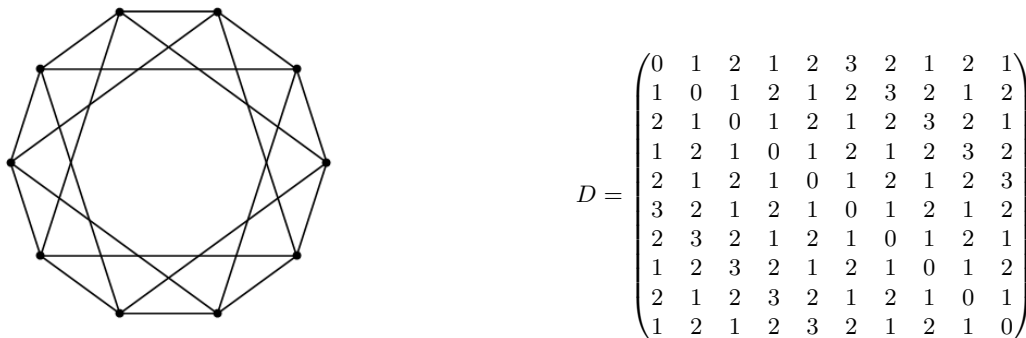
Integralni cirkulantni grafovi

Graf se naziva *cirkulantnim* ako je on Kejljev graf na cirkulantnoj grupi, odnosno ako je njegova matrica susedstva cirkulantna. Graf se naziva *integralnim* ako su sve sopstvene vrednosti matrice susedstva celi brojevi. Integralni grafovi su intenzivno proučavani u poslednjih 20 godina i postoji mnogo konstrukcija specifičnih klasa grafova sa celobrojnim spektrom [15]. Klasa cirkulantnih grafova ima značajne primene u projektovanju svih vrsta mreža (računarskih, telekomunikacionih, kvantnih), kao i u paralelnom i distribuiranom računarstvu [137].

Integralni cirkulantni grafovi su generalizacija unitarnih Kejljevih grafova, koje su nedavno proučavali Klotz i Sander [173]. Neka je D skup pozitivnih pravih delioca prirodnog broja $n > 1$. Definišimo graf $ICG_n(D)$ sa skupom čvorova $Z_n = \{0, 1, \dots, n - 1\}$ i skupom grana

$$E(ICG_n(D)) = \{\{a, b\} \mid a, b \in Z_n, \gcd(a - b, n) \in D\}.$$

U ovom delu ćemo se baviti i matricom rastojanja integralnih cirkulantnih grafova $ICG_n(D)$ i odgovarajućim spektrima (videti Sliku 5.1).



Slika 5.1: Integralni cirkulantni graf $ICG_{10}(1)$ i njegova matrica rastojanja.

U kvantnom komunikacijskom scenariju, postavlja se pitanje kako urediti n kubita u kvantnoj mreži tako da se dobije dobra komunikacija među njima. Kvantni spin sistem se može definisati kao kolekcija kubitova u grafu, čija je dinamika vođena određenim Hamiltonijanom, bez spoljašnjeg uticaja na sistem. Dakle, dinamika sistema se ostvaruje transferom stanja i istraživanja su fokusirana na situaciju u kojoj imamo savršen transfer.

Integralni cirkulantni grafovi su predloženi kao potencijalni kandidati za modeliranje kvantnih spin mreža koje dopuštaju periodičnu dinamičnost sistema. Za neke kvantne spin sisteme, potreban uslov za postojanje savršenog transfera stanja (eng. perfect state transfer) je periodičnost i simetričnost dinamičkog sistema [41, 217]. Relevantni rezultati na ovu temu su dati u [96], gde je pokazano da je topologija kvantne mreže, koja je bazirana na regularnim grafovima sa bar četiri različite sopstvene vrednosti, periodična ako i samo ako je graf integralan.

Bašić i ostali [18, 20, 21] su odredili potreban i dovoljan uslov pod kojim integralni cirkulantni graf ima savršen transfer stanja. Ispostavilo se da stepen dvojke u faktorizaciji razlika susednih sopstvenih vrednosti mora biti konstanta i tačno jedan od delioca $n/4$ i $n/2$ mora pripadati skupu D . Saxena, Severini i Shraplinski [217] su proučavali parametre integralnih cirkulantnih grafova, kao što su dijametar, osobinu bipartitnosti i savršen transfer stanja. Klotz i Sander [173] su odredili, između ostalog, sopstvene vrednosti unitarnih Kejljevih grafova i predložili generalizaciju ovih grafova, koju su nazvali *gcd grafovi* (isti termin kao i integralni cirkulantni grafovi). Ilić i Bašić su u [19, 143] odredili hromatski broj i najveću kliku integralnih cirkulantnih grafova sa jednim i dva delioca, i opovrgnuli hipotezu iz [173] da je broj čvorova grafa $ICG_n(D)$ deljiv sa $\omega(G)$ ili $\chi(G)$.

Graf je hiperenergetski, ako je njegova energija veća od energije kompletnog grafa K_n , odnosno ako važi $E(G) > 2n - 2$. Ovaj koncept je prvi uveo Gutman, a zatim se intenzivno proučavao u literaturi [4, 102, 119, 218]. Hiperenergetski grafovi su važni, jer se molekularni grafovi sa maksimalnom energijom odnose na maksimalno stabilan π -elektronski sistem. Bilo je dosta istraživanja i konstrukcija parova i familija nekospektralnih grafova sa jednakom energijom [3, 208], uglavnom baziranih na iteriranim linijskim grafovima i tenzorskim proizvodom. Najjednostavniji primer je par (C_3, C_4) sa sopstvenim vrednostima $2, -1, -1$ i $2, 0, 0, -2$ i jednakim energijama. Najmanji par nekospektralnih povezanih grafova sa jednakim brojem čvorova su petougao C_5 i četverostrana piramida H_4 sa energijama $2\sqrt{5} + 2$. Brankov i drugi [26] su prvi primenili sistematsku kompjutersku pretragu za molekularnim ekvenergetskim stablima. Xu i Hou [250] su konstruisali metodu za dobijanje beskonačno mnogo parova bipartitnih grafova sa jednakom energijom.

Takođe pomenućemo još jednu modifikaciju grafovske energije – *Laplasova energija*, koja je definisana sa [117, 266]

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

gde n i m označavaju broj čvorova i grana grafa G . Jedna od fundamentalnih osobina Laplasove energije je da u slučaju regularnih grafova $LE(G) = E(G)$.

Parovi grafova koji su nekospektralni sa jednakom energijom i jednakim brojem čvorova ćemo nazivati **A**-ekvenergetski. Analogno definišemo **L**-ekvenergetske i **D**-ekvenergetske grafove na osnovu Laplasove i energije rastojanja. Dakle, ako su dva regularna grafa G i H **A**-ekvenergetska, tada su oni automatski i **L**-ekvenergetski.

Indulal i drugi [159] su konstruisali parove *D*-ekvenergetskih grafova sa n čvorova za $n \equiv 1 \pmod{3}$ i za $n \equiv 0 \pmod{6}$. Ramane i drugi [207] su dokazali da ako su G_1 i G_2 r -regularni grafovi sa n čvorova i dijametra manjeg ili jednakog dva, tada $DE(\mathcal{L}^k(G_1)) = DE(\mathcal{L}^k(G_2))$ za svako $k \geq 1$, gde je $\mathcal{L}^k(G)$ upravo k -ti ponovljeni linijski graf of G . U [205] autori su odredili sopstvene vrednosti matrice rastojanja za spoj (eng. join) dva grafa čiji su dijometri manji ili jednaki dva, i konstruisali parove nekospektralnih *D*-ekvenergetskih grafova za svako $n \geq 9$. Stevanović i Indulal [232] su dalje generalizovali ovaj rezultat i opisali spektar matrice rastojanja za kompoziciju spojeva regularnih grafova u terminima spektara matrice susedstva. Ovo su iskoristili da pokažu da za svako $n \in \mathbb{N}$ postoji beskonačno mnogo familija sa bar n grafova koji imaju jednake energije. Sve ove konstrukcije iz literature su bazirane na proizvodima grafova i većina prezentovanih grafova ima dijametar dva.

Koristeći kompjutersku pretragu na grafovima sa < 10 čvorova, zaključili smo da ne postoje parovi **A**–, **L**–, i **D**–ekvenergetskih grafova. Do sada ovakvi parovi trostruko ekvenergetskih grafova nisu istraživani.

5.1 Preliminarni rezultati

Podsetimo se da za prirodan broj n i podskup $S \subseteq \{0, 1, 2, \dots, n-1\}$, cirkulantni graf $G(n, S)$ je graf sa n čvorova, koji su obeleženi $\{0, 1, 2, \dots, n-1\}$, tako da je svaki čvor i susedan sa $|S|$ drugih čvorova $\{i + s \pmod{n} \mid s \in S\}$. Skup S se zove skup simbola grafa $G(n, S)$.

So [223] je okarakterisao integralne cirkulantne grafove. Neka je

$$G_n(d) = \{k \mid \gcd(k, n) = d, 1 \leq k < n\}$$

skup svih pozitivnih celih brojeva manjih od n koji imaju najveći zajednički delilac d sa n . Neka je D_n skup pozitivnih delioca broja n za koje važi $d \leq \frac{n}{2}$.

Teorema 5.1.1 *Cirkulantan graf $G(n, S)$ je integralan ako i samo ako je*

$$S = \bigcup_{d \in D} G_n(d)$$

za neki podskup delioca $D \subseteq D_n$.

Sledi da je stepen grafa $ICG_n(D)$ jednak upravo $\sum_{d \in D} \varphi(n/d)$, gde je $\varphi(n)$ Ojlerova funkcija. Nije teško pokazati da je integralni cirkulantni graf $ICG_n(D) = ICG_n(d_1, d_2, \dots, d_k)$ povezan ako i samo ako je $\gcd(d_1, d_2, \dots, d_k) = 1$.

Neka je D proizvoljan skup delioca $\{d_1, d_2, \dots, d_k\}$ broja n . Možemo konstruisati matricu rastojanja $D_n(D)$ grafa $ICG_n(D)$ u odnosu na prirodnu numeraciju čvorova $0, 1, \dots, n-1$. Elementi a_0, a_1, \dots, a_{n-1} prve vrste matrice $D_n(D)$ generišu elemente ostalih vrsti cikličnim pomeranjem.

$$D_n(D) = \begin{pmatrix} a_0 & a_1 & \dots & a_{n-1} \\ a_{n-1} & a_0 & \dots & a_{n-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_1 & a_2 & \dots & a_0 \end{pmatrix}$$

Za više detalja o cirkulantnim matricama videti knjigu [58]. Za sopstvene vrednosti μ_r , $0 \leq r \leq n-1$, cirkulantne matrice kao što je D_n postoji eksplicitna formula. Naime, definišimo sledeći polinom $P_n(z)$ na osnovu elemenata prve vrste matrice D_n ,

$$P_n(z) = \sum_{j=0}^{n-1} a_j \cdot z^j$$

Sopstvene vrednosti od D_n su date sa

$$\mu_r = P_n(\omega^r) = \sum_{j=0}^{n-1} a_j \cdot \omega^{rj}, \quad 0 \leq r \leq n-1. \quad (5.1)$$

Ramanudžanova suma (eng. Ramanujan sum), koja se obično obeležava sa $c(r, n)$, je funkcija dva cela broja r i n definisana sa

$$c(r, n) = \sum_{\substack{a=1 \\ \gcd(a, n)=1}}^n e^{\frac{2\pi i}{n} \cdot ar} = \sum_{\substack{a=1 \\ \gcd(a, n)=1}}^n \omega_n^{ar},$$

gde je ω_n primitivni n -ti koren iz jedinice. Ove sume mogu uzimati samo celobrojne vrednosti i važi

$$c(r, n) = \mu \left(\frac{n}{\gcd(r, n)} \right) \cdot \frac{\varphi(n)}{\varphi \left(\frac{n}{\gcd(r, n)} \right)},$$

gde μ označava Mebijusovu funkciju (eng. Möbius function). U sledećem odeljku ćemo koristiti dobro poznata sumiranja [123]

$$s(r, n) = \sum_{i=0}^{n-1} \omega_n^{ir} = \begin{cases} 0 & \text{ako } r \nmid n \\ n & \text{ako } r \mid n \end{cases} \quad (5.2)$$

U [173] dokazano je da $\text{ICG}_n(D)$ ima integralni spektar,

$$\lambda_k = \sum_{d \in D} c\left(k, \frac{n}{d}\right), \quad 0 \leq k \leq n-1. \quad (5.3)$$

Definicija 5.1.2 Broj n je kvadrat-slobodan (eng. square-free) ako nije deljiv ni jednim kvadratom nekog prostog broja, odnosno ako je oblika $n = p_1 p_2 \dots p_k$ za neke proste brojeve $p_1 < p_2 < \dots < p_k$.

5.2 Energija unitarnih Kejljevih grafova

Unitarni Kejljev graf $\text{ICG}_n(1) \equiv X_n$ ima skup čvorova $V(X_n) = Z_n$ i skup grana

$$E(X_n) = \{(a, b) : a, b \in Z_n, \gcd(a-b, n) = 1\}.$$

Graf X_n je regularan stepena $\varphi(n)$. Unitarni Kejljevi grafovi su veoma simetrični i imaju neobične osobine koje povezuju teoriju grafova i teoriju brojeva.

Neka je $n = p_1^{\alpha_1} p_2^{\alpha_2} \dots p_k^{\alpha_k}$, gde su $p_1 < p_2 < \dots < p_k$ različiti prosti brojevi i $\alpha_i \geq 1$.

Lema 5.2.1 Ako je $k > 2$ ili $k = 2$ i $p_1 > 2$, važi sledeća nejednakost

$$2^{k-1} \varphi(n) > n. \quad (5.4)$$

Dokaz. Za $k = 1$, imamo $n = p^\alpha$ gde je p prost broj, i $\varphi(n) = p^{\alpha-1}(p-1)$. Za $k = 2$, imamo $n = p^\alpha q^\beta$, za različite proste brojeve p i q , $p < q$. Tražena nejednakost se može zapisati kao

$$2 \cdot p^{\alpha-1} q^{\beta-1} (p-1)(q-1) > p^\alpha q^\beta,$$

ili $pq - 2p - 2q + 2 \geq 0$. Za $p = 2$, ova nejednakost ne važi. Za $p \geq 3$, sledi da je $q \geq 5$ i zato $(p-3)(q-5) \geq 0$. Posle množenja i pregrupisanja dobijamo

$$pq - 2p - 2q + 2 \geq q + 3p - 13 \geq 5 + 9 - 13 > 0.$$

Dakle, za $k = 2$, nejednakost važi ako i samo ako je $p > 2$.

Neka je sada $k \geq 3$. Posmatramo sledeću ekvivalentnu nejednakost

$$\left(1 - \frac{1}{p_1}\right) \left(1 - \frac{1}{p_2}\right) \dots \left(1 - \frac{1}{p_k}\right) \geq \frac{1}{2^{k-1}}.$$

Kako je $p_i \geq 2i - 1$ za $i \geq 1$, sledi $1 - \frac{1}{p_i} > \frac{1}{2}$. Koristeći jednostavnu procenu

$$\left(1 - \frac{1}{p}\right) \left(1 - \frac{1}{q}\right) > \frac{1}{2},$$

za proizvoljne proste brojeve $2 < p < q$, završavamo dokaz. ■

Nularnost grafa G , koja se obeležava sa $\eta(G)$, je višestrukost nule u spektru grafa G .

Lema 5.2.2 Nularnost grafa X_n je $n - m$, gde je $m = p_1 p_2 \dots p_k$ najveći kvadrat-slobodan delilac od n .

Dokaz. Broj nula u spektru grafa X_n je upravo broj rešenja jednačine $\mu\left(\frac{n}{\gcd(i,n)}\right) = 0$. Broj $\frac{n}{\gcd(i,n)}$ je kvadrat-slobodan ako i samo ako je

$$\gcd(i, n) = \frac{n}{l}, \quad (5.5)$$

gde je l proizvoljan delilac od m . Identitet $\gcd(i, n) = d$ je ekvivalentan sa $\gcd(\frac{i}{d}, \frac{n}{d}) = 1$. Broj rešenja jednačine $\gcd(i, n) = d$ za $1 \leq i \leq n$ je jednak broju rešenja $\gcd(\frac{i}{d}, \frac{n}{d}) = \gcd(j, \frac{n}{d}) = 1$, i ovaj broj je jednak upravo $\varphi(\frac{n}{d})$ po definiciji Ojlerove funkcije. Dakle, broj rešenja jednačine (5.5) je jednak $\varphi(l)$. Koristeći poznatu formulu $\sum_{k|n} \varphi(k) = n$, sledi da je nularnost grafa X_n jednaka $n - \sum_{l|m} \varphi(l) = n - m$. ■

Teorema 5.2.3 *Energija unitarnog Kejljevog grafa X_n je jednaka $2^k \varphi(n)$, gde je k broj različitih prostih delioca broja n .*

Dokaz. Energija grafa X_n je jednaka

$$E(X_n) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i| = \varphi(n) \sum_{i=1}^n \left| \frac{\mu(\frac{n}{\gcd(i,n)})}{\varphi(\frac{n}{\gcd(i,n)})} \right|.$$

Neka je SF skup svih kvadrat-slobodnih brojeva. Kako je apsolutna vrednost Mebijusove funkcije 0 ili 1, možemo redukovati sumu na kvadrat-slobodne brojeve

$$E(X_n) = \varphi(n) \sum_{1 \leq i \leq n, \frac{n}{\gcd(i,n)} \in SF} \frac{1}{\varphi(\frac{n}{\gcd(i,n)})}.$$

Dakle, potrebno je dokazati sledeći identitet

$$2^k = \sum_{1 \leq i \leq n, \frac{n}{\gcd(i,n)} \in SF} \frac{1}{\varphi(\frac{n}{\gcd(i,n)})}.$$

Kvadrat-slobodni brojevi koji dele n su forme $p_1^{\beta_1} p_2^{\beta_2} \dots p_k^{\beta_k}$, gde je $\beta_i = 0$ ili $\beta_i = 1$. Očigledno, postoji 2^k kvadrat-slobodnih brojeva koji dele n . Neka je $m = p_1^{\beta_1} p_2^{\beta_2} \dots p_k^{\beta_k}$ proizvoljan kvadrat-slobodan broj i neka je

$$\gcd(i, n) = p_1^{\alpha_1 - \beta_1} p_2^{\alpha_2 - \beta_2} \dots p_k^{\alpha_k - \beta_k} = \frac{n}{m}. \quad (5.6)$$

Analogno kao u Lemi 5.2.2, zaključujemo da postoji tačno $\varphi(m)$ brojeva i koji zadovoljavaju uslov (5.6). Kako je udeo svakog takvog broja $\frac{1}{\varphi(m)}$ u sumi za energiju, dobijamo udeo 1 za svaki kvadrat-slobodan broj koji deli n . Time je dokaz završen. ■

Kombinacijom prethodna dva tvrđenja, dobijamo

Teorema 5.2.4 *Unitarni Kejljev graf X_n je hiperenergetski ako i samo ako je $k > 2$, ili $k = 2$ i $p_1 > 2$.*

Spektar komplementa unitarnog Kejljevog grafa $\overline{X_n}$ se sastoji od sopstvenih vrednosti $n - 1 - \lambda_1, -\lambda_2 - 1, -\lambda_3 - 1, \dots, -\lambda_n - 1$, [47]. Lako se dokazuje sledeća

Teorema 5.2.5 *Neka je $m = p_1 p_2 \dots p_k$ najveći kvadrat-slobodan broj koji deli n . Energija komplementa unitarnog Kejljevog grafa X_n je jednaka*

$$E(\overline{X_n}) = 2n - 2 + (2^k - 2)\varphi(n) - \prod_{i=1}^k p_i + \prod_{i=1}^k (2 - p_i).$$

Ramaswamy i Veena [209] su nezavisno dobili isti rezultat o energiji unitarnih Kejljevih grafova, koristeći tenzorski proizvod grafova i matrica.

Za date grafove G i H , *tenzorski proizvod* $G \otimes H$ ima skup čvorova $V(G) \times V(H)$ i dva čvora (v_1, u_1) i (v_2, u_2) su spojena granom ako i samo ako $(v_1, v_2) \in E(G)$ i $(u_1, u_2) \in E(H)$. Za uzajamno proste brojeve n i m , lako se dobija da je tenzorski proizvod unitarnih Kejljevih grafova X_n i X_m izomorfan sa X_{nm} . Koristeći slično svojstvo energije grafova $E(G \otimes H) = E(G) \cdot E(H)$ i kanonske faktorizacije brojeva, autori su u [209] pokazali sledeću nejednakost:

$$E(X_n) > \frac{2^{k-1}(n-1)}{k}.$$

5.3 Spektar matrice rastojanja ICG-a

Neka je $N_p(i)$ skup čvorova koji su na rastojanju p od polaznog čvora i . Dokazaćemo da važi

$$N_p(0) = \bigcup_{i=1}^{s_p} G_n(d_i^{(p)}),$$

za neki skup delioca n

$$D^{(p)} = \{d_1^{(p)}, d_2^{(p)}, \dots, d_{s_p}^{(p)}\}.$$

Za $p = 1$, ovo se uklapa u definiciju integralnog cirkulantnog grafa $ICG_n(D)$ za skup delioca $D^{(1)} = D$. Neka je a proizvoljan čvor na rastojanju p od polaznog čvora 0 . Pretpostavimo da važi $\gcd(a, n) = d$. Sledi da postoje čvorovi $0 \equiv v_0, v_1, \dots, v_{p-1}, v_p \equiv a$, takvi da su za svako $0 \leq r \leq p-1$, čvorovi v_r i v_{r+1} susedni. Drugim rečima,

$$\gcd(v_r - v_{r+1}, n) = d_{i_r}, \quad \text{za } r = 0, 1, \dots, p-1, \quad 1 \leq i_r \leq k.$$

Neka je b proizvoljan čvor (različit od a) za koji važi $\gcd(b, n) = d$. To znači da postoje celi brojevi a' i b' koji su uzajamno prosti sa n , takvi da je $a = a' \cdot d$ i $b = b' \cdot d$. Kako je $\gcd(a', n) = 1$, iz Bezuove teoreme sledi

$$a' \cdot a^* \equiv 1 \pmod{n},$$

gde je a^* inverz od a' po modulu n . Sada, posmatrajmo sledeće čvorove $0 \equiv u_0, u_1, \dots, u_{p-1}, u_p \equiv b$, definisane sa

$$u_r = v_r \cdot a^* b'.$$

Za $r = 0$ imamo $u_0 = 0$, i za $r = p$ sledi $u_p = a \cdot a^* b' = d \cdot (a' \cdot a^*) \cdot b' = d \cdot b' = b$. Dakle, za svako $r = 0, 1, \dots, p-1$ važi

$$\gcd(u_r - u_{r+1}, n) = \gcd((v_r - v_{r+1}) \cdot a^* b', n) = \gcd(v_r - v_{r+1}, n) = d_{i_r}.$$

Time smo dokazali da je rastojanje od čvora 0 do čvora b manje ili jednako od k , $d(0, b) \leq d(0, a)$. Slično možemo pokazati da važi i $d(0, a) \leq d(0, b)$ i najzad dobijamo $d(0, a) = d(0, b) = k$.

Nije teško primetiti da je skup svih delioca broja n unija skupova $D^{(p)}$, $p = 1, 2, \dots, \text{diam}(G)$. Koristeći relaciju (5.1), dobijamo da je spektar matrice rastojanja grafa $ICG_n(D)$ upravo:

$$\mu_r = 1 \cdot \sum_{i=1}^{s_1} c\left(r, \frac{n}{d_i^{(1)}}\right) + 2 \cdot \sum_{i=1}^{s_2} c\left(r, \frac{n}{d_i^{(2)}}\right) + \dots + \text{diam}(G) \cdot \sum_{i=1}^{s_{\text{diam}(G)}} c\left(r, \frac{n}{d_i^{(\text{diam}(G))}}\right). \quad (5.7)$$

Dakle, dokazali smo sledeću teoremu:

Teorema 5.3.1 *Integralni cirkulantni graf $ICG_n(D)$, gde je D proizvoljan skup delioca od n , ima integralan spektar matrice rastojanja.*

Kako je matrica rastojanja cirkulantna, za Wienerov indeks važi

$$W(G) = \frac{n \cdot \mu_0}{2}.$$

5.4 Energija rastojanja unitarnih Kejljevih grafova

U sledeća četiri dela, izračunaćemo energiju rastojanja grafa X_n .

n je prost broj

U ovom slučaju, X_n je kompletan graf (dijametra 1). Spektar grafa X_n je $\{p-1, -1, -1, \dots, -1\}$ i

$$DE(X_n) = 2(n-1).$$

n je stepen dvojke

Ako je $n = 2^k$ za $k > 1$, tada je X_n kompletan bipartitan graf sa particijama

$$V(X_n) = \{0, 2, \dots, n-2\} \cup \{1, 3, \dots, n-1\},$$

i dijametra dva. Spektar matrice susedstva grafa X_n je $\{\frac{n}{2}, -\frac{n}{2}, 0, 0, \dots, 0\}$, pa je spektar matrice rastojanja jednak $\{\frac{3n}{2} - 2, \frac{n}{2} - 2, -2, -2, \dots, -2\}$. Kako je $\varphi(2^k) = 2^{k-1}$, sledi

$$DE(X_n) = \left| \frac{3n}{2} - 2 \right| + \left| \frac{n}{2} - 2 \right| + 2(n-2) = 4(n-2).$$

n je neparan složen broj

Koristićemo sledeći rezultat iz [173].

Teorema 5.4.1 Broj zajedničkih suseda za dva različita čvora a i b u unitarnom Kejljevom grafu X_n je jednak $F_n(a-b)$, gde je $F_n(s)$ definisan sa

$$F_n(s) = n \prod_{i=1}^k \left(1 - \frac{\varepsilon(p)}{p} \right), \quad \text{gde je} \quad \varepsilon(p) = \begin{cases} 1 & \text{ako } p \mid s \\ 2 & \text{ako } p \nmid s \end{cases}.$$

Kako 2 ne deli n , po Teoremi 5.4.1 svi faktori u razvoju $F_n(a-b)$ su veći od nule. Zato za svaki par čvorova postoji zajednički sused, što implicira da je dijameter grafa jednak 2 i $D_n(X_n) = 2(J_n - I_n) - A_n(X_n)$, gde je J_n matrica sa svim jedinicama. Sopstvene vrednosti matrice D_n su date sledećom formulom

$$\mu_r = 2 \sum_{i=0}^{n-1} \omega_n^{ir} - 2 - c(r, n).$$

Najzad korišćenjem relacije (5.3) spektar od D_n je jednak

$$\{2(n-1) - \varphi(n), -2 - c(1, n), -2 - c(2, n), \dots, -2 - c(n-1, n)\}$$

Spektralni radijus matrice rastojanja grafa X_n je $2(n-1) - \varphi(n)$. Koristićemo istu tehniku kao kod računanja energije za X_n .

Posmatrajmo sledeću sumu

$$S = \sum_{i=1}^n |-c(i, n) - 2| = \sum_{i=1}^n |c(i, n) + 2|.$$

Kako već znamo nularnost grafa X_n , sabraćemo samo nenula sopstvene vrednosti iz spektra X_n . Podelimo sumu S na dva dela: kada je $\frac{n}{\gcd(n, i)}$ kvadrat-slobodan sa parnim brojem prostih delioca i kada je $\frac{n}{\gcd(n, i)}$ kvadrat-slobodan sa neparnim brojem delioca. Broj podskupova sa parnim brojem elemenata od $\{p_1, p_2, \dots, p_k\}$ je jednak broju podskupova sa neparnim brojem elemenata od $\{p_1, p_2, \dots, p_k\}$.

U prvom slučaju imamo

$$\sum_{i \in S_1} \left(\frac{\varphi(n)}{\varphi\left(\frac{n}{\gcd(i,n)}\right)} + 2 \right) = \varphi(n) \cdot 2^{k-1} + 2 \sum_{l|m, \mu(l)=1} \varphi(l). \quad (5.8)$$

Neka je l kvadrat-slobodan broj koji deli m sa parnim brojem prostih delioca. Broj rešenja jednačine $\frac{n}{\gcd(i,n)} = l$ je jednak $\varphi(l)$. Za sve $0 \leq i < n$ koji zadovoljavaju $n = l \cdot \gcd(i, n)$ imamo

$$\frac{\varphi(n)}{\varphi\left(\frac{n}{\gcd(i,n)}\right)} \cdot \varphi(l) + 2\varphi(l) = \varphi(n) + 2\varphi(l).$$

Po sumiranju svih $l \mid m$ sa $\mu(l) = 1$ dobijamo identitet (5.8). Analogno, u drugom slučaju imamo

$$\sum_{i \in S_2} \left(\frac{\varphi(n)}{\varphi\left(\frac{n}{\gcd(i,n)}\right)} - 2 \right) = \varphi(n) \cdot 2^{k-1} - 2 \sum_{l|m, \mu(l)=-1} \varphi(l).$$

Kako je Ojlerova funkcija $\varphi(n)$ multiplikativna, kada saberemo gornje sume i sopstvenu vrednost -2 , imamo

$$\begin{aligned} S &= 2 \cdot (n - m) + \varphi(n) \cdot 2^k + 2 \sum_{l|m} \mu(l) \varphi(l) \\ &= 2n - 2m + \varphi(n) \cdot 2^k + 2 \prod_{i=1}^k (1 - \varphi(p_i)) = 2n - 2m + \varphi(n) \cdot 2^k + 2 \prod_{i=1}^k (2 - p_i). \end{aligned}$$

Najzad, energija rastojanja grafa X_n je jednaka

$$\begin{aligned} DE(X_n) &= S - |\varphi(n) + 2| + |2n - \varphi(n) - 2| \\ &= 2 \left(2n + \varphi(n)(2^{k-1} - 1) - m - 2 + \prod_{i=1}^k (2 - p_i) \right). \end{aligned}$$

n je paran broj sa bar jednim neparnim deliocem

Kao i u prethodnom slučaju postoji $\varphi(n)$ jedinica u prvoj vrsti matrice D_n . Čvor 0 nije susedan sa parnim čvorovima $2, 4, \dots, n-2$, ali svaka dva parna čvora imaju bar po jednog zajedničkog suseda po Teoremi 5.4.1. Kako su svi susedi neparnog čvora – čvorovi sa parnim indeksima, zaključujemo da je broj čvorova na rastojanju 2 upravo $\frac{n}{2} - 1$. Slično, svaka dva čvora a i b iz X_n , koja su oba neparna imaju zajedničkog suseda. Zaključujemo da je dijametar grafa X_n jednak tri i da postoji tačno $\frac{n}{2} - \varphi(n)$ čvorova na rastojanju tri od polaznog čvora 0.

Polinom $P_n(z)$ je u ovom slučaju jednak

$$P_n(z) = 3 \sum_{i=0}^{n-1} z^i - \sum_{i=0}^{\frac{n}{2}-1} z^{2i} - 2 - 2 \sum_{\substack{i=1 \\ \gcd(i,n)=1}}^n z^i.$$

Sopstvene vrednosti matrice D_n su date formulom

$$\mu_r = 3 \sum_{i=0}^{n-1} \omega_n^{ir} - \sum_{i=0}^{\frac{n}{2}-1} \omega_n^{2ir} - 2 - 2 \cdot c(r, n).$$

Za $r = 0$, spektralni radijus matrice rastojanja je

$$\mu_0 = 3n - \frac{n}{2} - 2 - 2\varphi(n) = \frac{5n}{2} - 2(\varphi(n) + 1).$$

Za $r = \frac{n}{2}$, sledi da je $c(n/2, n) = -\varphi(n)$ i

$$\mu_{n/2} = 0 - \frac{n}{2} - 2 - 2 \cdot c\left(\frac{n}{2}, n\right) = 2(\varphi(n) - 1) - \frac{n}{2}.$$

Za $r \neq 0$ i $r \neq \frac{n}{2}$, vrednost sume

$$\sum_{i=0}^{\frac{n}{2}-1} \omega_n^{2ir} = \frac{\omega_n^{nr} - 1}{\omega_n^{2r} - 1}$$

je nula. Najzad, spektr matrice D_n se sastoji od $\frac{5n}{2} - 2(\varphi(n) + 1)$, $2(\varphi(n) - 1) - \frac{n}{2}$ i $-2 - 2 \cdot c(1, n)$, $-2 - 2 \cdot c(2, n)$, \dots , $-2 - 2 \cdot c(n/2 - 1, n)$, $-2 - 2 \cdot c(n/2 + 1, n)$, \dots $-2 - 2 \cdot c(n - 1, n)$.

Suma $S' = \sum_{i=0}^{n-1} |c(i, n) + 1|$ se može izračunati analogno, i kako je najmanji prost broj od n upravo $p_1 = 2$, sledi

$$S' = n - m + \varphi(n) \cdot 2^k + \prod_{i=1}^k (2 - p_i) = n - m + \varphi(n) \cdot 2^k.$$

Energija rastojanja grafa X_n je jednaka

$$\begin{aligned} DE(X_n) &= 2S' - |2 + 2c(0, n)| - |2 + 2c(n/2, n)| + \left| \frac{5n}{2} - 2(\varphi(n) + 1) \right| + \left| 2(\varphi(n) - 1) - \frac{n}{2} \right| \\ &= 2n - 2m + \varphi(n) \cdot 2^{k+1} - (2 + 2\varphi(n)) - (2\varphi(n) - 2) + \left(\frac{5n}{2} - 2(\varphi(n) + 1) \right) \\ &\quad + \left| 2(\varphi(n) - 1) - \frac{n}{2} \right|. \end{aligned}$$

Vrednost $\left| 2(\varphi(n) - 1) - \frac{n}{2} \right|$ se ne može razrešiti, pošto može uzimati pozitivne i negativne vrednosti, kao i nulu (na primer $n = 6$, $n = 10$ i $n = 12$). Koristeći reprezentaciju $n = 2^k \cdot m$ gde je m neparan broj, sledi $\varphi(n) = \varphi(2^k)\varphi(m) = 2^{k-1}\varphi(m)$. Zbog toga je jednačina $2(\varphi(n) - 1) = \frac{n}{2}$ ekvivalentna sa

$$2\varphi(n) = n + 1. \tag{5.9}$$

Poslednja jednačina predstavlja otvorenu hipotezu Lehmera [178], i neka od očiglednih rešenja uključuju proste Fermaove brojeve $n = F_k - 2 = 2^{2^k} - 1$ za $k = 0, 1, 2, 3, 4, 5$.

5.5 Tri-ekvienergetski grafovi

Neka je $n = 2pq$, gde su $p > q > 2$ proizvoljni prosti brojevi. Posmatrajmo sledeće integralne cirkulantne grafove

$$G_n = \text{ICG}(2pq, \{1, 2\}) \quad \text{i} \quad H_n = \text{ICG}(2pq, \{p, 2p, q, 2q\}).$$

Po formuli (5.3), spektr matrice susedstva grafova G_n i H_n je

$$\begin{aligned} \lambda_i^G &= c(i, 2pq) + c(i, pq), \quad i = 1, 2, \dots, n \\ \lambda_i^H &= c(i, p) + c(i, 2p) + c(i, q) + c(i, 2q), \quad i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned}$$

Za indeks i , imamo osam mogućnosti za najveći zajednički delilac brojeva i i $2pq$. Zato je spektr grafa G_n jednak

$$\lambda_i^G = \begin{cases} 0 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 1 \\ 2 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2 \\ 0 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = p \\ 0 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = q \\ -2(p-1) & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2p \\ -2(q-1) & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2q \\ 0 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = pq \\ 2(p-1)(q-1) & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2pq \end{cases}$$

Analogno, spektar grafa H_n je jednak

$$\lambda_i^H = \begin{cases} 0 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 1 \\ -4 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2 \\ 0 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = p \\ 0 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = q \\ 2(p-2) & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2p \\ 2(q-2) & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2q \\ 0 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = pq \\ 2(p+q-2) & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2pq \end{cases}$$

Energije grafova G_n i H_n su jednake

$$\begin{aligned} E(G_n) &= (p-1)(q-1) \cdot 0 + (p-1)(q-1) \cdot 2 + (q-1) \cdot 0 + (p-1) \cdot 0 \\ &\quad + (q-1) \cdot (2(p-1)) + (p-1) \cdot (2(q-1)) + 1 \cdot 0 + 1 \cdot (2(p-1)(q-1)) \\ &= 8(p-1)(q-1). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E(H_n) &= (p-1)(q-1) \cdot 0 + (p-1)(q-1) \cdot 4 + (q-1) \cdot 0 + (p-1) \cdot 0 \\ &\quad + (q-1) \cdot (2(p-2)) + (p-1) \cdot (2(q-2)) + 1 \cdot 0 + 1 \cdot (2(p+q-2)) \\ &= 8(p-1)(q-1). \end{aligned}$$

Vidimo da su grafovi G_n i H_n nekospektralni sa jednakom energijom. Kako su integralni cirkulantni grafovi i regularni, sledi $E(G_n) = LE(G_n)$ i $E(H_n) = LE(H_n)$. Dakle, G_n i H_n su **A**-ekvienergetski i **L**-ekvienergetski.

Grafovi G_n i H_n su generisani sa skupovima delioca $\{1, 2\}$ i $\{p, 2p, q, 2q\}$, pa sledi da je dijametar oba grafa jednak dva. Na osnovu formule (5.7), sopstvene vrednosti matrice rastojanja grafova G_n i H_n su

$$\rho_i^G = c(i, 2pq) + c(i, pq) + 2[c(i, p) + c(i, 2p) + c(i, q) + c(i, 2q) + c(i, 2)], \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$\rho_i^H = c(i, p) + c(i, 2p) + c(i, q) + c(i, 2q) + 2[c(i, 2pq) + c(i, pq) + c(i, 2)], \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Za indeks i , imamo osam mogućnosti za najveći zajednički delilac brojeva i i $2pq$. Zato je spektar matrice rastojanja grafa G_n upravo

$$\rho_i^G = \begin{cases} -2 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 1 \\ -4 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2 \\ -2 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = p \\ -2 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = q \\ 2(p-2) & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2p \\ 2(q-2) & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2q \\ -2 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = pq \\ 2(p-1)(q-1) + 4(p+q-2) + 2 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2pq \end{cases}$$

Analogno, spektar matrice rastojanja grafa H_n je

$$\rho_i^H = \begin{cases} -2 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 1 \\ 4 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2 \\ -2 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = p \\ -2 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = q \\ -2(p-1) & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2p \\ -2(q-1) & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2q \\ -2 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = pq \\ 4(p-1)(q-1) + 2(p+q-2) + 2 & \text{ako je } \gcd(i, 2pq) = 2pq \end{cases}$$

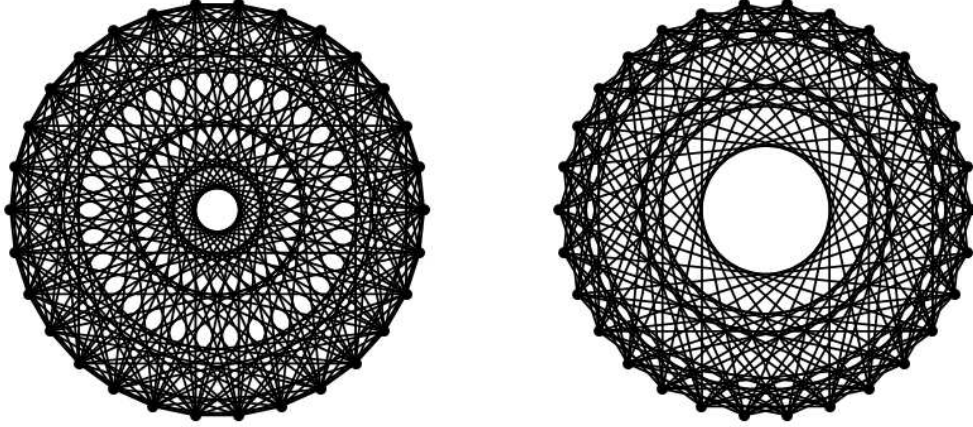
Energije rastojanja grafova G_n i H_n su jednake

$$\begin{aligned} DE(G_n) &= (p-1)(q-1) \cdot 2 + (p-1)(q-1) \cdot 4 + (q-1) \cdot 2 + (p-1) \cdot 2 \\ &\quad + (q-1) \cdot (2(p-2)) + (p-1) \cdot (2(q-2)) + 1 \cdot 2 \\ &\quad + 1 \cdot (2(p-1)(q-1) + 4(p+q-2) + 2) \\ &= 4(3pq - 2p - 2q + 2) = E(G_n) + 2n. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} DE(H_n) &= (p-1)(q-1) \cdot 2 + (p-1)(q-1) \cdot 4 + (q-1) \cdot 2 + (p-1) \cdot 2 \\ &\quad + (q-1) \cdot (2(p-1)) + (p-1) \cdot (2(q-1)) + 1 \cdot 2 \\ &\quad + 1 \cdot (4(p-1)(q-1) + 2(p+q-2) + 2) \\ &= 4(3pq - 2p - 2q + 2) = E(H_n) + 2n. \end{aligned}$$

Dakle, grafovi G_n i H_n su nekospaktralni i **D**-ekvienergetski.

Na Slici 5.2 je prikazan najmanji par tri-ekvienergetskih grafova sa 30 čvorova. Slično se može pokazati da su integralni cirkulantni grafovi $ICG(8p, \{1, 2\})$ i $ICG(8p, \{4, 8, p, 2p\})$ takođe **A**-, **L**-, i **D**-ekvienergetski.



Slika 5.2: Par tri-ekvienergetskih grafova sa 30 čvorova.

5.6 Klase integralnih cirkulantnih grafova

U prvom delu, posmatramo brojeve $n = p_1^{\alpha_1} p_2^{\alpha_2} \cdot \dots \cdot p_k^{\alpha_k}$ sa skupom delioca $D = \{1, p_i\}$, gde je $\alpha_i = 1$. Sopstvene vrednosti grafa $ICG_n(D)$ su jednake

$$\begin{aligned} \lambda_k &= c(k, n) + c\left(k, \frac{n}{p_i}\right) \\ &= \mu\left(\frac{n}{\gcd(k, n)}\right) \cdot \frac{\varphi(n)}{\varphi\left(\frac{n}{\gcd(k, n)}\right)} + \mu\left(\frac{n}{\gcd(k \cdot p_i, n)}\right) \cdot \frac{\varphi\left(\frac{n}{p_i}\right)}{\varphi\left(\frac{n}{\gcd(k \cdot p_i, n)}\right)} \end{aligned}$$

Neka je $m \cdot \gcd(k, n) = n$ i $m' \cdot \gcd(k \cdot p_i, n) = n$. Koristeći ove relacije, lako dobijamo $m' \cdot \gcd(p_i, m) = m$.

Ako m nije kvadrat-slobodan, sledi da je $\mu(m) = 0$ i $p_j^2 \mid m$ za neko $1 \leq j \leq k$, $j \neq i$. To znači da je m' takođe deljivo sa p_j^2 i slično $\mu(m') = 0$. Dakle, u ovom slučaju je $\lambda_k = 0$.

Ako je $\gcd(m, p_i) = 1$, imamo $m = m'$ i

$$|\lambda_k| = \frac{\varphi(n) + \varphi\left(\frac{n}{p_i}\right)}{\varphi(m)}. \quad (5.10)$$

Ako je $\gcd(m, p_i) = p_i$, sledi da $\mu(m)$ i $\mu(m/p_i)$ imaju različite znakove i zbog multiplikativnosti Ojlerove funkcije sledi

$$\begin{aligned} |\lambda_k| &= \left| \mu(m) \cdot \frac{\varphi(n)}{\varphi(m)} + \mu(m/p_i) \cdot \frac{\varphi(n/p_i)}{\varphi(m/p_i)} \right| \\ &= \left| \frac{\varphi(n)}{\varphi(m)} - \frac{\varphi(n/p_i)}{\varphi(m/p_i)} \cdot \frac{\varphi(p_i)}{\varphi(p_i)} \right| = 0. \end{aligned}$$

Dakle, treba sabrati sve sopstvene vrednosti (5.10) takve da p_i ne deli m . Postoji 2^{k-1} mogućnosti za m , i za svaku vrednost m postoji tačno $\varphi(m)$ rešenja jednačine $m \cdot \gcd(k, n) = n$. Kako je $\varphi(n) = \varphi(p_i) \cdot \varphi(n/p_i)$, to znači da

$$E(\text{ICG}_n(1, p_i)) = 2^{k-1} \cdot (\varphi(n) + \varphi(n/p_i)) = 2^{k-1} \cdot p_i \cdot \varphi(n/p_i) = E(\text{ICG}_n(p_i)).$$

Time smo dokazali sledeću

Teorema 5.6.1 *Neka je $n = p_1^{\alpha_1} p_2^{\alpha_2} \cdot \dots \cdot p_k^{\alpha_k}$. Za dvoelementni skup delioca $D = \{1, p_i\}$, gde je $\alpha_i = 1$, važi*

$$E(\text{ICG}_n(1, p_i)) = 2^{k-1} p_i \cdot \varphi\left(\frac{n}{p_i}\right).$$

Za $k > 3$ integralan cirkulantan graf $\text{ICG}_n(1, p_i)$ je hiperenergetski, jer

$$E(\text{ICG}_n(1, p_i)) = 2p_i \cdot 2^{k-2} \varphi\left(\frac{n}{p_i}\right) > 2p_i \cdot \frac{n}{p_i} = 2n.$$

Drugi rezultat se odnosi na kvadrat-slobodan broj $n = p_1 p_2 \cdot \dots \cdot p_k$ sa skupom delioca $D = \{p_i, p_j\}$.

Teorema 5.6.2 *Neka je n kvadrat-slobodan broj $n = p_1 p_2 \cdot \dots \cdot p_k$. Tada energija integralnog cirkulantnog grafa $\text{ICG}_n(p_i, p_j)$ ne zavisi od izbora prostih delioca p_i i p_j ,*

$$E(\text{ICG}_n(p_i, p_j)) = 2^k \varphi(n) = 2^k \prod_{i=1}^k (p_i - 1).$$

Dokaz. Za $1 \leq k \leq n$, neka je

$$m = \frac{n}{\gcd(k \cdot p_i, n)} \quad \text{i} \quad m' = \frac{n}{\gcd(k \cdot p_j, n)}.$$

Razlikujemo četiri slučaja.

Slučaj 1. Broj k je deljiv sa p_i i p_j . U tom slučaju, brojevi m i m' su jednaki i nisu deljivi sa p_i i p_j . Dakle,

$$|\lambda_k| = \frac{\varphi\left(\frac{n}{p_i}\right) + \varphi\left(\frac{n}{p_j}\right)}{\phi(m)}.$$

Broj rešenja jednačine $\gcd(k, n) = \frac{n}{m}$ je jednak $\varphi(m)$. Broj mogućih vrednosti m je jednak 2^{k-2} , pošto možemo odabrati bilo koji delilac od $\frac{n}{p_i p_j}$. Zato je udeo jednak

$$2^{k-2} \left(\varphi\left(\frac{n}{p_i}\right) + \varphi\left(\frac{n}{p_j}\right) \right).$$

Slučaj 2. Broj k je deljiv sa p_i i nije deljiv sa p_j . Sada važi $m = m' \cdot p_j$ i $\mu(m) = -\mu(m')$,

$$|\lambda_k| = \left| \frac{\varphi\left(\frac{n}{p_j}\right)}{\varphi(m')} - \frac{\varphi\left(\frac{n}{p_i}\right)}{\varphi(m' p_j)} \right| = \frac{\varphi(n) - \varphi\left(\frac{n}{p_i}\right)}{\varphi(m' p_j)}.$$

Broj rešenja jednačine $\gcd(k \cdot p_j, n) = \frac{n}{m'}$ je jednak $\varphi(m'p_j)$. Dakle, udeo je sada

$$2^{k-2} \left(\varphi(n) - \varphi\left(\frac{n}{p_i}\right) \right).$$

Slučaj 3. Broj k je deljiv sa p_j i nije deljiv sa p_i . Slično kao u prethodnom slučaju imamo udeo

$$2^{k-2} \left(\varphi(n) - \varphi\left(\frac{n}{p_j}\right) \right).$$

Slučaj 4. Broj k nije deljiv ni sa p_i ni sa p_j . Sada imamo $mp_i = m'p_j = m''p_ip_j$ i $\mu(m) = \mu(m')$,

$$|\lambda_k| = \frac{\varphi\left(\frac{n}{p_i}\right)}{\varphi(m)} + \frac{\varphi\left(\frac{n}{p_j}\right)}{\varphi(m')} = \frac{2\varphi(n)}{\varphi(m''p_ip_j)}.$$

Broj rešenja jednačina $\gcd(k \cdot p_i, n) = \frac{n}{m}$ i $\gcd(k \cdot p_j, n) = \frac{n}{m'}$ je jednak $\varphi(m''p_ip_j)$. Zato je udeo u ovom slučaju jednak

$$2^{k-2} \cdot 2\varphi(n) = 2^{k-1}\varphi(n).$$

Kada sumiramo sve doprinose u ova četiri slučaja, jednostavno dobijamo $E(\text{ICG}_n(p_i, p_j)) = 2^k\varphi(n)$. Štaviše, nularnost grafa $\text{ICG}_n(p_i, p_j)$ je jednaka nuli. ■

Korišćenjem prethodnog rezultata, možemo konstruisati bar k nekospektralnih regularnih grafova sa n čvorova

$$\text{ICG}_n(1), \text{ICG}_n(p_1, p_2), \text{ICG}_n(p_1, p_3), \dots, \text{ICG}_n(p_{k-1}, p_k),$$

sa jednakom energijom [208, 250]. Ovi grafovi su očigledno regularni i nisu kospektralni, jer su njihove najveće sopstvene vrednosti različite,

$$\varphi(n) = \varphi\left(\frac{n}{p_1}\right)(p_1 - 1) > \varphi\left(\frac{n}{p_1}\right) + \varphi\left(\frac{n}{p_2}\right) > \varphi\left(\frac{n}{p_1}\right) + \varphi\left(\frac{n}{p_3}\right) > \dots > \varphi\left(\frac{n}{p_1}\right) + \varphi\left(\frac{n}{p_k}\right).$$

Posledica 5.6.3 *Za svaki $k \in \mathbb{N}$, postoji beskonačno mnogo familija od k hiperenergetskih nekospektralnih integralnih cirkulantnih grafova sa n čvorova koji imaju jednaku energiju.*

Bilo bi interesantno odrediti energiju ostalih integralnih cirkulantnih grafova $\text{ICG}_n(D)$ i to ostavljamo za dalje istraživanje. Čak i slučaj kada se skup delioca sastoji od tri prosta broja deluje da se teško može rešiti elegantno.

5.7 Energija po modulu 4

2004. godine Bapat i Pati [17] su dokazali interesantnu jednostavnu činjenicu – energija grafa ne može biti neparan broj. Pirzada i Gutman [201] su generalizovali ovaj rezultat i dokazali

Teorema 5.7.1 *Neka su r i s celi brojevi takvi da je $r \geq 1$ i $0 \leq s \leq r - 1$. Ako je q proizvoljan neparan broj, tada $E(G)$ ne može biti u formi $(2^s q)^{1/r}$.*

U ovom delu ćemo otići korak dalje i okarakterisati energiju integralnih cirkulantnih grafova po modulu 4.

Korišćenjem relacije (5.2) dobijamo

$$\sum_{i=0}^{n-1} c(i, n) = 0,$$

odnosno za svako k važi

$$\sum_{i=k}^{k+n-1} c(i, n) = 0. \quad (5.11)$$

Za parno n imamo

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{n/2-1} c(k, n) &= \sum_{\substack{a=1 \\ \gcd(a,n)=1}}^n \sum_{k=0}^{n/2-1} \omega_n^{ak} = \sum_{\substack{a=1 \\ \gcd(a,n)=1}}^{n/2} \left(\sum_{k=1}^{n/2-1} \omega_n^{ak} + \omega_n^{(n-a)k} \right) \\ &= \sum_{\substack{a=1 \\ \gcd(a,n)=1}}^{n/2} \left(\omega_n^{an} - \omega_n^{an/2} + \sum_{k=0}^n \omega_n^{ak} \right) = \sum_{\substack{a=1 \\ \gcd(a,n)=1}}^{n/2} (1 + 1) \\ &= \varphi(n). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Slično, za neparno n imamo

$$\sum_{k=0}^{(n-1)/2} c(k, n) = \frac{\varphi(n)}{2} \quad (5.13)$$

Takođe, ako je $k \equiv k' \pmod{n}$ tada je $c(k, n) = c(k', n)$.

Primetimo da za proizvoljan delilac d i $1 \leq i \leq n-1$ važi

$$t_{n/d,i} = \frac{n/d}{\gcd(n/d,i)} = \frac{n}{\gcd(n, id)}$$

i

$$t_{n/d,n-i} = \frac{n/d}{\gcd(n/d,n-i)} = \frac{n}{\gcd(n, nd-id)}.$$

Kako je $\gcd(n, id) = \gcd(nd-id)$, sledi $t_{n/d,i} = t_{n/d,n-i}$. Konačno imamo

$$c(n/d, i) = \mu(t_{n/d,i}) \frac{\varphi(n/d)}{\varphi(t_{n/d,i})} = \mu(t_{n/d,n-i}) \frac{\varphi(n/d)}{\varphi(t_{n/d,n-i})} = c(n/d, n-i),$$

za svako $1 \leq i \leq n-1$.

Lema 5.7.2 *Neka je $ICG_n(D)$ proizvoljan integralan cirkulantan graf. Tada su za svako $1 \leq i \leq n-1$, sopstvene vrednosti λ_i i λ_{n-i} jednake.*

Za $i=0$ imamo

$$\lambda_0 = \sum_{d \in D} \varphi(n/d),$$

dok za parno n i $i = n/2$ imamo

$$\lambda_{n/2} = \sum_{d \in D} (-1)^d \varphi(n/d),$$

5.7.1 Slučaj n neparan

Po Lemi 5.7.2, energija grafa $G \cong ICG_n(D)$ je jednaka

$$E(G) = \lambda_0 + 2 \sum_{i=1}^{(n-1)/2} |\lambda_i|.$$

Kako je $x \equiv |x| \pmod{2}$, da bi okarakterisali $E(G)$ po modulu 4 posmatramo parnost sledeće sume

$$\frac{E(G)}{2} \equiv \sum_{d \in D} \frac{\varphi(n/d)}{2} + \sum_{i=1}^{(n-1)/2} \sum_{d \in D} c(i, n/d) \pmod{2}$$

Kako je $n/d > 2$, broj $\varphi(n/d)$ je paran. Sada možemo zameniti redosled suma

$$\frac{E(G)}{2} \equiv \sum_{d \in D} \frac{\varphi(n/d)}{2} + \sum_{d \in D} \sum_{i=1}^{(n-1)/2} c(i, n/d) \pmod{2}. \quad (5.14)$$

Teorema 5.7.3 *Za neparno n , energija grafa $ICG_n(D)$ je deljiva sa četiri.*

Dokaz. Koristeći sledeće rastavljanje $\frac{n-1}{2} = \frac{n}{d} \cdot \frac{d-1}{2} + \frac{n-d}{2d}$, formula za energiju postaje

$$\frac{E(G)}{2} \equiv \sum_{d \in D} \frac{\varphi(n/d)}{2} + \sum_{d \in D} \left(\sum_{l=0}^{\frac{d-1}{2}-1} \sum_{i=l\frac{n}{d}+1}^{(l+1)\frac{n}{d}} c(i, n/d) + \sum_{i=\frac{n(d-1)}{2d}+1}^{\frac{n-1}{2}} c(i, n/d) \right) \pmod{2}. \quad (5.15)$$

Dalje dobijamo

$$\frac{E(G)}{2} \equiv \sum_{d \in D} \frac{\varphi(n/d)}{2} + \sum_{i=1}^{(n/d-1)/2} c(i, n/d) \pmod{2},$$

i korišćenjem relacije (5.13), sledi

$$\frac{E(G)}{2} \equiv \sum_{d \in D} \frac{\varphi(n/d)}{2} + \frac{\varphi(n/d)}{2} + \varphi(n/d) \equiv \sum_{d \in D} 2\varphi(n/d) \equiv 0 \pmod{2},$$

i konačno dobijamo $4 \mid E(G)$. ■

5.7.2 Slučaj n paran

Po Lemi 5.7.2, energija grafa $G \cong ICG_n(D)$ je jednaka

$$E(G) = |\lambda_0| + |\lambda_{n/2}| + 2 \sum_{i=1}^{n/2-1} |\lambda_i|.$$

Korišćenjem sličnog rezonovanja kao u prethodnom delu, dobijamo da su λ_0 i $\lambda_{n/2}$ iste parnosti,

$$|\lambda_0| + |\lambda_{n/2}| = \sum_{d \in D} \varphi(n/d) + \left| \sum_{d \in D} (-1)^d \varphi(n/d) \right|.$$

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{2} \cdot (|\lambda_0| + |\lambda_{n/2}|) = \sum_{d \in D} \frac{\varphi(n/d)}{2} \pm \sum_{d \in D} (-1)^d \frac{\varphi(n/d)}{2} \\ &\equiv \begin{cases} \sum_{d \in D, d \text{ parno}} \varphi(n/d) \pmod{2}, & \text{ako je } \lambda_{n/2} > 0 \\ \sum_{d \in D, d \text{ neparno}} \varphi(n/d) \pmod{2}, & \text{ako je } \lambda_{n/2} < 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Ako $\frac{n}{2} \notin D$, tada $2 \mid \varphi(n/d)$ i $S \equiv 0 \pmod{2}$; inače obe sopstvene vrednosti λ_0 i $\lambda_{n/2}$ su neparne i

$$S \equiv \begin{cases} 0, & \text{ako } \lambda_{n/2} > 0 \text{ i } 4 \nmid n, \text{ ili } \lambda_{n/2} < 0 \text{ i } 4 \mid n \\ 1, & \text{ako } \lambda_{n/2} > 0 \text{ i } 4 \mid n, \text{ ili } \lambda_{n/2} < 0 \text{ i } 4 \nmid n \end{cases}.$$

Dakle,

$$\frac{E(G)}{2} \equiv S + \sum_{d \in D} \sum_{i=1}^{n/2-1} c(i, n/d) \pmod{2}.$$

Teorema 5.7.4 Za parno n , energija grafa $ICG_n(D)$ nije deljiva sa četiri ako i samo ako $\frac{n}{2} \notin D$ i $\lambda_{n/2}$ je negativno.

Dokaz. Ako je d parno, imamo $\frac{n}{2} - 1 = \frac{d}{2} \cdot \frac{n}{d} - 1$. Kako je $c(0, n/d) = c(n/d, n/d) = \varphi(n/d)$, sledi

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n/2-1} c(i, n/d) &= -c(0, n/d) + \sum_{k=1}^{d/2} \sum_{i=(k-1) \cdot n/d}^{k \cdot n/d - 1} c(i, n/d) \\ &= -\varphi(n/d) + \frac{d}{2} \cdot \sum_{i=0}^{n/d-1} c(i, n/d) \\ &= -\varphi(n/d). \end{aligned}$$

Ako je d neparno, imamo $\frac{n}{2} - 1 = \frac{d-1}{2} \cdot \frac{n}{d} + \frac{1}{2} \cdot \frac{n}{d} - 1$. Slično sledi

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n/2-1} c(i, n/d) &= -c(0, n/d) + \sum_{k=1}^{(d-1)/2} \sum_{i=(k-1) \cdot n/d}^{k \cdot n/d - 1} c(i, n/d) + \sum_{i=((d-1)/2) \cdot n/d}^{n/2-1} c(i, n/d) \\ &= -\varphi(n/d) + \frac{d-1}{2} \cdot \sum_{i=0}^{n/d-1} c(i, n/d) + \sum_{i=0}^{n/(2d)-1} c(i, n/d) \\ &= -\varphi(n/d) + \varphi(n/d) = 0, \end{aligned}$$

koristeći relaciju (5.12).

Za $d \neq \frac{n}{2}$, dobijamo $S \equiv 0 \pmod{2}$ i $4 \mid E(G)$.

Za $d = \frac{n}{2}$, kombinovanjem gornjih slučajeva sledi

$$\sum_{i=1}^{n/2-1} c(i, n/d) \equiv \frac{1 + (-1)^{n/2}}{2} \pmod{2}.$$

Za $\lambda_{n/2} > 0$, imamo

$$\frac{E(G)}{2} \equiv S + \frac{1 + (-1)^{n/2}}{2} \equiv \frac{1 + (-1)^{n/2}}{2} + \frac{1 + (-1)^{n/2}}{2} \equiv 0 \pmod{2},$$

dok za $\lambda_{n/2} < 0$, imamo

$$\frac{E(G)}{2} \equiv S + \frac{1 + (-1)^{n/2}}{2} \equiv \frac{1 - (-1)^{n/2}}{2} + \frac{1 + (-1)^{n/2}}{2} \equiv 1 \pmod{2}.$$

Time je dokaz završen. ■

5.8 Minimum energije integralnih cirkulantnih grafova

Prirodno pitanje je koji integralni cirkulantni grafovi imaju minimalnu energiju i kompletno okarakterisati ekstremalne grafove. U ovom delu koristimo sledeći interesantan rezultat iz [107, 267]

Teorema 5.8.1 Neka je G regularan graf sa n čvorova stepena $r > 0$. Tada

$$E(G) \geq n,$$

sa jednakošću ako i samo ako je svaka komponenta od G izomorfna sa kompletnim bipartitnim grafom $K_{r,r}$.

Dokaz je zasnovan na proceni

$$E(G) \geq \frac{M_2^2}{\sqrt{M_2 M_4}},$$

gde su M_2 i M_4 spektralni momenti grafa G .

Neka je n paran broj i pretpostavimo da je $\text{ICG}_n(D^*)$ izomorfan sa $K_{n/2, n/2}$. Bašić i Ilić su dokazali sledeću teoremu u [19].

Teorema 5.8.2 *Neka su d_1, d_2, \dots, d_k delioci broja n tako da je najveći zajednički delilac brojeva d_1, d_2, \dots, d_k jednak d . Tada graf $\text{ICG}_n(d_1, d_2, \dots, d_k)$ ima tačno d komponenti povezanosti izomorfnih sa $\text{ICG}_{n/d}(\frac{d_1}{d}, \frac{d_2}{d}, \dots, \frac{d_k}{d})$.*

Dokaz. Ako je $\text{gcd}(d_1, d_2, \dots, d_k) = d > 1$, u grafu $\text{ICG}_n(D)$ postoji bar d povezanih komponenti. Dokazaćemo da je za svako $0 \leq r < d$ podgraf indukovan čvorovima $\{r, d+r, 2d+r, \dots, (\frac{n}{d}-1) \cdot d+r\}$ povezan (konstrukcijom puta od čvora r do svih ostalih čvorova u ovoj komponenti).

Dokazaćemo primenom Bezuove teoreme i matematičke indukcije po k , dokazaćemo da postoje celi brojevi x_1, x_2, \dots, x_k takvi da važi $x_1 \cdot d_1 + x_2 \cdot d_2 + \dots + x_k \cdot d_k = d$. Za $k \geq 2$, možemo naći cele brojeve y_1, y_2, \dots, y_{k-1} takve da je $y_1 \cdot d_1 + y_2 \cdot d_2 + \dots + y_{k-1} \cdot d_{k-1} = \text{gcd}(d_1, d_2, \dots, d_{k-1})$. Primenom Bezuove teoreme na brojeve $\text{gcd}(d_1, d_2, \dots, d_{k-1})$ i d_k , sledi

$$d = x \cdot \text{gcd}(d_1, d_2, \dots, d_{k-1}) + y \cdot d_k = xy_1 \cdot d_1 + xy_2 \cdot d_2 + \dots + xy_{k-1} \cdot d_{k-1} + y \cdot d_k.$$

Štaviše, za $i = 1, 2, \dots, k$ i $j = 0, 1, \dots, n-1$, neka je

$$H_n(d_i) = \{h \mid 0 \leq h < n, h \equiv 0 \pmod{d_i}\} \subseteq Z_n,$$

i neka $j + H_n(d_i)$ označava podgraf od $\text{ICG}_n(D)$ indukovan skupom čvorova $\{j + h \mid h \in H_n(d_i)\}$. Dva čvora $j + h_1$ i $j + h_2$ su susedna ako važi $h_2 - h_1 \in G_n(d_i)$. Dakle, iz čvora r postoji šetnja do svakog čvora $r + k \cdot d$, gde je $0 \leq k \leq \frac{n}{d}$, prolazeći kroz podgrafove $H_n(d_1), H_n(d_2), \dots, H_n(d_k)$, redom. Zbog simetrije svaka od komponenti grafa $\text{ICG}_n(D)$ je izomorfna sa $\text{ICG}_{n/d}(\frac{d_1}{d}, \frac{d_2}{d}, \dots, \frac{d_k}{d})$. ■

Komplement grafa $\text{ICG}_n(D^*)$ mora sadržati tačno dve povezane komponente koje su kompletni grafovi, i za komplement skupa delioca $\overline{D^*} = \{d_1, d_2, \dots, d_k\}$ imamo $\text{gcd}(d_1, d_2, \dots, d_k) = 2$ i graf $\text{ICG}_{n/2}(\frac{d_1}{2}, \frac{d_2}{2}, \dots, \frac{d_k}{2})$ je izomorfan sa kompletnim grafom $K_{n/2}$. Sada direktno dobijamo da skup $\overline{D^*}$ mora sadržati sve parne delioce od n i zato skup D^* sadrži sve neparne delioce od n . U tom slučaju stepen grafa G je jednak $\frac{n}{2} = \sum_{d \in D} \varphi(\frac{n}{d})$. Koristeći osobine spektra kompletnog bipartitnog grafa, imamo $|\lambda_{n/2}| = |\lambda_n| = \frac{n}{2}$ i za svako $k \neq \frac{n}{2}, n$ važi

$$\lambda_k = \sum_{d \in D^*} c\left(k, \frac{n}{d}\right) = \sum_{d \mid n, d \text{ parno}} c(k, d) = 0.$$

Za neparno n , minimum energije je $2n(1 - \frac{1}{p})$, gde je p najmanji prost broj koji deli n . Ekstremalni integralni cirkulantni graf sadrži sve delioce od n koji nisu deljivi sa p (odnosno komplement ovog grafa je sastavljen od p kompletnih grafova sa n/p čvorova). Dokaz ove hipoteze ostavljamo za dalja istraživanja.

Glava 6

Estradin indeks

Neka je $G = (V, E)$ prost graf sa $|V| = n$ čvorova i $|E| = m$ grana. Neka je spektar grafa G dat sa $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$. Estradin indeks se definiše na sledeći način

$$EE(G) = \sum_{i=1}^n e^{\lambda_i}.$$

U poslednjih deset godina, Estradin indeks je našao mnoge primene u merenju stepena sklapanja proteina [85, 86], kod centralnosti kompleksnih mreža (kao što su socijalne, neuralne, metaboličke, protein–protein mreže interakcija, internet WWW) [87], i predložen je za merenje molekularnog grananja (gde uzima u obzir sve atome u molekulu, ali susedne čvorove sa većim uticajem) [89]. U okviru grupe izomera, EE se povećava sa povećanjem mere grananja ugljenikovih atoma u skeletonu [109]. Takođe, EE karakteriše strukturu alkana preko elektronske particione funkcije [88]. Nedavno, Carbó-Dorca [36] je nastojao pronaći veze između Estradinog indeksa i Šenonove entropije.

Neka matematičke osobine Estradinog indeksa su prikazane u [261] (za pregledni članak o Estradinom indeksu pogledati [63]). Prirodan problem je proučavanje Estradinog indeksa kod hemijskih stabala (sa maksimalnim stepenom četiri) i generalno kod stabala sa ograničenim stepenom [125, 126]. Glavni rezultat je pokazivanje

$$EE(S_n) = EE(B_{n,n-1}) > EE(B_{n,n-2}) > \dots > EE(B_{n,3}) > EE(B_{n,2}) = EE(P_n), \quad (6.1)$$

gde je metla $B_{n,\Delta}$ stablo koje se sastoji od zvezde $S_{\Delta+1}$ i puta $P_{n-\Delta-1}$ koji je zakačen na proizvoljan list zvezde.

Sledeće pitanje se takođe može postaviti [180]: koji su to najrazgranatiji alkani? Ovaj problem je detaljno analiziran u [92] i nekoliko molekularnih strukturnih deskriptora upućuju da su najrazgranatiji alkani upravo oni predstavljeni Volkmanovim stablima.

Dalje uvodimo Laplasov Estradin indeks, koristeći Laplasove sopstvene vrednosti i dajemo osnovne matematičke osobine ove invarijante. Takođe analiziramo broj ograničenih puteva u celobrojnoj mreži koji se sastoje od koraka $(1, 1)$ i $(1, -1)$ i ne seku prave $y = m$ i $y = -k$.

6.1 Osnovne osobine

U dokazima ćemo koristiti vezu između Estradinog indeksa i spektralnih momenata grafa. Za $k \geq 0$, sa M_k označavamo k -ti spektralni momenat grafa G ,

$$M_k(G) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^k.$$

Šetnja dužine k u grafu G je proizvoljan niz čvorova i grana,

$$w = w_0, e_1, w_1, e_2, \dots, w_{k-1}, e_k, w_k,$$

tako da grana e_i spaja čvorove w_{i-1} i w_i za svako $i = 1, 2, \dots, k$. Šetnja je zatvorena ako važi $w_0 = w_k$. Dobro je poznato (videti [47]) da $M_k(G)$ predstavlja broj zatvorenih šetnji dužine k u grafu G . Dokaz je zasnovan na Teoremi 2.3.1 i činjenici da su sopstvene vrednosti matrice A^k upravo $\lambda_1^k, \lambda_2^k, \dots, \lambda_n^k$. Očigledno, za svaki graf važi $M_0 = n$, $M_1 = 0$ i $M_2 = 2m$. Za treći momenat imamo $M_3 = 6t$, gde t predstavlja broj trouglova u grafu G . Četvrti momenat je jednak

$$M_4 = 2 \sum_{v \in V} \deg^2(v) - 2m + 8q, \tag{6.2}$$

gde q označava broj četvorouglova u grafu G .

Iz Tejlorovog razvoja funkcije e^x , dobijamo da su Estradin indeks i spektralni momenti grafa G povezani sa

$$EE(G) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{M_k}{k!}. \tag{6.3}$$

Dakle, ako za dva grafa G i H važi $M_k(G) \geq M_k(H)$ za sve $k \geq 0$, tada je $EE(G) \geq EE(H)$. Štaviše, ako za neko k važi stroga nejednakost $M_k(G) > M_k(H)$, tada je $EE(G) > EE(H)$. Takođe, po definiciji eksponenta matrice, imamo identitet $EE(G) = \text{tr}(e^{A(G)})$.

U [5] autori analiziraju Estradin indeks ponovljenih linijskih grafova i dokazuju sledeći identitet za r -regularan graf G :

$$EE(\mathcal{L}^k(G)) = a_k(r) \cdot EE(G) + b_k(r) \cdot n,$$

gde koeficijenti $a_k(r)$ i $b_k(r)$ zavise samo od parametara r i k .

Sopstvene vrednosti bipartitnog grafa zadovoljavaju relaciju $\lambda_{n-i+1} = -\lambda_i$, za $i = 1, 2, \dots, n$. Zato, za bipartitan graf G sa nularnošću η , tada imamo

$$EE(G) = \eta + 2 \sum_{\lambda_i > 0} \cosh \lambda_i,$$

gde $\cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$ predstavlja hiperbolički kosinus.

Teorema 6.1.1 *Neka je G graf sa n čvorova i m grana. Tada je Estradin indeks ograničen sa*

$$\sqrt{n^2 + 4m} \leq EE(G) \leq n - 1 + e^{\sqrt{m-1}}.$$

Jednakost na obe strane je dostignuta ako i samo ako je $G \cong \overline{K_n}$.

Dokaz. Po definiciji Estradinog indeksa imamo

$$EE^2(G) = \sum_{i=1}^n e^{2\lambda_i} + 2 \sum_{i < j} e^{\lambda_i} e^{\lambda_j}.$$

Iz nejednakosti između aritmetičke i geometrijske sredine sledi

$$2 \sum_{i < j} e^{\lambda_i} e^{\lambda_j} \geq n(n-1) \left(\prod_{i < j} e^{\lambda_i} e^{\lambda_j} \right)^{2/(n(n-1))} = n(n-1) \left(\prod_{i=1}^n e^{\lambda_i} \right)^{2/n} = n(n-1).$$

Koristeći samo spektralne momente M_0 , M_1 i M_2 dobijamo

$$\sum_{i=1}^n e^{2\lambda_i} = \sum_{i=1}^n \sum_{k \geq 0} \frac{(2\lambda_i)^k}{k!} = n + 4m + \sum_{i=1}^n \sum_{k \geq 3} \frac{(2\lambda_i)^k}{k!} \geq n + 4m.$$

Sumiranjem poslednje dve nejednakosti dobijamo donju granicu; u ovom slučaju jednakost važi ako i samo ako je $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_n = 0$, odnosno $G \cong \overline{K}_n$.

Gornju granicu dobijamo na sledeći način

$$\begin{aligned} EE(G) &= n + \sum_{i=1}^n \sum_{k \geq 1} \frac{\lambda_i^k}{k!} \leq n + \sum_{i=1}^n \sum_{k \geq 1} \frac{|\lambda_i|^k}{k!} = n + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} \sum_{i=1}^n (\lambda_i^2)^{k/2} \\ &\leq n + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 \right)^{k/2} = n + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} (2m)^{k/2} = n - 1 + e^{\sqrt{2m}}. \end{aligned}$$

Jednakost važi ako i samo ako graf G ima sve sopstvene vrednosti jednake nuli, odnosno $G \cong \overline{K}_n$.

■

Slično se mogu pokazati sledeće procene za bipartitne grafove.

Teorema 6.1.2 *Neka je G graf sa n čvorova i m grana. Tada je Estradin indeks ograničen sa*

$$e^{2m/n} + e^{-2m/n} + n - 2 \leq EE(G) \leq n - 2 + e^{\sqrt{2m}} + e^{-\sqrt{2m}}.$$

Jednakost na levoj strani je dostignuta ako i samo ako $G \cong K_{n/2, n/2}$, dok je jednakost na desnoj strani dostignuta za grafove koji imaju najviše jednu pozitivnu sopstvenu vrednost, odnosno $G \cong K_{a,b} \cup \overline{K}_c$, gde je $a + b + c = n$ i $ab = m$.

Estradin indeks zvezde S_n je jednak

$$EE(S_n) = e^{\sqrt{n-1}} + e^{-\sqrt{n-1}} + n - 2 = \cosh \sqrt{n-1} + (n-2).$$

Za bipartitne grafove, možemo koristiti nejednakost

$$\cosh x \geq 1 + \frac{x^2}{2},$$

i posle sumiranja dobijamo $EE(G) \geq n + m$.

Peña, Gutman i Rada su postavili sledeće dve hipoteze u [59]:

Hipoteza 6.1.3 *Među stablima sa n čvorova, put ima najmanji, a zvezda najveći Estradin indeks*

$$EE(S_n) > EE(T) > EE(P_n).$$

Hipoteza 6.1.4 *Među grafovima sa n čvorova, put ima najmanji, a kompletan graf najveći Estradin indeks*

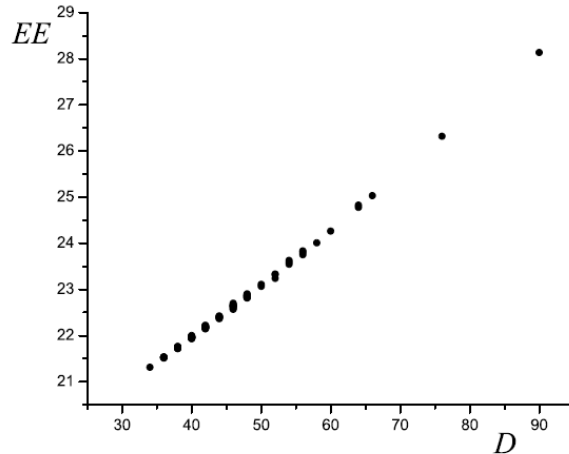
$$EE(K_n) > EE(G) > EE(P_n).$$

Kako dodavanje grana povećava broj zatvorenih šetnji bilo koje dužine, dobijamo da prva hipoteza implicira drugu hipotezu. Iz Teoreme 6.1.2 direktno dobijamo da zvezda S_n ima najveći EE među stablima sa n čvorova, zbog $m = n - 1$. Das i Lee [57] su dali parcijalan odgovor Hipoteze 6.1.3, dok je Deng [62] predložio dokaz identičan našem dokazu iz sledeće sekcije – samo mesec dana ranije.

Kvantitativna analiza korelacija Estradinog indeksa dovodi do sledeće aproksimacije

$$EE(G) \approx 1.735n - 0.13 + 0.11M_1(G),$$

sa greškom manjom od 0.1%, što se može videti sa Slike 6.1. Estradin indeks je takođe koreliran sa najvećom sopstvenom vrednošću matrice susedstva [116], dok empirijske studije otkrivaju da su broj čvorova n i broj grana m faktori koji najviše utiču na vrednost EE molekularnih grafova.



Slika 6.1: Korelacija između Estradinog indeksa i prvog Zagrebačkog indeksa za stabla sa 10 čvorova.

6.2 Grafovske transformacije

Neka je $M_k(n, i)$ broj zatvorenih šetnji dužine k koje polaze od čvora v_i u putu $P_n = v_0v_1v_2 \dots v_n$. Kako je svako stablo bipartitan graf, to važi $M_{2k+1}(n, i) = 0$ za $0 \leq i \leq n$. Zbog simetrije imamo $M_k(n, i) = M_k(n, n - i)$.

Niz brojeva c_1, c_2, \dots, c_k is *unimodalan* ako ne postoje indeksi $1 \leq p < q < r \leq k$ takvi da je $c_p > c_q < c_r$.

Lema 6.2.1 Za svako parno $k > 0$ važi

$$M_k(n, 0) \leq M_k(n, 1) \leq \dots \leq M_k(n, \lceil \frac{n}{2} \rceil - 1) \leq M_k(n, \lceil \frac{n}{2} \rceil).$$

Za dovoljno veliko k imamo strogu nejednakost.

Dokaz. Neka je A matrica susedstva puta P_n . Dokazaćemo da matrica A^k ima sledeću osobinu: svaka dijagonala paralelna glavnoj dijagonali je unimodalna. Kao prvo, matrica A^k je simetrična. Drugo, zbog automorfizma $f : \{v_0, v_1, \dots, v_n\} \rightarrow \{v_0, v_1, \dots, v_n\}$ u grafu P_n , koji je dat sa $f(v_i) = v_{n-i}$, dobijamo $(A^k)_{i,j} = (A^k)_{n-i,n-j}$. Dakle, dovoljno je dokazati da su dijagonale paralelne glavnoj dijagonali rastuće za $i + j \leq n$.

Nastavićemo matematičkom indukcijom po k i dokazati da za svako $1 \leq i, j \leq n$ za koje je $i + j \leq n$, važi:

$$(A^k)_{i,j} \geq (A^k)_{i-1,j-1}. \quad (6.4)$$

Za $k = 0$ i $k = 1$, tvrđenje je očigledno. Korišćenjem rekurentne formule koja je izvedena iz množenja matrica, imamo

$$\begin{aligned} (A^{k+1})_{i-1,j-1} &= (A^k)_{i-1,j-2} + (A^k)_{i-1,j} \\ (A^{k+1})_{i,j} &= (A^k)_{i,j-1} + (A^k)_{i,j+1}. \end{aligned}$$

Iz indukcijske hipoteze važi $(A^k)_{i,j-1} \geq (A^k)_{i-1,j-2}$. Ako je $i + j + 1 \leq n$, tada takođe imamo $(A^k)_{i,j+1} \geq (A^k)_{i-1,j}$. Za $i + j + 1 = n + 1$, tj. $j = n - i$, imamo $(A^k)_{i-1,j} = (A^k)_{i,j+1}$. Time smo dokazali nejednakost (6.4).

Za strogu nejednakost, posmatrajmo dve susedne vrste sa indeksima $i - 1$ i i . Eventualno, element $(A^k)_{i,0}$ postaje veći od nule što forsira strogu nejednakost $(A^{k+1})_{i,1} > (A^{k+1})_{i-1,0}$. Ovo uzrokuje niz strogih nejednakosti $(A^{k+2})_{i,2} > (A^{k+2})_{i-1,1}$, $(A^{k+3})_{i,3} > (A^{k+3})_{i-1,2}$, i konačno

$$(A^{k+n-i})_{i,n-i} > (A^{k+n-i})_{i-1,n-i-1}.$$

Broj zatvorenih šetnji dužine k koje polaze od čvora i je jednak elementu (i, i) u matrici A^k . Dakle,

$$M_k(n, i) = (A^k)_{i,i}$$

i korišćenjem nejednakosti (6.4) zaključujemo da važi $M_k(n, i) \leq M_k(n, i + 1)$ za svako $0 \leq i \leq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor - 1$. Za dovoljno veliko k (najviše n^2), imamo strogu nejednakost $M_k(n, i) < M_k(n, i + 1)$. ■

Štaviše, korišćenjem nejednakosti (6.4) možemo dokazati da za fiksirano $k > 0$ i $0 \leq i < \frac{n}{2}$ važi

$$\sum_{j=0} (A^k)_{i,j} \leq \sum_{j=0} (A^k)_{i+1,j},$$

ili drugim rečima: ukupan broj šetnji u P_n dužine k koje polaze od čvora i je manji ili jednak od broja šetnji u P_n iste dužine koje polaze od čvora $i + 1$, gde je $0 \leq i < \frac{n}{2}$. Kako je $(A^k)_{i+1,j} \geq (A^k)_{i,j-1}$ za $j = 2, 3, \dots, n$, dovoljno je pokazati $(A^k)_{i+1,1} \geq (A^k)_{i,n}$, što je očigledno zbog uređenja $1 \leq i < i + 1 < n$.

Teorema 6.2.2 *Neka je w čvor netrivialnog povezanog grafa G i za nenegativne cele brojeve p i q , neka $G(p, q)$ označava graf dobijen od G dodavanjem visećih puteva $P = wv_1v_2 \dots v_p$ i $Q = wu_1u_2 \dots u_q$ susednih sa w i dužina p i q , redom. Ako je $p \geq q \geq 1$, tada*

$$M_k(G(p, q)) \geq M_k(G(p + 1, q - 1)). \quad (6.5)$$

Za dovoljno veliko k važi stroga nejednakost.

Dokaz. Kako ova transformacija ne utiče na broj čvorova i grana, imamo $M_k(G(p, q)) = M_k(G(p + 1, q - 1))$ za $k = 0, 1, 2$.

Dakle, neka je $k \geq 3$. Nejednakost (6.5) ćemo dokazati ako pokažemo da graf $G(p, q)$ ima više zatvorenih šetnji dužine k nego $G(p + 1, q - 1)$. U tom pogledu, konstruisaćemo injekciju i^* iz skupa $\mathcal{W}'_k = \mathcal{W}_k(G(p + 1, q - 1))$ zatvorenih šetnji dužine k u grafu $G(p + 1, q - 1)$ u skup $\mathcal{W}_k = \mathcal{W}_k(G(p, q))$ zatvorenih šetnji dužine k u $G(p, q)$. Neka su P' i Q' putevi $wv_1v_2 \dots v_pv_{p+1}$ i $wu_1u_2 \dots u_{q-1}$ u grafu $G(p + 1, q - 1)$.

Posmatrajmo proizvoljnu zatvorenu šetnju C' iz \mathcal{W}' . Ako se C' cela nalazi u G ili ne sadrži granu (v_p, v_{p+1}) , tada je $i^*(C') = C'$ takođe zatvorena šetnja u grafu $G(p, q)$. Ako se C' cela nalazi u uniji puteva $P' \cup Q'$, možemo konstruisati odgovarajuću šetnju $i^*(C')$ u $P \cup Q$ pomeranjem šetnje za jedno mesto, jer su obe unije izomorfne sa P_{p+q+1} . Dakle, možemo pretpostaviti da C' sadrži granu (v_p, v_{p+1}) i neke čvorove iz dela G .

Pretpostavimo prvo da zatvorena šetnja C' polazi iz čvora x iz grafa G . Tada imamo sledeću dekompoziciju šetnje C'

$$C' = W_1 C'_1 C'_2 C'_3 C'_4 \dots W_2, \quad (6.6)$$

gde je C'_i zatvorena šetnja koja polazi iz w i koja je cela unutar $P' \cup Q'$ ili G , W_1 šetnja od x do w u grafu G i W_2 šetnja od w do x u grafu G . Šetnje W_1 i W_2 sadrže tačno jednom čvor w . Neka su l_1, l_2, l_3, \dots dužine zatvorenih šetnji C'_1, C'_2, C'_3, \dots , redom. Kako je $q \leq p$, iz Leme 6.2.1 imamo

$$M_{l_j}(p + q + 1, q - 1) \leq M_{l_j}(p + q + 1, q).$$

Dakle, možemo konstruisati injektivno preslikavanje i^*_j zatvorenih šetnji dužine l_j koje polaze iz w u uniji puteva $P' \cup Q'$ u skup zatvorenih šetnji dužine l_j koje polaze iz w u uniji puteva $P \cup Q$.

Neka su šetnje C'_{2i+1} , $i \geq 0$ sadržane u G , dok su šetnje C'_{2i} , $i \geq 1$ sadržane u $P' \cup Q'$. Tada

$$i^*(C') = W_1 C'_1 i^*_{l_2}(C'_2) C'_3 i^*_{l_4}(C'_4) \dots W_2$$

je odgovarajuća zatvorena šetnja u $G(p, q)$ iz čvora x . Primetimo da smo ovde uključili i slučaj $x \equiv w$.

Pretpostavimo sada da zatvorena šetnja C' polazi iz čvora y iz grafa $P' \cup Q'$. Slično imamo dekompoziciju

$$C' = W_1 C'_1 C'_2 C'_3 C'_4 \dots W_2, \quad (6.7)$$

gde je W_1 šetnja od y do w u grafu G i W_2 šetnja od w do y u grafu G . Kako šetnje W_1 i W_2 sadrže tačno jednom čvor w , to su W_1 i W_2 cele sadržane u P' ili Q' . Iz komentara posle dokaza Leme 6.2.1 sledi da za fiksirano k , broj šetnji iz w u $P' \cup Q'$ do bilo kog drugog čvora je manji ili jednak od broja šetnji iz w u $P \cup Q$ do bilo kog drugog čvora.

Preslikavanje i^* je injekcija po konstrukciji, i time smo dokazali (6.5). Za dovoljno veliko k i za zatvorene šetnje koje se mogu dekomponovati relacijama (6.6) i (6.7) u fiksirani broj delova, bar jedan od brojeva l_2, l_4, \dots je dovoljno veliki tako da važi stroga nejednakost $M_{l_{2j}}(p+q+1, q-1) < M_{l_{2j}}(p+q+1, q)$. Tada takođe važi stroga nejednakost $M_k(G(p+1, q-1)) < M_k(G(p, q))$. ■

Direktno iz (6.3) i prethodne teoreme imamo

Posledica 6.2.3 *Neka je w čvor netrivijskog povezanog grafa G i za nenegativne cele brojeve p i q , neka $G(p, q)$ označava graf dobijen od G dodavanjem visećih puteva $P = wv_1v_2 \dots v_p$ i $Q = wu_1u_2 \dots u_q$ susednih sa w i dužina p i q , redom. Ako je $p \geq q \geq 1$, tada*

$$EE(G(p, q)) > EE(G(p+1, q-1)).$$

Teorema 6.2.4 *Neka je $e = uv$ most grafa G , tako da su obe komponente grafa $G - e = G_1 \cup G_2$ netrivijske. Graf G' dobijamo identifikovanjem čvorova $u \in G_1$ i $v \in G_2$ (nazovimo ovaj čvor takođe u) i dodavanjem viseće grane uv . Tada važi*

$$M_k(G') \geq M_k(G),$$

sa jednakošću ako i samo ako je $k \leq 3$.

Dokaz. Kao i u prethodnoj teoremi, $M_k(G') = M_k(G)$ za $k = 0, 1, 2$. Kako se broj trouglova nije promenio, važi $M_3(G') = M_3(G)$. Prema tome, pretpostavimo da je $k \geq 4$. Konstruisaćemo injekciju i^* iz skupa $\mathcal{W}_k(G)$ zatvorenih šetnji dužine k u grafu G u skup $\mathcal{W}_k(G')$ zatvorenih šetnji dužine k u grafu G' .

Posmatrajmo proizvoljnu zatvorenu šetnju C iz $\mathcal{W}(G)$. Ako se C cela nalazi u G_1 ili G_2 (ne sadrži granu uv), tada je $i^*(C) = C$ takođe zatvorena šetnja u grafu G' . U drugom slučaju, bez gubljenja opštosti pretpostavimo da šetnja C polazi iz čvora $w \in G_1$. Slično kao i u prethodnoj teoremi, šetnja C se može razložiti na sledeći način

$$C = wW_1u \rightarrow vC_1v \rightarrow uC_2u \rightarrow vC_3v \rightarrow uC_4u \rightarrow v \dots v \rightarrow uW_2,$$

gde su C_{2i} zatvorene šetnje u grafu G_2 , C_{2i-1} zatvorene šetnje u grafu G_1 ($i = 1, 2, \dots$), W_1 šetnja od w do u u grafu G_1 i W_2 šetnja od u do w u grafu G_1 . Odgovarajuću šetnju C' iz $\mathcal{W}(G')$ konstruišemo na sledeći način

$$C' = i^*(C) = wW_1C_1u \rightarrow v \rightarrow uC_2C_3u \rightarrow v \rightarrow u \dots u \rightarrow v \rightarrow uW_2.$$

Kako most uv moramo proći paran broj puta, šetnja C' je dobro definisana. Nije teško utvrditi da je dato preslikavanje injekcija, a za $k \geq 4$ u grafu G' postoje šetnje koje nemaju original u $\mathcal{W}(G)$. Naime, možemo posmatrati bilo koju šetnju koja sadrži čvorove iz G_1 i G_2 , a ne sadrži granu uv . Po konstrukciji, svaka slika šetnje iz $\mathcal{W}(G)$ sadrži deo $u \rightarrow v \rightarrow u$, čime je dokaz završen. ■

Posledica 6.2.5 *Neka je $e = uv$ most grafa G , tako da su obe komponente grafa $G - e = G_1 \cup G_2$ netrivijske. Graf G' dobijamo identifikovanjem čvorova $u \in G_1$ i $v \in G_2$ (nazovimo ovaj čvor takođe u) i dodavanjem viseće grane uv . Tada važi*

$$EE(G') > EE(G).$$

Koristeći ovu transformaciju, može se lako pokazati da među stablima sa n čvorova zvezda S_n ima najveći Estradin indeks. Takođe među unickličnim grafovima sa n čvorova, graf $G(a, b, c)$, gde je $a + b + c = n$, ima najveći Estradin indeks. Kompjuterskom pretragom među unickličnim grafovima sa $n \leq 20$ čvorova, dobijamo da S'_n ima najveće spektralne momente i Estradin indeks (videti Sekciju 3.6).

6.2.1 Stabla sa fiksim stepenom

Teorema 6.2.6 *Neka je $T \not\cong B_{n,\Delta}$ proizvoljno stablo sa n čvorova i maksimalnim stepenom Δ . Tada važi*

$$EE(B_{n,\Delta}) < EE(T). \quad (6.8)$$

Dokaz. Fiksirajmo čvor v stepena Δ kao koren stabla i neka je $k > 2$ paran broj. Neka su $T_1, T_2, \dots, T_\Delta$ stabla susedna sa v . Možemo u više navrata primeniti transformaciju iz Posledice 6.2.3 na bilo koji čvor stepena većeg od dva na najvećem rastojanju od korena v_i u stablu T_i , sve dok T_i ne postane put. Iz Posledice 6.2.3 sledi da svaka primena transformacije strogo smanjuje Estradin indeks.

Kada sva stabla $T_1, T_2, \dots, T_\Delta$ postanu putevi, možemo ponovo primeniti Posledicu 6.2.3 na čvor v sve dok postoje bar dva puta dužine ≥ 2 , što dalje smanjuje Estradin indeks. Na kraju ovog procesa, dolazimo do ekstremalnog stabla – metle $B_{n,\Delta}$. ■

Iako je Deng [62] nezavisno potvrdio Hipotezu 6.1.3, Posledica 6.2.3 nam omogućuje novi dokaz ovog tvrđenja. Naime, brisanjem grana u grafu smanjujemo broj zatvorenih šetnji i po relaciji (6.3) takođe smanjujemo Estradin indeks. Dakle, svaki graf ima veći Estradin indeks nego njegovo proizvoljno razapinjuće stablo – što implicira da graf sa minimalnim Estradinim indeksom mora biti stablo. Ako je $\Delta > 2$, možemo još jednom primeniti transformaciju iz Posledice 6.2.3 na čvor stepena Δ u metli $B_{n,\Delta}$ i dobiti $B_{n,\Delta-1}$. Dakle, $EE(B_{n,\Delta}) > EE(B_{n,\Delta-1})$ za $\Delta > 2$, što pokazuje

$$EE(S_n) = EE(B_{n,n-1}) > EE(B_{n,n-2}) > \dots > EE(B_{n,3}) > EE(B_{n,2}) = EE(P_n). \quad (6.9)$$

U [110] autori su procenjivali Estradin indeks puta P_n i dokazali

$$EE(P_n) \approx (n+1)I_0 - \cosh 2,$$

gde je $I_0 = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k!)^2} = 2.27958530$. U radu su takođe prikazane određene klase grafova čiji su karakteristični polinomi jako povezani sa Čebiševljevim polinomima druge vrste. Preciznost ovih aproksimacija je izuzetno dobra. Kako se spektar grafa $B_{n,3} \cong Z_n$ sastoji od

$$\{0\} \cup \left\{ 2 \cos \frac{(2k+1)\pi}{2(n-1)} \mid k = 0, 1, 2, \dots, n-2 \right\},$$

imamo sledeću aproksimaciju $EE(Z_n) \approx nI_0$ iz [95] i graf Z_n ima drugi najmanji Estradin indeks među stablima sa n čvorova.

Kompletno Δ -arno stablo je definisano u poglavlju o spektralnom radijusu matrice rastojanja. Kompjuterska pretraga među stablima sa ≤ 22 čvorova je potvrdila da kompletno Δ -arno stablo ima maksimalnu vrednost EE i parne spektralne momente za $k \leq 16$ među stablima sa maksimalnim stepenom $\Delta \leq n-1$.

Dobro je poznato da niz prirodnih brojeva $d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_n \geq 1$ predstavlja stepeni niz stabla ako i samo ako $d_1 + d_2 + \dots + d_n = 2n-2$. Posmatrajmo proizvoljno stablo T sa nizom stepena

$$\Delta = d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_{n-1} \geq d_n = 1.$$

Iz (6.2), četvrti spektralni momenat stabala zavisi samo od sume kvadrata stepena, odnosno prvog Zagrebačkog indeksa [199]. Kako bi maksimizirali sumu $Z(T) = \sum_{i=1}^n d_i^2$, pretpostavimo da postoje

dva čvora i i j tako da važi $1 < d_i \leq d_j < \Delta$. Prosta transformacija $d'_i = d_i - 1$, $d'_j = d_j + 1$ strogo povećava M_4 , jer

$$Z(T') - Z(T) = (d_i - 1)^2 + (d_j + 1)^2 - d_i^2 - d_j^2 = 2(d_j - d_i + 1) \geq 2.$$

Dakle, četvrti spektralni momenat je maksimalan ako najviše jedan čvor stabla ima stepen različit od 1 i Δ , što je zadovoljeno za kompletno Δ -arno stablo.

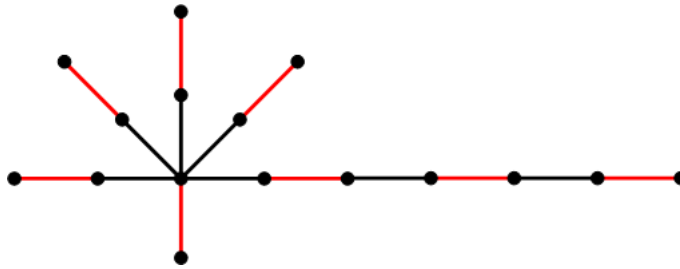
Bazirano na ovom argumentu i navedenih empirijskih zapažanja, imamo sledeću

Hipoteza 6.2.7 *Za svako $k \geq 2$, kompletno Δ -arno stablo ima maksimalne spektralne momente M_{2k} među stablima sa n čvorova i maksimalnim stepenom Δ .*

Ova hipoteza implicira hipotezu Gutmana i drugih [109], zahvaljujući jednačini (6.3). U [258] autori su nastavili ova istraživanja, i odredili ekstremalne grafove u klasi stabala sa n čvorova i datim dijametrom d ili uparivajućim brojem m . Takođe su podržali ovu hipotezu za $\Delta \geq \lceil \frac{n+1}{3} \rceil$.

6.2.2 Stabla sa savršenim uparivanjima

Dobro je poznato da ako stablo T ima savršeno uparivanje M , tada je ono jedinstveno. Neka je $A_{n,\Delta}$ Δ -zvezdoliko stablo $S(n - 2\Delta, 2, 2, \dots, 2, 1)$ koje se sastoji od centralnog čvora v , višeće grane, višećeg puta dužine $n - 2\Delta$ i $\Delta - 2$ višećih puteva dužine dva, svi prikačeni na čvor v (videti Sliku 6.2).



Slika 6.2: Stablo $A_{16,6}$.

Teorema 6.2.8 *Stablo $A_{n,\Delta}$ ima minimalni Estradin indeks među stablima koja imaju savršeno uparivanje i maksimalni stepen Δ .*

Dokaz. Neka je T proizvoljno stablo sa savršenim uparivanjem i neka je v čvor stepena Δ sa susedima $v_1, v_2, \dots, v_\Delta$. Neka su $T_1, T_2, \dots, T_\Delta$ maksimalna podstabla sa korenima $v_1, v_2, \dots, v_\Delta$, redom, takva da nikoje stablo ne sadrži čvor v . Tada najviše jedan od brojeva $|T_1|, |T_2|, \dots, |T_\Delta|$ može biti neparan (ako bi T_i i T_j imali neparan broj čvorova, tada bi koreni v_i i v_j bili neupareni po predloženom algoritmu za maksimalno uparivanje – što je nemoguće). Zapravo, kako je broj čvorova u stablu T paran, postoji tačno jedno stablo među $T_1, T_2, \dots, T_\Delta$ sa neparnim brojem čvorova.

Korišćenjem Posledice 6.2.3, možemo transformisati svako stablo T_i u viseći put koji je susedan sa v , dok simultano smanjujemo EE i održavamo postojanje savršenog uparivanja. Neka stablo T_Δ ima neparan broj čvorova. Možemo primeniti sličnu transformaciju kao iz Teoreme 6.2.2, ali umesto pomeranja po jedne grane, pomeraćemo dve grane kako bi sačuvali postojanje savršenog uparivanja. Dakle, ako je $p \geq q \geq 2$ tada iz Posledice 6.2.3 sledi

$$EE(G(p, q)) > EE(G(p + 2, q - 2)).$$

Koristeći ovu transformaciju možemo redukovati stablo T_Δ na jedan čvor, stabla $T_2, \dots, T_{\Delta-1}$ na dva čvora, što forsira stablo T_1 sa $n - 2\Delta$ čvorova i time dobijamo $A_{n,\Delta}$. Kako smo u

svakom trenutku smanjivali EE , zaključujemo da $A_{n,\Delta}$ zaista ima minimalni EE među stablima sa savršenim uparivanjem. ■

Slično imamo sledeći niz nejednakosti:

$$EE(F_n) = EE(A_{n,n/2}) > EE(A_{n,n/2-1}) > \dots > EE(A_{n,3}) > EE(A_{n,2}) = EE(P_n).$$

6.3 Laplasov Estradin indeks

Po analogiji sa Estradinim indeksom, *Laplasov Estradin indeks* se definiše [265] kao

$$LEE(G) = \sum_{i=1}^n e^{\mu_i}.$$

Neke osnovne osobine ovog indeksa su prikazane u [181, 262, 269].

Neka je $\mathcal{L}(G)$ linijski graf od G . U [265] autori su dokazali sledeću relaciju između Laplasovog Estradinog indeksa grafa G i Estradinog indeksa linijskog grafa G .

Teorema 6.3.1 *Neka je G povezani graf sa n čvorova i m grana. Ako je G bipartitan, tada važi*

$$LEE(G) = n - m + e^2 \cdot EE(\mathcal{L}(G)).$$

Dokaz. Koristimo poznati identitet o karakterističnim polinomima

$$\prod_{i=1}^n (x - \mu_i) = x^{n-m} \prod_{i=1}^m (x - 2 - \gamma_i),$$

gde su $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_m$ sopstvene vrednosti matrice $\mathcal{L}(G)$. Zato važi

$$LEE(G) = \sum_{i=1}^n e^{\mu_i} = (n - m) + \sum_{i=1}^m e^{2+\gamma_i} = n - m + e^2 EE(\mathcal{L}(G)).$$

■

Naš cilj ovde je da podržimo korišćenje LEE kao meru za grananje u alkanima. Ova osobina se ne može baš precizno definisati, ali postoje nekoliko uslova koje svaka predložena mera mora da zadovoljava [92, 187]. Kao osnovna osobina koju topološki indeks TI mora posedovati da bi bio odgovarajuća mera grananja je

$$TI(P_n) < TI(T) < TI(S_n) \quad \text{ili} \quad TI(P_n) > TI(T) > TI(S_n),$$

za $n = 5, 6, \dots$, gde je P_n put, S_n zvezda, a T proizvoljno stablo sa n čvorova (različito od P_n i S_n). Na primer, prvu relaciju zadovoljavaju najveća sopstvena vrednost [186] i Estradin indeks [62], dok drugu relaciju zadovoljavaju Wienerov indeks [146], Hosoyin indeks i energija [100].

Teorema 6.3.2 *Među stablima sa n čvorova, put P_n ima minimalni, a zvezda S_n maksimalni Laplasov Estradin indeks,*

$$LEE(P_n) < LEE(T) < LEE(S_n),$$

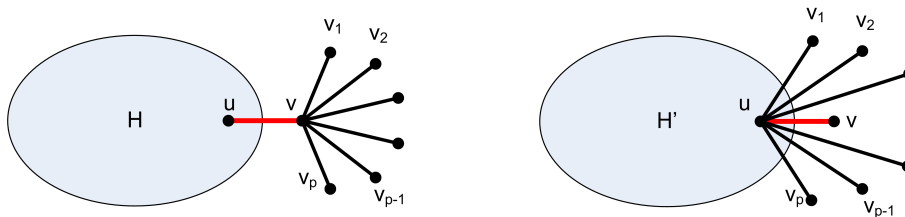
gde je T proizvoljno stablo sa n čvorova različito od P_n i S_n .

Dokaz. Linijski graf stabla T je povezan graf sa $n - 1$ čvorova. Linijski graf puta P_n je takođe put P_{n-1} , dok je linijski graf zvezda S_n kompletan graf K_{n-1} . Korišćenjem relacije (6.9) sledi

$$EE(\mathcal{L}(P_n)) \leq EE(\mathcal{L}(T)) \leq EE(\mathcal{L}(S_n)),$$

i iz Teoreme 6.3.1 dobijamo $LEE(P_n) \leq LEE(T) \leq LEE(S_n)$, gde leva jednakost važi ako i samo ako je $T \cong P_n$ i desna jednakost važi ako i samo ako je $T \cong S_n$. ■

Definicija 6.3.3 Neka je v čvor stepena $p+1$ grafa G , koji nije zvezda, takav da su vv_1, vv_2, \dots, vv_p viseće grane incidentne sa v , i neka je u sused čvora v koji je različit od v_1, v_2, \dots, v_p . Formirajmo graf $G' = \sigma(G, v)$ brisanjem grana vv_1, vv_2, \dots, vv_p i dodavanjem novih grana uv_1, uv_2, \dots, uv_p . Kažemo da je G' σ -transformacija grafa G .



Slika 6.3: σ -transformacija primenjena na čvoru v grafa G .

Teorema 6.3.4 Neka je $G' = \sigma(G, v)$ σ -transformacija bipartitnog grafa G . Tada

$$LEE(G) < LEE(G'). \quad (6.10)$$

Dokaz. Grafovi G i G' su bipartitni i imaju isti broj čvorova i grana. Korišćenjem Teoreme 6.3.1, dovoljno je dokazati nejednakost

$$EE(\mathcal{L}(G)) < EE(\mathcal{L}(G')).$$

Neka su u_1, u_2, \dots, u_m susedi čvora u u G (različiti od v). Posmatrajmo indukovani podgraf H linijskog grafa $\mathcal{L}(G)$ koji je formiran od čvorova $vv_1, vv_2, \dots, vv_p, vu, uu_1, uu_2, \dots, uu_m$. Nije teško primetiti da su ovi čvorovi grupisani u dve klike veličina $p + 1$ i $m + 1$ sa zajedničkim čvorom uv . Slično, možemo posmatrati indukovani podgraf H' linijskog grafa $\mathcal{L}(G')$ koji je formiran od odgovarajućih čvorova $uv_1, uv_2, \dots, uv_p, vu, uu_1, uu_2, \dots, uu_m$. U ovom slučaju imamo tačno jednu kliku veličine $m + p + 1$.

Kako je H pravi podgraf od H' , sledi da za svako $k \geq 0$ važi $M_k(H') \geq M_k(H)$ odnosno $M_k(\mathcal{L}(G')) \geq M_k(\mathcal{L}(G))$, i za neko k važi stroga nejednakost. Najzad, korišćenjem relacije (6.3), direktno dobijamo $LEE(G) < LEE(G')$. ■

Neka je T proizvoljno stablo sa n čvorova i korenom v . Tada možemo pronaći čvor u koji je roditelj lista na najvećem rastojanju od korena v i primeniti σ -transformaciju na čvoru u i povećati Laplasov Estradin indeks.

Posledica 6.3.5 Neka je T stablo sa n čvorova. Ako je $T \not\cong S_n$, tada $LEE(T) < LEE(S_n)$.

Neka je $DS_n(a, b)$ stablo formirano dodavanjem grane koja spaja centre dve zvezde S_a i S_b , gde je $a + b = n$ i $2 \leq a \leq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$. Graf $DS_n(a, b)$ zovemo *dupla zvezda* (eng. double star). Direktnim izračunavanjem, karakteristični polinom Laplasove matrice duple zvezde $DS_n(a, b)$ je jednak

$$P(x) = (-1)^n x(x-1)^{n-4} (x^3 - (n+2)x^2 + (n+2+ab)x - n).$$

Možemo pretpostaviti da je $n > 5$. Laplasov spektar grafa $DS_n(a, b)$ se sastoji od tri realna korena polinoma $f_{n,a}(x) = x^3 - (n+2)x^2 + (n+2+a(n-a))x - n$, jedinice sa višestrukošću $n-4$, i nule sa višestrukošću 1. Kako bi uveli uređenje duplih zvezda sa n čvorova pomoću vrednosti indeksa LEE , dovoljno je posmatrati sledeću funkciju $g_{n,a}(x_1, x_2, x_3) = e^{x_1} + e^{x_2} + e^{x_3}$, gde su $x_1 \geq x_2 \geq x_3 > 0$ koreni polinoma trećeg stepena $f_{n,a}(x)$. Iz Vietovih formula imamo $x_1 + x_2 + x_3 = n + 2$.

Sada ćemo locirati korene x_1 , x_2 i x_3 . Kao prvo, imamo

$$f_{n,a}(n-a+1) = 1-a < 0$$

$$f_{n,a}\left(n-a+\frac{3}{2}\right) = \frac{15}{8} + a^2 + n + \frac{n^2}{2} - \frac{11a}{4} - \frac{3na}{2}.$$

Poslednja funkcija (posmatrana kao kvadratna funkcija od a) je opadajuća za $a < \frac{11}{8} + \frac{3n}{4}$, i zato za $a \leq \frac{n}{2} - 1$ sledi

$$f_{n,a}\left(n-a+\frac{3}{2}\right) \geq f_{n,a}\left(n-\frac{n}{2}+1+\frac{3}{2}\right) = \frac{45+n}{8} > 0.$$

Dalje imamo

$$f_{n,a}(a) = (a-1)(n-2a) \geq 0 \quad \text{i} \quad f_{n,a}(a+1) = 1+a-n < 0$$

i konačno

$$f_{n,a}(0) = -n < 0 \quad \text{i} \quad f_{n,a}(1) = (a-1)(n-1-a) > 0.$$

Dakle $x_3 \in [0, 1]$, $x_2 \in [a, a+1]$ i $x_1 \in [n-a+1, n-a+\frac{3}{2}]$ za $2 \leq a \leq \frac{n}{2} - 1$. Funkcija

$$h(a) = e^0 + e^a + e^{n-a+1} - e^1 - e^{a+2} - e^{n-a+1/2}$$

je opadajuća za $a > 0$ (jer je $h'(a) < 0$), i tada za $a \leq \frac{n}{2} - 1$ dobijamo

$$h(a) \geq h\left(\frac{n}{2} - 1\right) = e^{n/2} \left(e^{-1} - e + e^2 - e^{3/2}\right) + 1 - e > \frac{e^{n/2}}{2} + 1 - e > 0.$$

Prema tome za $2 \leq a < \lfloor \frac{n}{2} \rfloor - 1$, imamo

$$e^0 + e^a + e^{n-a+1} > e^1 + e^{a+2} + e^{n-a+1/2},$$

odnosno $LEE(DS_n(a, b)) > LEE(DS_n(a+1, b-1))$. Specijalni slučaj $a = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ se može lako razrešiti,

$$\begin{aligned} LEE(DS_n(2, n-2)) - LEE\left(DS_n\left(\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor, \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil\right)\right) &> e^{n-1} + e^2 - e^{\lceil n/2 \rceil} - e^{\lceil n/2 \rceil + 2} - e \\ &> e^{\lceil n/2 \rceil} \cdot \left(e^{\lfloor n/2 \rfloor - 1} - 1 - e^2\right) - e \\ &> 0 \end{aligned}$$

za $n > 7$ i kompjuterskom proverom takođe imamo $LEE(DS_n(2, n-2)) - LEE\left(DS_n\left(\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor, \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil\right)\right) > 0$ za $n = 6, 7$. Po Teoremi 6.3.4, druga najveća vrednost za LEE je dupla zvezda $DS_n(a, b)$, i iz gornjih razmatranga imamo

Teorema 6.3.6 *Jedinstveno stablo sa $n \geq 5$ čvorova i drugim maksimalnim Laplasovim Estradinim indeksom je dupla zvezda $DS_n(2, n-2)$.*

Autori u [269] su dokazali sledeću nejednakost:

Teorema 6.3.7 *Neka je G povezan bipartitan graf sa $n \geq 3$ čvorova, m grafa, t razapinjućih stabala i prvim Zagrebačkim indeksom $Z(G)$. Tada*

$$LEE(G) \geq 1 + e^{\frac{Z(G)}{m}} + (n-2)e^{\left(\frac{tnm}{Z(G)}\right)^{1/(n-2)}}$$

$$LEE(G) \geq 1 + e^{\frac{Z(G)}{m}} + (n-2)e^{\frac{2m - \frac{Z(G)}{m}}{n-2}}$$

gde jednakosti važe ako i samo ako je $G \cong S_n$ ili $G \cong K_{n/2, n/2}$.

6.4 O broju trajektorija i korekciji teoreme

Rešavanje nekih kombinatornih problema se svodi na određivanje broja n -varijacija elemenata -1 i 1 , za koje važe određeni uslovi. *Trajektorijama* ćemo zvati izlomljene linije oblika $Z_0Z_1Z_2 \dots Z_n$, gde je Z_k tačka sa koordinatama (x_k, y_k) , pri čemu za svako $k = 1, 2, \dots, n$ važi $x_k = 1 + x_{k-1}$ i $y_k = c_1 + c_2 + \dots + c_k$, gde je $c_1c_2 \dots c_n$ data n -varijacija elemenata -1 i 1 . Tačku Z_0 zovemo početkom, a tačku Z_n krajem trajektorije $Z_0Z_1Z_2 \dots Z_n$.

Dikov put (eng. Dyck path) je celobrojna trajektorija u koordinatnoj ravni koja se sastoji od rastućih koraka $(1, 1)$ i opadajućih koraka $(1, -1)$, koja se nikada ne nalazi ispod x ose (ali je može dodirivati). Ukupan broj Dikovih puteva sa početkom $(0, 0)$ i krajem $(2n, 0)$ je dat Katalanovim brojem

$$C_n = \frac{1}{n+1} \binom{2n}{n}.$$

Katalanovi brojevi se nalaze u mnogim kombinatornim problemima – videti knjigu [226] za mnogobrojne kombinatorne interpretacije ovih brojeva i [225] za matricni pristup. Ovi brojevi zadovoljavaju sledeću rekurentnu vezu, $C_0 = 1$ i

$$C_{n+1} = \sum_{k=0}^n C_k \cdot C_{n-k}.$$

Postoje razne modifikacije i generalizacije Dikovih puteva. Kod rešavanja zadataka statističke kontrole kvaliteta proizvodnje javlja se potreba i za rešavanjem sledećeg problema: Koliko ima varijacija elemenata 0 i 1 date dužine u kojima pre svake nule ima dva (ili u opštem slučaju k) puta više jedinica nego nula? U toj situaciji jedinice obično predstavljaju ispravne, a nule neispravne proizvode u nekoj seriji. U ovom delu posmatramo *ograničene Dikove puteve* – trajektorije koje ne dodiruju prave $y = m$ i $y = -k$ za fiksirane prirodne brojeve $m, k > 0$. Mladenović je u [193] prebrojavao ove puteve i dokazao

Teorema 6.4.1 *Neka je $m, n, k \in \mathbb{N}$. Broj celobrojnih trajektorija sa početkom $(0, 0)$ i krajem $(2n, 0)$ koje ne dodiruju prave $y = m$ i $y = -k$ je jednak*

$$\binom{2n}{n} - \binom{2n}{n+m} - \binom{2n}{n+k} + 2 \binom{2n}{n+m+k}.$$

U sledećoj sekciji ćemo dokazati da ova teorema nije tačna. Štaviše, restrikcija Teoreme 6.4.1 za $k = 0$ je sama po sebi težak problem i broj takvih trajektorija nema zatvorenu formu. Implementirali smo algoritam zasnovan na dinamičkom programiranju za brojanje ovakvih puteva i uporedili ih sa predloženim brojem ograničenih Dikovih puteva koji ne dodiruju prave $y = m$ i $y = -k$ za različite vrednosti n . Zatim dokazujemo da je predloženi broj trajektorija zapravo gornja granica, a dokazujemo i sličnu donju granicu za koju važi jednakost ako i samo ako je $n < 2(m+k)$. U poslednjem delu prezentujemo neke relacije između Čebiševljevih polinoma druge vrste i funkcija generatriše za ograničene Dikove puteve.

6.4.1 Kontraprimeri

Postoji očigledna bijekcija između ograničenih Dikovih puteva od $(0, 0)$ do $(2n, 0)$ koji ne dodiruju prave $y = m$ i $y = -k$, i zatvorenih šetnji dužine $2n$ koje polaze od fiksiranog čvora v_k sa puta $P = v_1v_2v_3 \dots v_{k+m-1}$.

Označimo sa $d[i][j]$ broj puteva dužine j koji polaze od čvora v_k i završavaju se u čvoru v_i . Inicijalne vrednosti su $d[k][0] = 1$ i $d[i][0] = 0$ za $i \neq k$. Koristimo sledeću rekurentnu formulu za računanje matrice d :

$$d[i][j] = d[i-1][j-1] + d[i+1][j-1]$$

uz $d[i][j] = 0$ za $i \leq 0$ ili $i > k + m - 1$. Vremenska složenost ovog algoritma je $O(n(m + k))$. Kako je potrebno znati samo vrednosti elemenata u $(i - 1)$ -toj vrsti za računanje elementa (i, j) , možemo redukovati memorijsku složenost na $O(m + k)$. Takođe smo implementirali operacije sa velikim brojevima, jer broj šetnji može biti van granica svih standardnih tipova celih brojeva.

Najzad, broj ograničenih Dikovih puteva dužine $2n$ je jednak $d[k][2n]$. Kompjuterski rezultati za slučaj $k = 2$ i $m = 5$ su prezentovani u Tabeli 6.1 i Slici 6.4.

Dužina puta	Tačan broj	Predložen broj	Razlika
2	2	2	0
4	5	5	0
6	14	14	0
8	42	42	0
10	131	131	0
12	417	417	0
14	1341	1341	0
16	4334	4334	0
18	14041	14042	1
20	45542	45562	20
22	147798	148029	231
24	479779	481804	2025
26	1557649	1572625	14976
28	5057369	5156025	98656
30	16420730	17018505	597775
32	53317085	56717910	3400825
34	173118414	191540940	18422526
36	562110290	658084182	95973892
38	1825158051	2309516616	484358565
40	5926246929	8307367724	2381120795
42	19242396629	30693300198	11450903569
44	62479659622	116529049786	54049390164
46	202870165265	453938745602	251068580337
48	658715265222	1808941473996	1150226208774
50	2138834994142	7345198595742	5206363601600

Tabela 6.1: Poređenje predloženog i tačnog broja puteva za $k = 2$ i $m = 5$.

6.4.2 Gornja i donja granica za ograničene Dikove puteve

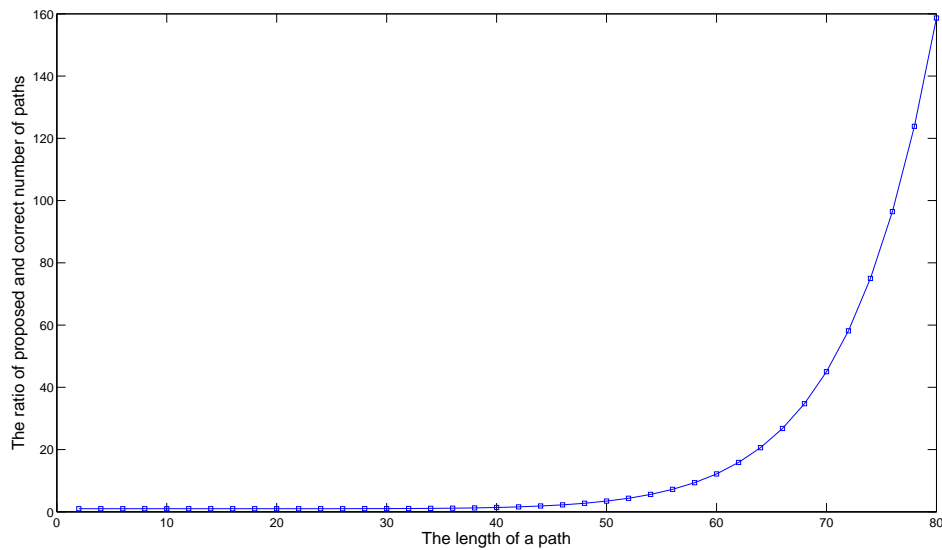
Neka je S skup svih celobrojnih trajektorija iz \mathbb{Z}^2 koje se sastoje od gornjih $(1, 1)$ i donjih $(1, -1)$ koraka, sa početkom $(0, 0)$ i krajem $(2n, 0)$. Dobro je poznato da je broj takvih trajektorija upravo

$$|S| = \binom{2n}{n}.$$

Neka je S_1 skup trajektorija iz S koje dodiruju pravu $y = m$, a S_2 skup trajektorija koje dodiruju pravu $y = -k$.

Broj trajektorija koje dodiruju pravu $y = -k$ se može izračunati na sledeći način: posmatrajmo prvi put kada trajektorija t sa početkom u koordinatnom početku $(0, 0)$ i krajem $(2n, 0)$ dodiruje pravu $y = -k$. Označimo ovu tačku sa P . Deo puta t od početka do tačke P se reflektuje (preslika simetrično) u odnosu na pravu $y = -k$. Time dobijamo bijekciju između skupa svih puteva koje dodiruju pravu $y = -k$ i skupa svih trajektorija sa novim početkom $(0, -2k)$ i krajem $(2n, 0)$, odnosno

$$|S_1| = \binom{2n}{n+k}.$$



Slika 6.4: Odnos predloženog i tačnog broja puteva za $k = 2$ i $m = 5$.

Analogno dobijamo

$$|S_2| = \binom{2n}{n+m}.$$

Loše trajektorije su one koje pripadaju i S_1 i S_2 . Za svaki put $t \in S_1 \cup S_2$, neka je $x_1(t)$ celobrojna tačka koja pripada pravoj $y = m$ sa minimalnom x koordinatom – što predstavlja prvi trenutak kada trajektorija t dodiruje pravu $y = m$. Slično, označimo sa $x_2(t)$ celobrojnu tačku koja pripada pravoj $y = -k$ sa minimalnom x koordinatom – što predstavlja prvi trenutak kada trajektorija t dodiruje pravu $y = -k$. Neka je T_1 skup loših puteva sa $x_1(t) < x_2(t)$ i T_2 skup loših puteva sa $x_1(t) > x_2(t)$. Primetimo da važi $\{t \in S_1 \cup S_2 \mid x_1(t) = x_2(t)\} = \emptyset$ i $T_1 \cup T_2 = \emptyset$.

Ovde ćemo predstaviti neznatno izmenjen dokaz u odnosu na onaj opisan u [193]. Naime, za trajektoriju $t \in T_1$, neka je t_1 deo trajektorije sa početkom $(0, 0)$ i krajem $(x_1(t), m)$, t_2 deo trajektorije t sa početkom $(x_1(t), m)$ i krajem $(x_2(t), -k)$, i t_3 deo trajektorije t sa početkom $(x_2(t), -k)$ i krajem $(2n, 0)$. Konstruisaćemo odgovarajuću trajektoriju t' na sledeći način. Neka je t'_3 trajektorija simetrična sa t_3 u odnosu na pravu $y = -k$, a $t'_2 \cup t''_3$ trajektorija simetrična sa $t_2 \cup t'_3$ u odnosu na pravu $y = m$. Konačno, dobijamo $t' = t_1 \cup t'_2 \cup t''_3$ i početak trajektorije t' je $(0, 0)$, a kraj tačka $(2n, 2m + 2k)$.

Ovo nije bijekcija, kako je autor u [193] istakao. Naime, za

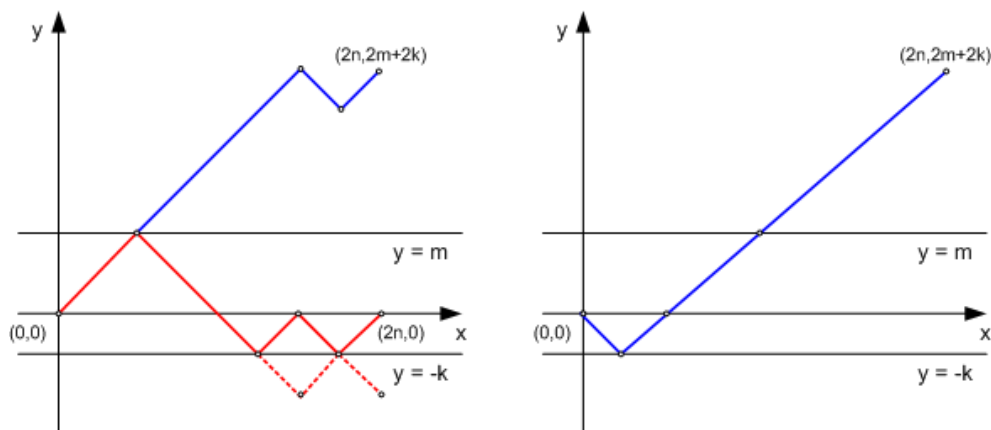
$$2n \geq 2(m + k) + 2k,$$

postoje putevi sa početkom $(0, 0)$ i krajem $(2n, 2m + 2k)$ koji posle rekonstrukcije ne dodiruju pravu $y = m$ pre dodira sa pravom $y = -k$. Jedan kontraprimer je prikazan na Slici 6.5.

Sada imamo

$$|T_1| \leq \binom{2n}{n+m+k},$$

sa jednakošću ako i samo ako važi $n < m + 2k$. Analogno možemo konstruisati injekciju između trajektorija iz T_2 i puteva sa početkom $(0, 0)$ i krajem $(2n, -2k - 2m)$.



Slika 6.5: Kontraprimer za Teoremu 6.4.1.

Korišćenjem principa uključenja-isključenja sledi

$$\begin{aligned}
 |S \setminus (S_1 \cup S_2)| &= |S| - |S_1| - |S_2| + |S_1 \cup S_2| \\
 &\leq |S| - |S_1| - |S_2| + |T_1| + |T_2| \\
 &= \binom{2n}{n} - \binom{2n}{n+k} - \binom{2n}{n+m} + 2 \binom{2n}{n+k+m}.
 \end{aligned}$$

Dakle, dokazali smo sledeću gornju granicu

Teorema 6.4.2 *Neka je $m, n, k \in \mathbb{N}$. Broj celobrojnih trajektorija od $(0, 0)$ do $(2n, 0)$ koje ne dodiruju prave $y = m$ i $y = -k$ je manji ili jednak od*

$$\binom{2n}{n} - \binom{2n}{n+m} - \binom{2n}{n+k} + 2 \binom{2n}{n+m+k},$$

gde jednakost važi ako i samo ako je $n < m + k + \min(m, k)$.

Korišćenjem slične metode kao u prethodnom delu, možemo izvesti donju granicu za broj ograničenih Dikovih puteva. Po principu uključenja-isključenja, sada treba oduzeti broj trajektorija od $(0, 0)$ do $(2n, 2m + 2k)$ koje dodiruju pravu $y = -k$ pre prave $y = m$. Posle simetrije u odnosu na pravu $y = -k$, traženi broj je upravo broj celobrojnih trajektorija od $(0, 0)$ do $(2n, 2m + 4k)$, odnosno $\binom{2n}{n+m+2k}$. Slično, imamo $\binom{2n}{n+2m+k}$ celobrojnih trajektorija koje prvo dodiruju pravu $y = m$ pre prave $y = -k$.

Time smo oduzeli sve puteve koji posle preseka $(x_k, -k)$ sa pravom $y = -k$ imaju bar jedan presek sa obe prave. Loši putevi u ovom slučaju su oni koji dodiruju pravu $y = m$ u x koordinati koja je manja od x_k , ili drugim rečima $x_m < x_k$. Prvi put kada se ovo može desiti je tačno kada trajektorija dodiruje prave $y = m$ i $y = -k$ dva puta, odnosno za $n = 2(m + k)$.

Teorema 6.4.3 *Neka je $m, n, k \in \mathbb{N}$. Broj celobrojnih trajektorija od $(0, 0)$ do $(2n, 0)$ koje ne dodiruju prave $y = m$ i $y = -k$ je veći ili jednak od*

$$\binom{2n}{n} - \binom{2n}{n+m} - \binom{2n}{n+k} + 2 \binom{2n}{n+m+k} - \binom{2n}{n+m+2k} - \binom{2n}{n+2m+k},$$

gde jednakost važi ako i samo ako je $n < 2(m + k)$.

6.4.3 Funkcija generatriše za ograničene Dikove puteve

Čebiševljevi polinomi prve i druge vrste $T_k(x)$ i $U_k(x)$ su definisani implicitno sa $\cos k\theta = T_k(\cos\theta)$ i $\sin(k+1)\theta/\sin\theta = U_k(\cos\theta)$, redom. Ovi polinomi se pojavljuju u različitim oblastima (videti Rivlina [213]), ali njihove primene u kombinatorici kod prebrojavanja trajektorija su manje poznate. Zbog toga je pogodno definisati modifikovane Čebiševljeve polinome na sledeći način

$$T_k^*(x) = 2x^k T_k\left(\frac{1}{2x}\right) = \sum_{j=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} (-1)^j \left(\binom{k-j}{j} + \binom{k-j-1}{j-1} \right) x^{2j}.$$

$$U_k^*(x) = x^k U_k\left(\frac{1}{2x}\right) = \sum_{j=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} (-1)^j \binom{k-j}{j} x^{2j}.$$

Za ograničene Dikove puteve sa $k=0$, dobijamo niz A080934 iz Enciklopedije celobrojnih nizova (On-Line Encyclopedia of Integer Sequences [222]). Ovaj jednostavniji niz se može predstaviti kao m -ti koeficijent u razvoju racionalne funkcije $R(n)$, gde je $R(1) = 1$ i

$$R(n+1) = \frac{1}{1-x \cdot R(n)}.$$

Funkcija generatriše za broj ograničenih Dikovih puteva sa početkom $(0, 0)$ i krajem $(2n, 0)$ koji ne dodiruju pravu $y = m$ i ne prolaze ispod prave $y = 0$ je dat sa [197, 216]

$$R_m(x) = \frac{U_m^*(x)}{U_{m+1}^*(x)}.$$

Ovo se može jednostavno dokazati pomoću rekurentne formule za Čebiševljeve polinome druge vrste $U_{k+1}(x) = U_k(x) - x^2 U_{k-1}$. Koristeći sličnu dekompoziciju trajektorija kao u prethodnom delu, dobijamo funkciju generatriše za broj Dikovih puteva koji ne dodiruju prave $y = m$ i $y = -k$

$$\frac{1}{1 - xR_{m-1}(x) - xR_{k-1}(x)}. \quad (6.11)$$

Ova funkcija generatriše se može koristiti za dalju analizu ograničenih Dikovih puteva. Međutim, mi smo fokusirali naša istraživanja na kombinatorni pristup, iako nije lako dobiti gornje i donje granice iz Teoreme 6.4.2 i Teoreme 6.4.3 koristeći analitičke metode.

Glava 7

Stepen-rastojanje invarijanta

Stepen-rastojanje invarijanta grafa G se definiše kao

$$DD(G) = \sum_{\{u,v\} \in V(G)} (deg(u) + deg(v)) d(u,v) = \sum_{v \in V(G)} deg(v) \cdot D_G(v),$$

gde $D_G(v) = \sum_{u \in V(G)} d(u,v)$ predstavlja sumu svih rastojanja od čvora v . Za druge modifikacije Wienerovog indeksa videti [141, 154, 255].

Ova grafovska invarijanta se prvi put javlja u hemijskim primenama autora Dobrynina i Kochetove [81] i u isto vreme kod Gutmana [101], koji daje alternativni naziv *Šulcov indeks*. Stepen-rastojanje invarijanta se može posmatrati kao težinska varijanta Wienerovog indeksa, u koju su uključene lokalne osobine čvorova (stepen) i globalne osobine (rastojanja). Na primer, za stablo T sa n čvorova važi [101, 172]

$$DD(T) = 4W(T) - n(n-1).$$

Ovo se lako može pokazati indukcijom po n , uklanjajući proizvoljan list iz stabla T .

Tomescu [237] je dokazao da je zvezda S_n ima minimalnu vrednost stepen-rastojanje invarijante među svim grafovima sa n čvorova,

Teorema 7.0.4 *Neka je G graf sa n čvorova. Tada*

$$DD(G) \geq 3n^2 - 7n + 4,$$

sa jednakošću ako i samo ako $G \cong S_n$.

Dokaz. Za svaki čvor $v \in V$ važi

$$D(v) = \sum_{u \in V} d(u,v) \geq deg(v) + 2(n - deg(v) - 1) = 2n - 2 - deg(v).$$

Po definiciji sledi

$$\begin{aligned} DD(G) &= \sum_{v \in V} deg(v) D(v) \\ &\geq \sum_{v \in V} deg(v) ((2n - 2) - deg(v)) \\ &= (2n - 3) \sum_{v \in V} deg(v) - \sum_{v \in V} deg(v) (deg(v) - 1) \\ &\geq (2n - 3) 2m - \sum_{v \in V} (n - 1) (deg(v) - 1) \\ &= 2m(2n - 3) - (n - 1)(2m - n) \\ &= 2m(n - 2) + (n - 1)n. \end{aligned}$$

Kako je $m \geq n - 1$, dobijamo $DD(G) \geq 2(n - 1)(n - 2) + (n - 1)n$. Jednakost važi ako i samo ako je G stablo i $\deg(v) = n - 1$ za svaki čvor sa $\deg(v) > 1$, odnosno $G \cong S_n$. ■

U [31] autori su odredili minimalnu vrednost $DD(G)$ za nepovezane grafove sa $m \leq n$ grana, koristeći jednostavniju tehniku. Dankelmann i drugi [55] su prezentovali asimptotsku gornju granicu za grafove sa n čvorova i dijametrom d i dokazali

Teorema 7.0.5 *Neka je G graf sa n čvorova. Tada*

$$DD(G) \leq \frac{n^4}{27} + O(n^{7/2}).$$

Granica je dostižna za graf koji se dobija od kompletnog grafa $K_{\lfloor n/3 \rfloor}$ i puta $P_{\lceil 2n/3 \rceil}$ dodavanjem grane između krajnjeg čvora puta i proizvoljnog čvora kompletnog grafa, jer za svaki čvor $v \in V(K_{\lfloor n/3 \rfloor})$ imamo $D(v) = \frac{2n^3}{27} + O(n^2)$.

U [238, 239] Tomescu je odredio ekstremalne unicklične i biciklične grafove sa minimalnom stepen-rastojanje invarijantom. Takođe u [240] on je odredio i tri grafa koja imaju najmanju vrednost stepen-rastojanje invarijante među svim grafovima sa n čvorova.

Teorema 7.0.6 *Neka je G unickličan graf. Tada*

$$DD(G) \geq 3n^2 - 3n - 6,$$

sa jednakošću ako i samo ako $G \cong S_n + e$.

Teorema 7.0.7 *Neka je G bicikličan graf. Tada*

$$DD(G) \geq 3n^2 + n - 18.$$

Jednakost važi ako i samo ako je G izomorfan sa grafom dobijenim od zvezde S_n dodavanjem dve grane koje imaju zajednički čvor.

Yuan i An [256] su odredili maksimalnu vrednost stepen-rastojanje invarijante za sve unicklične grafove sa n čvorova, dok je Zhou u [260] dao razne gornje i donje granice za stepen-rastojanje invarijantu. Relacije između stepen-rastojanje invarijante i Wienerovog indeksa su proučavane u [114, 169, 172, 202], dok se formule za DD indeks na klasama nanocevi i nanotorusa mogu naći u [61, 134].

U prvom delu poglavlja predstavljamo formulu za računanje stepen-rastojanje invarijante u klasi parcijalnih Hemingovih grafova i prezentujemo linearan algoritam za računanje DD invarijante u klasi benzenoidnih grafova. U drugom delu generalizujemo rezultate iz [256] i rešavamo hipotezu iz [238] o maksimalnoj vrednosti $DD(G)$ među bicikličnim grafovima.

7.1 Hemingovi grafovi i kanonska reprezentacija

Pokazaćemo da se $DD(G)$ može izraziti u terminima količnik grafova kanonske metričke reprezentacije grafa G . Metrika količnik grafova se može izostaviti, ako se G izometrijski ugrađuje (očuvava rastojanja) u Hemingov graf (eng. Hamming graph), gde se formule jako pojednostavljaju. Sličan pristup je nedavno koristio Klavžar za računanje Wienerovog indeksa grafa preko njegove kanonske reprezentacije.

Definicija 7.1.1 *Kartezijanski proizvod (eng. Cartesian product) $G_1 \square G_2 \square \dots \square G_k$ grafova G_1, G_2, \dots, G_k ima skup čvorova $V(G_1) \times V(G_2) \times \dots \times V(G_k)$, i dva čvora $u = (u_1, u_2, \dots, u_k)$ i $v = (v_1, v_2, \dots, v_k)$ su susedna ako se razlikuju na tačno jednoj poziciji, recimo na i -toj, i $u_i v_i$ je grana grafa G_i .*

Neka d_G predstavlja uobičajeno geodetsko rastojanje u G .

Lema 7.1.2 Neka je $G = G_1 \square G_2 \square \dots \square G_k$. Za čvorove $u, v \in G$ važi

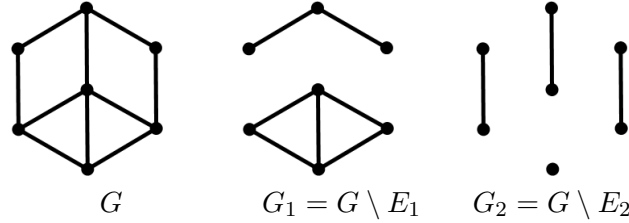
$$d_G(u, v) = \sum_{i=1}^k d_{G_i}(u_i, v_i).$$

Hemingov graf je kartezijanski proizvod kompletnih grafova, dok je *parcijalni Hemingov graf* definiše kao graf koji se izometrično ugrađuje u Hemingov graf. Za specijalan slučaj kada su svi faktori K_2 govorimo o *hiperkocki* Q_n i *parcijalnim kockama*, respektivno. Ova klasa grafova uključuje stabla, medijanske grafove, benzenoide, fenilene, rešetke i mnoge druge. Parcijalni Hemingovi grafovi su proučavani u [27, 38, 247].

Kanonska metrička reprezentacija povezanog grafa G , po Graham-u i Winkler-u [98], je definisana na sledeći način. Grane xy i uv iz $E(G)$ su u Djoković–Winkler [79, 249] relaciji Θ ako i samo ako

$$d(x, u) + d(y, v) \neq d(x, v) + d(y, u).$$

Neka je Θ^* tranzitivno zatvorenje relacije Θ i neka su E_1, E_2, \dots, E_k klase ekvivalencije relacije Θ^* , odnosno Θ^* -klase ukratko. Za $i = 1, 2, \dots, k$, neka G_i označava graf $(V(G), E(G) \setminus E_i)$ gde su $C_1^{(i)}, C_2^{(i)}, \dots, C_{r_i}^{(i)}$ povezane komponente grafa G_i . Na primer, posmatrajmo graf G sa Slike 7.1. Ovaj graf ima dve Θ^* -klase E_1 i E_2 .



Slika 7.1: Θ^* klase ekvivalencije grafa G .

Definišimo grafove G_i^* , $i = 1, 2, \dots, k$, sa $V(G_i^*) = \{C_1^{(i)}, \dots, C_{r_i}^{(i)}\}$ gde je $C_j^{(i)} C_{j'}^{(i)}$ grana grafa G_i^* ako je neki čvor iz $C_j^{(i)}$ susedan u G sa nekim čvorom iz $C_{j'}^{(i)}$. Definišimo kontrakcije $\alpha_i: V(G) \rightarrow V(G_i^*)$ na sledeći način $\alpha_i(v) = C_j^{(i)}$ gde je $v \in C_j^{(i)}$. Tada je preslikavanje

$$\alpha: G \rightarrow G_1^* \square \dots \square G_k^*, \quad (7.1)$$

gde je $\alpha(v) = (\alpha_1(v), \dots, \alpha_k(v))$, *kanonska metrička reprezentacija* (eng. canonical metric representation) grafa G . Graham i Winkler su dokazali da je α iredundantno izometrično ugrađivanje. Pod terminom *iredundantno* podrazumevamo da svaki faktor grafa G_i^* ima bar dva čvora i da se svaki čvor iz G_i^* pojavljuje kao koordinata nekog čvora $\alpha(u)$. Za više rezultata o kanonskoj reprezentaciji videti radove [28, 37, 156] i knjige [64, 157].

7.2 Formula za računanje DD indeksa

Teorema 7.2.1 Neka je $G = (V, E)$ parcijalni Hemingov graf. Neka je notacija njegove kanonske metričke reprezentacije kao u (7.1) i neka je d_i funkcija rastojanja grafa G_i^* . Za $i = 1, 2, \dots, k$ i $j = 1, 2, \dots, r_i$, neka je $\deg(C_j^{(i)})$ suma stepena u grafu G koji se slikaju u $C_j^{(i)}$ preslikavanjem α_i . Tada

$$DD(G) = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^{r_i} \deg(C_j^{(i)}) (n - |C_j^{(i)}|).$$

Dokaz. Neka je $\alpha: G \rightarrow G^* = G_1^* \square \dots \square G_k^*$ kanonska reprezentacija grafa G , gde za $u \in V$ važi $\alpha(u) = (\alpha_1(u), \dots, \alpha_k(u))$. Po definiciji sledi

$$\begin{aligned} DD(G) &= \sum_{\{u,v\} \in V} (deg(u) + deg(v))d_G(u,v) = \sum_{\{u,v\} \in V} (deg(u) + deg(v))d_{G^*}(\alpha(u), \alpha(v)) \\ &= \sum_{\{u,v\} \in V} (deg(u) + deg(v)) \sum_{i=1}^k d_i(\alpha_i(u), \alpha_i(v)) \\ &= \sum_{i=1}^k \sum_{\{u,v\} \in V} (deg(u) + deg(v))d_i(\alpha_i(u), \alpha_i(v)). \end{aligned}$$

Kako je G parcijalni Hemingov graf, svaka komponenta G_i^* je kompletan graf, pa je $d_i(\alpha_i(u), \alpha_i(v))$ jednako 1, kada je $\alpha_i(u) \neq \alpha_i(v)$. Dakle,

$$\begin{aligned} DD(G) &= \sum_{i=1}^k \sum_{\{u,v\} \in V, \alpha_i(u) \neq \alpha_i(v)} deg(u) + deg(v) \\ &= \sum_{i=1}^k \sum_{u \in V} deg(u) (n - |\alpha_i(u)|) \\ &= \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^{r_i} \sum_{u \in \alpha_i^{-1}(C_j^{(i)})} deg(u) (n - |C_j^{(i)}|) \\ &= \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^{r_i} deg(C_j^{(i)}) (n - |C_j^{(i)}|). \end{aligned}$$

■

U slučaju parcijalnih kocki, Teorema 7.2.1 se svodi na još jednostavniju formu. Zbog toga uvedimo neke nove oznake. Nije teško primetiti da je graf G parcijalna kocka ako i samo ako je svaka komponenta G_i^* izomorfna sa K_2 . Dakle, svaki od grafova G_i se sastoji od dve povezane komponente koje označavamo sa $W_{i,0}$ i $W_{i,1}$ i zovemo *poluprostori* grafa G . Drugim rečima, $W_{i,\chi}$ se sastoji od onih čvorova u kod kojih je $\alpha_i(u) = \chi$, $\chi \in \{0, 1\}$.

Neka je G parcijalna kocka sa poluprostorima $W_{i,\chi}$, $1 \leq i \leq k$, $\chi \in \{0, 1\}$. Za svako $1 \leq i \leq k$ i $\chi \in \{0, 1\}$ neka je

$$D_{(i,\chi)} = \sum_{u \in W_{i,\chi}} deg(u).$$

Kako je $r_i = 2$ za svako i i $|W_{i,\chi}| + |W_{i,\chi}| = n$, Teorema 7.2.1 se redukuje na

Posledica 7.2.2 Neka je G parcijalna kocka sa poluprostorima $W_{i,\chi}$, $1 \leq i \leq k$, $\chi \in \{0, 1\}$. Tada

$$DD(G) = \sum_{i=1}^k (|W_{i,0}|D_{(i,1)} + |W_{i,1}|D_{(i,0)}).$$

Prednost Posledice 7.2.2 za računanje $DD(G)$ u odnosu na definiciju je ta što u ovom slučaju ne moramo da izačunamo sva rastojanja između čvorova već da samo brojimo čvorove i sumiramo stepene. Ovaj rezultat je još jedna primena takozvane 'rez metode' (eng. cut method). Za njenu preciznu definiciju i primenu na hemijskim grafovima videti [167]. Ova metoda je dobila ime po benzenoidnim grafovima, u kojima su Θ^* klase upravo ortogonalni rezovi. Ovde treba pomenuti i povezan rezultat za računanje težinskog Wienerovog indeksa $\sum_{u,v} w(u)w(v)d(u,v)$, gde je w proizvoljna težinska funkcija [170].

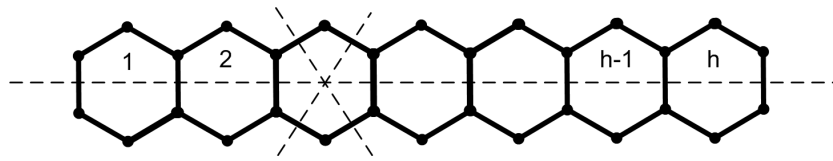
7.3 Primene na hemijske grafove

U ovoj sekciji ćemo primeniti Posledicu 7.2.2 na neke hemijski važne klase parcijalnih kocki – benzenoidne grafove. Termin *benzenoidan graf* se koristi za grafove koji se konstruišu na sledeći način. Posmatramo heksagonalnu mrežu \mathcal{H} i neka je Z ciklus u ovoj mreži. Tada se benzenoidni graf formira od čvorova i grana \mathcal{H} koji leže u ciklusu Z i njegovoj unutrašnjosti. Čvorovi i grane koje pripadaju Z formiraju perimetar benzenoidnog grafa, dok se čvorovi koji ne pripadaju perimetru nazivaju unutrašnji čvorovi.

Treći primer je linearni fenilen PH_h , lanac sastavljen od heksagona i kvadrata.

Linearni benzeni

Posmatrajmo linearni lanac benzena L_h sa Slike 7.2.



Slika 7.2: Linearni benzen L_h .

Broj čvorova u grafu L_h je jednak $n_h = 4h + 2$, dok je suma svih stepena $d_h = 2m_h = 10h + 2$, jer postoje $2(h - 1)$ čvorova stepena tri i $(2h + 4)$ čvorova stepena dva. Za horizontalni ortogonalni rez imamo udeo $2(2h + 1)(5h + 1)$. Za heksagon C_i , postoje dva simetrična ortogonalna reza sa udelima

$$(n_{i-1} + 1) \cdot (d_{n-i} + 4) + (n_{h-i} + 1) \cdot (d_i + 4).$$

Korišćenjem simetrije, sledi

$$\begin{aligned} DD(L_h) &= 2(2h + 1)(5h + 1) + 4 \sum_{i=1}^h (4(i - 1) + 3)(10(h - i) + 6) \\ &= 2 \left(10h^2 + 7h + 1 + 2 \sum_{i=1}^h (40ih - 10h - 40i^2 + 34i - 6) \right) \\ &= \frac{2}{3} (40h^3 + 72h^2 + 47h + 3). \end{aligned}$$

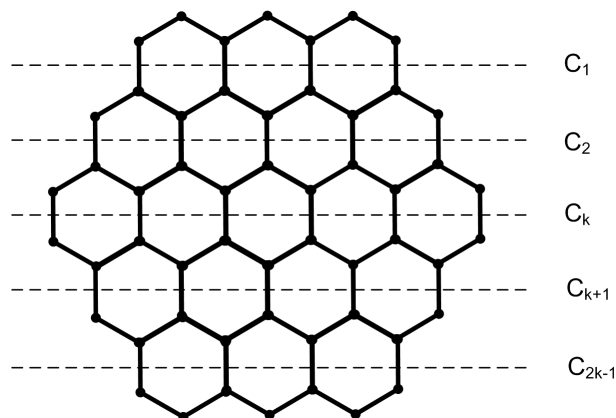
Koroneni i cirkumkoroneni

Sada ćemo izvesti formulu za računanje stepen-rastojanje invarijante za seriju koronena i cirkumkoronena H_k , $k \geq 1$. Prvi članovi ove serije su $H_1 =$ benzen, $H_2 =$ koronen, $H_3 =$ cirkumkoronen, $H_4 =$ cirkumcirkumkoronen.

Na Slici 7.3, prikazana su $2k - 1$ horizontalna ortogonalna reza u H_k za $k = 3$. Postoje još dve grupe sa po $2k - 1$ ekvivalentnih rezova, koji se dobijaju rotiranjem gornje grupe za $+60^\circ$ i -60° stepeni. Broj čvorova u H_k je jednak $n_k = 6k^2$, dok H_k sadrži tačno $6k$ čvorova stepena dva. Dakle, suma svih stepena je jednaka

$$d_k = 2m_k = 2 \cdot 6k + 3 \cdot (6k^2 - 6k) = 6k(3k - 1).$$

Primitimo da zbog simetrije, udeo ortogonalnog reza C_i je jednak udelu ortogonalnog reza C_{2k-i} , $i = 1, 2, \dots, k - 1$. Može se pokazati indukcijom da za $i = 1, 2, \dots, k$ broj čvorova iznad reza


 Slika 7.3: Cikrumkoronen H_3 .

C_i je upravo $i(2k + i)$, dok je njihova suma stepena jednaka $(6k - 1)i - 2i + 3i^2$. Dakle,

$$\begin{aligned} \frac{1}{3}DD(H_k) &= 2 \cdot (3k^2)(9k^2 - 3k) \\ &+ 2 \sum_{i=1}^{k-1} i(2k + i) \cdot (18k^2 - 6k - ((6i - 1)k - 2i + 3i^2)) \\ &+ 2 \sum_{i=1}^{k-1} (6k^2 - i(2k + i)) \cdot ((6i - 1)k - 2i + 3i^2) \\ &= \frac{2h}{15} \cdot (3 + 25h - 45h^2 - 205h^3 + 492h^4). \end{aligned}$$

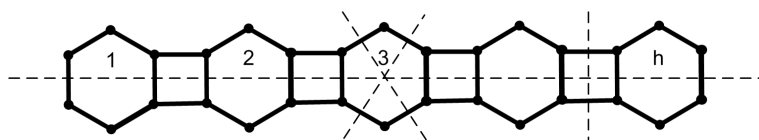
Najzad, dobijamo polinom petog stepena za stepen-rastojanje invarijantu grafa H_k :

$$DD(H_k) = \frac{2}{5} \cdot h (3 + 25h - 45h^2 - 205h^3 + 492h^4).$$

Napomenimo da je nalaženje formule za Wienerov indeks serije H_k bio otvoren problem skoro 20 godina. Rez metodom se ovaj problem rešava pravolinijski, slično kao i računanje $DD(H_k)$.

Linearni fenileni

Posmatrajmo linearni fenilen PH_h , koji se sastoji od $h - 1$ prstenova veličine četiri (ciklobutadina) i h prstenova veličine šest (benzena), gde je svaki ciklobutadin susedan sa dva heksagonalna prstena, kao na Slici 7.4.


 Slika 7.4: Linearni fenilen PH_h .

Broj čvorova u ovom grafu je jednak $n_h = 6h$, dok je suma svih stepena $d_h = 2m_h = 2(8h - 2)$. Horizontalni rez sadrži $2h$ grana, dok svaki od preostalih $(h - 1) + 2h$ ortogonalnih rezova sadrže dve grane. Za horizontalni rez imamo udeo $2 \cdot 3h(8h - 2)$. Za vertikalne rezove u kvadratu i , imamo udeo $6i(16(h - i) - 2) + 6(h - i)(16i - 2)$, dok za heksagon C_i , imamo dva simetrična ortogonalna

reza sa udelima $(6i - 3)(16(h - i) + 6) + (6(h - i) + 3)(16i - 10)$. Najzad sledi

$$\begin{aligned}
DD(PH_h) &= 2 \cdot 3h(8h - 2) \\
&+ \sum_{i=1}^{h-1} (6i(16(h - i) - 2) + 6(h - i)(16i - 2)) \\
&+ 2 \sum_{i=1}^h ((6i - 3)(16(h - i) + 6) + (6(h - i) + 3)(16i - 10)) \\
&= 12h^2(8h + 1).
\end{aligned}$$

7.4 Linearni algoritam za benzenoidne sisteme

Neka je B benzenoidan graf. Skup grana grafa B se može podeliti u tri reza na sledeći način: svaki rez se sastoji od paralelnih grana; zatim konstruišemo graf količnike baš kako je to urađeno u kanonskoj metričkoj reprezentaciji. Time dobijamo tri stabla T_1, T_2, T_3 . Ključno zapažanje u [39] je da se graf B ugrađuje izometrično u proizvod $T_1 \square T_2 \square T_3$ (videti [40, 113, 171, 271] za detalje algoritama za računanje Wienerovog indeksa, Segedinskog indeksa i hiper-Wienerovog indeksa u benzenoidnim sistemima i stablima).

Neka je

$$W(T, a, b) = \sum_{v \in T} \sum_{u \in T} (a(u)b(v) + a(v)b(u))d(u, v)$$

modifikovani težinski Wienerov indeks stabla T , tako da svaki čvor $v \in T$ ima dve težine $a(v)$ i $b(v)$.

Za $i = 1, 2, 3$, neka težina a_i bude broj čvorova i b_i suma stepena u odgovarajućim komponentama povezanosti.

Teorema 7.4.1 *Neka je G benzenoidan graf i neka je α kanonsko ugrađivanje grafa G u proizvod $H = T_1 \square T_2 \square T_3$. Tada*

$$DD(G) = W(T_1, a_1, b_1) + W(T_2, a_2, b_2) + W(T_3, a_3, b_3).$$

Dokaz. Za $u \in V$, neka je $\alpha(v) = (v_1, v_2, v_3)$.

$$\begin{aligned}
DD(G) &= \sum_{v \in V} \sum_{u \in V} (deg(v) + deg(u)) \cdot d(u, v) \\
&= \sum_{v \in V} \sum_{u \in V} (deg(v) + deg(u)) \cdot d_H(\alpha(u), \alpha(v)) \\
&= \sum_{v \in V} \sum_{u \in V} (deg(v) + deg(u)) \cdot \sum_{i=1}^3 d_{T_i}(u_i, v_i) \\
&= \sum_{i=1}^3 \left(\sum_{v \in V} \sum_{u \in V} (deg(v) + deg(u)) \cdot d_{T_i}(u_i, v_i) \right) \\
&= \sum_{i=1}^3 \left(\sum_{v_i \in V(T_i)} \sum_{u \in V(T_i)} (b_i(v) a_i(u) + b_i(u) a_i(v)) \cdot d_{T_i}(u_i, v_i) \right) \\
&= W(T_1, a_1, b_1) + W(T_2, a_2, b_2) + W(T_3, a_3, b_3).
\end{aligned}$$

Pogledajmo detaljnije identitet

$$\sum_{v \in V} \sum_{u \in V} (deg(v) + deg(u)) \cdot d_{T_i}(u_i, v_i) = \sum_{v_i \in V(T_i)} \sum_{u \in V(T_i)} (b_i(v) a_i(u) + b_i(u) a_i(v)) \cdot d_{T_i}(u_i, v_i).$$

Neka su v_k i u_k dva čvora iz T_k , $k = 1, 2, 3$, i neka oni predstavljaju komponente koje se sastoje od čvorova v'_1, v'_2, \dots, v'_p i u'_1, u'_2, \dots, u'_q iz T , redom.

$$\begin{aligned} S &= \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^q (deg(v'_i) + deg(u'_j)) \cdot d_{T_k}(v_k, u_k) \\ &= d_{T_k}(v_k, u_k) \cdot \left(p \sum_{j=1}^q deg(u'_j) + q \sum_{i=1}^p deg(v'_i) \right) \\ &= d_{T_k}(v_k, u_k) \cdot (a_k(v)b_k(u) + a_k(u)b_k(v)). \end{aligned}$$

Time je dokaz završen. ■

Prezentovaćemo linearan algoritam za računanje generalizacije težinskog Wienerovog indeksa, odnosno računanja stepen-rastojanje invarijante DD za benzenoide sisteme pomoću Teoreme 7.4.1.

Lema 7.4.2 *Neka je (T, a, b) dvostruko težinsko stablo. Za granu e iz T , označimo sa T_1 i T_2 komponente povezanosti grafa $T \setminus e$, i za $i = 1, 2$ neka je*

$$A_i(e) = \sum_{u \in T_i} a(u) \quad i \quad B_i(e) = \sum_{u \in T_i} b(u).$$

Tada važi

$$W(T, a, b) = \sum_{e \in T} (A_1(e)B_2(e) + A_2(e)B_1(e)).$$

Dokaz se zasniva na metodi rezanja za računanje Wienerovog indeksa.

Primitimo da važi $A_1(e) + A_2(e) = \sum_{v \in T} a(v) = A$ i $B_1(e) + B_2(e) = \sum_{v \in T} b(v) = B$. Sada možemo lako dizajnirati algoritam za računanje suma $A_1(e)$ i $B_1(e)$ u stablu T pomoću dinamičkog programiranja. Odaberimo čvor v kao koren stabla i obavimo pretragu u dubinu DFS od čvora v . Neka je $p(v)$ roditelj čvora v u DFS stablu. Neka $A(u)$ označava sumu težina a u podstablu čiji je koren čvor u , uključujući i $a(u)$, i slično neka $B(v)$ označava sumu težina b u podstablu čiji je koren čvor u , uključujući i $b(u)$. Korišćenjem formula

$$A(v) = a(v) + \sum_{(u,v) \in E(T)} A(u) \quad i \quad B(v) = b(v) + \sum_{(u,v) \in E(T)} B(u),$$

rekurzivno računamo nizove A i B , dok obilazimo čvorove po dubini. Najzad primitimo da važi $A_1((v, p(v))) = A(v)$ i $B_1((v, p(v))) = B(v)$ iz Leme 7.4.2.

Vremenska složenost algoritma za računanje modifikovanog težinskog Wienerovog indeksa je $O(n)$, dok je korišćena memorija $O(n)$ (pošto su potrebna tri pomoćna niza dužine n).

Graf G na Slici 7.5 ima 5 heksagona, 21 čvor i 25 grana.

$$DD(T_1, a_1, b_1) = (3 \cdot 44 + 18 \cdot 6) + (3 \cdot 44 + 18 \cdot 6) + (7 \cdot 34 + 14 \cdot 16) = 942$$

$$DD(T_2, a_2, b_2) = (5 \cdot 39 + 16 \cdot 11) + (10 \cdot 26 + 11 \cdot 24) + (16 \cdot 11 + 5 \cdot 39) = 1266$$

$$DD(T_3, a_3, b_3) = (3 \cdot 44 + 18 \cdot 6) + (7 \cdot 34 + 14 \cdot 16) + (13 \cdot 19 + 8 \cdot 31) + (18 \cdot 6 + 3 \cdot 44) = 1437$$

Po Teoremi 7.4.1, imamo $DD(G) = 942 + 1266 + 1437 = 3645$.

7.5 Formule za složene grafove

Inspirisani radovima [130, 166, 253] o računanju Wienerovog indeksa, Zagrebačkih indeksa i PI indeksa na složenim grafovima (koji su dobijeni primenom raznih grafovskih proizvoda), ovde prezentujemo slične formule za stepen-rastojanja invarijantu. Sa $|G|$ i $\|G\|$ označavamo broj čvorova i broj grana grafa G .

Algoritam 2: DFS (vertex v)

Ulaz: Lista suseda stabla T sa korenom $root$ i težinskim funkcijama a i b .

Izlaz: Niz roditelja $parent$ i kumulativne sume A i B .

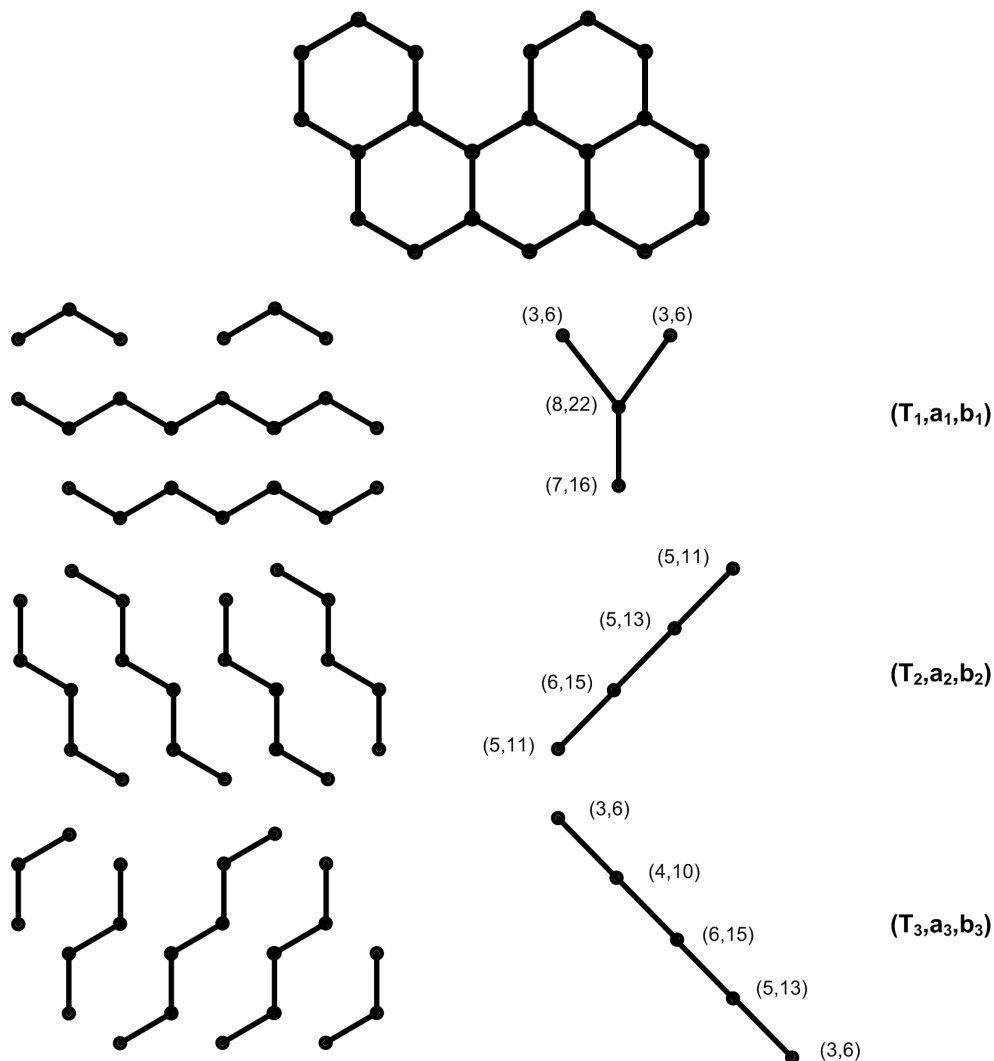
```
1  $A[v] = a[v];$ 
2  $B[v] = b[v];$ 
3 foreach neighbor  $u$  of  $v$  do
4   | if ( $parent[u] = 0$ ) and ( $u \neq root$ ) then
5   |   |  $parent[u] = v;$ 
6   |   |  $DFS(u);$ 
7   |   |  $A[v] = A[v] + A[u];$ 
8   |   |  $B[v] = B[v] + B[u];$ 
9   | end
10 end
```

Algoritam 3: ModifiedWeightedWienerIndex ()

Ulaz: Lista suseda stabla T sa korenom $root$ i težinskim funkcijama a i b .

Izlaz: Modifikovani težinski Wienerov indeks.

```
1  $SA = 0;$ 
2  $SB = 0;$ 
3 for  $v = 1$  to  $n$  do
4   |  $SA = SA + a[v];$ 
5   |  $SB = SB + b[v];$ 
6 end
7  $root = 1;$ 
8  $parent[root] = -1;$ 
9  $DFS(root);$ 
10  $MWW = 0;$ 
11 for  $v = 1$  to  $n$  do
12   | if  $v \neq root$  then
13   |   |  $MWW = MWW + A[v] * (SB - B[v]) + B[v] * (SA - A[v]);$ 
14   | end
15 end
16 return  $MWW;$ 
```


 Slika 7.5: Koraci u računanju DD za benzenoidne sisteme G .

Teorema 7.5.1 *Neka su G i H dva grafa. Tada*

$$DD(G \square H) = |H|^2 \cdot DD(G) + |G|^2 \cdot DD(H) + 4 \cdot |G| \cdot \|G\| \cdot W(H) + 4 \cdot |H| \cdot \|H\| \cdot W(G).$$

Dokaz. Stepen čvora $(g, h) \in V(G \square H)$ je jednak $deg(g) + deg(h)$. Zato imamo

$$\begin{aligned} DD(G \square H) &= \frac{1}{2} \sum_{u \in G \square H} \sum_{v \in G \square H} (deg(u) + deg(v)) \cdot d(u, v) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{(g_i, h_j) \in G \square H} \sum_{(g_k, h_l) \in G \square H} (deg(g_i, h_j) + deg(g_k, h_l)) \cdot d((g_i, h_j), (g_k, h_l)) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{|G|} \sum_{j=1}^{|H|} \sum_{k=1}^{|G|} \sum_{l=1}^{|H|} (deg(g_i) + deg(h_j) + deg(g_k) + deg(h_l)) \cdot (d(g_i, g_k) + d(h_j, h_l)). \end{aligned}$$

Sada možemo zameniti sume:

$$\begin{aligned}
DD(G \square H) &= \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^{|G|} \sum_{j,l=1}^{|H|} (deg(g_i) + deg(g_k)) \cdot d(g_i, g_k) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^{|G|} \sum_{j,l=1}^{|H|} (deg(h_j) + deg(h_l)) \cdot d(h_j, h_l) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^{|G|} \sum_{j,l=1}^{|H|} (deg(h_j) + deg(h_l)) \cdot d(g_i, g_k) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^{|G|} \sum_{j,l=1}^{|H|} (deg(g_i) + deg(g_k)) \cdot d(h_j, h_l).
\end{aligned}$$

Konačno, rezultat sledi korišćenjem $\sum_{g \in G} deg(g) = 2\|G\|$ i $\sum_{h \in H} deg(h) = 2\|H\|$,

$$\begin{aligned}
DD(G \square H) &= \sum_{j,l=1}^{|H|} DD(G) + \sum_{i,j=1}^{|G|} DD(H) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^{|G|} (deg(g_i) + deg(g_k)) \cdot \sum_{j,l=1}^{|H|} d(h_j, h_l) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{j,l=1}^{|H|} (deg(h_j) + deg(h_l)) \cdot \sum_{i,k=1}^{|G|} d(g_i, g_k) \\
&= DD(G) \cdot |H|^2 + DD(H) \cdot |G|^2 + 4 \cdot |G| \cdot \|G\| \cdot W(H) + 4 \cdot |H| \cdot \|H\| \cdot W(G).
\end{aligned}$$

■

Iz prethodne teoreme i formule $DD(P_n) = 4 \cdot W(P_n) - n(n-1) = \frac{n(n-1)(2n-1)}{3}$, dobijamo sledeću formulu

$$\begin{aligned}
DD(P_n \square P_m) &= n^2 \cdot \frac{m(m-1)(2m-1)}{3} + m^2 \cdot \frac{n(n-1)(2n-1)}{3} \\
&+ 4n(n-1) \cdot \frac{(m-1)m(m+1)}{6} + 4m(m-1) \cdot \frac{(n-1)n(n+1)}{6} \\
&= \frac{4}{3} \cdot mn(1 + mn^2 + nm^2) - \frac{1}{3} \cdot mn(n+m+2n^2+2m^2+6mn).
\end{aligned}$$

Situacija se dalje pojednostavljuje ako posmatramo direktan proizvod grafa sa samim sobom,

$$DD(G \square G) = 2|G|^2 \cdot DD(G) + 8|G| \cdot \|G\| \cdot W(G). \quad (7.2)$$

Sledeće formule su dobro poznate:

$$|G^n| = |G|^n \quad \|G^n\| = n \cdot |G|^{n-1} \cdot \|G\|.$$

Za Wienerov indeks imamo

$$W(G \square H) = |G|^2 \cdot W(H) + |H|^2 \cdot W(G),$$

$$W(G^n) = n \cdot |G|^{2n-2} \cdot W(G).$$

Sada indukcijom direktno dobijamo

Teorema 7.5.2 Za svaki graf G važi

$$DD(G^n) = n \cdot |G|^{2n-3} (DD(G) \cdot |G| + (4n - 4) \cdot \|G\| \cdot W(G)).$$

Za $G = P_2$ imamo $|G| = 2$, $\|G\| = 1$, $W(G) = 1$, $DD(G) = 1$ i konačno

$$DD(Q_n) = DD(P_2 \square P_2 \square \dots \square P_2) = n^2 \cdot 2^{2n-1}.$$

Spoj $G + H$ grafova G i H sa disjunktним skupovima $V(G)$ i $V(H)$ je grafovska unija $G \cup H$ zajedno sa svim granama koje spajaju $V(G)$ i $V(H)$.

Teorema 7.5.3 Za grafove G i H važi

$$\begin{aligned} DD(G + H) &= 4 \cdot (|G| \cdot \|G\| - \|G\| + |H| \cdot \|H\| - \|H\| - |G| \cdot |H|) \\ &\quad + 3 \cdot |G| \cdot |H| \cdot (|G| + |H|) - M_1(G) - M_1(H). \end{aligned}$$

Dokaz. Stepen čvora u grafu $G + H$ je jednak $deg(v) + |H|$ za $v \in G$ i $deg(v) + |G|$ za $v \in H$.

$$d_{G+H}(u, v) = \begin{cases} 0 & \text{ako } u = v \\ 1 & \text{ako } (u, v) \in E(G), \text{ ili } (u, v) \in E(H), \text{ ili } u \in V(G) \text{ i } v \in V(H) \\ 2 & \text{inače.} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} DD(G + H) &= \sum_{\tilde{v} \in G+H} deg(\tilde{v}) \cdot \sum_{\tilde{u} \in G+H} d(\tilde{v}, \tilde{u}) \\ &= \sum_{v \in G} (deg(v) + |H|) \cdot (deg(v) + |H| + 2(|G| - deg(v) - 1)) \\ &\quad + \sum_{u \in H} (deg(u) + |G|) \cdot (deg(u) + |G| + 2(|H| - deg(u) - 1)). \end{aligned}$$

Sada podelimo sumu:

$$\begin{aligned} DD(G + H) &= (2|G| + |H| - 2) \cdot \sum_{v \in G} (deg(v) + |H|) - \sum_{v \in G} (deg(v) + |H|)deg(v) \\ &\quad + (2|H| + |G| - 2) \cdot \sum_{u \in H} (deg(u) + |G|) - \sum_{u \in H} (deg(u) + |G|)deg(u) \\ &= (2|G| + |H| - 2) \cdot (2\|G\| + |H| \cdot |G|) - \sum_{v \in G} deg^2(v) - 2\|G\| \cdot |H| \\ &\quad + (2|H| + |G| - 2) \cdot (2\|H\| + |G| \cdot |H|) - \sum_{u \in H} deg^2(u) - 2\|H\| \cdot |G| \end{aligned}$$

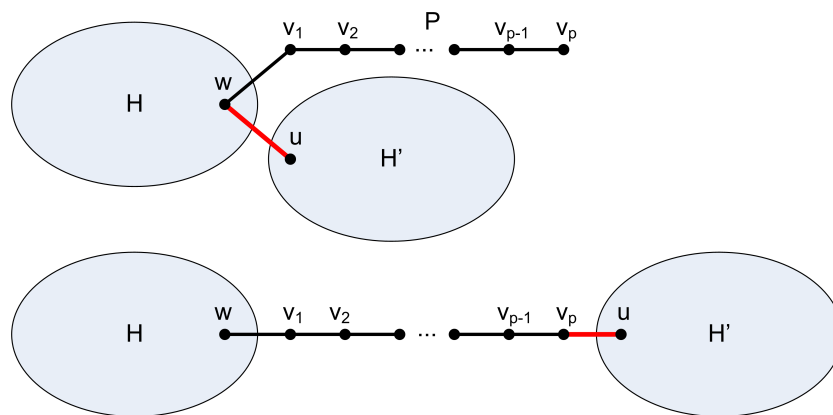
Konačno, primenom $M_1(G) = \sum_{v \in G} deg^2(v)$ i $M_1(H) = \sum_{u \in H} deg^2(u)$ sledi rezultat. ■

Schultz-ovi polinomi i neke generalizacije ovih rezultata su prikazani u [83].

7.6 Grafovske transformacije

Neka su H i H' dva grafa tako da je $|V(H)| \geq 1$ i $|V(H')| \geq 1$. Neka je $w \in V(H)$ čvor stepena $deg(w) \geq 2$, i $u \in V(H')$. Pretpostavimo da je $P = wv_1v_2 \dots v_p$ viseći put dužine $p \geq 1$ susedan sa w , i da grana wu spaja podgrafove H i H' . Takav graf označimo sa G (Slika 7.6). Neka je $G' = \pi(H, w, P, H')$ graf dobijen od G brisanjem grane wu i dodavanjem grane $v_p u$. Takvu transformaciju iz G u G' zvaćemo *a* π -transformacija. Primetimo da ako važi $deg(w) = 2$, tada su G i G' izomorfni.

Sledeći rezultat je dokazan u [101] i [152].



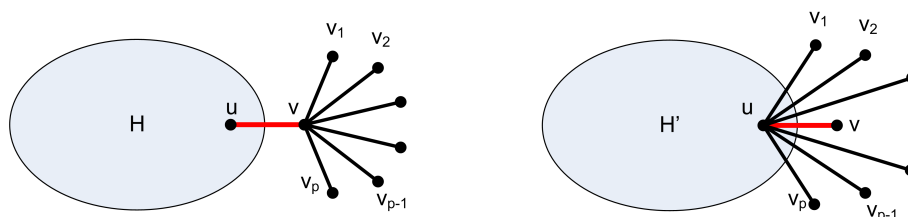
Slika 7.6: π -transformacija grafa G na čvoru w .

Teorema 7.6.1 *Neka je $G' = \pi(H, w, P, H')$ π -transformacija grafa G . Tada*

$$DD(G') \geq DD(G),$$

sa jednakošću ako i samo ako je $\deg(w) = 2$.

Neka je v čvor stepena $p + 1$ u grafu $G \not\cong S_n$, takav da su vv_1, vv_2, \dots, vv_p viseće grane indicentne sa v , i neka je u sused od v različit od v_1, v_2, \dots, v_p . Novi graf $G' = \sigma(G, v)$ formiramo brisanjem grana vv_1, vv_2, \dots, vv_p i dodavanjem novih grana uv_1, uv_2, \dots, uv_p . Kažemo da je G' σ -transformacija (Slika 7.7). Primitimo da ako je $\deg(u) = 1$, tada su grafovi G i G' izomorfni.



Slika 7.7: σ -transformacija grafa G na čvoru v .

Teorema 7.6.2 *Neka je $G' = \sigma(G, v)$ σ -transformacija grafa G . Tada*

$$DD(G) \geq DD(G'),$$

sa jednakošću ako i samo ako je $\deg(u) = 1$.

7.7 Uniciklični grafovi

Girt (eng. girth) grafa G je dužina najkraćeg ciklusa. Neka je $\mathcal{U}_{n,k}$ skup svih unicikličnih grafova sa $n \geq 3$ čvorova i girtom $k \geq 3$.

Definicija 7.7.1 *Neka je $L_{n,k}$ graf dobijen od ciklusa C_k i puta P_{n-k+1} identifikovanjem proizvoljnog čvora sa ciklusa C_k sa jednim krajem puta P_{n-k+1} . Neka je $H_{n,k}$ graf dobijen od C_k dodavanjem $n - k$ listova nekom čvoru sa ciklusa C_k .*

Za $U_{n,k} \in \mathcal{U}_{n,k}$, ako je $k = n$, tada je $U_{n,k} \cong C_k$; ako je $k = n - 1$, tada je $U_{n,k} \cong L_{n,n-1}$. Dakle, u nastavku pretpostavimo da važi $3 \leq k \leq n - 2$.

Autori u [254] su odredili ekstremalne grafove sa minimalnim i maksimalnim Wienerovim indeksom među unicikličnim grafovima sa n čvorova i girtom k .

Teorema 7.7.2 *Neka je $U_{n,k} \in \mathcal{U}_{n,k}$ ($3 \leq k \leq n-2$) unicikličan graf sa girtom k .*

Ako je k parno, tada

$$\frac{k^3}{8} + (n-k) \left(\frac{k^2}{4} + n-1 \right) \leq W(U_{n,k}) \leq \frac{k^3}{8} + (n-k) \left(\frac{n^2 + nk + 3k - 1}{6} - \frac{k^2}{12} \right).$$

Ako je k neparno, tada

$$\frac{k^3 - k}{8} + (n-k) \left(\frac{k^2 - 1}{4} + n-1 \right) \leq W(U_{n,k}) \leq \frac{k^3 - k}{8} + (n-k) \left(\frac{n^2 + nk + 3k - 1}{6} - \frac{k^2 + 3}{12} \right).$$

Leva jednakost važi ako i samo ako $U_{n,k} \cong H_{n,k}$, dok desna jednakost važi ako i samo ako $U_{n,k} \cong L_{n,k}$.

Sledeće formule su očigledne

$$W(C_k) = \begin{cases} \frac{k^3}{8}, & \text{ako je } k \text{ parno;} \\ \frac{k(k^2-1)}{8}, & \text{ako je } k \text{ neparno.} \end{cases} \quad \text{i} \quad D_{C_k}(u) = \begin{cases} \frac{k^2}{4}, & \text{ako je } k \text{ parno;} \\ \frac{k^2-1}{4}, & \text{ako je } k \text{ neparno.} \end{cases}$$

7.7.1 Maksimum stepen-rastojanje invarijante među unicikličnim grafovima

Teorema 7.7.3 *Neka je $G \in \mathcal{U}_{n,k}$ ($3 \leq k \leq n-2$) unicikličan graf sa girtom k . Tada*

$$DD(G) \leq DD(L_{n,k}),$$

sa jednakošću ako i samo ako $U_{n,k} \cong L_{n,k}$.

Dokaz. Korišćenjem π -transformacije iz Teoreme 7.6.1, možemo pretpostaviti da među unicikličnim grafovima sa n čvorova i datim girtom, maksimalna vrednost stepen-rastojanje invarijante se dostiže za graf $L = L(n, k; n_1, n_2, \dots, n_k)$ koji je dobijen od ciklusa $C = v_1 v_2 \dots v_k$ sa visećim putevima (dužina $n_i \geq 0$) susednih sa čvorovima v_i za $i = 1, 2, \dots, k$, redom. Očigledno važi $n_1 + n_2 + \dots + n_k = n - k$. Prisetimo da dozvoljavamo $n_i = 0$ za neke vrednosti $i = 1, 2, \dots, k$.

Čvorovi grafa L imaju stepene 1, 2 ili 3. Možemo upariti čvorove stepena tri i jedan, kao početne i krajnje čvorove visećih puteva. Pretpostavimo da je $n_i > 0$ za neko $i = 1, 2, \dots, k$ i neka je w_i krajnji čvor puta koji je zakačen za v_i . Tada važi

$$D_L(w_i) = D_S(v_i) + (n-1-n_i)n_i. \quad (7.3)$$

Kada računamo stepen-rastojanje invarijantu, iz (7.3) imamo

$$3 \cdot D_L(v_i) + 1 \cdot D_L(w_i) = 2D_L(v_i) + 2D_L(w_i) - (n-1-n_i)n_i.$$

Sabiranjem ovakvih suma, koristeći $n_1 + n_2 + \dots + n_k = n - k$, sledi

$$DD(L) = 4W(L) - \sum_{i=1}^k (n-1-n_i)n_i = 4W(L) - (n-1)(n-k) + \sum_{i=1}^k n_i^2. \quad (7.4)$$

Maksimum izraza $\sum_{i=1}^k n_i^2$ je upravo $(n_1 + n_2 + \dots + n_k)^2 = (n-k)^2$, sa jednakošću ako i samo ako postoji tačno jedan viseći put zakačen za C_k . Po Teoremi 7.7.2, $L_{n,k}$ je jedinstveni ekstremalni graf koji maksimizuje Wienerov indeks među unicikličnim grafovima sa n čvorova i girtom k . Zato $L_{n,k}$ takođe ima maksimalnu vrednost stepen-rastojanje invarijante i $DD(L_{n,k}) = 4W(L_{n,k}) - (n-k)(k-1)$. ■

Koristeći gornji dokaz, u kombinaciji sa Teoremom 7.7.2, dobijamo

$$DD(L_{n,k}) = \begin{cases} \frac{k^3}{2} + 4(n-k) \left(\frac{n^2 + nk + 3k - 1}{6} - \frac{k^2}{12} \right) - (n-k)(k-1), & \text{ako je } k \text{ paran;} \\ \frac{k^3 - k}{2} + 4(n-k) \left(\frac{n^2 + nk + 3k - 1}{6} - \frac{k^2 + 3}{12} \right) - (n-k)(k-1), & \text{ako je } k \text{ neparan.} \end{cases}$$

Posledica 7.7.4 [256] *Neka je U unicikličan graf sa $n \geq 5$ čvorova. Tada*

$$DD(U) \leq \frac{2}{3}(n^3 - 10n) + 14,$$

sa jednakošću ako i samo ako je $U \cong L_{n,3}$.

Dokaz. Iz dokaza Teoreme 7.7.3, sledi

$$DD(G) \leq 4W(G) - (n-k)(k-1) \leq 4W(G) - 2(n-3),$$

sa jednakošću ako i samo ako je $k = n - 2$ ili $k = 3$. Sa druge strane, u [254] je dokazano da $L_{n,3}$ ima maksimalni Wienerov indeks među unicikličnim grafovima sa n čvorova. Time je dokaz završen. ■

7.7.2 Minimum stepen-rastojanje invarijante među unicikličnim grafovima

Teorema 7.7.5 *Neka je G unicikličan graf sa n čvorova i girtom k . Tada*

$$DD(G) \geq DD(H_{n,k}),$$

sa jednakošću ako i samo ako $G \cong H_{n,k}$.

Dokaz. Korišćenjem σ -transformacija iz Teoreme 7.6.2, možemo pretpostaviti da među unicikličnim grafovima sa n čvorova i datim girtom, minimalna vrednost stepen-rastojanje invarijante se dostiže za graf $H = H(n, k; n_1, n_2, \dots, n_k)$, koji je dobijen od ciklusa $C = v_1 v_2 \dots v_k$ sa $n_i \geq 0$ listova susednih sa čvorovima v_i ($i = 1, 2, \dots, k$). Po definiciji imamo

$$\begin{aligned} DD(H) &= \sum_{i=1}^k \left((n_i + 2)D_H(v_i) + n_i(D_H(v_i) + n - 2) \right) \\ &= \sum_{i=1}^k (2n_i + 2)D_H(v_i) + (n - 2) \sum_{i=1}^k n_i \\ &= 2 \sum_{i=1}^k n_i D_H(v_i) + 2 \sum_{i=1}^k D_H(v_i) + (n - 2)(n - k). \end{aligned}$$

Primetimo da suma $\sum_{i=1}^k D_H(v_i)$ zavisi samo od n i k , jer

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k D_H(v_i) &= \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k d(v_i, v_j) + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k n_j (1 + d(v_i, v_j)) \\ &= 2W(C_k) + \sum_{j=1}^k n_j \sum_{i=1}^k (1 + d(v_i, v_j)) \\ &= 2W(C_k) + \sum_{j=1}^k n_j (k + D_{C_k}(v_j)) \\ &= 2W(C_k) + (n - k)(k + D_{C_k}(v)), \end{aligned}$$

gde je v proizvoljan čvor sa ciklusa C_k .

Dalje imamo,

$$\begin{aligned}
 D_H(v_i) &= n_i + \sum_{j \neq i} d(v_i, v_j) + \sum_{j \neq i} n_j(d(v_i, v_j) + 1) \\
 &= \sum_{j \neq i} d(v_i, v_j) + \sum_{j=1}^k n_j(d(v_i, v_j) + 1) \\
 &\geq D_{C_k}(v) + \sum_{j=1}^k n_j = D_{C_k}(v) + n - k,
 \end{aligned} \tag{7.5}$$

sa jednakošću ako i samo ako je $n_j = 0$ za sve $j \neq i$, odnosno $H \cong H_{n,k}$.

Sada sledi

$$\sum_{i=1}^k n_i D_H(v_i) \geq (D_{C_k}(v) + n - k) \sum_{i=1}^k n_i = (n - k)(D_{C_k}(v) + n - k). \tag{7.6}$$

Jednakost važi u (7.6) ako i samo ako za svako $1 \leq i \leq k$ ili $n_i = 0$ ili $D_H(v_i) = D_{C_k}(v) + n - k$. Neka je $n_i \neq 0$ za neko i . Tada jednakost važi takođe u (7.5), što implicira da je $n_j = 0$ za svako $j \neq i$, tj. $H \cong H_{n,k}$.

Najzad dobijamo

$$\begin{aligned}
 DD(G) &\geq 2(n - k)(D_{C_k}(v) + n - k) + 4W(C_k) \\
 &\quad + 2(n - k)(k + D_{C_k}(v)) + (n - 2)(n - k),
 \end{aligned}$$

sa jednakošću ako i samo ako $H \cong H_{n,k}$. ■

Korišćenjem gornjeg dokaza, u kombinaciji sa formulama za $W(C_k)$ i $D_{C_k}(v)$, dobijamo

$$DD(H_{n,k}) = \begin{cases} \frac{k^3}{2} + (n - k)(k^2 + 3n - 2), & \text{ako je } k \text{ paran;} \\ \frac{k^3 - k}{2} + (n - k)(k^2 + 3n - 3), & \text{ako je } k \text{ neparan.} \end{cases}$$

Posledica 7.7.6 [238] *Neka je U un cikličan graf sa $n \geq 4$ čvorova. Tada*

$$DD(U) \geq 3n^2 - 3n - 6,$$

sa jednakošću ako i samo ako $U \cong H_{n,3}$.

Dokaz. Potrebno je dokazati nejednakost $DD(H_{n,k}) > DD(H_{n,3})$ za $3 < k \leq n$. Slučajevi $n = 4$ i $n = 5$ se direktno proveravaju, jer je $DD(H_{4,3}) = 30 < DD(H_{4,4}) = 32$ i $DD(H_{5,3}) = 54 < DD(H_{5,5}) = 60 < DD(H_{5,4}) = 61$.

Ako je k parno, neka je

$$f(k) = \frac{k^3}{2} + (n - k)(k^2 + 3n - 2).$$

Tada $f'(k) = -\frac{3k^2}{2} + 2nk - 3n + 2$, i kvadratna funkcija $f'(k)$ dostiže minimum za $k = 3$ ili $k = n$. Lako se vidi da važi $f'(3) = 3n - \frac{23}{2} > 0$ za $n \geq 4$, i $f'(n) = \frac{n^2}{2} - 3n + 2 > 0$ za $n \geq 6$. Sledi da je $f(k)$ strogo monotono rastuća funkcija za $n \geq 6$ i $DD(H_{n,k}) > DD(H_{n,3})$.

Slično za k neparno, neka je

$$g(k) = \frac{k^3 - k}{2} + (n - k)(k^2 + 3n - 3).$$

Tada $g'(k) = -\frac{3k^2}{2} + 2nk - 3n + \frac{5}{2}$, i $g'(k)$ dostiže minimum za $k = 4$ ili $k = n$. Lako se vidi da $g'(4) = 5n - \frac{43}{2} > 0$ za $n \geq 5$, i $g'(n) = \frac{1}{2}(n^2 - 6n + 5) > 0$ za $n \geq 6$. Sledi da je $g(k)$ strogo rastuća funkcija za $n \geq 6$ i $DD(H_{n,k}) > DD(H_{n,4})$.

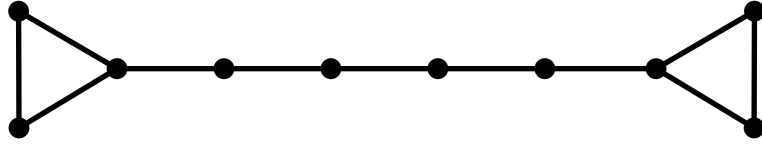
Na kraju je $f(4) = 3n^2 + 2n - 24 > 3n^2 - 3n - 6 = g(3)$, što implicira $DD(H_{n,4}) > DD(H_{n,3})$. ■

7.8 Biciklični grafovi

U [236] Tomescu je postavio sledeću hipotezu.

Hipoteza 7.8.1 *Među svim bicikličnim grafovima sa n čvorova, graf B_n koji se dobija spajanjem dva trougla putem ima najveću vrednost stepen-rastojanje invarijante.*

Ova hipoteza je jako interesantna, jer su u tom slučaju biciklični grafovi najjednostavniji grafovi kod kojih ekstremalni grafovi sa maksimalnim Wienerovim indeksom nisu ekstremalni grafovi sa maksimalnim DD indeksom (kao što je to u slučaju stabala i un cikličnih grafova). Ekstremalni grafovi za Wienerovim indeksom su dati u radu Söltésa [224].



Slika 7.8: Bicikličan graf B_{10} .

Sada ćemo dokazati ovu hipotezu. Neka je $D_G^*(v) = \sum_{x \in V(G)} \deg(x)d(v, x)$.

Lema 7.8.2 *Neka je G povezan graf sa $n \geq 4$ čvorova i $n + 1$ grana. Tada*

- (i) $D_G(v) \leq \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n - 2$,
- (ii) $D_G^*(v) \leq n^2 + 2n - 14$.

Dokaz. Dokaz ćemo sprovesti indukcijom po n . Za $n = 4$, tada je $G \cong K_4 - e$ i lako proveravamo oba tvrđenja. Slično direktno proveravamo pet bicikličnih grafova za slučaj $n = 5$. Neka je sada $n \geq 6$.

Slučaj 1: v je list.

Neka je w njegov sused. Očigledno da $G - v$ zadovoljava hipotezu, pa imamo

$$D_G(v) = D_{G-v}(w) + n - 1 \leq \frac{1}{2}(n-1)^2 - \frac{1}{2}(n-1) - 2 + n - 1 = \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n - 2,$$

što dokazuje deo (i). Deo (ii) sledi na osnovu:

$$\begin{aligned} D_G^*(v) &= \sum_{x \in V(G) \setminus \{v\}} \deg(x)(d(x, w) + 1) = D_{G-v}^*(w) + \sum_{x \in V(G) \setminus \{v\}} \deg(x) \\ &\leq (n-1)^2 + 2(n-1) - 14 + (2n+1) = n^2 + 2n - 14. \end{aligned}$$

Slučaj 2: v nije list.

Kako je $\deg(v) \geq 2$, postoje bar dva čvora na rastojanju 1 od v , dok su ostali čvorovi na rastojanjima najviše 2, 3, ..., $n - 2$ od v . Dakle,

$$D_G(v) \leq 2 \cdot 1 + 2 + 3 + \dots + (n-2) = \frac{1}{2}n^2 - \frac{3}{2}n + 2 < \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n - 2,$$

što implicira (i). Da bi dokazali (ii), neka f_i označava sumu stepena čvorova na rastojanju i od v u grafu G , gde je $i \in \{0, 1, 2, \dots\}$. Jasno je da važi

$$D^*(v) = \sum_{i \geq 1} i f_i.$$

Sada $\sum_{i \geq 1} f_i = 2n + 2 - \deg(v) \leq 2n$. Štaviše, imamo $f_1 \geq 3$ jer $\deg(v) \geq 2$ i $n \geq 6$, kao i $f_i \geq 2$ if $f_{i+1} > 0$. Kako je dijametar grafa G manji ili jednak od $n - 2$, sledi $f_i = 0$ za $i \geq n - 1$. Lako se vidi da je uz ova ograničenja suma $\sum_{i \geq 1} i f_i$ maksimalna ako važi $f_1 = 3$, $f_i = 2$ za $i = 2, 3, \dots, n - 3$, i $f_{n-2} = 5$. Dakle,

$$D^*(v) \leq 3 \cdot 1 + 2(2 + 3 + \dots + (n - 3)) + 5(n - 2) = n^2 - 3.$$

Sada (ii) sledi, jer $n^2 - 3 < n^2 + 2n - 14$ za $n \geq 6$. ■

Lema 7.8.3 *Neka je G povezan graf, v proizvoljan list i w njegov sused. Tada je*

$$DD(G) = DD(G - v) + D_{G-v}(w) + D_G(v) + D_G^*(v).$$

Dokaz. Iz definicije imamo

$$\begin{aligned} DD(G) &= \sum_{\{x,y\} \subseteq V(G) \setminus \{v,w\}} (\deg(x) + \deg(y))d(x,y) \\ &+ \sum_{x \in V(G) \setminus \{v,w\}} (\deg(x) + \deg(w))d(x,w) \\ &+ \sum_{x \in V(G) \setminus \{v\}} (\deg(x) + 1)d(x,v) \\ &= \sum_{\{x,y\} \subseteq V(G) \setminus \{v,w\}} (\deg_{G-v}(x) + \deg_{G-v}(y))d_{G-v}(x,y) \\ &+ \sum_{x \in V(G) \setminus \{v,w\}} (\deg_{G-v}(x) + \deg_{G-v}(w) + 1)d_{G-v}(x,w) \\ &+ \sum_{x \in V(G) \setminus \{v\}} (\deg_{G-v}(x) + 1)d_G(x,v) \\ &= DD(G - v) + D_{G-v}(w) + D_G^*(v) + D_G(v). \end{aligned}$$

■

Slično se može dokazati sledeća relacija.

Lema 7.8.4 *Neka je G povezan graf sa artikulacionim čvorom v , tako da su G_1 i G_2 dve povezane komponente grafa G koje imaju samo čvor v u preseku i $G_1 \cup G_2 = G$. Tada važi*

$$DD(G) = DD(G_1) + DD(G_2) + 2\|G_1\|D_{G_2}(v) + 2\|G_2\|D_{G_1}(v) + (|G_1| - 1)D_{G_2}^*(v) + (|G_2| - 1)D_{G_1}^*(v).$$

Lema 7.8.5 *Neka je H povezan graf sa $h \geq 2$ čvorova i C_k ciklus sa $k \geq 4$ čvorova. Graf G_1 dobijamo od H i C_k identifikovanjem jednog čvora iz H sa jednim čvorom iz C_k ; dok graf G_2 dobijamo od H i $L_{k,3}$ identifikovanjem jednog čvora iz H i lista iz $L_{k,3}$. Tada važi*

$$DD(G_1) < DD(G_2).$$

Dokaz. Neka je $H \cap C_k = H \cap F = \{v\}$. Iz Leme 7.8.4, dobijamo

$$DD(G_1) = DD(H) + DD(C_k) + 2\|H\|D_{C_k}(v) + 2kD_H(v) + (h - 1)D_{C_k}^*(v) + (k - 1)D_H^*(v),$$

$$DD(G_2) = DD(H) + DD(F) + 2\|H\|D_F(v) + 2kD_H(v) + (h - 1)D_F^*(v) + (k - 1)D_H^*(v).$$

Dakle,

$$\begin{aligned} DD(G_1) - DD(G_2) &= DD(C_k) - DD(F) + 2m_1(D_{C_k}(v) - D_F(v)) \\ &+ (h - 1)(D_{C_k}^*(v) - D_F^*(v)). \end{aligned}$$

Iz Posledice 7.7.4, imamo $DD(C_k) < DD(F)$. Štaviše,

$$D_F(v) = 1 + 2 + \dots + (k-3) + 2(k-2) = \frac{(k-2)(k+1)}{2} > \left\lfloor \frac{k^2}{4} \right\rfloor = D_{C_k}(v),$$

$$D_F^*(v) = 2D_F(v) + (k-3) = k^2 - 5 > 2 \left\lfloor \frac{k^2}{4} \right\rfloor = D_{C_k}^*(v).$$

Najzad dobijamo $DD(G_1) - DD(G_2) < 0$. ■

Lema 7.8.6 *Neka je G povezan graf sa n čvorova i $n+1$ granom. Tada važi bar jedno od sledećih tvrđenja:*

- (i) G ima dva čvorno disjunktna ciklusa i minimalni stepen čvorova je dva,
- (ii) G ima viseći čvor,
- (iii) G je 2-povezan,
- (iv) G je dobijen od dva disjunktna ciklusa identifikovanjem dva čvora sa svakog ciklusa.

Dokaz. Ako je G 2-povezan, tada važi (iii), pa možemo pretpostaviti da G ima artikulacioni čvor v . Slično, zbog (ii) možemo pretpostaviti da svaki list grafa $G - v$ mora biti susedan sa v . Svaka komponenta od $G - v$ sa k čvorova mora biti ili stablo sa $k-1$ granom i sa bar dva lista, ili povezan graf sa bar k grana. U oba slučaja, broj grana u podgrafu indukovanom tom komponentom (uz čvor v) je bar $k+1$. Kako G ima $n+1$ grana, graf $G - v$ mora imati tačno dve komponente. Svaka od komponenti je ili put sa krajnjim čvorovima koji su susedni sa v , ili ciklus sa jednim čvorom susednim sa v , ili ciklus sa putem koji ga povezuje sa v . Dakle, važi ili (i) ili (iv). ■

U [234] autori su pogrešno izračunali Wienerov indeks grafa B_n

$$W(B_n) = \binom{n-1}{3} + (n-6)^2 + 8(n-6) + 15 = \frac{n^3}{6} - \frac{13n}{6} + 2,$$

dok je tačna vrednost $W(B_n) = \frac{n^3}{6} - \frac{13n}{6} + 4$. Lako proveravamo da važi sledeće

$$DD(B_n) = 4W(B_n) + 2 \left(\frac{(n-3)(n-4)}{2} + n - 2 \right) = \frac{2}{3}n^3 + n^2 - \frac{41}{3}n + 24.$$

Teorema 7.8.7 *Neka je G povezan bicikličan graf sa $n \geq 5$ čvorova. Tada*

$$DD(G) \leq \frac{2}{3}n^3 + n^2 - \frac{41}{3}n + 24.$$

Jednakost važi ako i samo ako je $G \cong B_n$.

Dokaz. Dokaz ćemo izvesti indukcijom po n . Za $n = 5$ i $n = 6$ teoremu je lako proveriti, pa pretpostavimo da je $n \geq 7$. Po Lemi 7.8.6 jedan od sledećih četiri slučaja se mora desiti.

Slučaj 1: G ima dva čvorno disjunktna ciklusa i minimalni stepen čvorova je dva.

Primenom Leme 7.8.5, lako dobijamo da važi nejednakost $DD(G) \leq DD(B_n)$, sa jednakošću ako i samo ako je $G \cong B_n$.

Slučaj 2: G ima bar jedan list.

Neka je v proizvoljan list grafa G sa susedom w . Očigledno $G - v$ zadovoljava induktivnu hipotezu, pa imamo

$$DD(G - v) \leq \frac{2}{3}(n-1)^3 + (n-1)^2 - \frac{41}{3}(n-1) + 24, \quad (7.7)$$

Po Lemi 7.8.2, Lemi 7.8.3 i indukcijskoj hipotezi, dobijamo

$$\begin{aligned}
DD(G) &= DD(G-v) + D_{G-v}(w) + D_G(v) + D_G^*(v) \\
&= \left(\frac{2}{3}(n-1)^3 + (n-1)^2 - \frac{41}{3}(n-1) + 24 \right) + \left(\frac{1}{2}(n-1)^2 - \frac{1}{2}(n-1) - 2 \right) \\
&\quad + \left(\frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n - 2 \right) + (n^2 + 2n - 14) \\
&= \frac{2}{3}n^3 + n^2 - \frac{41}{3}n + 21 \\
&< \frac{2}{3}n^3 + n^2 - \frac{41}{3}n + 24,
\end{aligned}$$

što smo i želeli.

Slučaj 3: G je 2-povezan.

Neka je v proizvoljan čvor. Plesník je u [203] dokazao sledeću procenu $D_G(v) \leq \frac{1}{4}n^2$ za svaki čvor v . U konjunkciji sa $\sum_{v \in V(G)} \deg(v) = 2n + 2$ dobijamo

$$DD(G) = \sum_{v \in V(G)} \deg(v)D_G(v) \leq \sum_{v \in V(G)} \deg(v) \frac{n^2}{4} = \frac{n^3 + n^2}{2},$$

i kako je $\frac{n^3+n^2}{2} < \frac{2}{3}n^3 + n^2 - \frac{41}{3}n + 21$ za $n \geq 7$, tvrđenje sledi.

Slučaj 4: G je unija dva ciklusa sa tačno jednim zajedničkim čvorom.

Slično kao u Slučaju 1, primenom Leme 7.8.5, lako dobijamo da važi $DD(G) < DD(B_n)$.

Time je dokaz završen. ■

Glava 8

Omega polinom i Cluj–Niš indeks

8.1 Omega polinom

Prebrojavajući polinom se može napisati u obliku

$$P(G, x) = \sum_k m(G, k) \cdot x^k \quad (8.1)$$

gde eksponenti predstavljaju mere particija $p(G)$, $\bigcup p(G) = P(G)$ grafovске osobine $P(G)$, dok su koeficijenti $m(G, k)$ povezani sa brojem particija mere k . U matematičkoj hemiji, prebrojavajuće polinomi je uveo Hosoya: $Z(G, x)$ prebrojava koliko ima nezavisnih skupova grana [128], dok $H(G, x)$ prebrojava rastojanja u grafu [176]. Hosoya je zatim predložio sekstet polinome [129] za brojanje rezonantnih prstenova u benzenoidnim molekulima.

Neke osobine grafova koje su povezane sa rastojanjima se mogu izraziti u polinomijalnoj formi, sa koeficijentima koji se mogu računati iz slojnih matrica (eng. layer) ili matrica omotača (eng. Shell matrix) [66, 78]. Ove matrice se grade na osnovu particija čvorova grafa, pomoću TOPOCLUJ softverskog paketa [241].

Neka je $G(V, E)$ povezan bipartitan graf sa skupom čvorova $V(G)$ i skupom grana $E(G)$. Dve grane $e = (x, y)$ i $f = (u, v)$ grafa G su *kodistantne e co f* ako zadovoljavaju sledeću relaciju [241]:

$$d(v, x) = d(v, y) + 1 = d(u, x) + 1 = d(u, y)$$

Ako je "co" relacija ekvivalencije u G , tada se skup grana $C(G) = \{f \in E(G) \mid f \text{ co } e\}$ naziva *ortogonalni rez oc* grafa G i $E(G)$ je unija disjunktних ortogonalnih rezova: $E(G) = C_1 \cup C_2 \cup \dots \cup C_k$, $C_i \cap C_j = \emptyset$ za $i \neq j$. U tom slučaju se lako vidi da je relacija "co" u stvari Θ relacija (Djoković-Winkler relation [79, 249]) i sledi G je *co*-graf ako i samo ako je parcijalna kocka [168]. U planarnom bipartitnom grafu, grana e je u relaciji Θ sa svakom suprotnom granom f ako su zatvorene oblasti/površni grafa izometrične. Tada je ortogonalni rez *oc* u odnosu na datu granu e najmanji podskup grana zatvorenih u odnosu na ovu relaciju i $C(e)$ je tačno Θ -klasa grafa G . Parcijalna kocka je uvek bipartitan graf, ali suprotno nije tačno.

Skup naspramnih ili topološki paralelnih grana u okviru iste zatvorene oblasti/prstena koje formiraju traku susednih oblasti/pljosni se naziva *naspramna traka ops* (eng. opposite edge strip), koja je kvazi-ortogonalan rez *qoc* (tj. tranzitivnost ne mora biti zadovoljena) [69]. Po definiciji, *ops* počinje i završava se ili u (1) jednoj parnoj zatvorenoj oblasti/prstenu ili (2) dve neparne zatvorene oblasti/prstena; u prvom slučaju *ops* formira ciklus, dok u drugom slučaju put. U slučaju otvorenih struktura, otvorena (beskonačna) oblast/površ je ekvivalentna sa neparnom oblašću.

Teorema 8.1.1 *Neka je G planaran graf koji predstavlja poliedar sa tačno k neparnih oblasti f_{odd} , koje su izolovane jedna od druge. Familija ops traka sadrži upola manje ops puteva nego što je broj grana u neparnim oblastima $e_{\text{odd}}/2$.*

Dokaz. Posmatrajmo parnu oblast f_{even} . Ako grana e pripada *ops* traci, tada dijametralno suprotna grana e' mora takođe biti u istoj *ops* traci. Kako je broj oblasti konačan, svaka *ops* traka se završava, što znači da se ili formira ciklus, ili se stiže do grane e' sa neparne oblasti. Zato, svaki *ops* put mora imati krajeve koji se ili nalaze u različitim ili u istim oblastima sa neparnim brojem grana. Najzad, jednostavnim uparivanjem broj *ops* puteva je jednak $np = e_{odd}/2$. Broj e_{odd} mora biti paran, jer suma svih veličina oblasti mora biti jednaka dvostrukom broju grana. ■

Posledica 8.1.2 U planarnom bipartitnom grafu (koji predstavlja poliedar), sve *ops* trake su ciklusi.

Neka je $m(G, s)$ broj *ops* dužine s (tj. broj presečnih grana). Omega polinom je definisan sa [69, 74, 75]

$$\Omega(G, x) = \sum_s m(G, s) \cdot x^s.$$

Prvi izvod u $x = 1$ predstavlja broj grana u grafu G

$$\Omega'(G, x) = \sum_s m(G, s) \cdot s = e = |E(G)|.$$

Topološki indeks Cluj-Ilmenau [70] $CI = CI(G)$, je definisan pomoću Omega polinoma:

$$CI(G) = \Omega'(G, 1)^2 - (\Omega'(G, 1) - \Omega''(G, 1)).$$

8.2 Broj *ops* puteva i primeri

Generalno, neparne oblasti mogu biti izolovane sa dva ekstremna slučaja.

1. Graf se sastoji od susednih neparnih oblasti, kao kod Platonovih tela (tetraedar T , oktaedar Oct , ikosedar Ico i dodekaedar Do , osim kocke C); njegovi *ops* su svi putevi dužine 1, i $\Omega(G, x) = ex^1$, $np = e$, $CI = e(e - 1)$, gde je e ukupan broj grana u G . Ovo važi i za stabla.
2. Bipartitni graf koji nije acikličan sa tačno jednom *ops* trakom; to može biti samo ciklus (Hamiltonov *ops*); $np = 1$, $\Omega(G, X) = 1 \cdot X^s$, $CI(G) = s^2 - (s + s(s - 1)) = 0$.
3. Najčešće se javlja mešoviti slučaj. Da bi izračunali np , moramo uvesti neke dodatne definicije.

Neka je broj grana sa neparnih i parnih oblasti e_{odd} i e_{even} redom. Dalje, neka je e_{odd_in} broj grana koje se nalaze na obe neparne oblasti, dok je broj ostalih grana sa neparnih oblasti e_{odd_ex} . Unutrašnje grane su brojane kao u Slučaju 1, dok spoljašnje grane direktno odgovaraju *ops* putevima (što je dokazano u prethodnoj teoremi). Dakle, ukupan broj *ops* puteva je:

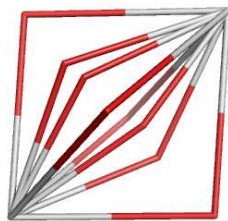
$$np(G) = e_{odd_in} + e_{odd_ex}/2. \tag{8.2}$$

Ostali članovi Omega polinoma predstavljaju *ops* cikluse.

U ovom delu ilustrujemo gornje argumente. Slika 8.1 prezentuje bipartitan graf sa tačno jednom *ops* trakom, koja je ciklus (slika je preuzeta iz TOPOCLUJ softvera).

Platonova tela imaju neparne oblasti, osim kocke. U Tabeli 8.1 svi Omega polinomi imaju tačno jedan član, što znači da su svi *ops* putevi unutrašnji. Takođe su prikazani i Prsten polinom $R(G, X)$, kao i CI indeks.

Neke od map operacija [76, 227], naročito *Leapfrog* Le i *Capra* Ca , održavaju broj puteva originala kod transformacija; jedina promena je u eksponentu (tj. u dužini *ops*) koji se množi sa 3 ili 6, u slučaju operacija Le i Ca , redom (Tabela 8.2).



Slika 8.1: Kompletan bipartitni graf $K_{2,8}$; $\Omega(G, X) = 1X^{16}$; $CI(G) = 0$; Hamiltonov *ops*.

Tabela 8.1: Omega i Prsten polinomi kod Platonovih tela.

	Struktura	Ring	Omega	CI
1	T	$4X^3$	$6X^1$	30
2	Oct	$8X^3$	$12X^1$	132
3	Do	$12X^5$	$30X^1$	870
4	Ico	$20X^3$	$30X^1$	870
5	C	$6X^4$	$3X^4$	96

Kada Le ponovimo n puta (Slika 8.2 a), broj članova Omega polinoma se povećava, ali prvih nekoliko članova ne menja originalni broj *ops* puteva u odnosu na prethodnika. Ako je Ca druga operacija (Slika 8.2 b), tada se eksponent množi sa 7. U Tabeli 8.3 se nalaze primeri, dok ovde dajemo formule za Omega polinom u iteriranom grafu $Le_n(T)$.

$$\Omega(Le_n(T), X) = a_1 \cdot X^{e_1} + a_2 \cdot X^{e_2}$$

$$a_1 = 6 \quad a_2 = 3 \cdot \left(3^{\lfloor n/2 \rfloor} - 1 \right) = \begin{cases} 3 \cdot (3^{n/2} - 1) & \text{ako je } n \text{ parno} \\ 3 \cdot (3^{(n-1)/2} - 1) & \text{ako je } n \text{ neparno} \end{cases}$$

$$e_2 = 2e_1 \quad e_1 = 3^{\lfloor (n+1)/2 \rfloor} = \begin{cases} 3^{n/2} & \text{ako je } n \text{ parno} \\ 3^{(n+1)/2} & \text{ako je } n \text{ neparno} \end{cases}$$

Broj grana u $Le_n(T)$ je $\Omega'(Le_n(T), 1) = 2 \cdot 3^{n+1}$.

Sledeći primeri se odnose na kaveze (eng. cages) koji imaju spojene f_5 oblasti, sa izolovanim parnim oblastima (Slika 8.3 kolona a); u tim slučajevima je broj svih *ops* puteva veći od broja grana u grafu G . Takođe smo posmatrali kaveze sa disjunktivnim f_5 oblastima (Slika 8.3 kolona b); oni imaju razne tipove grana i broj *ops* puteva se približava izolovanom broju grana sa neparnih oblasti. Međutim, u jednom slučaju imamo i *ops* ciklus, što je i napomenuto formulom (8.2).

Napomenimo da se broj unutrašnjih *ops* puteva dužine/eksponenta 1, može posmatrati kao pravi topološki indeks. U radu [71] je analiziran broj n_p (broj susednih pentagona), odnosno koeficijent uz x u Omega polinomu i koreliran je sa energijom malih fulerena sa odličnim rezultatima.

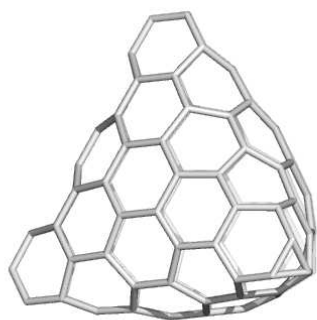
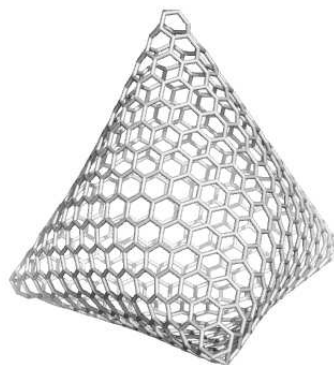
Numerička izračunavanja su vršena softverom Nano-Studio [196].

8.3 Topološki indeksi i diskriminativna sposobnost

Mrežna analiza je jako popularna oblast na koju su uticale i mnoge druge discipline, na primer biologija, hemija, informatika, sociologija, itd. U okviru računarske i biologije sistema, mreže su od velikog interesa pri modeliranju bioloških organizama [84, 163]. Konkretno, korišćenje visokopropusnih tehnologija utabalo je put biologiji mreža, i mrežnu analizu kao moderna područja gore navedenih disciplina. Do sada su istražene razne vrste bioloških mreža, na primer mreže gena, mreže protein-protein interakcija, metaboličke i transkripcione regulatorne mreže [84, 163, 175]. Za detaljnu analizu takvih mreža, potrebne su metode iz teorije grafova [6, 84, 163].

Tabela 8.2: Map operacije i Omega polinom u Platonskim telima

	Graf	Omega	CI
1	$Ca(T)$	$6X^7$	1470
2	$Ca(Oct)$	$12X^7$	6468
3	$Ca(Do, Ico)$	$30X^7$	42630
4	$Le(T)$	$6X^3$	270
5	$Ca(Le(T))$	$6X^{21}$	13230
6	$Q(T)$	$6X^2 + 3X^4$	504
7	$Ca(Q(T))$	$6X^{14} + 3X^{28}$	24696

(a) $Le_3(T)$; $v = 108$ (b) $Ca(Le_3(T))$; $v = 756$ Slika 8.2: Ne-kiralne (a) i kiralne (b) tetraedarne strukture dizajnirane iteracijom Le_n i (Le_n & Ca) map operacijama.

Na početku, daćemo kratak pregled o nedavnim događanjima i rezultatima unutar teorije kompleksnih mreža. Razvoj tehnika za istraživanje strukturnih karakteristika kompleksnih mreža je još uvek aktuelan problem istraživanja u različitim naučnim oblastima. Pored ispitivanja strukturnih svojstava mreža, karakterizacija raznih klasa grafova je takođe trenutno od velikog interesa u industriji. Na primer, istražuju se novi pristupi za teorijsko predviđanje postojanja različitih strukturnih klasa kompleksnih mreža pomoću spektara grafova [175]. Zanimljivo, takve metode mogu se primeniti i na istraživanje mehanizama rasta kod složenih mreža. Ostale metode za istraživanje sistema koji su modelirani grafovima i koji se pojavljuju u biološkim ili hemijskim naukama su bazirani na utvrđivanju takozvanih motiva i modula i drugih strukturnih grafovskih invarijanti kao što su metrijske karakteristike grafova i mere centralnosti [163, 175].

U ovom delu se bavimo specijalnim problemom, koji nije dobio mnogo pažnje u okviru generalne mrežne analize. Preciznije, mi želimo ispitivati diskriminativnu moć (mogućnost razlikovanja) novog topološkog indeksa korišćenjem (realnih) atomskih i sintetičkih mreža. Podsetimo se da je problem već razmatran preko hemijskih grafova (mreže atoma) [188], ali ne u opštem kontekstu. Generalno, topološki deskriptor se naziva degenerisan ako indeks uzima iste vrednosti za nekoliko različitih grafova. Takvi deskriptori se intenzivno koriste za karakterizaciju složenosti hemijskih mreža [25, 188], a takođe i kod rešavanja brojnih aspekata u dizajniranju lekova koji su strukturno orijentisani [10].

Kao što je već spomenuto, najvažnija karakteristika topoloških indeksa je diskriminaciona sposobnost neizomorfni grafova. Ispostavlja se da ova sposobnost može biti korisna u hemijskoj dokumentaciji (efikasno čuvanje i pronalaženje hemijskih struktura). Prezentovaćemo sistematsko

Tabela 8.3: Primeri Omega i Ring polinoma sa iteriranom $Le_n(T)$ i zadnjom Ca operacijom.

Graf	Omega	CI	Ring
$Le_n(T)$			
1	$6X^3$	270	$4X^3 + 4X^6$
2	$6X^3 + 6X^6$	2646	$4X^3 + 16X^6$
3	$6X^9 + 6X^{18}$	23814	$4X^3 + 52X^6$
4	$6X^9 + 24X^{18}$	227934	$4X^3 + 160X^6$
5	$6X^{27} + 24X^{54}$	2051406	$4X^3 + 484X^6$
6	$6X^{27} + 78X^{54}$	18900054	$4X^3 + 1456X^6$
$Ca(Le_n(T))$			
1	$6X^{21}$	13230	-
2	$6X^{21} + 6X^{42}$	129654	-
3	$6X^{63} + 6X^{126}$	1166886	-
4	$6X^{63} + 24X^{126}$	11168766	-
5	$6X^{189} + 24X^{378}$	100518894	-
6	$6X^{189} + 78X^{378}$	926102646	-

istraživanje, uključujući i računanje osetljivosti $S = \frac{na}{n}$ (količnik broja različitih vrednosti i ukupnog broja posmatranih struktura [235]) više indeksa koji su razvijani u TOPO Group Cluj na skupu izomera cikloalkana na deset čvorova/atoma i ciklusa sa 3 do 10 atoma (ukupno 376 struktura) [67]. Kao rezultat, dobili smo osetljivost indeksa CJp oko 0.525. Ova vrednost je veoma blizu vrednosti za SZp (0.536) i superiorna u odnosu na osetljivost Wienerovog indeksa (0.216) i hiper-Wienerovog indeksa (0.408). Osetljivost Balabanovog J indeksa [11] je 0.981 i ovaj indeks pokazuje prve degenerativne vrednosti kod dodekana i smatra se za jedan od najosetljivijih prostih topoloških indeksa.

U okviru naše studije, indeksi Hararijevog tipa su prevazišli diskriminativnu sposobnost J indeksa. Analizom dobijamo da je HCJ_p indeks (koji se računa na osnovu recipročne Cluj matrice $1/[UCJ]_{ij}$) jedini nedegenerisani indeks među 12 indeksa, koji uključuju i J indeks. Do sada je mnogo truda uloženo u nalaženje topološkog indeksa za dobru (jedinственu) karakterizaciju molekularnih mreža. Naravno, ovaj problem zavisi kako od posmatranog indeksa, tako i od osnovne strukture. Nadmetanje je počelo od Randićevog molekularnog identifikacionog broja [210], koji je definisan kao suma svih težinskih puteva u molekulu. Od tada su posmatrani različiti težinski putevi, šetnje ili sume rastojanja, što je dovelo do uvođenja novih ID brojeva [12, 174] koji su testirani na velikim skupovima hemijskih struktura. Šema za dodeljivanje težina granama, koja uključuje slojne matrice i stepene proširene matrice susedstva su predložili Hu i Xu [133]. Rezultujući $EAID$ broj se čini kao najosetljiviji indeks do sada (bez degenerativnih parova na preko četiri miliona hemijskih struktura).

8.4 Omotač matrice i polinomi

Težine u predloženom super indeksu se određuju korišćenjem "omotač" matričnog operatora (eng. Shell operator) [68, 78], a težine grana su osobine kodirane u matrici informacija M . Elementi matrice omotača ShM dimenzija $n \times n$ su definisani sa

$$ShM_{i,k} = \sum_{v \in V, d(i,v)=k} M_{i,v}.$$

Matrica omotača grafa G je sastavljena od gornjih elemenata

$$ShM(G) = \{ShM_{i,k} \mid i \in V(G), 1 \leq k \leq d(G)\}.$$

Nulta kolona se sastoji od dijagonalnih elemenata matrice informacija. Omotač polinom je definisan na osnovu ShD matrice [70] kao

$$P(ShD, x) = \sum_k p(G, k)x^k,$$

a koeficijenti se računaju kao poluzbirovi u kolonama omotač matrice. Vrednost polinoma u $x = 1$ je upravo Wienerov indeks, $P(ShD, 1) = W(G)$. Prvi izvod je suma kvadrata rastojanja u grafu G . Matrica rastojanja i omotač matrica za graf G_1 sa Slike 8.4 su prikazani u Tabeli 8.4.

ShM							D								
i/k	0	1	2	3	4	RS	i/k	1	2	3	4	5	6	7	RS
1	0	1	4	6	4	16	1	0	1	2	3	4	2	3	15
2	0	3	4	3	0	11	2	1	0	1	2	3	1	2	10
3	0	3	6	0	0	10	3	2	1	0	1	2	2	1	9
4	0	2	4	6	0	13	4	3	2	1	0	1	3	2	12
5	0	1	2	6	8	18	5	4	3	2	1	0	4	3	17
6	0	1	4	6	4	16	6	2	1	2	3	4	0	3	15
7	0	1	4	9	0	15	7	3	2	1	2	3	3	0	14
CS	0	12	28	36	16	92	CS	15	10	9	12	17	15	14	92
$P(1)$	0	6	14	18	8	46									
$P'(1)$	0	6	28	54	32	120									

Tabela 8.4: Matrica rastojanja i omotač matrica za graf G_1 .

Proizvod dijagonalne matrice sa stepenima čvorova na dijagonali Deg i matrice rastojanja D daje stepen-rastojanje matricu $DegD$

$$Deg(G) \cdot D(G) = DegD(G). \tag{8.3}$$

Ovaj proizvod daje isti poluzbir elemenata kao i Hadamardov (element po element) proizvod vektora koji predstavljaju sumu po vrstama RS matrica susedstva i rastojanja, redom. Kada primenimo omotač operator nad matricom informacija $DegD(G)$ dobijamo matricu $ShDegD$ i sume elemenata po kolonama predstavljaju koeficijente u odgovarajućem omotač polinomu (videti Tabelu 8.5).

ShDegD							DegD								
i/k	0	1	2	3	4	RS	i/k	1	2	3	4	5	6	7	RS
1	0	1	4	6	4	15	1	0	1	2	3	4	2	3	15
2	0	9	12	9	0	30	2	3	0	3	6	9	3	6	30
3	0	9	18	0	0	27	3	6	3	0	3	6	6	3	27
4	0	4	8	12	0	24	4	6	4	2	0	2	6	4	24
5	0	1	2	6	8	17	5	4	3	2	1	0	4	3	17
6	0	1	4	6	4	15	6	2	1	2	3	4	0	3	15
7	0	2	4	9	0	14	7	3	2	1	2	3	3	0	14
CS	0	26	52	48	16	142	CS	24	14	12	18	28	24	22	142
$P(1)$	0	13	26	24	8	71									
$P'(1)$	0	13	52	72	32	169									
$P''(1)$	0	0	52	144	96	292									

Tabela 8.5: Stepen-rastojanje matrica i odgovarajuća omotač matrica za graf G_1 .

Nezavisno od toga da li se proizvod (8.3) radi zdesna ili sleva, omotač polinom ostaje isti.

Polusuma elemenata matrice $Deg \cdot D$ ili $D \cdot Deg$ je jednaka poznatom stepen-rastojanje indeksu

$$DD(G) = \sum_{v \in V(G)} deg(v) \cdot D(v),$$

gde su $deg(v)$ i $D(v)$ sume po vrstama u matricama susedstva $RS(A(v))$ i rastojanja $RS(D(v))$. Dalje, ako primenimo omotač operator dobijamo matrice $Sh(A \cdot D)$ i $Sh(D \cdot A)$ koje se razlikuju od $ShDegD$ i $ShDDeg$ matrica na ne-nula dijagonalama (takođe, neke informacije se gube pri računanju prvog izvoda). Iako su vrednosti u $x = 1$ odgovarajućih polinoma jednake, nadalje ćemo samo posmatrati polinom $P(ShDegD, x)$.

Drugi razlog je što elementi matrice $DegD$ imaju osobine koje je opisao Dobrynin. Ova matrica se može dobiti korišćenjem operatora šetnje [77]

$$Deg(k) \cdot D(G) = W_{(A,K,D)}, \quad (8.4)$$

gde je K kvadratna matrica odgovarajućeg reda koja ima sve nedijagonalne elemente jednake k , dok se na dijagonali nalaze nule. Za $k = 1$ dobijamo klasičnu $DegD(G)$ matricu.

Operator šetnje [68, 72, 77] $W_{(M1,M2,M3)}$ je definisan sa

$$W_{(M1,M2,M3)} ij = RS(M1^{M2ij})_i \cdot M3_{ij}$$

Preciznije, on je baziran na Hadamardovoj algebri i intezivno primenjivan u [68, 77]. Omotač matrica za operator šetnje $W_{(A,K,D)}$ je ilustrovan u Tabli 8.6. Relacija (8.4) za $k = 1, 2, \dots, d(G)$ definiše proširene stepen-rastojanje matrice i odgovarajuće omotač polinome $P(ShW_{(A,K,D)}, x)$, primenjujući 'proširenu povezanost' koju su uveli Balaban i drugi [14] u pionirskom dobu hemijske teorije grafova. Ove matrice mogu objašnjavati i višestruke grane i petlje (kao što je i opisano u [78]).

Posmatrajmo proširene valence $Deg(k_r)$ koje su definisane kao broj čvorova na rastojanju $d(i, j) = r$, $r = 1, 2, \dots, d(G)$ [161]. One se mogu izračunati kao sume po vrstama RS u odgovarajućoj proširenoj matrici susedstva A_r . Sada se može uvesti generalizacija proširenih valenci kao

$$Deg(k_r) \cdot D(G) = W_{(A_r,k,D)},$$

gde $k, r = 1, 2, \dots, d(G)$. Na osnovu ovih matrica možemo konstruisati $d(G)$ različitih omotač polinoma $P(ShW_{A_r,k,D})$.

		$W_{(A,1,D)}(G_1)$								$ShW_{(A,1,D)}(G_1)$							
		1	2	3	4	5	6	7	RS	1	2	3	4	5	6	7	RS
1		0	1	2	3	4	2	3	15	1	0	1	4	6	4	15	
2		3	0	3	6	9	3	6	30	2	0	9	12	9	0	30	
3		6	3	0	3	6	6	3	27	3	0	9	18	0	0	27	
4		6	4	2	0	2	6	4	24	4	0	4	8	12	0	24	
5		4	3	2	1	0	4	3	17	5	0	1	2	6	8	17	
6		2	1	2	3	4	0	3	15	6	0	1	4	6	4	15	
7		3	2	1	2	3	3	0	14	7	0	1	4	9	0	14	
CS		24	14	12	18	28	24	22	142	CS	0	26	52	48	16	142	
										$P(1)$	0	13	26	24	8	71	
										$P'(1)$	13	52	72	32	169	338	

Tabela 8.6: Omotač matrica za $W_{(A,1,D)}(G_1)$.

8.5 Super Cluj–Niš indeks

Na osnovu prethodnog, definišimo super indeks Cluj–Niš indeks (nazvan po gradovima dva autora) na sledeći način [70]:

$$CJN(G) = \sum_{k,p,r,s} (D(p)(ShW_{(A,K,M),1}))^s,$$

gde $1 \leq k, p, r \leq d(G)$. Izračunavanje CJN indeksa je prikazano u Tabelama 8.7, 8.8, 8.9 i 8.10. Poslednja vrsta u Tabeli 8.10 predstavlja upravo CJN indeks grafa G_1 .

k	$DegD$	D_1	D_2	$D_2^{1/2}$	D_3	$D_3^{1/3}$	D_4	$D_4^{1/4}$
1	71	169	292	17.08801	336	6.952053	192	3.722419
2	159	389	694	26.34388	822	9.367505	480	4.680695
3	313	755	1322	36.35932	1530	11.52295	864	5.421612
4	655	1591	2814	53.04715	3306	14.89707	1920	6.619502
	1198	2904	5122	132.8384	5994	42.73959	3456	20.44423
							18674	3100.022

Tabela 8.7: CJN indeks matrice $ShW(A_r, K, D)$ za $r = 1, s = 1, 1/p, 1 \leq p \leq 4$ za graf G_1 .

k	$DegD$	D_1	D_2	$D_2^{1/2}$	D_3	$D_3^{1/3}$	D_4	$D_4^{1/4}$
1	88	220	402	20.04994	486	7.862224	288	4.119534
2	195	503	958	30.95158	1218	10.67946	768	5.264296
3	395	1001	1866	43.19722	2322	13.24201	1440	6.160141
4	856	2206	4206	64.85368	5382	17.52459	3456	7.667317
	1534	3930	7432	159.0524	9408	49.30829	5952	23.21129
							28256	4161.572

Tabela 8.8: CJN indeks matrice $ShW(A_r, K, D)$ za $r = 2, s = 1, 1/p, 1 \leq p \leq 4$ za graf G_1 .

k	$DegD$	D_1	D_2	$D_2^{1/2}$	D_3	$D_3^{1/3}$	D_4	$D_4^{1/4}$
1	85	233	470	21.67948	618	8.51784	384	4.426728
2	185	509	1032	32.12476	1368	11.101	864	5.421612
3	396	1082	2170	46.58326	2826	14.13809	1728	6.44742
4	869	2391	4844	69.59885	6408	18.57409	4032	7.968565
	1535	4215	8516	169.9863	11220	52.33102	7008	24.26432
							32494	4461.582

Tabela 8.9: CJN indeks matrice $ShW(A_r, K, D)$ za $r = 3, s = 1, 1/p, 1 \leq p \leq 4$ za graf G_1 .

Pre nego što damo rezultate osetljivosti novog topološkog indeksa, opisaćemo skupove podataka koje smo koristili. Prvi test skup se sastoji od 2265 odabranih realnih hemijskih struktura sa različitim skeletima iz masene spektralne baze podataka NIST [60]. Za sve grafove važi $4 \leq |V| \leq 19$, gde $|V|$ označava broj čvorova/atoma. Drugi test skup [60] sadrži sintetizovane hemijske grafove (izomere) koji imaju po 10 čvorova. Preciznije, skup sadrži 75 stabala, 475 unicikličnih grafova i 1792 bicikličnih grafova, odnosno ukupno 2342 struktura. Za računanje jedinstvenosti (degenerativnosti) CJN indeksa za ove grafove, koristili smo formulu $S(I) = n_d/n$.

Složenost izračunavanja CJN indeksa je $O(|V|^3 + d^2|V|^{2.807})$, gde je d dijametar grafa G . Matrica rastojanja se računa pomoću Floyd–Varšalovog algoritma (eng. Floyd–Warshall algorithm) [43] u vremenu $O(|V|^3)$, dok za svaku proširenu matricu susedstva $A_r, r = 1, 2, \dots, d$, moramo d

k	$DegD$	D_1	D_2	$D_2^{1/2}$	D_3	$D_3^{1/3}$	D_4	$D_4^{1/4}$
1	32	98	228	15.09967	360	7.113787	288	4.119534
2	47	141	320	17.88854	492	7.894447	384	4.426728
3	64	196	456	21.35416	720	8.962809	576	4.898979
4	94	282	640	25.29822	984	9.94638	768	5.264296
	237	717	1644	79.64059	2556	33.91742	2016	18.70954
							7170	849.2676
							86594	12572.44

Tabela 8.10: CJN indeks matrice $ShW(A_r, K, D)$ za $r = 4$, $s = 1, 1/p$, $1 \leq p \leq 4$ za graf G_1 .

Algoritam 4: WalkOperator (A , *diameter*)

Ulaz: Matrica susedstva A i dijametar grafa G .

Izlaz: Operator šetnje.

```

1 powA = A;
2 for i = 1 to n do
3   | w[i][0] = 0;
4 end
5 for j = 1 to diameter do
6   | for i = 1 to n do
7     | w[i][j] = 0;
8     | for k = 1 to n do
9       | w[i][j] = w[i][j] + powA[i][k];
10    | end
11   | end
12   | powA = matrix_product(powA, A);
13 end
14 return w;
```

puta računati omotač matricu sa jednim proizvodom matrica uz korišćenje Štrasenovog algoritma [43] u vremenu $O(|V|^w)$, gde je $w = \log_2 7 \approx 2.807$ (videti Algoritam 4 i Algoritam 5).

Kao konačan rezultat, dobili smo da CJN indeks može razlikovati grafove jedinstveno (degenerativnost je nula) u oba skupa grafova.

Dehmer i Varmuza [60] su istraživali osobine jedinstvenosti nekoliko informaciono-teoretskih invarijanti, sa posebnim akcentom na parametrizovanim merama baziranim na entropiji grafova. Korišćenjem istih skupova podataka, ove mere informacija pokazuju malu degenerativnost (osetljivost je manja od jedan). Međutim, u poređenju sa ostalim poznatim merama informacija, indeksi bazirani na entropiji imaju dosta veću osetljivost. Istraživanja u ovoj sekciji se mogu posmatrati kao jasan korak u rešavanju problema pronalaženja ili dizajniranja topoloških deskriptora sa velikom osetljivošću. Predloženi CJN indeks jeste super indeks, jer se sastoji od nekoliko deskriptora povezanih netrivialnim algebarskim transformacijama. To može biti razlog zašto razdvaja strukturne informacije jedinstvenije (bez degenerativnih slučajeva) nego ostale mere informacija iz [60].

Prezentovani super indeks je u mogućnosti da razlikuje parove grafova sa istim stepen-rastojanje nizovima, kao i stabla (G_2, G_3) i (G_4, G_5) (videti [160]) ili ciklične grafove (G_6, G_7) i (G_8, G_9) (videti [211]), koji su pokazali degenerativnost kod grafovskih invarijanti baziranih na rastojanjima ili imaju isti spektar za nekoliko matrica informacija. Preliminarni test za procenjivanje korelacionih sposobnosti deskriptora koji su bazirani na stepen-rastojanje matricama $ShDegD$ i omotač polinomima [70] je izvršen na osnovu skupa oktana, kao jedan od reprezentativnih primera za topološke

Algoritam 5: CJN ()

Ulaz: Matrica susedstva A i matrica rastojanja D .

Izlaz: Cluj – Niš indeks.

```

1  diameter = max( $D[i][j]$ );
2  cjn = 0;
3  for  $s = 1$  to diameter do
4      for  $i = 1$  to  $n$  do
5          for  $j = 1$  to  $n$  do
6              if  $D[i][j] = s$  then  $a[i][j] = 1$  else  $a[i][j] = 0$ ;
7          end
8      end
9       $W = WalkOperator(a, diameter)$ ;
10     for  $k = 1$  to diameter do
11         for  $i = 1$  to  $n$  do
12              $p[i] = 0$ ;
13              $diagonal[i] = w[i][k]$ ;
14              $derivative[j] = 0$ ;
15         end
16          $ShDegD = 0$ ;
17         for  $i = 1$  to  $n$  do
18             for  $j = 1$  to  $n$  do
19                  $ShDegD[i][D[i][j]] = ShDegD[i][D[i][j]] + D[i][j]$ ;
20             end
21         end
22         for  $i = 1$  to  $n$  do
23             for  $j = 1$  to diameter do
24                  $ShDegD[i][j] = ShDegD[i][j] * diagonal[i]$ ;
25             end
26         end
27         for  $i = 1$  to  $n$  do
28             for  $j = 0$  to diameter do
29                  $p[j] = p[j] + ShDegD[i][j]$ ;
30             end
31         end
32          $derivative[0] = p[0]/2$ ;
33         for  $j = 1$  to diameter do
34              $derivative[0] = derivative[0] + p[j]/2$ ;
35             for  $i = 1$  to diameter do
36                  $derivative[i] = derivative[i] + (p[j]/2) * (j - i + 1)! / (j + 1)!$ ;
37             end
38         end
39         for  $j = 1$  to diameter do
40              $cjn = cjn + power(derivative[j], 1/j)$ ;
41         end
42     end
43 end
44 return cjn;

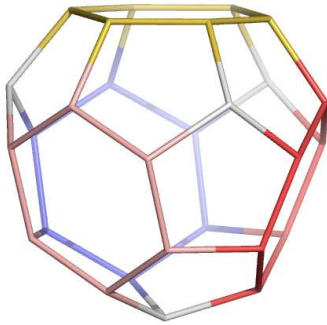
```

indekse. Takođe smo primetili izuzetnu korelaciju tačke ključanja BP sa stepen-rastojanje indeksom $R^2 = 0.91$, što je najbolji jednostavan model koji se pojavio u literaturi [1, 2].

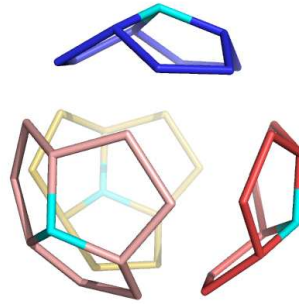
8.6 Dalja istraživanja

U ovom delu, razmatrali smo diskriminativnu sposobnost novog super indeksa koji je baziran na omotač matricama i polinomima. U istraživanju smo koristili nekoliko skupova atomskih i sintetičkih struktura (izomera) i dobili smo da CJN indeks razlikuje sve posmatrane grafove. U pogledu postojanja ogromnog broja topoloških indeksa i činjenice da su skoro svi degenerativne prirode, ovo je izuzetan rezultat koji bi trebalo dalje analizirati na drugim skupovima mreža. Takođe, moguće je dalje razvijanje indeksa sličnih Cluj – Niš indeksu i posmatrati njihove korelacione osobine. Drugi važan aspekt koji bi trebalo istaći se odnosi na istraživanje raznih klasa molekularnih mreža (na primer malih bioloških mreža) i analiziranje mogućnosti za jedinstvenu klasifikaciju. Na osnovu rezultata prikazanih u ovom radu, CJN indeks deluje kao odgovarajući kandidat zbog njegove osetljivosti na male promene u strukturi unutar mreže. Ova osobina je potrebna kod ispitivanja raznih svojstava mreža, koje često mogu da budu pogrešne [84]. Naravno, kako bi ovaj problem dublje istražili i dokazali ovu hipotezu potrebne su naprednije i detaljnije studije.

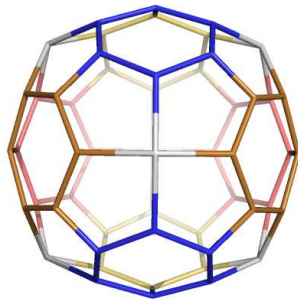
(a) $S_2(T)$; $v = 21$



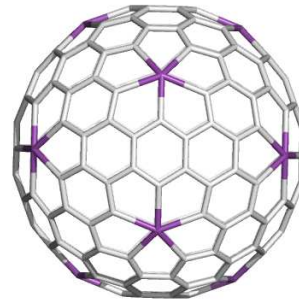
(b) $Trs(Du(Med(Le(T))))$; $v = 40$



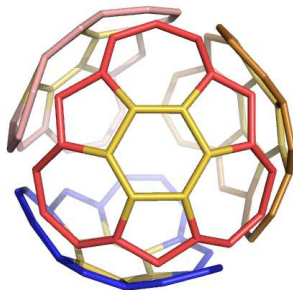
(a) $S_2(Oct)$; $v = 54$



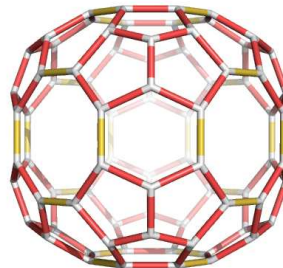
(b) $Trs(Du(Med(Le(Do))))$; $v = 192$



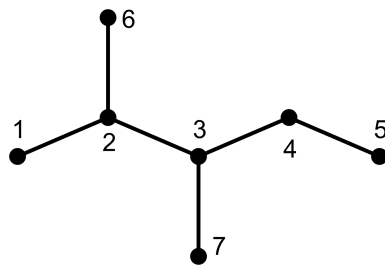
(a) Korazen; $v = 96$



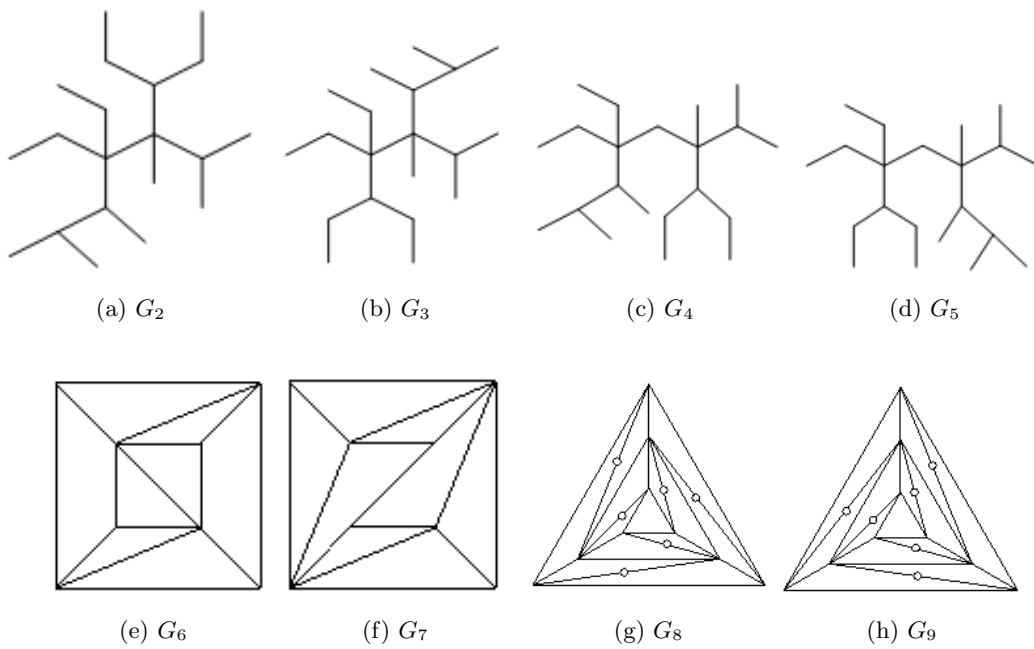
(b) $Trs(Du(Med(Le(Oct))))$; $v = 80$



Slika 8.3: Kavezi sa (a) spojenim f_5 oblastima i izolovanim f_{even} i (b) razdvojene f_5 oblasti; kavez u donjem desnom uglu ima 3 ops ciklusa.



Slika 8.4: Graf G_1 .



Slika 8.5: Parovi grafova sa degenerativnim svojstvima.

Glava 9

Konstrukcija hamiltonovih grafova sa ograničenim Δ i D

Neka je G prost graf sa dijametrom D . *Hamiltonov ciklus* je ciklus koji sadrži svaki čvor u grafu tačno jednom. Graf G je *1-hamiltonov* ako posle brisanja proizvoljnog čvora ili grane, i dalje ostaje hamiltonov. 1-hamiltonov graf G je *optimalan* ako sadrži najmanji broj grana među svim 1-hamiltonovim grafovima sa istim brojem čvorova kao i G .

Mreže sa bar jednim hamiltonovim ciklusom se zovu mreže sa petljama (eng. loop networks). Distribuirane mreže sa petljama su proširenja mreža sa strukturom prstena i intenzivno se koriste u dizajniranju i implementaciji lokalnih mreža i u paralelnoj arhitekturi računara. Postoji nekoliko uzajamno isključivih zahteva za dizajniranje topologija kompjuterskih mreža. Na primer, nikoja dva procesora ne smeju biti suviše udaljena u cilju podržavanja efikasnog izvršavanja paralelnih zahteva za obradu. Takođe, osobina hamiltonosti je takođe jedan od glavnih zahteva. Metod prosleđivanja tokena (eng. token passing method) je metod pristupa kanalu gde se podaci prosleđuju sekvencijalno u prstenu od jednog procesora do drugog sa kontrolnim tokenom koji određuje procesor sa trenutnom kontrolom nad kanalom.

Jedan od otvorenih problema u preglednom članku Bermonda i drugih [22] o distribuiranim mrežama sa petljama je sledeći:

Problem 9.0.1 *Dizajnirati hamiltonovu mrežu, koja je Δ -regularna sa n čvorova i dijametra reda $O(\log n)$.*

Ovaj problem je povezan sa čuvenim stepen-dijametar problemom u kome želimo da nađemo najveći mogući broj čvorova $n_{\Delta,D}$ grafa G koji ima dijametar D i najveći stepen Δ . Broj čvorova grafa G je ograničen *Murovom granicom*,

$$n_{\Delta,D} \leq 1 + \Delta + \Delta(\Delta - 1) + \Delta(\Delta - 1)^2 + \dots + \Delta(\Delta - 1)^{D-1}.$$

Za $D > 1$ i $\Delta > 2$ samo Petersenov graf, Hoffman-Singleton graf i možda graf dijametra $D = 2$ i stepena $\Delta = 57$ dostižu Murovu granicu. Generalno, najveći stepen-dijametar grafovi su mnogo manji od ove granice (za pregledni članak i druge rezultate videti [192]).

Harary i Hayes [122] su prezentovali familiju optimalnih 1-hamiltonovih planarnih grafova sa n čvorova. Wang, Hung i Hsu [242] su dizajnirali drugu familiju optimalnih 1-hamiltonovih grafova, koja sadrži planarne, hamiltonove, kubne grafove dijametra $O(\sqrt{n})$. U literaturi se javljaju još tri familije kubnih, planarnih i optimalnih 1-hamiltonovih grafova sa dijametrom $O(\log n)$. Ove konstrukcije su moguće samo za specijalne vrednosti broja n , kao što je opisano u Tabeli 9.1.

Najbolje konstrukcije kubnih grafova imaju dijametar $1.413 \log_2 n$ (videti [32]). Bollobás i Chung su dokazali u [24] da kubni graf koji se dobija dodavanjem proizvoljnog savršenog uparivanja ciklusu sa n čvorova ima dijametar reda $O(\log n)$. U istom radu, autori su dali sledeći rezultat

Referenca	Ime	n	D	Komentar
Wang i drugi [243]	Eye graph	$6 \cdot 2^s - 6$	$O(\log n)$	3-povezan
Hung i drugi [135]	Christmas tree	$3 \cdot 2^s - 2$	$2s$	hamiltonski povezan
Kao i drugi [164]	Brother tree	$6 \cdot 2^s - 4$	$2s + 1$	bipartitan

 Tabela 9.1: Familije 1-hamiltonovih grafova dijametra $O(\log n)$.

Teorema 9.0.2 *Neka je T kompletno binarno stablo sa $2^k - 1$ čvorova. Ako konstruišemo dva proizvoljna uparivanja veličine 2^{k-2} listova stabla T , tada rezultujući graf ima dijаметar D za koji važi*

$$\log_2 n - 10 \leq D(G) \leq \log_2 n + \log_2 \log_2 n + 10$$

sa verovatnoćom koja teži 1 kada n teži beskonačnosti.

U [214] je dokazano da su skoro svi k -regularni grafovi hamiltonovi za svako $k \geq 3$ analizom raspodele 1-faktora u slučajnom regularnom grafu.

U ovom delu predlažemo algoritam za konstrukciju hamiltonovih grafova sa n čvorova, maksimalnog stepena Δ i dijametra koji je ograničen sa

$$D \leq 2 \cdot \lceil \log_{\Delta-1} n \rceil.$$

Naš glavni doprinos je osiguravanje dijametra reda $O(\log_{\Delta-1} n)$ za svako n , ne samo za specijalne vrednosti, dok se hamiltonost i mali dijаметar dostižu korišćenjem znatno manje grana.

U sledećoj sekciji opisujemo linearan algoritam za konstrukciju traženih mreža. Zatim posvećujemo posebnu pažnju slučaju $\Delta = 3$ i poboljšavamo gornju granicu za broj grana u rezultujućem grafu na $\lfloor \frac{11n+6}{8} \rfloor$. Sličan pristup se može primeniti i za slučajeve $\Delta > 3$ i time dobijamo hamiltonov graf sa prosečnim stepenom asimptotski jednakim $4 - \frac{4}{\Delta-1}$. Na kraju, pokazujemo da se algoritam može modifikovati tako da konstruiše planaran hamiltonov graf sa maksimalnim stepenom Δ i dijametrom najviše $2\lceil \log_2 n \rceil$ i prikazujemo neke eksperimentalne rezultate za dijаметar kada je $\Delta = 3$.

9.1 Algoritam i korektnost

Kompletno binarno stablo je stablo sa n nivoa, gde za svaki nivo $d \leq n - 1$ važi da je broj čvorova na nivou d jednak 2^d . To znači da postoje svi mogući čvorovi na ovim nivoima. Dodatni uslov za kompletno binarno stablo je da za poslednji n -ti nivo, iako svi čvorovi ne moraju da postoje, čvorovi koji postoje moraju popunjavati nivo sleva udesno (za više detalja videti [43]). Kompletno binarno stablo je jedna od najvažnijih arhitektura kompjuterskih mreža [179].

Generalizacija binarnih stabala su Δ -arna stabla. Naime, svaki čvor ima najviše $\Delta - 1$ direktnih potomaka, ali svi čvorovi koji nisu u poslednjem nivou imaju tačno $\Delta - 1$ direktnih potomaka. Svi čvorovi na poslednjem nivou moraju zauzimati mesta uzastopno sleva udesno.

Predlažemo sledeći algoritam za konstrukciju hamiltonovih grafova sa n čvorova, maksimalnim stepenom Δ i dijametra $\leq 2\log_{\Delta-1} n$. Prvo konstruišemo kompletno Δ -arno stablo sa n čvorova, i za svaki čvor pamtimo njegov stepen, roditelja i sve direktne potomke sleva udesno. Obeleženo Δ -arno stablo sadrži labele od 1 do n , gde je koren obeležen sa 1, od koga grane vode do čvorova $2, 3, \dots, \Delta$, zatim do čvorova u drugom nivou $\Delta + 1, \Delta + 2, \dots, (\Delta - 1)(\Delta - 1) + \Delta$, i tako dalje. Takođe održavamo i red svih listova u stablu.

Čvorove obilazimo u redosledu kako i formiraju hamiltonov ciklus. Polazni čvor je koren stabla. Prvo pokušavamo da idemo uz stablo nagore preko roditelja trenutnog čvora; ako je roditelj već obišen, tada biramo jednog direktnog neobišenog potomka. U slučaju da su svi susedi trenutnog čvora markirani, biramo slučajan nemarkirani list i dodajemo granu koja povezuje ova dva čvora.

Algoritam 6: Konstrukcija hamiltonovog super-grafa od kompletnog Δ -arnog stabla

Ulaz: Δ -arno korensko stablo sa n čvorova.

Izlaz: Hamiltonov ciklus u nizu *cycle*, gde je m ukupan broj dodatih grana.

```
1  $v = root$ ;  
2  $k = 1$ ;  
3  $m = n - 1$ ;  
4 while  $k \leq n$  do  
5    $cycle[k] = v$ ;  
6    $mark[v] = true$ ;  
7   if  $parent[v]$  nije markiran then  
8      $v = parent[v]$ ;  
9   else if postoji direktan potomak u koji nije markiran then  
10     $v = u$ ;  
11  else  
12    Neka je  $u$  slučajan nemarkiran list;  
13    Dodaj granu  $(v, u)$ ;  
14     $m = m + 1$ ;  
15     $v = u$ ;  
16  end  
17   $k = k + 1$ ;  
18 end  
19 Dodaj granu  $(v, root)$ ;  
20  $m = m + 1$ ;
```

Teorema 9.1.1 Graf konstruisan ovim algoritmom je hamiltonov.

Dokaz. Glavna ideja algoritma je obilazak hamiltonovog puta dodavanjem grana kada je to potrebno. Na kraju, spajamo poslednji čvor sa korenom binarnog stabla. U stablu može postojati najviše jedan čvor koji nije koren sa stepenom većim od 1 i manjim od Δ – neka je to čvor s . Sve grane koje dodajemo tokom izvršavanja algoritma povezuju ili dva lista ili list i čvor s . Zbog simetrije, čvor s možemo eliminisati prolaskom od korena do s u prvih nekoliko koraka algoritma. Dakle, na kraju algoritma dobijeni graf ima maksimalni stepen Δ .

Ne možemo posetiti ni jedan čvor dva puta, pa još treba dokazati da ćemo markirati sve čvorove. Pretpostavimo da čvor v nije markiran i da je algoritam završen. Ako je bilo koji čvor iz njegovog podstabla markiran i običen, tada bi svakako posetili v , jer prvo pokušavamo da idemo nagore. Prema tome, svi čvorovi u podstablu sa korenom v su nemarkirani. Kako u tom podstablu postoji bar jedan list, mi moramo posetiti taj list tokom izvršavanja algoritma. Ovo je kontradikcija, pa je konstruisani graf zaista hamiltonov. ■

Dijametar ovog grafa je manji ili jednak od dvostruke dubine stabla,

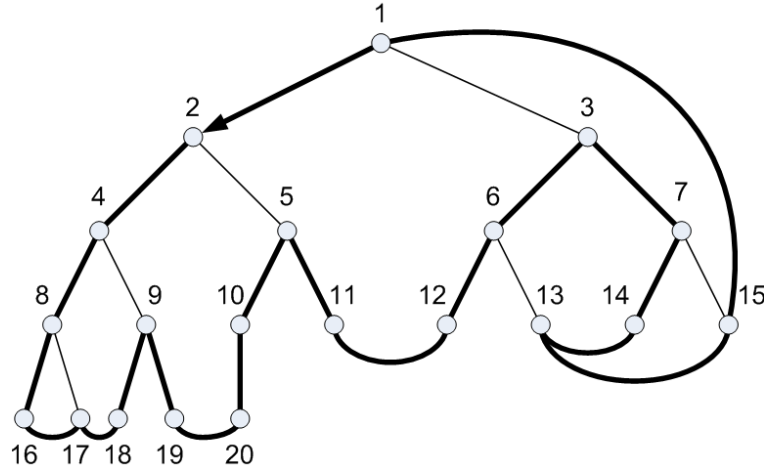
$$D(G) \leq 2 \cdot \lfloor \log_{\Delta-1} n \rfloor.$$

Lema 9.1.2 Broj listova $L(n)$ u kompletnom Δ -arnom stablu je

$$L(n) = \begin{cases} n - \lfloor \frac{n}{\Delta-1} \rfloor, & \text{ako } n \equiv 1 \pmod{\Delta-1} \\ n - 1 - \lfloor \frac{n}{\Delta-1} \rfloor, & \text{ako } n \not\equiv 1 \pmod{\Delta-1} \end{cases}$$

Dokaz. Očigledno je $L(1) = 1$ i $L(k) = k - 1$ za $k = 2, 3, \dots, \Delta - 1$. Kada god adekvatno dodamo $\Delta - 1$ čvorova ovom stablu, uvek dodajemo tačno $\Delta - 2$ novih listova, pa imamo sledeću rekurentnu relaciju za broj listova

$$L(n) = L(n - \Delta + 1) + \Delta - 2.$$



Slika 9.1: Primer izvršenja algoritma za graf sa parametrima $n = 20$ i $\Delta = 3$.

Sada po matematičkoj indukciji, eksplicitna formula za $L(n)$ direktno sledi. ■

Teorema 9.1.3 *Broj grana u konstruisanom grafu je manji od $(2 - \frac{1}{\Delta-1})n + \frac{\Delta-3}{2}$.*

Dokaz. Δ -regularan graf sadrži tačno $\frac{n\Delta}{2}$ grana. Unutrašnji čvorovi u Δ -arnom stablu su čvorovi sa stepenom koji je veći od 1. Po izvršenju algoritma, svaki list će imati stepen najviše tri i svaki unutrašnji čvor će imati stepen najviše Δ . Time dobijamo gornju granicu za broj grana u hamiltonovom grafu koji je dobijen predloženim algoritmom:

$$\begin{aligned} |E| &< \frac{n\Delta}{2} - \frac{\Delta-3}{2} \left(n - \left\lfloor \frac{n}{\Delta-1} \right\rfloor - 1 \right) \\ &\leq \frac{3n}{2} + \frac{\Delta-3}{2} \left(\frac{n}{\Delta-1} + 1 \right) \\ &= \left(2 - \frac{1}{\Delta-1} \right) n + \frac{\Delta-3}{2}. \end{aligned}$$

■

Ova granica je manja od $\frac{5n}{3}$ za $\Delta = 4$, i manja od $2n$ za $\Delta > 4$ kada je dubina stabla veća od dva. Na osnovu ovih činjenica imamo sledeću

Teorema 9.1.4 *Vremenska i memorijska složenost predloženog algoritma je linearna $O(n)$.*

9.2 Broj dodatih grana za $\Delta = 3$

Kubni grafovi su od specijalnog interesa za topologije mreža i zbog njihove važnosti u ovom delu poboljšavamo prethodne procene za broj grana koje dodajemo u konstrukciji za slučaj $\Delta = 3$.

Posmatrajmo prvo grafove sa $n = 2^{k+1} - 1$ čvorova, gde je $k \geq 1$. Odgovarajuće kompletno binarno stablo ima popunjen poslednji nivo sa 2^k listova. Neka je $f(k)$ broj dodatnih grana kada algoritam startujemo polazeći od proizvoljnog lista u stablu i kada završavamo u drugom listu. Lako se može proveriti da važi $f(1) = 0$ i $f(2) = 2$. Zbog potpunosti definišimo $f(0) = 0$. Po obilasku čvorova nagore do korena, a zatim nadole do proizvoljnog lista, graf indukovani neposećenim

čvorovima je sastavljen od disjunktih kompletnih binarnih stabala sa visinama $0, 1, \dots, k-2$. Time dobijamo sledeću rekurentnu formulu:

$$f(k) = 2(k-1) + 2 \cdot \sum_{i=0}^{k-2} f(i).$$

Koristeći matematičku indukciju, dokazaćemo sledeće:

$$f(k) = \begin{cases} \frac{2}{3}(2^k - 1), & \text{ako je } k \text{ parno} \\ \frac{3}{3}(2^k - 2), & \text{ako je } k \text{ neparno.} \end{cases}$$

Pretpostavimo da formula važi za sve brojeve $m < 2k$, i sada ćemo je pokazati za $2k$ i $2k+1$.

$$\begin{aligned} f(2k) &= 2(2k-1) + 2 \cdot \sum_{i=0}^{k-1} f(2i) + 2 \cdot \sum_{i=1}^{k-1} f(2i-1) \\ &= 4k - 2 + \frac{4}{3} \cdot \sum_{i=0}^{2k-2} 2^i - \frac{4}{3} \cdot (3k-2) = \frac{2}{3} \cdot (2^{2k} - 1). \\ f(2k+1) &= 2(2k+1-1) + 2 \cdot \sum_{i=0}^{k-1} f(2i) + 2 \cdot \sum_{i=1}^k f(2i-1) \\ &= 4k + \frac{4}{3} \cdot \sum_{i=0}^{2k-1} 2^i - \frac{4}{3} \cdot 3k = \frac{2}{3} \cdot (2^{2k+1} - 2). \end{aligned}$$

Da bi procenili stvarni broj dodatih grana u predloženom algoritmu moramo startovati od korena i dodati novu granu na kraju koja povezuje koren i poslednji obiđeni čvor. Posle prvog lista na putu od korena, neobiđeni čvorovi formiraju disjunktna kompletna binarna stabla sa visinama $0, 1, 2, \dots, k-2$ i $k-1$. Dakle, ukupan broj grana koje ćemo dodati je:

$$f(0) + f(1) + \dots + f(k-1) + k = \frac{f(k+1)}{2} = \left\lfloor \frac{n}{3} \right\rfloor.$$

Dakle, dokazali smo sledeći rezultat.

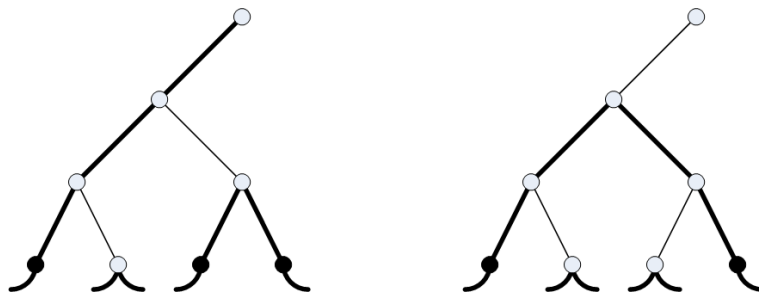
Teorema 9.2.1 Broj dodatih grana u slučaju kompletnog binarnog stabla sa $2^{k+1} - 1$ čvorova ne zavisi od slučajnog biranja listova u algoritmu i on iznosi $\frac{f(k+1)}{2}$. ■

Pretpostavimo sada da n nije oblika $2^{k+1} - 1$.

Teorema 9.2.2 Za svaki $n \in \mathbb{N}$, postoji hamiltonov graf sa dijametrom najviše $2 \lfloor \log_2 n \rfloor$, maksimalnim stepenom 3 i sa najviše $\lfloor \frac{11n}{8} + \frac{3}{4} \rfloor$ grana.

Dokaz. Broj listova u odgovarajućem binarnom stablu sa n čvorova iznosi $\lfloor \frac{n}{2} \rfloor$. Neki od listova su na poslednjem nivou, a neki na preposlednjem. Posmatrajmo uzastopne listove u poslednjem nivou počevši sleva i grupišimo ih u grupe od po četiri. Time dobijamo podstabla visine dva i na kraju mogu ostati najviše tri neuparena lista. Možemo da uradimo istu stvar za listove sa prethodnog nivoa, ali polazeći zdesna nalevo.

Dakle, broj podstabala visine dva je manji ili jednak od $\frac{n}{8}$ i veći od $\frac{n-2 \cdot 3}{8}$. Na osnovu dva slučaja sa Slike 9.2, mogu postojati dva ili tri lista u svakom od ovih podstabala koja će dobiti i održati stepen dva do kraja algoritma. Dakle, broj grana koje ne treba dodati je jednak polovini broja čvorova stepena dva, i ovaj broj se nalazi između $\frac{n}{8} - \frac{3}{4}$ i $\frac{3n}{16}$. Najzad, ukupan broj grana u konstruisanom grafu po izvršenju algoritma će biti između $\lfloor \frac{21n}{16} \rfloor$ i $\lfloor \frac{11n}{8} + \frac{3}{4} \rfloor$. ■



Slika 9.2: Dva slučaja za podstabla visine dva.

Primedba 9.2.3 *Kada je hamiltonov ciklus konstruisan, možemo dodati grane u graf tako da graf postane kubni (ukoliko je n parno).*

Za slučaj $\Delta > 3$, možemo konstruisati hamiltonov graf sa najviše

$$\left(2 - \frac{1}{\Delta - 1} - \frac{(\Delta - 2)^2}{(\Delta - 1)^3}\right)n + \frac{\Delta - 3}{2} + 2(\Delta - 2)$$

grana. Sličan pristup se može primeniti na kompletna binarna podstabla sa većom visinom i dobiti bolje procene za ukupan broj grana.

9.3 Dalja poboljšanja i analize

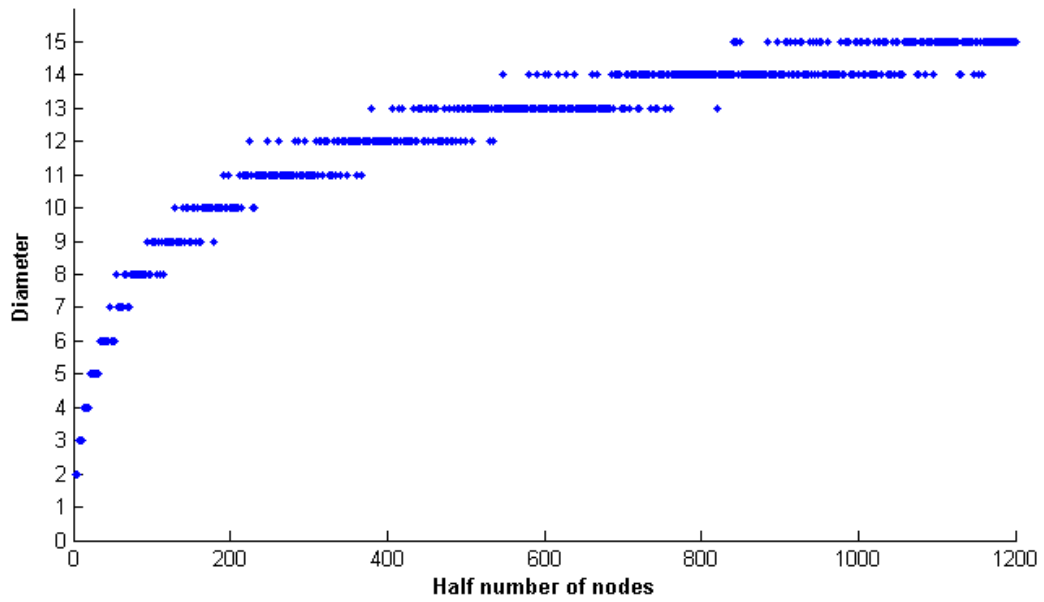
Predloženi algoritam se može modifikovati za konstrukciju planarnog hamiltonovog grafa dijametra manjeg ili jednakog od $2 \cdot \lceil \log_{\Delta-1} n \rceil$.

Teorema 9.3.1 *Adekvatnim izborom potomaka i neobiđenih listova u algoritmu, možemo osigurati planarnost konstruisanog grafa.*

Dokaz. Da bi dokazali teoremu, konstruisaćemo hamiltonov put koji polazi od čvora koji se nalazi skroz levo i završava se u najbližem listu (susednom listu ili listu koji je na rastojanju tri od njega). Za male vrednosti broja n , ovo se može lako potvrditi. U generalnom slučaju, prvo idemo nagore do korena stabla, a zatim do lista koji se nalazi skroz desno. Sada je Δ -arno stablo partitionisano na manja stabla, koja će biti obidena indukcijom sleva udesno. Ova binarna stabla nemaju zajedničkih čvorova, pa možemo nezavisno dodavati nove grane koje ne seku već postojeće. Time smo redukovali problem na prethodni, pošto imamo disjunktna stabla koja obilazimo polazeći od listova. Na kraju dodajemo zadnju granu bez problema sa presecanjem grana (kao na Slici 9.1). ■

Za slučaj $\Delta = 3$, u našoj implementaciji smo uvek birali list koji je najudaljeniji od trenutnog lista. Ova heuristika je odrađena koristeći pretragu u širinu (eng. breadth first search). Memorijska složenost je linearna $O(n)$, jer koristimo samo tri niza dužine n . Vremenska složenost je takođe $O(n)$, jer je broj grana $m \leq \frac{3n}{2} = O(n)$. Dijametri kubnih grafova konstruisanih ovim algoritmom su prikazani na Slici 9.3, gde se na x osi nalazi polovina broja čvorova $n/2$. Očigledno je sa ovog grafika da je konstanta 2 iz gornje granice daleko od najbolje moguće.

Umesto slučajnog biranja listova, možemo to raditi mnogo sofisticiranije i dalje redukovati dijametar grafa. Jedan od mogućih načina je dodavanje uparivanja koje povezuje samo listove na zadnjem nivou u dva podstabla korena. Tada možemo i dalje primeniti algoritam, ali kada biramo slučajan čvor za nastavak – prvo proverimo da li je upareni list markiran. Time smanjujemo dijametar za konstantu, koja je bar 2. Za neka dalja istraživanja ostavljamo konstrukciju 1-optimalnih ili 1-granski hamiltonovih grafova pomoću sličnog algoritma.



Slika 9.3: Veličina dijametra za $n = 4$ do $n = 2400$ i $\Delta = 3$.

Glava 10

Prilozi

10.1 Householderova metoda za određivanje sopstvenih vrednosti

Neka je A realna simetrična matrica dimenzija $n \times n$. Householderova metoda se koristi za konstrukciju slične trodijagonalne matrice, a zatim se primenjuje QR metoda za nalaženje sopstvenih vrednosti i sopstvenih vektora ove matrice. U ovoj konstrukciji se koriste rotacije slične onima iz Jakobijevog iterativnog metoda za određivanje ortogonalnih matrica i sopstvenih vrednosti. Svaka transformacija u Jakobijevoj metodi postavlja dva nedijagonalna elementa na nulu, ali sledeće iteracije ih mogu vratiti na brojeve veće od nule. Zato ovde koristimo metodu koja postavlja nekoliko nula van glavne dijagonale, koji ostaju nule u sledećim iteracijama [248].

Teorema 10.1.1 (Householderova refleksija) *Neka su \mathbf{x} i \mathbf{y} vektori iste norme. Tada postoji ortogonalna simetrična matrica $P = P^{-1}$, tako da važi $\mathbf{y} = P \cdot \mathbf{x}$, gde je*

$$P = I - 2W \cdot W^{\top} \quad i \quad W = \frac{\mathbf{x} - \mathbf{y}}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|}.$$

Teorema 10.1.2 (Householderova matrica) *Neka je A realna simetrična matrica i \mathbf{x} proizvoljan vektor. Ako je k ceo broj, $1 \leq k \leq n - 2$, tada možemo konstruisati vektor W_k i matricu $P_k = I - 2W_k W_k^{\top}$, tako da važi*

$$P_k \cdot \mathbf{x} = P_k \cdot [x_1, x_2, \dots, x_k, x_{k+1}, x_{k+2}, \dots, x_n]^{\top} = P_k \cdot [x_1, x_2, \dots, x_k, -S, 0, \dots, 0]^{\top} = \mathbf{y}.$$

Ovde je ključna ideja definisanje vrednosti $S = \operatorname{sgn}(x_{k+1}) \sqrt{x_{k+1}^2 + x_{k+2}^2 + \dots + x_n^2}$.

Polazimo sa $A_0 = A$ i konstruišemo niz Householderovih matrica, tako da važi

$$A_k = P_k \cdot A_{k-1} \cdot P_{k-1}, \quad \text{za } k = 1, 2, \dots, n - 2,$$

gde matrica A_k ima nule ispod glavne dijagonale u kolonama $1, 2, \dots, k$. Tada je A_{n-2} simetrična trodijagonalna matrica slična sa A . Ovaj proces se zove Householderova metoda. Rezultujuću trodijagonalnu matricu pamtimo sa dva niza dužina n i $n - 1$.

Dalje primenjujemo QR faktorizaciju $A = QR$, gde je Q ortogonalna matrica i R gornja trougaona matrica. Za simetrične trodijagonalne matrice postoji efikasnija metoda za faktorizaciju (videti LAPACK implementaciju <http://www.netlib.org/lapack/>). Naime, primenjujemo seriju ortogonalnih transformacija Q_i na trodijagonalnu matricu A tako da ona konvergira ka dijagonalnoj matrici (koja ima iste sopstvene vrednosti kao i A). Proizvod svih transformacija $Q_1 Q_2 \dots Q_n$ je matrica čije kolone sadrže sopstvene vektore matrice A . Određivanje QR faktorizacije simetrične trodijagonalne matrice je složenosti $O(n)$.

```
public class Eigenvalues {
    private int n;

    /** Arrays for internal storage of eigenvalues. */
    private double[] diagonal, subdiag;

    /** Array for internal storage of eigenvectors. */
    private double[][] V;

    /** sqrt(a^2 + b^2) without under/overflow. */
    public static double hypot(double a, double b)
    {
        double r;
        if (Math.abs(a) > Math.abs(b))
        {
            r = b / a;
            r = Math.abs(a) * Math.sqrt(1+r*r);
        }
        else if (b != 0)
        {
            r = a / b;
            r = Math.abs(b) * Math.sqrt(1+r*r);
        }
        else
            r = 0.0;
        return r;
    }

    // Symmetric Householder reduction to tridiagonal form.
    private void householder ()
    {
        for (int j = 0; j < n; j++)
            diagonal[j] = V[n-1][j];

        // Householder reduction to tridiagonal form.
        for (int i = n-1; i > 0; i--)
        {
            // Scale to avoid under/overflow.
            double scale = 0.0;
            double h = 0.0;
            for (int k = 0; k < i; k++)
                scale = scale + Math.abs(diagonal[k]);
            if (scale == 0.0)
            {
                subdiag[i] = diagonal[i-1];
                for (int j = 0; j < i; j++)
                {
                    diagonal[j] = V[i-1][j];
                    V[i][j] = 0.0;
                    V[j][i] = 0.0;
                }
            }
            else
            {
                // Generate Householder vector.
                for (int k = 0; k < i; k++)
                {
                    diagonal[k] /= scale;
                    h += diagonal[k] * diagonal[k];
                }
                double f = diagonal[i-1];
                double g = Math.sqrt(h);
                if (f > 0)

```

```

        g = -g;
        subdiag[i] = scale * g;
        h = h - f * g;
        diagonal[i-1] = f - g;
        for (int j = 0; j < i; j++)
            subdiag[j] = 0.0;

// Apply similarity transformation to remaining columns.
for (int j = 0; j < i; j++)
{
    f = diagonal[j];
    V[j][i] = f;
    g = subdiag[j] + V[j][j] * f;
    for (int k = j+1; k <= i-1; k++)
    {
        g += V[k][j] * diagonal[k];
        subdiag[k] += V[k][j] * f;
    }
    subdiag[j] = g;
}
f = 0.0;
for (int j = 0; j < i; j++)
{
    subdiag[j] /= h;
    f += subdiag[j] * diagonal[j];
}
double hh = f / (h + h);
for (int j = 0; j < i; j++)
    subdiag[j] -= hh * diagonal[j];

for (int j = 0; j < i; j++)
{
    f = diagonal[j];
    g = subdiag[j];
    for (int k = j; k <= i-1; k++)
    {
        V[k][j] -= (f * subdiag[k] + g * diagonal[k]);
    }
    diagonal[j] = V[i-1][j];
    V[i][j] = 0.0;
}
}
diagonal[i] = h;
}

// Accumulate transformations.
for (int i = 0; i < n-1; i++)
{
    V[n-1][i] = V[i][i];
    V[i][i] = 1.0;
    double h = diagonal[i+1];
    if (h != 0.0)
    {
        for (int k = 0; k <= i; k++)
            diagonal[k] = V[k][i+1] / h;
        for (int j = 0; j <= i; j++)
        {
            double g = 0.0;
            for (int k = 0; k <= i; k++)
            {
                g += V[k][i+1] * V[k][j];
            }
            for (int k = 0; k <= i; k++)

```

```

        {
            V[k][j] -= g * diagonal[k];
        }
    }
}
for (int k = 0; k <= i; k++)
    V[k][i+1] = 0.0;
}
for (int j = 0; j < n; j++)
{
    diagonal[j] = V[n-1][j];
    V[n-1][j] = 0.0;
}
V[n-1][n-1] = 1.0;
subdiag[0] = 0.0;
}

// Symmetric tridiagonal QL algorithm.
private void diagonalize ()
{
    for (int i = 1; i < n; i++)
        subdiag[i-1] = subdiag[i];
    subdiag[n-1] = 0.0;

    double f = 0.0;
    double tst1 = 0.0;
    double eps = Math.pow(2.0,-52.0);
    for (int l = 0; l < n; l++)
    {
        // Find small subdiagonal element
        tst1 = Math.max(tst1,Math.abs(diagonal[l]) + Math.abs(subdiag[l]));
        int m = l;
        while (m < n)
        {
            if (Math.abs(subdiag[m]) <= eps*tst1)
                break;
            m++;
        }

        // If m == l, d[l] is an eigenvalue, otherwise iterate.
        if (m > l)
        {
            int iter = 0;
            do
            {
                iter = iter + 1;
                // Compute implicit shift
                double g = diagonal[l];
                double p = (diagonal[l+1] - g) / (2.0 * subdiag[l]);
                double r = hypot(p,1.0);
                if (p < 0)
                    r = -r;
                diagonal[l] = subdiag[l] / (p + r);
                diagonal[l+1] = subdiag[l] * (p + r);
                double dl1 = diagonal[l+1];
                double h = g - diagonal[l];
                for (int i = l+2; i < n; i++)
                    diagonal[i] -= h;
                f = f + h;

                // Implicit QL transformation.
                p = diagonal[m];
                double c = 1.0;

```

```

    double c2 = c;
    double c3 = c;
    double e11 = subdiag[l+1];
    double s = 0.0;
    double s2 = 0.0;
    for (int i = m-1; i >= 1; i--)
    {
        c3 = c2;
        c2 = c;
        s2 = s;
        g = c * subdiag[i];
        h = c * p;
        r = hypot(p,subdiag[i]);
        subdiag[i+1] = s * r;
        s = subdiag[i] / r;
        c = p / r;
        p = c * diagonal[i] - s * g;
        diagonal[i+1] = h + s * (c * g + s * diagonal[i]);

        // Accumulate transformation.
        for (int k = 0; k < n; k++)
        {
            h = V[k][i+1];
            V[k][i+1] = s * V[k][i] + c * h;
            V[k][i] = c * V[k][i] - s * h;
        }
    }
    p = -s * s2 * c3 * e11 * subdiag[l] / d11;
    subdiag[l] = s * p;
    diagonal[l] = c * p;

    // Check for convergence.
}
while (Math.abs(subdiag[l]) > eps * tst1);
}
diagonal[l] = diagonal[l] + f;
subdiag[l] = 0.0;
}

// Sort eigenvalues and corresponding vectors.
for (int i = 0; i < n-1; i++)
{
    int k = i;
    double p = diagonal[i];
    for (int j = i+1; j < n; j++)
    {
        if (diagonal[j] < p)
        {
            k = j;
            p = diagonal[j];
        }
    }
    if (k != i)
    {
        diagonal[k] = diagonal[i];
        diagonal[i] = p;
        for (int j = 0; j < n; j++)
        {
            p = V[j][i];
            V[j][i] = V[j][k];
            V[j][k] = p;
        }
    }
}
}

```



```
    }
}

/** Constructor */
public Eigenvalues (double [][] A)
{
    n = A.length;
    V = new double[n][n];
    for (int i = 0; i < n; i++)
        for (int j = 0; j < n; j++)
            V[i][j] = A[i][j];

    diagonal = new double[n];
    subdiag = new double[n];
    householder ();
    diagonalize();
}

/** Return the eigenvector matrix */
public double [][] getV ()
{
    return V;
}

/** Return the eigenvalues */
public double[] getEigenvalues ()
{
    return diagonal;
}

public static double [][] genGraph (int n, double p)
{
    double [][] A = new double [n][n];

    for (int i = 0; i < n; i++)
    {
        A [i][i] = 0.0;
        for (int j = i + 1; j < n; j++)
            if (Math.random() < p)
            {
                A [i][j] = 1.0;
                A [j][i] = 1.0;
            }
            else
            {
                A [i][j] = 0.0;
                A [j][i] = 0.0;
            }
    }
    return A;
}

public static void main(String[] args)
{
    double [][] A = Eigenvalues.genGraph(50, 0.5);
    double [] eValues = new Eigenvalues (A).getEigenvalues();
    for (int i = 0; i < A.length; i++)
        System.out.println(eValues [i]);
}
}
```

10.2 MATHEMATICA kod za integralne cirkulantne grafove

```
(* Ramanujan's function *)  
c[i_,n_]:=MoebiusMu[n/GCD[i,n]]*(EulerPhi[n] /EulerPhi[n/GCD[i,n]]);
```

```
(* Calculating the energy of ICG *)
```

```
ICG [n_,Divs_]:=Module[  
  {i,j,L,energy,lambda},  
  energy=0;  
  L={};  
  For[i=1,i<=n,i++,  
    lambda=0;  
    For[j=1,j<=Length[Divs],j++,  
      lambda+=c[i,n/Divs[[j]]];  
    ];  
    energy+=Abs[lambda];  
    L=AppendTo[L,lambda];  
  ];  
  Print[energy," ",Mod[energy,4]];  
  Return[L];  
];
```

```
(* Generating all subsets *)
```

```
n=2*3*5;  
Divs=Divisors[n];  
S=Subsets[Divisors[n]];  
A={};  
For[i=1,i<=Length[S],i++,  
  d=n;  
  y=0;  
  For[j=1,j<=Length[S[[i]]],j++,  
    d=GCD[d,S[[i,j]]];  
    If[n==S[[i,j]],y=1];  
  ];  
  If[d==1&&y==0,  
    Print[S[[i]]];  
    Print[ICG[n,S[[i]]]];  
  ];  
];
```

```
(* Calculating distance matrix i distance energy *)
```

```
DICG[n_, Divs_] := Module[  
  {A, i, j, k, ZZ, DE, EE},  
  A = {};  
  For[i = 1, i <= n, i++,  
    AA = {};  
    For[j = 1, j <= n, j++,  
      ok = 0;  
      For[k = 1, k <= Length[Divs], k++,  
        If[GCD[Abs[i - j], n] == Divs[[k]],  
          ok = 1;  
          Break[];  
        ];  
      ];  
      If[ok == 1, AA = AppendTo[AA, 1], AA = AppendTo[AA, 0]];  
    ];  
  A = AppendTo[A, AA];  
  ];  
ZZ = Eigenvalues[A];  
EE = 0;  
For[i = 1, i <= n, i++,  
  EE = EE + Abs[ZZ[[i]]];  
];
```

```

(* FloydWarshall algorithm *)
DD = A;
For[k = 1, k <= n, k++,
  For[i = 1, i <= n, i++,
    If[DD[[i, k]] > 0,
      For[j = 1, j <= n, j++,
        If[DD[[k, j]] > 0,
          If[i != j,
            If[DD[[i, j]] == 0 ||
              DD[[i, j]] > DD[[i, k]] + DD[[k, j]],
              DD[[i, j]] = DD[[i, k]] + DD[[k, j]];
            ];
          ];
        ];
      ];
    ];
  ];
];

ZZ = Eigenvalues[DD];
DE = 0;
For[i = 1, i <= n, i++,
  DE = DE + Abs[ZZ[[i]]];
];
Print[Divs, " ", EE, " ", DE];
];

```

10.3 Korišćeni softver

U disertaciji su korišćeni razni programi za postavljanje hipoteza i proveravanje rezultata. Pomoćni programi su razvijani u programskim jezicima C^{++} i *Java* (nalaženje sopstvenih vrednosti, energija grafa, dijametra, uparivajućeg broja, matrice rastojanja, ekstremalnih grafova, itd).

10.3.1 AutoGraphiX

AGX je interaktivni softver dizajniran za pomoć u pronalaženju hipoteza u teoriji grafova. Njegov glavni prozor omogućuje biranje između nekoliko postojećih problema ili samostalno definisanje svog problema i pokretanje serije optimizacija za odabranu funkciju z . Interaktivni način rada ima vrlo jednostavan interfejs sa kojim se mogu dizajnirati grafovi, štampati vrednosti invarijanti, pronaći maksimalna klika, maksimalno uparivanje, itd. Takođe sadrži rezervnu (backup) funkciju koja omogućuje menjanje čvorova i grana bez gubljenja grafova.

Svi problemi koje AGX rešava se mogu izraziti kao parametarska optimizacija na konačnim familijama grafova, a nalaženje ekstremalnih tačaka se vrši metaheuristikom. AutoGraphiX (AGX) kompjuterski sistem je razvijan od strane GERAD grupe iz Montreala, koju predvodi Pierre Hansen [7, 8, 9, 35]. AGX koristi metaheuristiku "pretragu promenljivih okolina" (eng. Variable Neighborhood Search) [120, 121, 153] i metode pametne analize podataka za nalaženje ekstremalnih grafova u odnosu na jednu ili više invarijanti. Promenljive okoline se definišu dodavanjem, brisanjem ili zamenom grana, brisanjem visećeg čvora i sličnim transformacijama. AutoGraphiX sistem primenjuje VNS na postavljenu inicijalni problem različitim strategijama pretrage. Ako je $i(G)$ neka invarijanta grafa G ili formula koja uključuje nekoliko invarijanti, G_n skup grafova sa n čvorova, $G_{n,m}$ skup grafova sa n čvorova i m grana, AGX efikasno rešava sledeće probleme

$$\text{Min/Max } \{i(G) : G \in G_n\} \quad \text{ili} \quad \text{Min/Max } \{i(G) : G \in G_{n,m}\}.$$

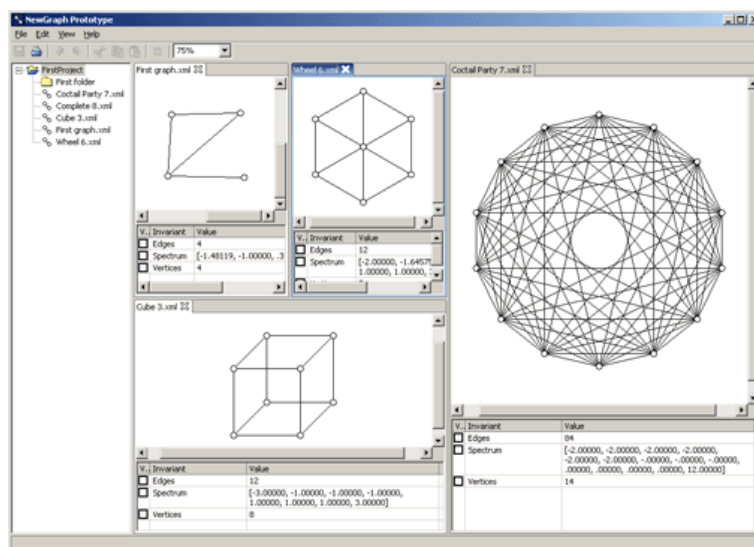
Poslednja faza je analiza dobijenih rezultata, prepoznavanje klasa i invarijanti i interaktivna vizualizacija grafova.

U poslednjih deset godina postoji serija radova koja se bavi različitim grafovskim invarijantama i dobijenih hipoteza pomoću programa AGX: prosek rastojanja, najveća sopstvena vrednost matrice susedstva i Laplasove matrice, Randić indeks, poređenje Zagrebačkih indeksa, itd. Takođe AGX sadrži tri metode za automatizovano postavljanje i opovrgavanje hipoteza. Softver se besplatno može prevući sa adrese <http://www.gerad.ca/~agx/>.

10.3.2 newGRAPH

newGRAPH je integrisano okruženje za pomoć u istraživanjima u teoriji grafova. Njegova svrha je podrška korisniku da postavi i potvrdi ili opovrgne hipoteze, eksperimentiše sa grafovima, ali može služiti i u edukativne svrhe. Ovo je nova verzija programa GRAPH koju su razvijali Dragoš Cvetković i Slobodan Simić, dok ekipu za newGRAPH čine Vladimir Brankov, Dragan Stevanović i Marko Milošević. Softver se besplatno može prevući sa adrese <http://www.mi.sanu.ac.rs/newgraph/>.

Iznad svega, newGRAPH je modularan i adaptivan, tako da može zadovoljiti potrebe svakog istraživača. Korišćenjem koncepta "plug-in" dodataka i spoljašnjih biblioteka, korisnik može pisati nove grafovske invarijante, generatore grafova ili uvesti postojeće dodatke.



Slika 10.1: Okruženje newGRAPH.

10.3.3 nauty

Nauty je program dizajniran za računanje grupe automorfizama grafova i digrafova [189]. Takođe može služiti za kanonsko označavanje i generisanje neizomorfni grafova uz različita ograničenja. Brendan McKay je implementirao prvu verziju u jeziku C koji radi na različitim operativnim sistemima. U disertaciji smo koristili stabla do 22 čvorova, unicyklične grafove do 20 čvorova, bipartitne grafove do 16 čvorova, grafove do 10 čvorova, itd. koji su generisani pomoću geng programa iz paketa nauty. Softver se besplatno može prevući sa adrese <http://cs.anu.edu.au/~bdm/nauty/>.

Glava 11

Zaključak

U ovoj disertaciji grafovi se izučavaju koristeći invarijante bazirane na sopstvenim vrednostima matrice susedstva, Laplasove matrice i matrice rastojanja. Spektri grafova imaju značajne primene kod pretraživanja Interneta, u multiprocesorskim i socijalnim mrežama, u ekonomiji itd. Topološki indeksi su veoma zastupljeni u matematičkoj hemiji, i u radu se prikazuju neke modifikacije grafovske energije i Wienerovog indeksa.

U disertaciji se analiziraju Laplasovi koeficijenti i modifikovana Laplasova energija, spektralni radijus matrice rastojanja, energija integralnih cirkulantnih grafova, ekstremalne osobine Estradinog indeksa, stepen-rastojanje invarijanta kod parcijalnih Hemingovih grafova, uvodi se novi jako diskriminativni topološki indeks i prikazuju algoritmi za konstrukciju hamiltonovih grafova sa ograničenjima. Disertacija predstavlja značajan doprinos u izučavanju grafovskih invarijanti koje su bazirane na sopstvenim vrednostima i rastojanjima, sa primenama u kompjuterskim naukama i hemiji. Glavni rezultati ovog rada su:

- Uvođenje uređenja stabala na osnovu Laplasovih koeficijenata i upotreba Kelmansove teoreme [139, 230];
- Generalizacija rezultata o spektralnom radijusu matrice rastojanja [233] i određivanje gornjih i donjih granica za energiju rastojanja [268];
- Kompletno rešavanje hipoteza o Estradinom indeksu iz [59], o maksimalnoj vrednosti stepen-rastojanje invarijante kod bicikličnih grafova iz [236], o granicama za energiju rastojanja iz [33];
- Dizajniranje linearnog algoritma za računanje stepen-rastojanje invarijante kod benzenoidnih grafova;
- Korekcija teorema o uređenju grafova iz [228] i broju ograničenih Dikovih puteva [193];
- Analiza energija integralnih cirkulantnih grafova, kao i konstrukcija ekvienergetskih nekospektralnih grafova;
- Uvođenje novog diskriminativnog topološkog indeksa CJN ;
- Dizajniranje algoritma za konstrukciju hamiltonovih grafova sa n čvorova, maksimalnim stepenom Δ i dijametrom $\leq 2 \cdot \lfloor \log_{\Delta-1} n \rfloor$;
- Postavljeno je nekoliko hipoteza vezanih za Laplasove koeficijente, spektralni radijus matrice rastojanja, Estradin indeks i energiju integralnih cirkulantnih grafova, i predloženi su pravci za dalja istraživanja;
- Svi rezultati i hipoteze su testirane sistemima AGX i samostalnim programima.

Literatura

- [1] *Datasets for molecular descriptor comparisons*, 2010, <http://www.moleculardescriptors.eu/dataset/dataset.htm>.
- [2] *The International Academy of Mathematical Chemistry*, 2010, <http://www.iamc-online.org/>.
- [3] N. M. M. de Abreu A. S. Bonifácio, C. T. M. Vinagre, *Constructing pairs of equienergetic and non-cospectral graphs*, Appl. Math. Lett. (2008), no. 21, 338–341.
- [4] S. Akbari, F. Moazami, and S. Zare, *Kneser Graphs and their Complements are Hyperenergetic*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2009), no. 61, 361–368.
- [5] T. Aleksić, I. Gutman, and M. Petrović, *Estrada index of iterated line graphs*, Bull. Acad. Serbe Sci. Arts (Cl. Sci. Math. Natur.) (2007), no. 134, 33–41.
- [6] U. Alon, *An Introduction to Systems Biology: Design Principles of Biological Circuits*, Chapman & Hall/CRC, 2006.
- [7] M. Aouchiche, *Comparaison Automatisé e d’Invariants en Théorie des Graphes*, Ph.D. thesis, École Polytechnique de Montréal, 2006.
- [8] M. Aouchiche, J. M. Bonnefoy, A. Fidahoussen, G. Caporossi, P. Hansen, L. Hiesse, J. Lacheré, and A. Monhait, *Variable Neighborhood Search for Extremal Graphs, 14. The AutoGraphiX 2 System*, Global Optimization: from Theory to Implementation (L. Liberti and N. Maculan, eds.), Springer, 2006, pp. 281–310.
- [9] M. Aouchiche, G. Caporossi, P. Hansen, and M. Laffay, *AutoGraphiX: a survey*, Elec. Notes in Disc. Math. (2005), no. 22, 515–520.
- [10] J. Bajorath, *Cheminformatics: Concepts, Methods, and Tools for Drug Discovery. Methods in Molecular Biology*, Humana Press, 2004.
- [11] A. T. Balaban, *Highly discriminating distance-based topological index*, Chem. Phys. Lett. (1982), no. 89, 399–404.
- [12] A. T. Balaban, D. Ciubotariu, and O. Ivanciuc, *Design of topological indices. Part 2. Distance measure connectivity indices*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (1990), no. 25, 41–70.
- [13] A. T. Balaban, D. Ciubotariu, and M. Medeleanu, *Topological indices and real number vertex invariants based on graph eigenvalues or eigenvectors*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. (1991), no. 31, 517–523.
- [14] A. T. Balaban, O. Mekenyan, and D. Bonchev, *Unique description of chemical structures based on hierarchically ordered extended connectivities (HOC procedures). II Mathematical proofs for the HOC algorithm*, J. Comput. Chem. (1985), no. 6, 552–561.
- [15] K. Balińska, D. Cvetković, Z. Radosavljević, S. Simić, and D. Stevanović, *A survey on integral graphs*, Univ. Beograd. Publ. Elektrotehn. Fak. Ser. Mat. (2002), no. 13, 42–65.
- [16] R. Bapat, S. J. Kirkland, and M. Neumann, *On distance matrices and Laplacians*, Linear Algebra Appl. (2005), no. 401, 193–209.
- [17] R. B. Bapat and S. Pati, *Energy of a graph is never an odd integer*, Bull. Kerala Math. Assoc. (2004), no. 1, 129–132.
- [18] M. Bašić, *Characterization of circulant graphs having perfect state transfer*, manuscript, 2010.
- [19] M. Bašić and A. Ilić, *On the clique number of integral circulant graphs*, Appl. Math. Lett. (2009), no. 22, 1406–1411.

- [20] M. Bašić, M. Petković, and D. Stevanović, *Perfect state transfer in integral circulant graphs*, Appl. Math. Lett. (2009), no. 22, 1117–1121.
- [21] M. Bašić and M. D. Petković, *Some classes of integral circulant graphs either allowing or not allowing perfect state transfer*, Appl. Math. Lett. (2009), no. 22, 1609–1615.
- [22] J. C. Bermond, F. Comellas, and D. F. Hsu, *Distributed Loop Computer Networks: A Survey*, J. Parallel Distr. Comput. (1995), no. 24, 2–10.
- [23] B. Bollobás, *Turán's Theorem and Maximal Degrees*, J. Comb. Theory, Ser. B (1999), no. 75, 160–164.
- [24] B. Bollobás and F. R. K. Chung, *The diameter of a cycle plus a random matching*, SIAM J. Discrete Math. (1988), no. 1, 328–333.
- [25] D. Bonchev and D. H. Rouvray, *Complexity in Chemistry, Biology, and Ecology*, Mathematical and Computational Chemistry, Springer: New York, 2005.
- [26] V. Brankov, D. Stevanović, and I. Gutman, *Equienergetic chemical trees*, J. Serb. Chem. Soc. (2004), no. 69, 549–553.
- [27] B. Brešar, *Partial Hamming graphs and expansion procedures*, Discrete Math. (2001), no. 237, 13–27.
- [28] ———, *On the natural imprint function of a graph*, European J. Combin. (2002), no. 23, 149–161.
- [29] S. Brin and L. Page, *The Anatomy of a Large-Scale Hypertextual Web Search Engine*, Proc. 7th IEEE Int. Conf. World Wide Web (WWW), Brisbane, Australia, 1998, pp. 107–117.
- [30] R. A. Brualdi, *Energy of a Graph*, 2006, <http://www.public.iastate.edu/~lhogben/energyB.pdf>.
- [31] O. Bucicovschi and S. M. Cioabă, *The minimum degree distance of graphs of given order and size*, Discrete Appl. Math. (2008), no. 156, 3518–3521.
- [32] M. Capalbo, *An explicit construction of lower diameter cubic graphs*, SIAM J. Discrete Math. (2003), no. 16, 630–634.
- [33] G. Caporossi, E. Chasset, and B. Furtula, *Some Conjectures and Properties on Distance Energy*, Les Cahiers du GERAD (2009), G200964, <http://www.gerad.ca/fichiers/cahiers/G-2009-64.pdf>.
- [34] G. Caporossi, D. Cvetković, I. Gutman, and P. Hansen, *Variable neighborhood search for extremal graphs 2. Finding graphs with extremal energy*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. (1999), no. 39, 984–996.
- [35] G. Caporossi and P. Hansen, *Variable neighborhood search for extremal graphs. I. The AutoGraphiX system*, Discrete Math. (2000), no. 212, 29–44.
- [36] R. Carbó-Dorca, *Smooth function topological structure descriptors based on graph-spectra*, J. Math. Chem. (2008), no. 44, 373–378.
- [37] M. Chastand, *Fiber-complemented graphs. I Structure and invariant subgraphs*, Discrete Math. (2001), no. 226, 107–141.
- [38] V. Chepoi, *Isometric subgraphs of Hamming graphs and d -convexity*, Cybernetics (1988), no. 1, 6–11.
- [39] ———, *On distances in benzenoid systems*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. (1996), no. 36, 1169–1172.
- [40] V. Chepoi and S. Klavžar, *The Wiener index and the Szeged index of benzenoid systems in linear time*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. (1997), no. 37, 752–755.
- [41] M. Christandl, N. Datta, T. C. Dorlas, A. Ekert, A. Kay, and A. J. Landahl, *Perfect transfer of arbitrary states in quantum spin networks*, Phys. Rev. A (2005), no. 71, 032312.
- [42] V. Consonni and R. Todeschini, *New spectral indices for molecule description*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2008), no. 60, 3–14.
- [43] T. H. Cormen, C. E. Leiserson, R. L. Rivest, and C. Stein, *Introduction to Algorithms*, Second ed., MIT Press. New York, 2001.
- [44] D. Cvetković, *Graphs with least eigenvalue -2 : The eigenspace of the eigenvalue -2* , Rendiconti Sem. Mat. Messina, Ser. II (2003), no. 25, 63–86.
- [45] D. Cvetković and T. Davidović, *Multiprocessor interconnection networks with small tightness*, Internat. J. Foundations Computer Sci. (2009), no. 20, 941–963.

-
- [46] D. Cvetković, M. Doob, I. Gutman, and A. Torgašev, *Recent results in the theory of graph spectra*, North Holland, Amsterdam, 1988.
- [47] D. Cvetković, M. Doob, and H. Sachs, *Spectra of graphs – Theory and Application*, Third ed., Johann Ambrosius Barth Verlag, 1995.
- [48] D. Cvetković and I. Gutman, *Applications of graph spectra*, *Zbornik radova 13*, Matematički institut SANU, Beograd, 2009.
- [49] D. Cvetković, P. Rowlinson, and S. Simić, *On some algorithmic investigations of star partitions of graphs*, *Discrete Appl. Math.* (1995), no. 62, 119–130.
- [50] ———, *Eigenspaces of graphs*, Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [51] ———, *Spectral Generalizations of Line Graphs. On Graphs with Least Eigenvalue -2*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2004.
- [52] ———, *Signless Laplacians of finite graphs*, *Linear Algebra Appl.* (2007), no. 423, 155–171.
- [53] D. Cvetković and S. Simić, *Towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian. Part I*, *Publ. Inst. Math. (Beograd)* (2009), no. 85, 19–33.
- [54] P. Dankelmann, *Average distance and independence number*, *Discr. Appl. Math.* (1994), no. 51, 75–83.
- [55] P. Dankelmann, I. Gutman, S. Mukwembi, and H. C. Swart, *On the Degree Distance of a Graph*, *Discrete Appl. Math.* (2009), no. 157, 2733–2777.
- [56] K. Ch. Das, *On the largest eigenvalue of the distance matrix of a bipartite graph*, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* (2009), no. 62, 667–672.
- [57] K. Ch. Das and S. G. Lee, *On the Estrada index conjecture*, *Linear Algebra Appl.* (2009), no. 431, 1351–1359.
- [58] P. J. Davis, *Circulant matrices*, Pure and Applied Mathematics, John Wiley & Sons, New York-Chichester-Brisbane, 1979.
- [59] J. A. de la Peña, I. Gutman, and J. Rada, *Estimating the Estrada index*, *Linear Algebra Appl.* (2007), no. 427, 70–76.
- [60] M. Dehmer and K. Varmuza, *On aspects of the degeneracy of topological indices*, *Advanced Computational Technologies* (F. Enachescu, F. G. Filip, and B. Iantovics, eds.), Romanian Academy Press, 2010, pp. 000–000.
- [61] H. Deng, *The Schultz Molecular Topological Index of Polyhex Nanotubes*, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* (2007), no. 57, 677–684.
- [62] ———, *A proof of a conjecture on the Estrada index*, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* (2009), no. 62, 599–606.
- [63] H. Deng, S. Radenković, and I. Gutman, *The Estrada index*, *Applications of Graph Spectra* (D. Cvetković and I. Gutman, eds.), Math. Inst., Belgrade, 2009, pp. 123–140.
- [64] M. Deza and M. Laurent, *Geometry of Cuts and Metrics*, Springer-Verlag, Berlin, 1997.
- [65] R. Diekmann, A. Frommer, and B. Monien, *Efficient schemes for nearest neighbor load balancing*, *Parallel Computing* (1999), no. 25, 789–812.
- [66] M. V. Diudea, *Layer matrices in molecular graphs*, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* (1994), no. 34, 1064–1071.
- [67] ———, *Indices of reciprocal property or Harary indices*, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* (1997), no. 37, 292–299.
- [68] ———, *Valencies of property*, *Croat. Chem. Acta* (1999), no. 72, 835–851.
- [69] ———, *Omega polynomial*, *Carpath. J. Math.* (2006), no. 22, 43–47.
- [70] ———, *Nanomolecules and Nanostructures – Polynomials and Indices*, University of Kragujevac, Kragujevac, 2010, Mathematical Chemistry Monographs 10.

- [71] M. V. Diudea, S. Cigher, A. E. Vizitiu, M. S. Florescu, and P. E. John, *Omega polynomial and its use in nanostructure description*, J. Math. Chem. (2009), no. 45, 316–329.
- [72] M. V. Diudea, I. Gutman, and L. Jäntschi, *Molecular topology*, Nova, Huntington, New York, 2001.
- [73] M. V. Diudea and A. Ilić, *Note on Omega polynomial*, Carpathian J. Math. (2009), no. 20, 177–185.
- [74] ———, *All pentagonal face multitori*, J. Comput. Theor. Nanosci. (2011), in press.
- [75] ———, *Omega Polynomial in TiO₂ Crystal Lattices*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2011), no. 65, 153–162.
- [76] M. V. Diudea, P. E. John, A. Graovac, M. Primorac, and T. Pisanski, *Leapfrog and Related Operations on Toroidal Fullerenes*, Croat. Chem. Acta (2003), no. 76, 153–159.
- [77] M. V. Diudea and M. Randić, *Matrix operator, $W_{(M_1, M_2, M_3)}$ and Schultz-type numbers*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. (1997), no. 37, 1095–1100.
- [78] M. V. Diudea and O. Ursu, *Layer matrices and distance property descriptors*, Indian J. Chem. (2003), no. 42A, 1283–1294.
- [79] D. Djoković, *Distance preserving subgraphs of hypercubes*, J. Combin. Theory Ser. B (1973), no. 14, 263–267.
- [80] A. A. Dobrynin, R. Entringer, and I. Gutman, *Wiener index of trees: theory and applications*, Acta Appl. Math. (2001), no. 66, 211–249.
- [81] A. A. Dobrynin and A. A. Kochetova, *Degree distance of a graph: A degree analogue of the Wiener index*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. (1994), no. 34, 1082–1086.
- [82] H. Dong and X. Guo, *Ordering trees by their Wiener indices*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2006), no. 56, 527–540.
- [83] M. Eliasi and B. Taeri, *Schultz polynomials of composite graphs*, Appl. Anal. Discrete Math. (2008), no. 2, 285–296.
- [84] F. Emmert-Streib and M. Dehmer, *Analysis of Microarray Data: A Network-Based Approach*, Wiley-VCH, New York, 2008.
- [85] E. Estrada, *Characterization of 3D molecular structure*, Chem. Phys. Lett. (2000), no. 319, 713–718.
- [86] ———, *Characterization of the folding degree of proteins*, Bioinformatics (2002), no. 18, 697–704.
- [87] ———, *Topological structural classes of complex networks*, Phys. Rev. E (2007), no. 75, 016103–1–12.
- [88] ———, *Atom-bond connectivity and the energetic of branched alkanes*, Chem. Phys. Lett. (2008), no. 463, 422–425.
- [89] E. Estrada, J. A. Rodríguez-Valázquez, and M. Randić, *Atomic branching in molecules*, Int. J. Quantum Chem. (2006), no. 106, 823–832.
- [90] K. Fan, *Maximum properties and inequalities for the eigenvalues of completely continuous operators*, Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A. (1951), no. 37, 760–766.
- [91] L. Feng and G. Yu, *No starlike trees are Laplacian cospectral*, Univ. Beograd, Publ. Elektrotehn. Fak. Ser. Mat. (2007), no. 18, 46–51.
- [92] M. Fischermann, I. Gutman, A. Hoffmann, D. Rautenbach, D. Vidović, and L. Volkmann, *Extremal chemical trees*, Z. Naturforsch. (2002), no. 57a, 49–52.
- [93] M. Fischermann, A. Hoffmann, D. Rautenbach, L. Székely, and L. Volkmann, *Wiener index versus maximum degree in trees*, Discrete Appl. Math. (2002), no. 122, 127–137.
- [94] N. Ghareghani, F. Ramezani, and B. Tayfeh-Rezaie, *Graphs cospectral with starlike trees*, Linear Algebra Appl. (2008), no. 429, 2691–2701.
- [95] Y. Ginosar, I. Gutman, T. Mansour, and M. Schork, *Estrada index and Chebyshev polynomials*, Chem. Phys. Lett. (2008), no. 454, 145–147.
- [96] C. Godsil, *Periodic Graphs*, *arXiv:0806.2074v1*, 2008, <http://www.public.iastate.edu/~lhogben/energyB.pdf>.

-
- [97] C. Godsil and G. Royle, *Algebraic Graph Theory*, New York: Springer-Verlag, 2004.
- [98] R. L. Graham and P. M. Winkler, *On isometric embeddings of graphs*, Trans. Amer. Math. Soc. (1985), no. 288, 527–536.
- [99] J. M. Guo, *On the minimal energy ordering of trees with perfect matchings*, Discrete Appl. Math. (2008), no. 156, 2598–2605.
- [100] I. Gutman, *The energy of a graph*, Ber. Math. Statist. Sect. Forschungsz. Graz (1978), no. 103, 1–22.
- [101] ———, *Selected properties of the Schultz molecular topological index*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. (1994), no. 34, 1087–1089.
- [102] ———, *Hyperenergetic molecular graphs*, J. Serb. Chem. Soc. (1999), no. 64, 199–205.
- [103] ———, *The energy of a graph: old and new results*, Algebraic Combinatorics and Applications (A. Betten, A. Kohnert, R. Laue, and A. Wassermann, eds.), Springer-Verlag, Berlin, 2001, pp. 196–211.
- [104] ———, *Hyper-Wiener index and Laplacian spectrum*, J. Serb. Chem. Soc. (2003), no. 68, 949–952.
- [105] ———, *Uvod u hemijsku teoriju grafova*, Prirodno-matematički fakultet, Kragujevac, 2003.
- [106] I. Gutman and K. Ch. Das, *The first Zagreb index 30 years after*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2004), no. 50, 83–92.
- [107] I. Gutman, S. Z. Firoozabadi, J. A. de la Peña, and J. Rada, *On the energy of regular graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2007), no. 57, 435–442.
- [108] I. Gutman and B. Furtula, *Novel Molecular Structure Descriptors – Theory and Applications I & II*, University of Kragujevac, Kragujevac, 2010, Mathematical Chemistry Monographs 8 & 9.
- [109] I. Gutman, B. Furtula, V. Marković, and B. Glišić, *Alkanes with greatest Estrada index*, Z. Naturforsch. (2007), no. 62a, 495–498.
- [110] I. Gutman and A. Graovac, *Estrada index of cycles and paths*, Chem. Phys. Lett. (2007), no. 436, 294–296.
- [111] I. Gutman, D. Kiani, and M. Mirzakhah, *On incidence energy of graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2009), no. 62, 573–580.
- [112] I. Gutman, D. Kiani, M. Mirzakhah, and B. Zhou, *On incidence energy of a graph*, Linear Algebra Appl. (2009), no. 431, 1223–1233.
- [113] I. Gutman and S. Klavžar, *An algorithm for the calculation of the Szeged index of benzenoid hydrocarbons*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. (1995), no. 35, 1011–1014.
- [114] ———, *Bounds for the Schultz molecular topological index of benzenoid systems in terms of the Wiener index*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. (1997), no. 37, 741–744.
- [115] I. Gutman and M. Medeleanu, *On the structure dependence of the largest eigenvalue of the distance matrix of an alkane*, Indian J. Chem. (1998), no. 37, 569–573.
- [116] I. Gutman, S. Radenković, B. Furtula, T. Mansour, and M. Schork, *Relating Estrada index with spectral radius*, J. Serb. Chem. Soc. (2007), no. 72, 1321–1327.
- [117] I. Gutman and B. Zhou, *Laplacian energy of a graph*, Linear Algebra Appl. (2006), no. 414, 29–37.
- [118] I. Gutman, B. Zhou, and B. Furtula, *The Laplacian-energy Like Invariant is an Energy Like Invariant*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2010), no. 64, 85–96.
- [119] W. H. Haemers, *Strongly regular graphs with maximal energy*, Linear Algebra Appl. (2008), no. 429, 2719–2723.
- [120] P. Hansen and N. Mladenović, *Variable neighborhood search: Principles and applications*, Eur. J. Oper. Res. (2001), no. 130, 449–467.
- [121] P. Hansen, N. Mladenović, and J. A. Moreno Pérez, *Variable neighborhood search: Algorithms and Applications*, Annals Oper. Res. (2010), no. 175, 367–407.
- [122] F. Harary and J. P. Hayes, *Node fault tolerance in graphs*, Networks (1996), no. 27, 19–23.

-
- [123] G. H. Hardy and E. M. Wright, *An Introduction to the Theory of Numbers*, Fifth ed., Oxford University Press, New York, 1980.
- [124] C. X. He and H. Y. Shan, *On the Laplacian coefficients of bicyclic graphs*, *Discrete Math.* (2010), no. 310, 3404–3412.
- [125] C. Heuberger and S. G. Wagner, *Maximizing the number of independent subsets over trees with bounded degree*, *J. Graph Theory* (2008), no. 58, 49–68.
- [126] ———, *Chemical trees minimizing energy and Hosoya index*, *J. Math. Chem.* (2009), no. 46, 214–230.
- [127] Y. Ho and J. Li, *Bounds on the largest eigenvalues of trees with a given size of matching*, *Linear Algebra Appl.* (2002), no. 342, 203–217.
- [128] H. Hosoya, *On some counting polynomials in chemistry*, *Discrete Appl. Math.* (1988), no. 19, 239–257.
- [129] ———, *Clar’s aromatic sextet and sextet polynomial*, *Topics Curr. Chem.* (1990), no. 153, 255–272.
- [130] S. Hossein-Zadeh, A. Hamzeh, and A. R. Ashrafi, *Wiener-type invariants of some graph operations*, *Filomat* (2009), no. 23, 103–113.
- [131] Y. Hou, *On acyclic systems with minimal Hosoya index*, *Discrete Appl. Math.* (2002), no. 119, 251–257.
- [132] Y. Hou, I. Gutman, and C. W. Woo, *Unicyclic graphs with maximal energy*, *Linear Algebra Appl.* (2002), no. 356, 27–36.
- [133] C. Y. Hu and L. Xu, *Algorithm for computer perception of topological symmetry*, *Anal. Chem. Acta* (1994), no. 295, 127–134.
- [134] H. Hua, *Wiener and Schultz molecular topological indices of graphs with specified cut edges*, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* (2009), no. 61, 643–651.
- [135] C. N. Hung, L. H. Hsu, and T. Y. Sung, *Christmas tree: A versatile 1-fault-tolerant design for token rings*, *Inform. Process. Lett.* (1999), no. 72, 55–63.
- [136] B. Huo, X. Li, and Y. Shi, *Complete solution to a problem on the maximal energy of unicyclic bipartite graphs*, *Linear Algebra Appl.* (2011), in press.
- [137] F. K. Hwang, *A survey on multi-loop networks*, *Theor. Comp. Sci.* (2003), no. 299, 107–121.
- [138] A. Ilić, *The energy of unitary Cayley graphs*, *Linear Algebra Appl.* (2009), no. 431, 1881–1889.
- [139] ———, *On the ordering of trees by the Laplacian coefficients*, *Linear Algebra Appl.* (2009), no. 431, 2203–2212.
- [140] ———, *Distance spectra and Distance energy of integral circulant graphs*, *Linear Algebra Appl.* (2010), no. 433, 1005–1014.
- [141] ———, *Note on PI and Szeged indices*, *Math. Comput. Model.* (2010), no. 52, 1570–1576.
- [142] ———, *Trees with minimal Laplacian coefficients*, *Comp. Math. Appl.* (2010), no. 59, 2776–2783.
- [143] A. Ilić and M. Bašić, *On the chromatic number of integral circulant graphs*, *Comp. Math. Appl.* (2010), no. 60, 144–150.
- [144] A. Ilić, M. Bašić, and I. Gutman, *Calculating triply equienergetic graphs*, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* (2010), no. 64, 189–200.
- [145] A. Ilić and I. Gutman, *Eccentric connectivity index of chemical trees*, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* (2011), no. 65, 731–744.
- [146] A. Ilić, A. Ilić, and D. Stevanović, *On the Wiener index and Laplacian coefficients of graphs with given diameter or radius*, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* (2010), no. 63, 91–100.
- [147] A. Ilić and M. Ilić, *Laplacian coefficients of trees with given number of leaves or vertices of degree two*, *Linear Algebra Appl.* (2009), no. 431, 2195–2202.
- [148] A. Ilić, S. Klavžar, and D. Stevanović, *Calculating the Degree distance of partial Hamming graphs*, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* (2010), no. 63, 411–424.
- [149] A. Ilić, Đ. Krtinić, and M. Ilić, *On Laplacian-like energy of trees*, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* (2010), no. 64, 111–122.


-
- [150] A. Ilić and D. Stevanović, *On comparing Zagreb indices*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2009), no. 62, 681–687.
- [151] ———, *The Estrada index of chemical trees*, J. Math. Chem. (2010), no. 47, 305–314.
- [152] A. Ilić, D. Stevanović, L. Feng, and G. Yu, *Degree distance of unicyclic and bicyclic graphs*, manuscript, 2010.
- [153] A. Ilić, D. Urošević, J. Brimberg, and N. Mladenović, *A General Variable Neighborhood Search for solving the uncapacitated single allocation p -hub median problem*, Eur. J. Oper. Res. (2010), no. 206, 289–300.
- [154] A. Ilić, G. Yu, and L. Feng, *The Harary index of trees*, Utilitas Math. (2011), in press.
- [155] A. Ilić and B. Zhou, *Laplacian Estrada Index of Trees*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2010), no. 63, 769–776.
- [156] W. Imrich, *Embedding graphs into Cartesian products*, Graph Theory and its Applications: East and West, Ann. New York Acad. Sci. (1989), no. 576, 266–274.
- [157] W. Imrich and S. Klavžar, *Product graphs: Structure and recognition*, John Wiley & Sons, New York, 2000.
- [158] G. Indulal, *Sharp bounds on the distance spectral radius and the distance energy of graphs*, Linear Algebra Appl. (2009), no. 430, 106–113.
- [159] G. Indulal, I. Gutman, and A. Vijaykumar, *On the distance energy of a graph*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2008), no. 60, 461–472.
- [160] O. Ivanciuc, T. S. Balaban, and A. T. Balaban, *Chemical graphs with degenerate topological indices based on information on distance*, J. Math. Chem. (1993), no. 14, 21–31.
- [161] P. John and M. V. Diudea, *The second distance matrix of the graph and its characteristic polynomial*, Carpath. J. Math. (2004), no. 20, 235–239.
- [162] M. R. Jooyandeh, D. Kiani, and M. Mirzakhah, *Incidence energy of a graph*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2009), no. 62, 561–572.
- [163] B. H. Junker and F. Schreiber, *Analysis of biological networks*, Wiley Series in Bioinformatics, Wiley-Interscience, 2008.
- [164] S. S. Kao and L. H. Hsu, *Brother trees: A family of optimal 1_p -hamiltonian and 1-edge hamiltonian graphs*, Inform. Process. Lett. (2003), no. 86, 263–269.
- [165] A. K. Kelmans and V. M. Chelnokov, *A certain polynomial of a graph and graphs with extremal number of trees*, J. Comb. Theory, Ser. B (1974), no. 16, 197–214.
- [166] M. H. Khalifeh, H. Yousefi-Azari, and A. R. Ashrafi, *The first and second Zagreb indices of some graph operations*, Discrete Appl. Math. (2009), no. 157, 804–811.
- [167] S. Klavžar, *Bird's eye view of the cut method and a survey of its applications in chemical graph theory*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2008), no. 60, 255–274.
- [168] ———, *Some comments on co graphs and CI index*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2008), no. 59, 217–222.
- [169] S. Klavžar and I. Gutman, *A comparison of the Schultz molecular topological index with the Wiener index*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. (1996), no. 36, 1001–1003.
- [170] ———, *Wiener number of vertex-weighted graphs and a chemical application*, Discrete Appl. Math. (1997), no. 80, 73–81.
- [171] S. Klavžar, P. Žigert, and I. Gutman, *An algorithm for the calculation of the hyper-Wiener index of benzenoid hydrocarbons*, Comput. Chem. (2000), no. 24, 229–233.
- [172] D. J. Klein, Z. Mihalić, D. Plavšić, and N. Trinajstić, *Molecular topological index: A relation with the Wiener index*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. (1992), no. 32, 304–305.
- [173] W. Klotz and T. Sander, *Some properties of unitary cayley graphs*, Electron. J. Combin. (2007), no. #R45, 153–158.

- [174] J. V. Knop, R. W. Muller, K. Szymanski, and N. Trinajstić, *On the identification numbers for chemical structures*, Int. J. Quantum. Chem. (1986), no. 20, 173–183.
- [175] E. D. Kolaczyk, *Statistical analysis of network data*, Springer Series in Statistics, Springer, New York, 2009.
- [176] E. V. Konstantinova and M. V. Diudea, *The Wiener polynomial derivatives and other topological indices in chemical research*, Croat. Chem. Acta (2000), no. 73, 383–403.
- [177] J. Koolen and V. Moulton, *Maximal energy graphs*, Adv. Appl. Math. (2001), no. 26, 47–52.
- [178] D. H. Lehmer, *On Euler's totient function*, Bull. Amer. Math. Soc. (1932), no. 38, 745–751.
- [179] F. T. Leighton, *Introduction to Parallel Algorithms and Architectures: Arrays, Trees and Hypercubes*, Morgan Kaufmann, San Mateo, CA, 1992.
- [180] M. Lepović and I. Gutman, *A collective property of trees and chemical trees*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. (1998), no. 38, 823–826.
- [181] J. Li, W. C. Shiu, and A. Chang, *On the Laplacian Estrada index of a graph*, Appl. Anal. Discrete Math. (2009), no. 3, 147–156.
- [182] W. Lin and X. Guo, *On the largest eigenvalues of trees with perfect matchings*, J. Math. Chem. (2007), no. 42, 1057–1067.
- [183] H. Liu and X. F. Pan, *On the Wiener index of trees with fixed diameter*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2008), no. 60, 85–94.
- [184] J. Liu and J. Liu, *A Laplacian–Energy–Like invariant of a graph*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2008), no. 59, 355–372.
- [185] Z. Liu, *On spectral radius of distance matrix*, Appl. Anal. Discrete Math. (2010), in press.
- [186] L. Lovász and J. Pelikán, *On eigenvalues of trees*, Period. Math. Hung. (1973), no. 3, 175–182.
- [187] Z. Marković, V. Ivanov-Petrović, and I. Gutman, *Extremely branched alkanes*, J. Mol. Struct. (Theochem) (2003), no. 629, 303–306.
- [188] A. Mazurie, D. Bonchev, B. Schwikowski, and G. A. Buck, *Phylogenetic distances are encoded in networks of interacting pathways*, Bioinformatics (2008), no. 24, 2579–2585.
- [189] B. D. McKay, *Practical graph isomorphism*, Eur. J. Oper. Res. (1981), no. 30, 45–87.
- [190] R. Merris, *The distance spectrum of a tree*, J. Graph Theory (1990), no. 14, 365–369.
- [191] ———, *A survey of graph Laplacians*, Linear Multilin. Algebra (1995), no. 39, 19–31.
- [192] M. Miller and J. Širáň, *Moore graphs and beyond: A survey of the degree/diameter problem*, Electron. J. Combin. (2005), no. Dynamic survey #DS14.
- [193] P. Mladenović, *Kombinatorika*, Third ed., Društvo Matematičara Srbije, Beograd, 2001.
- [194] B. Mohar, *Problems: Laplacian coefficients of trees*, 2006, <http://www.fmf.uni-lj.si/~mohar/>.
- [195] ———, *On the Laplacian coefficients of acyclic graphs*, Linear Algebra Appl. (2007), no. 722, 736–741.
- [196] Cs. L. Nagy and M. V. Diudea, *Nano studio*, 2009, Babes-Bolyai University, Cluj.
- [197] H. Niederhausen and S. Sullivan, *Euler coefficients and restricted Dyck paths*, Congr. Numer. (2007), no. 188, 196–210.
- [198] V. Nikiforov, *The energy of graphs and matrices*, J. Math. Anal. Appl. (2007), no. 326, 1472–1475.
- [199] S. Nikolić, G. Kovačević, A. Milićević, and N. Trinajstić, *The Zagreb indices 30 years after*, Croat. Chem. Acta (2003), no. 76, 113–124.
- [200] G. R. Omidi and K. Tajbakhsh, *Starlike trees are determined by their Laplacian spectrum*, Linear Algebra Appl. (2007), no. 422, 654–658.
- [201] S. Pirzada and I. Gutman, *Energy of a graph is never the square root of an odd integer*, Appl. Anal. Discrete Math. (2008), no. 2, 118–121.


-
- [202] D. Plavšić, S. Nikolić, N. Trinajstić, and D. J. Klein, *Relation between the Wiener index and the Schultz index for several classes of chemical graphs*, Croat. Chem. Acta (1993), no. 66, 345–353.
- [203] J. Plesník, *On the sum of all distances in a graph or digraph*, J. Graph Theory (1984), no. 8, 1–21.
- [204] A. Pothen, H. Simon, and K. P. Liou, *Partitioning sparse matrices with eigenvectors of graphs*, SIAM J. Matrix Anal. Appl. (1990), no. 11, 430–452.
- [205] H. S. Ramane, I. Gutman, and D. S. Revankar, *Distance equienergetic graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2008), no. 60, 473–484.
- [206] H. S. Ramane, D. S. Revankar, I. Gutman, S. B. Rao, B. D. Acharya, and H. B. Walikar, *Bounds for the distance energy of a graph*, Kragujevac J. Math. (2008), no. 31, 59–68.
- [207] H. S. Ramane, D. S. Revankar, I. Gutman, and H. B. Walikar, *Distance spectra and distance energies of iterated line graphs of regular graphs*, Publ. Inst. Math. (Beograd) (2009), no. 85, 39–46.
- [208] H. S. Ramane and H. B. Walikar, *Construction of equienergetic graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2007), no. 57, 203–210.
- [209] H. N. Ramaswamy and C. R. Veena, *On the Energy of Unitary Cayley Graphs*, Electron. J. Combin. (2007), no. 16, #N24.
- [210] M. Randić, *On molecular identification numbers*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. (1984), no. 24, 164–175.
- [211] M. Randić, B. Horvath, and T. Pisanski, *Some graphs are more strongly-isospectral than other*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2010), no. 63, 737–750.
- [212] Wolfram Research, *Mathematica Edition: Version 7.0*, 2008.
- [213] T. J. Rivlin, *Chebyshev polynomials, from Approximation theory to Algebra and Number theory*, Second ed., Wiley, New York, 1990.
- [214] R. W. Robinson and N. C. Wormald, *Almost all regular graphs are hamiltonian*, Random Struct. Algor. (1992), no. 5, 363–374.
- [215] W. Rudin, *Principles of mathematical analysis*, Third ed., McGraw Hill, New York, 1976.
- [216] M. Sato and T. Sado, *Lattice paths restricted by two parallel hyperplanes*, Bull. Inf. Cybernetics (1985), no. 21, 97–105.
- [217] N. Saxena, S. Severini, and I. Shparlinski, *Parameters of integral circulant graphs and periodic quantum dynamics*, Int. J. Quant. Inf. (2007), no. 5, 417–430.
- [218] I. Shparlinski, *On the energy of some circulant graphs*, Linear Algebra Appl. (2006), no. 414, 378–382.
- [219] S. Simić, E. M. L. Marzi, and F. Belardo, *On the index of caterpillars*, Discrete Math. (2008), no. 308, 324–330.
- [220] S. Simić and Z. Stanić, *On some forests determined by their Laplacian or signless Laplacian spectrum*, Comp. Appl. Math. (2009), no. 58, 171–178.
- [221] S. Simić and D. Tošić, *The index of trees with specified maximum degree*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2005), no. 54, 351–362.
- [222] N. J. A. Sloane, *The on-line encyclopedia of integer sequences*, 2010, <http://www.research.att.com/~njas/sequences/A080934>.
- [223] W. So, *Integral circulant graphs*, Discrete Math. (2006), no. 306, 153–158.
- [224] L. Söltés, *Transmission in graphs: a bound and vertex removing*, Math. Slovaca (1991), no. 41, 11–16.
- [225] S. Stanimirović, P. Stanimirović, M. Miladinović, and A. Ilić, *Catalan matrix and related combinatorial identities*, Appl. Math. Comput. (2009), no. 215, 796–805.
- [226] R. Stanley, *Enumerative Combinatorics, Volume 2*, First ed., Cambridge University Press, Cambridge, 2001.
- [227] M. Stefu, M. V. Diudea, and P. E. John, *Composite operations on maps*, Studia Univ. "Babes-Bolyai" (2005), no. 50, 165–174.

- [228] D. Stevanović, *Laplacian-like energy of trees*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2009), no. 61, 407–417.
- [229] D. Stevanović and A. Ilić, *On the Laplacian coefficients of unicyclic graphs*, Linear Algebra Appl. (2009), no. 430, 2290–2300.
- [230] ———, *Distance spectral radius of trees with fixed maximum degree*, Electron. J. Linear Algebra (2010), no. 20, 168–179.
- [231] D. Stevanović, A. Ilić, C. Onisor, and M. Diudea, *LEL – a Newly Designed Molecular Descriptor*, Acta Chim. Slov. (2009), no. 56, 410–417.
- [232] D. Stevanović and G. Indulal, *The distance spectrum and energy of the compositions of regular graphs*, Appl. Math. Lett. (2009), no. 22, 1136–1140.
- [233] R. Subhi and D. Powers, *The distance spectrum of the path P_n and the first distance eigenvector of connected graphs*, Linear Multilin. Algebra (1990), no. 28, 75–81.
- [234] Z. Tang and H. Deng, *The graphs with minimal and maximal Wiener indices among a class of bicyclic graphs*, J. Nat. Sci. Hunan Norm. Univ. (2008), no. 31, 27–30.
- [235] R. Todeschini and V. Consonni, *Handbook of molecular descriptors*, Wiley–VCH, Weinheim, 2000.
- [236] A. I. Tomescu, *Minimal graphs with respect to the degree distance*, Tech. report, University of Bucharest, 2008, <http://sole.dimi.uniud.it/~alexandru.tomescu/files/dd-distance.pdf>.
- [237] I. Tomescu, *Some extremal properties of the degree distance of a graph*, Discrete Appl. Math. (1999), no. 98, 159–163.
- [238] ———, *Unicyclic and bicyclic graphs having minimum degree distance*, Discrete Appl. Math. (2008), no. 156, 125–130.
- [239] ———, *Properties of connected graphs having minimum degree distance*, Discrete Math. (2009), no. 309, 2745–2748.
- [240] ———, *Ordering connected graphs having small degree distances*, Discrete Appl. Math. (2010), no. 158, 1714–1717.
- [241] O. Ursu and M. V. Diudea, *TOPOCLUJ*, 2005, Babes-Bolyai University, Cluj.
- [242] J. J. Wang, C. N. Hung, and L. H. Hsu, *Optimal 1-hamiltonian graphs*, Inform. Process. Lett. (2003), no. 65, 157–161.
- [243] J. J. Wang, T. Y. Sung, L. H. Hsu, and M. Y. Lin, *A New Family of Optimal 1-hamiltonian Graphs with Small Diameter*, Proc. 4th Int. Conf. Comp. Comb., 1998, pp. 269–278.
- [244] L. Wang, Z. P. Chen, and X. H. Jiang, *Ringed Petersen spheres connected hypercube interconnection networks*, Proc. 10th IEEE Int. Conf. Eng. Complex Comput. Sys. (ICECCS’05), Washington, DC, IEEE Computer Society, 2005, pp. 127–131.
- [245] S. Wang and X. Guo, *Trees with extremal Wiener indices*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2008), no. 60, 609–622.
- [246] D. B. West, *Introduction to Graph Theory*, Second ed., Prentice Hall, New Jersey, 2001.
- [247] E. Wilkeit, *Isometric embeddings in Hamming graphs*, J. Combin. Theory Ser. B (1990), no. 50, 179–197.
- [248] J. H. Wilkinson and C. Reinsch, *Handbook for Automatic Computation, volume 2*, Springer-Verlag, Berlin, 1971.
- [249] P. Winkler, *Isometric embeddings in products of complete graphs*, Discrete Appl. Math. (1984), no. 7, 221–225.
- [250] L. Xu and Y. Hou, *Equienergetic bipartite graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2007), no. 57, 363–370.
- [251] W. Yan and L. Ye, *On the minimal energy of trees with a given diameter*, Appl. Math. Lett. (2005), no. 18, 1046–1052.

-
- [252] W. Yan and Y. N. Yeh, *Connections between Wiener index and matchings*, J. Math. Chem. (2006), no. 39, 389–399.
- [253] H. Yousefi-Azari, B. Manoochehrian, and A. R. Ashrafi, *The PI index of product graphs*, Appl. Math. Lett. (2008), no. 21, 624–627.
- [254] G. Yu and L. Feng, *On the Wiener index of unicyclic graphs with given girth*, Ars Comb. (2010), no. 94, 361–369.
- [255] G. Yu, L. Feng, and A. Ilić, *The eccentric distance sum of trees and unicyclic graphs*, J. Math. Anal. Appl. (2011), no. 375, 934–944.
- [256] H. Yuan and C. An, *The unicyclic graphs with maximum degree distance*, J. Math. Study (2006), no. 39, 18–24.
- [257] F. Zhang and H. Li, *On acyclic conjugated molecules with minimal energies*, Discrete Appl. Math. (1999), no. 92, 71–84.
- [258] J. Zhang, B. Zhou, and J. Li, *On Estrada index of trees*, Linear Algebra Appl. (2011), no. 434, 215–223.
- [259] X. D. Zhang, X. P. Lv, and Y. H. Chen, *Ordering trees by the Laplacian coefficients*, Linear Algebra Appl. (2009), no. 431, 2414–2424.
- [260] B. Zhou, *Bounds for the Schultz molecular topological index*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2006), no. 56, 189–194.
- [261] ———, *On Estrada index*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2008), no. 60, 485–492.
- [262] ———, *On sum of powers of Laplacian eigenvalues and Laplacian Estrada index*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2009), no. 62, 611–619.
- [263] B. Zhou and I. Gutman, *Relations between Wiener, hyper-Wiener and Zagreb indices*, Chem. Phys. Lett. (2004), no. 394, 93–95.
- [264] ———, *A connection between ordinary and Laplacian spectra of bipartite graphs*, Linear Multilin. Algebra (2008), no. 56, 305–310.
- [265] ———, *More on the Laplacian Estrada index*, Appl. Anal. Discrete Math. (2009), no. 3, 371–378.
- [266] B. Zhou, I. Gutman, and T. Aleksić, *A note on Laplacian energy of graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2008), no. 60, 441–446.
- [267] B. Zhou, I. Gutman, J. A. de la Peña, J. Rada, and L. Mendoza, *On spectral moments and energy of graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2007), no. 57, 183–191.
- [268] B. Zhou and A. Ilić, *On Distance Spectral Radius and Distance Energy of Graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (2010), no. 64, 261–280.
- [269] ———, *On sum of powers of Laplacian eigenvalues of bipartite graphs*, Czechoslovak Math. J. (2010), no. 60, 1161–1169.
- [270] B. Zhou and N. Trinajstić, *On the largest eigenvalue of the distance matrix of a connected graph*, Chem. Phys. Lett. (2007), no. 447, 384–387.
- [271] P. Žigert, S. Klavžar, and I. Gutman, *Calculating the hyper-Wiener index of benzenoid hydrocarbons*, ACH Models Chem. (2000), no. 173, 83–94.

	ПРИРОДНО - МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ НИШ
	КЉУЧНА ДОКУМЕНТАЦИЈСКА ИНФОРМАЦИЈА

Редни број, РБР:	
Идентификациони број, ИБР:	
Тип документације, ТД:	монографска
Тип записа, ТЗ:	текстуални / графички
Врста рада, ВР:	докторска дисертација
Аутор, АУ:	Александар Илић
Ментор, МН:	Драган Стевановић
Наслов рада, НР:	Екстремални проблеми и алгоритми за графовске инваријанте базиране на сопственим вредностима и растојањима
Језик публикације, ЈП:	српски
Језик извода, ЈИ:	енглески
Земља публикавања, ЗП:	Србија
Уже географско подручје, УГП:	Србија
Година, ГО:	2010.
Издавач, ИЗ:	ауторски репринт
Место и адреса, МА:	Ниш, Вишеградска 33.
Физички опис рада, ФО: <small>(поглавља/страница/ цитата/табела/слика/графика/прилога)</small>	169 страна, 11 поглавља, графички прикази и табеле
Научна област, НО:	математика и информатика
Научна дисциплина, НД:	теорија графова
Предметна одредница/Кључне речи, ПО:	спектри графова, тополошки индекси, графовски алгоритми, матрица растојања, Лапласови коефицијенти, енергија
УДК	519.177 + 519.172 + 519.16 + 519.174 + 544.15
Чува се, ЧУ:	библиотека
Важна напомена, ВН:	
Извод, ИЗ:	Дисертација представља значајан допринос у изучавању графовских инваријанти које су базиране на сопственим вредностима и растојањима, са применама у компјутерским наукама и хемији. У раду се анализирају Лапласови коефицијенти и модификована Лапласова енергија, спектрални радијус матрице растојања, енергија интегралних циркулантних графова, екстремалне особине Естрадаиног индекса, степен-растојање инваријанта код парцијалних Хемингових графова, уводи се нови јако дискриминативни тополошки индекс и приказују алгоритми за конструкцију хамилтонових графова са ограничењима.
Датум прихватања теме, ДП:	12.07.2010.
Датум одбране, ДО:	
Чланови комисије, КО:	Председник:
	Члан:
	Члан:
	Члан:
	Члан, ментор:

	ПРИРОДНО - МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ НИШ
	KEY WORDS DOCUMENTATION

Accession number, ANO :	
Identification number, INO :	
Document type, DT :	monograph
Type of record, TR :	textual / graphic
Contents code, CC :	doctoral dissertation
Author, AU :	Aleksandar Ilić
Mentor, MN :	Dragan Stevanović
Title, TI :	Extremal problems and algorithms for graph invariants based on eigenvalues and distances
Language of text, LT :	Serbian
Language of abstract, LA :	English
Country of publication, CP :	Serbia
Locality of publication, LP :	Serbia
Publication year, PY :	2010
Publisher, PB :	author's reprint
Publication place, PP :	Niš, Višegradska 33.
Physical description, PD : (chapters/pages/ref./tables/pictures/graphs/appendixes)	169 pages, 11 chapters, graphical representations and tables
Scientific field, SF :	mathematics and computer science
Scientific discipline, SD :	graph theory
Subject/Key words, S/KW :	graph spectra, topological indices, graph algorithms, distance matrix, Laplacian coefficients, energy
UC	519.177 + 519.172 + 519.16 + 519.174 + 544.15
Holding data, HD :	library
Note, N :	
Abstract, AB :	The dissertation represents significant contribution in the study of graph invariants based on eigenvalues and distances, with many applications in computer science and chemistry. This thesis is about Laplacian coefficients and Laplacian-like energy, spectral radius of distance matrix, the energy of integral circulant graphs, extremal properties of Estrada index, degree distance invariant of partial Hamming graphs, novel highly discriminating topological Cluj-Niš index and the design of new algorithm for constructing Hamiltonian graphs with given degree/diameter constrains.
Accepted by the Scientific Board on, ASB :	12.07.2010.
Defended on, DE :	
Defended Board, DB :	President:
	Member:
	Member:
	Member:
	Member, Mentor:



Универзитет у Нишу
Универзитетска библиотека

Овај текст је део Дигиталног репозиторијума, јавно је доступан, и може се слободно користити за личне потребе, у образовне и научне сврхе. Ако користите текст, наведите извор.

Комерцијална употреба текста није дозвољена.

University of Niš
University Library

This text is a part of the Digital repository of public domain. Permission is granted for personal, educational and scientific use. If you do use the document, indicate the source.

No permission is granted for commercial use.

