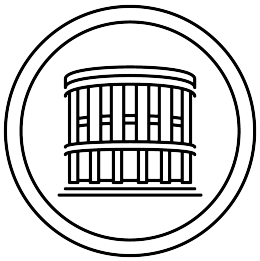
UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY



OPTIMALIZÁCIA VLASTNÝCH ČÍSEL GRAFOV

DIPLOMOVÁ PRÁCA

2024 Bc. Adam Sládeček

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

OPTIMALIZÁCIA VLASTNÝCH ČÍSEL GRAFOV

DIPLOMOVÁ PRÁCA

Študijný program:	Ekonomicko-finančná matematika a modelovanie
Študijný odbor:	matematika
Školiace pracovisko:	Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Vedúci práce:	prof. RNDr. Daniel Ševčovič, DrSc.

Bratislava 2024 **Bc. Adam Sládeček**





Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

Meno a priezvisko študenta: Bc. Adam Sládeček
Študijný program: ekonomicko-finančná matematika a modelovanie (Jednoodborové štúdium, magisterský II. st., denná forma)
Študijný odbor: matematika
Typ záverečnej práce: diplomová
Jazyk záverečnej práce: slovenský
Sekundárny jazyk: anglický

Názov: Optimalizácia vlastných hodnôt grafov
Optimization of eigenvalues of graphs

Anotácia: V práci nadviažeme na výsledky o optimalizácií rôznych spektrálnych indexov grafov, ktoré sú získané z vlastných hodnôt z binárnych matíc susednosti grafov.

Vedúci: prof. RNDr. Daniel Ševčovič, DrSc.
Katedra: FMFI.KAMŠ - Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Vedúci katedry: prof. RNDr. Marek Fila, DrSc.

Dátum zadania: 10.01.2023

Dátum schválenia: 11.01.2023 prof. RNDr. Daniel Ševčovič, DrSc.
garant študijného programu

.....
študent

.....
vedúci práce

Čestné prehlásenie Čestne prehlasujem, že túto diplomovú prácu som vypracoval samostatne pod vedením môjho školiteľa a s pomocou uvedenej literatúry.

V Bratislave, dňa 10.5.2024 .....

Poďakovanie Touto cestou sa chcem poďakovať vedúcemu mojej diplomovej práce prof. RNDr. Danielovi Ševčovičovi, DrSc. za ochotu, pomoc, odborné rady a podnetné pripomienky, ktoré mi pomohli pri písaní tejto práce.

Abstrakt v štátnom jazyku

SLÁDEČEK, Adam. *Optimalizácia vlastných hodnôt grafov* [diplomová práca]. Univerzita Komenského v Bratislave. Fakulta matematiky, fyziky a informatiky; Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky. Školiteľ: prof. RNDr. Daniel Ševčovič, DrSc., 2024, 74 s.

V našej práci sa venujeme vlastným číslam grafov a z nich plynúcej energie spektra grafu. Uvádzame odvodenia pre známe horné a dolné ohraničenia energie grafu. Pomocou odstránenia hrán z kompletného grafu sa pokúšame nájsť tzv. hyperenergetické postupnosti grafov. Taktiež sa zaoberáme celkovým počtom izomorfných a neizomorfných hyperenergetických grafov. Venujeme sa invertibilite grafu a energií invetovatelných grafov. Pracujeme aj s niektorými špeciálnymi triedami grafov a zaoberáme sa ich energiou a vlastnými číslami. Venujeme sa aj hľadaniu najmenšej kostry v grafe. Uvádzame vizuálne príklady jednotlivých skúmaných grafov.

Kľúčové slová: graf, energia grafu, ohraničenia energie grafu, invertovatelný graf, premostený graf, hyperenergetický graf, hypoenergetický graf, kostra grafu.

Abstract

SLÁDEČEK, Adam. *Optimization of eigenvalues of graph* [Master´s thesis]. Comenius University in Bratislava. Faculty of Mathematics, Physics and Informatics; Department of Applied Mathematics and Statistics. Supervisor: prof. RNDr. Daniel Ševčovič, DrSc., 2024, 74 p.

In our work, we deal with the eigenvalues of the graphs and the resulting energy of the spectrum of the graph. We present derivations for the known upper and lower bounds on the energy of the graph. By removing edges from the complete graph, we try to find the so-called hyperenergetic sequences of graphs. We also deal with the total number of isomorphic and non-isomorphic hyperenergetic graphs. We deal with graph invertibility and energies of invertible graphs. We also work with some special families of graphs and study their energy and eigenvalues. We also present the minimum spanning tree problem. We present visual examples of individual types of graphs.

Keywords: graph, graph energy, graph energy bounds, invertible graph, bridged graph, hyperenergetic graph, hypoenergetic graph, spanning tree.

Obsah

1 Súhrn známych výsledkov **11**
1.1 Ohraničenia energie grafu 12
1.1.1 Dolné ohraničenie energie grafu 14
1.1.2 Horné ohraničenie energie grafu 16
1.1.3 Nordhausovo-Gaddumovo ohraničenie 18

2 Hyperenergetické a hypoenergetické grafy **21**
2.1 Kompletné grafy s jednou odstránenou hranou 24
2.2 Kompletné grafy s odstránenou Hamiltonovou kružnicou . 26
2.3 Kompletné grafy s odstráneným cyklom 34
2.4 Kompletné grafy s odstránenou cestou 37
2.5 Kompletné grafy s odstráneným kompletným podgrafom . 43
2.6 Kompletné grafy s odstráneným hviezdicovým grafom . . . 45
2.7 Kompletné grafy s odstráneným 1-faktorom 48
2.8 Kompletné grafy s odstráneným kompletným bipartitným podgrafom 51
2.9 Počet hyperenergetických grafov 53

3 Energia špeciálnych grafov **56**
3.1 Multipartitné grafy 56
3.2 Invertovatelné grafy 59
3.3 Premostené grafy 62

4 Hľadanie minimálnej kostry grafu **68**
4.1 Borůvkov algoritmus 69

Literatúra *73*

Úvod

Táto diplomová práca sa zaoberá skúmaním niektorých špeciálnych tried grafov a hľadaním ich vlastných čísel a z nich odvodených indexov. Povieme si, čo jednotlivé indexy znamenajú, čo môžu povedať o vlastnostiach grafov a ako môžu byť takéto indexy ohraničené. Vlastné čísla grafov sú užitočným nástrojom pre skúmanie štruktúry a vlastností grafov. Svoje využite našli aj v iných vedeckých disciplínach, ako napríklad fyzika alebo molekulárna chémia. Pre veľa grafov, najmä s veľkým počtom vrcholov môže byť zložité presne vypočítať ich spektrum. Pri počítaní vlastných hodnôt grafov sa preto často siaha po numerických metódach, ktoré sú schopné dané vlastné hodnoty s pomerne veľkou presnosťou nájsť. Avšak pre niektoré ľubovoľne veľké grafy s vhodnou štruktúrou sme schopní ich vlastné hodnoty odvodiť analyticky. Cieľom našej práce bude hľadať množiny takých grafov, pre ktoré vieme vlastné hodnoty a z nich plynúce indexy vypočítať.

V prvej kapitole si predstavíme základné pojmy, ktoré budeme v práci používať. Uvedieme si definície grafových indexov ako energia grafu a spektrálna medzera. Pozrieme sa aj na niektoré známe tvrdenia a dôkazy pre horné a dolné ohraničenia pre veľkosť energie grafu. Čerpať budeme najmä z práce Dasa a Gutmana [1].

V druhej kapitole sa budeme venovať téme hyperenergetických grafov. Pre hyperenergetický graf platí, že jeho energia je vyššia ako energia kompletného grafu. Uvedieme si príklady hyperenergetických grafov a budeme hľadať postupnosti grafov, ktoré vlastnosť hyperenergetickosti spĺňajú. Grafy budeme hľadať odstraňovaním hrán a podgrafov z kompletného grafu. Uvedieme si tvrdenia, ktoré nám pomôžu nájsť vlastné hodnoty grafov. Taktiež prevedieme simulácie na niektorých triedach grafov aby sme zachytili správanie sa energie redukovaných grafov v porovnaní s energiou kompletného grafu. Ku koncu kapitoly sa pozrieme na

celkové počty izomorfných a neizomorfných hyperenergentických grafov a uvedieme si ci presné počty pre grafy s počtom vrcholov 8-10.

V tretej kapitole sa pozrieme na niektoré špeciálne triedy grafov, ukážeme odvodenie pre ohraničenia veľkosti ich energie a pre tzv. bipartitné grafy ukážeme presný vzorec pre výpočet energie grafu. Uvedieme aj pojem invertibility grafu a uvedieme si príklad tzv. pozitívne invertovateľného grafu. Nakoniec sa pozrieme na grafy, ktoré vzniknú premosťovaním menších podgrafov a taktiež sa budeme venovať ich vlastným hodnotám a sile spektra.

V poslednej kapitole si uvedieme základné poznatky k Laplaciánu grafu a vysvetlíme princíp Borůvkovho algoritmu na počesť českého matematika profesora Otakara Borůvku (* 10. máj 1899, Uherský Ostroh – † 22. júl 1995, Brno), ktorý v druhej polovici minulého storočia pôsobil na Univerzite Komenského. Tento rok 10. mája predstavuje 125. výročie narodenia tohto významného českého matematika.

Adam Sládeček, Bratislava, máj 2024.

Kapitola 1

Súhrn známych výsledkov

V tejto časti sa budeme venovať vlastným číslam grafov a z nich odvodených grafových indexov. Takéto indexy majú svoje praktické využitie najmä v chémii, keďže niektoré molekuly vieme reprezentovať príslušným grafom, kde atómy prvkov ako napríklad uhlík alebo vodík predstavujú vrcholy grafu a molekulárne väzby medzi jednotlivými atómami predstavujú hrany príslušného grafu.

Uvažujme jednoduchý graf G s množinou vrcholov $V(G) = \{v_1, \ldots, v_n\}$ a množinou hrán $E(G)$. Veľkosť tejto množiny je daná ako $|E(G)| = m$. Ďalej označme d_i ako stupeň vrchola v_i pre $i = 1, 2, \ldots, n$. Symbolom Δ budeme označovať maximálny stupeň vrcholov a symbolom δ minimálny stupeň vrcholov.

Pre vrcholy v_i a v_j platí $v_iv_j \in E(G)$, ak sú tieto vrcholy susedné. Pre maticu susednosti $A = A(G)$ grafu G platí, že $a_{ij} = 1$, ak $v_iv_j \in E(G)$, a 0 inak.

Nech $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_n$ sú usporiadané vlastné hodnoty matice $A(G)$. λ_1 sa nazýva spektrálny polomer grafu G. Pre jednoduché grafy bez slučiek platí $A_{ii} = 0$ a teda $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = tr(A) = 0$. Teda pre netriviálne grafy musí platiť $\lambda_1 > 0$ a $\lambda_n < 0$. Hovoríme, že graf je singulárny, ak má aspoň jednu nulovú vlastnú hodnotu. Ďalej nech t_k predstavuje počet cyklov veľkosti $k \leq n$ v grafe G. Niektoré dobre známe vlastnosti vlastných hodnôt

grafu sú:

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 = 2m$$
$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^3 = 6t_3$$
$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^4 = 8t_4 - 2m + 2\sum_{i=1}^{n} d_i^2$$

Prvý z grafových indexov je známy ako energia grafu a je definovaný ako

$$\Lambda_{pow}(G) = \sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|,$$

teda predstavuje súčet absolútnych hodnôt vlastných čísel grafu. Označenia V tejto kapitole si ukážeme odvodenie pre horné a dolné ohraničenia pre index Λ_{pow} pomocou počtu vrcholov, počtu hrán a determinantu matice susednosti grafu podľa [1]. V chémii energia grafu súvisí s celkovou energiou takzvaných π-väzieb.

Ďalšie zo známych grafových indexov sú

$$\Lambda_{gap}(G) = \lambda_+(A) - \lambda_-(A),$$
$$\Lambda_{ind}(G) = max\{|\lambda_+(A)|, |\lambda_-(A)|\},$$

kde $\lambda_-(A)$ predstavuje najväčšiu zápornú vlastnú hodnotu matice A a $\lambda_+(A)$ najmenšiu kladnú vlastnú hodnotu matice A. V chémií index Λ_{gap} súvisí s tzv. HOMO-LUMO medzerou, ktorá predstavuje energetický rozdiel medzi najväčším okupovaným a najmenším neokupovaným molekulárnym orbitálom.

1.1 Ohraničenia energie grafu

Pre väčšinu grafov, najmä grafov s veľkým počtom vrcholov nie sme schopní efektívne analyticky počítať vlastné hodnoty a následne z nich energiu grafu. V nasledujúcej časti si ukážeme ako môžu vyzerať niektoré horné a dolné odhady pre veľkosť energie grafu. Tvrdenia a príslušné dôkazy v tejto časti uvádzame ako príklad toho, ako môžeme pri dôkazoch tvrdení zohľadňujúcich energiu grafu postupovať. Taktiež si uvedieme lemy, ktoré budeme potrebovať pri odvodeniach daných ohraničení. Jednotlivé lemy, tvrdenia a dôkazy preberáme z článku Dasa a Gutmana [1].

Lemma 1.1. *[1, Lemma 2.1] Nech B je symetrická $p \times p$ matica, a B_k je jej hlavná $k \times k$ podmatica, teda sa skladá z prvých k riadkov a stĺpcov matice B. Potom, pre všetky $i = 1, 2, \ldots, k$, platí*

$$\rho_{p-i+1}(B) \leq \rho_{k-i+1}(B_k) \leq \rho_{k-i+1}(B),$$

kde $\rho_i(B)$ označuje i-tu najväčšiu vlastnú hodnotu matice B.

Lemma 1.2. *[1, Lemma 2.2] Nech $x_1, x_2, \ldots, x_N$ sú nezáporné čísla. Označme ich aritmetický priemer*

$$\alpha = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i$$

a geometrický priemer

$$\gamma = \left(\prod_{i=1}^{N} x_i \right)^{1/N}.$$

Potom platí,

$$\frac{1}{N(N-1)} \sum_{i<j} \left(\sqrt{x_i} - \sqrt{x_j} \right)^2 \leq \alpha - \gamma \leq \frac{1}{N} \sum_{i<j} \left(\sqrt{x_i} - \sqrt{x_j} \right)^2.$$

Navyše rovnosť platí, ak $x_1 = x_2 = \ldots = x_N$.

Lemma 1.3. *[1, Lemma 2.3] Nech $a_1, a_2, \ldots, a_n$ a $b_1, b_2, \ldots, b_n$ sú nezáporné reálne čísla. Pre $p > 1$ platí*

$$\sum_{i=1}^{n} (a_i + b_i)^p \leq \left(\sum_{i=1}^{n} a_i^p \right)^{1/p} + \left(\sum_{i=1}^{n} b_i^p \right)^{1/p}.$$

Navyše rovnosť platí, ak existujú konštanty c_1 a c_2 také, že platí $c_1 a_i = c_2 b_i \quad \forall i = 1, 2, \ldots, n$.

Lemma 1.4. *[1, Lemma 2.4] Pre vlastné hodnoty ľubovoľného grafu G platí,*

$$-\sqrt{\frac{2m(i-1)}{n(n-i+1)}} \leq \lambda_i \leq \sqrt{\frac{2m(n-i)}{ni}}, \quad \forall i = 1, 2, \ldots, n.$$

Lemma 1.5. *[1, Lemma 2.5] Nech G je graf s n vrcholmi, z ktorých ani jeden nie je izolovaný. Potom platí*

$$\lambda_1 \geq \frac{2m}{n}.$$

Rovnosť platí práve vtedy, keď graf G je regulárny.

1.1.1 Dolné ohraničenie energie grafu

V tejto časti ukážeme odvodenie pre dolné ohraničenie pre energiu grafu pomocou počtu vrcholov n, počtu hrán m a determinantu matice susednosti det$A$. Predtým ale uvedieme, niektoré známe nerovnosti.

Podľa článku [2, Theorem 2.2] platí

$$\Lambda_{pow}(G) \geq 2\sqrt{m}. \tag{1.1}$$

Rovnosť v tomto prípade nastáva ak graf G pozostáva z kompletného bipartitného grafu $K_{a,b}$, takého, že $a * b = m$ a ľubovoľne veľa izolovaných vrcholov.

McClelland vo svojej práci [3] odvodil dolné ohraničenie aj pomocou determinantu matice susednosti:

$$\Lambda_{pow}(G) \geq \sqrt{2m + n(n-1)|\det A|^{2/n}} \tag{1.2}$$

V [4, Theorem 1] bolo odvodené dolné ohraničenie pre regulárne grafy:

$$\Lambda_{pow}(G) \geq \frac{2m}{n} + n - 1 + \ln\left(\frac{n|\det A|}{2m}\right) \tag{1.3}$$

V nasledujúcom tvrdení uvádzame ďalšie dolné ohraničenie pre ľubovoľný graf G. Toto ohraničenie je presnejšie ako ohraničenie (1.2). Tvrdenie aj s dôkazom preberáme z [1].

Tvrdenie 1.1. *[1, Theorem 3.1] Nech G je jednoduchý graf s $n > 2$ vrcholmi, m hranami a maticou susednosti A. Potom platí*

$$\Lambda_{pow}(G) \geq \sqrt{2m + n(n-1)|det\ A|^{2/n} + \frac{4}{(n+1)(n-2)}\left[\sqrt{\frac{2m}{n}} - \left(\frac{2m}{n}\right)^{1/4}\right]^2} \tag{1.4}$$

Rovnosť platí, ak graf $G \cong \frac{n}{2}K_2$ (n je párne) alebo $G \cong \overline{K_n}$. To značí, že graf G je disjunktným zjednotením $\frac{n}{2}$ kópii kompletného grafu s dvoma vrcholmi alebo je komplement kompletného grafu s n vrcholmi.

Dôkaz. Komplement kompletného grafu K_n tvorí n izolovaných vrcholov a teda mu prislúcha n nulových vlastných hodnôt. Teda platí $m = 0$, det $A = 0$ a $\Lambda_{pow}(G) = 0$. Teda nerovnosť (1.4) pre tento typ grafu platí.

Ak $G \cong \frac{n}{2}K_2$ (n je párne), potom je vrcholov dvakrát viac ako hrán, teda platí $2m = n$ a det $A = (-1)^{\frac{n}{2}}$, lebo každý z K_2 podgrafov má determinant rovný -1 a teda $\Lambda_{pow}(G) = \sum_{i=1}^{n} |-1| = n$. Dosadením do (1.4) zistíme, že nerovnosť platí.

Ak ponecháme iba p hrán, vznikne graf $G \cong pK_2 \cup (n-2p)K_1$, kde $\lceil \frac{n}{2} \rceil > p \geq 1$. Pre neho platí $2m = 2p < n$, det $A = 0$ a $\Lambda_{pow}(G) = 2p$. Pre tento typ grafu je nerovnosť (1.4) splnená ostro. Pre všetky ostatné typy grafov platí, že obsahujú aspoň jeden prepojený podgraf s 2 alebo viac hranami.

Z Lemy 1.2 dostávame

$$\sum_{i=1}^{N} x_i \geq N \left(\prod_{i=1}^{N} x_i \right)^{\frac{1}{N}} + \frac{1}{N-1} \sum_{i<j} \left(\sqrt{x_i} - \sqrt{x_j} \right)^2 . \tag{1.5}$$

Označme vektor dvojíc vlastných hodnôt ako

$$(x_1, x_2, \ldots, x_N) = (|\lambda_1||\lambda_2|, |\lambda_1||\lambda_3|, \ldots, |\lambda_1||\lambda_n|, |\lambda_2||\lambda_3|, \ldots, |\lambda_{n-1}||\lambda_n|)$$

Potom platí

$$N = \binom{n}{2} = \frac{n(n-1)}{2}$$

Nech $s_{ij} = |\lambda_i||\lambda_j|$. Dosadením do 1.5 dostávame

$$\sum_{1 \leq i<j \leq n} s_{ij} \geq \frac{n(n-1)}{2} \left(\prod_{1 \leq i<j \leq n} s_{ij} \right)^{\frac{1}{\frac{n(n-1)}{2}}} + \frac{1}{\frac{n(n-1)}{2} - 1} \sum_{i<j \leq k<l} \left(\sqrt{s_{ij}} - \sqrt{s_{kl}} \right)^2 ,$$

$$\sum_{1 \leq i<j \leq n} s_{ij} \geq \frac{n(n-1)}{2} \left(\prod_{i=1}^{n} (|\lambda_i|)^{(n-1)} \right)^{\frac{2}{n(n-1)}} + \frac{2}{n^2-n-2} \sum_{i<j \leq k<l} \left(\sqrt{s_{ij}} - \sqrt{s_{kl}} \right)^2 ,$$

$$\sum_{1 \leq i<j \leq n} s_{ij} \geq \frac{n(n-1)}{2} \left(\prod_{i=1}^{n} |\lambda_i| \right)^{\frac{2}{n}} + \frac{2}{n^2-n-2} \sum_{i<j \leq k<l} \left(\sqrt{s_{ij}} - \sqrt{s_{kl}} \right)^2 ,$$

z čoho plynie

$$2 \sum_{1 \leq i<j \leq n} s_{ij} \geq n(n-1)|\det A|^{\frac{2}{n}} + \frac{4}{(n+1)(n-2)} \sum_{i<j \leq k<l} \left(\sqrt{s_{ij}} - \sqrt{s_{kl}} \right)^2 . \tag{1.6}$$

Podľa Lemy 1.4 platí pre n párne:

$$\lambda_{\frac{n}{2}} \leq \sqrt{\frac{2m}{n}}$$

a pre n nepárne:

$$\lambda_{\frac{n+1}{2}} \leq \sqrt{\frac{2m(n-1)}{n(n+1)}} < \sqrt{\frac{2m}{n}}.$$

Z lemy 1.1 vyplýva

$$\lambda_n \leq \lambda_2(A_2) = -1,$$

a teda $|\lambda_n| \geq 1$. Ďalej dostávame

$$\sum_{i<j\leq k<l} \left(\sqrt{s_{ij}} - \sqrt{s_{kl}}\right)^2 \geq \left(\sqrt{s_{1n}} - \sqrt{s_{\lceil \frac{n}{2} \rceil n}}\right)^2 + \sum_{\substack{i<j\leq k<l \\ (i,j)\neq(1,n) \\ (k,l)\neq\left(\lceil \frac{n}{2} \rceil, n\right)}} \left(\sqrt{s_{ij}} - \sqrt{s_{kl}}\right)^2$$

$$> |\lambda_n| \left(\sqrt{|\lambda_1|} - \sqrt{|\lambda_{\frac{n}{2}}|}\right)^2 \geq \left[\sqrt{\frac{2m}{n}} - \left(\frac{2m}{n}\right)^{1/4}\right]^2.$$

Dosadením tohto výsledku do (1.6) dostávame

$$2\sum_{1\leq i<j\leq n} s_{ij} > n(n-1)|\det A|^{\frac{2}{n}} + \frac{4}{(n+1)(n-2)} \left[\sqrt{\frac{2m}{n}} - \left(\frac{2m}{n}\right)^{1/4}\right]^2.$$

Pripočítaním $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 = 2m$ na obe strany dostávame

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 + 2\sum_{1\leq i<j\leq n} s_{ij}$$

$$> 2m + n(n-1)|\det A|^{\frac{2}{n}} + \frac{4}{(n+1)(n-2)} \left[\sqrt{\frac{2m}{n}} - \left(\frac{2m}{n}\right)^{1/4}\right]^2.$$

$$\left(\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|\right)^2 > 2m + n(n-1)|\det A|^{\frac{2}{n}} + \frac{4}{(n+1)(n-2)} \left[\sqrt{\frac{2m}{n}} - \left(\frac{2m}{n}\right)^{1/4}\right]^2.$$

$$\Lambda_{pow}(G) > \sqrt{2m + n(n-1)|\det A|^{\frac{2}{n}} + \frac{4}{(n+1)(n-2)} \left[\sqrt{\frac{2m}{n}} - \left(\frac{2m}{n}\right)^{1/4}\right]^2}.$$

Týmto je tvrdenie (1.1) dokázané. □

1.1.2 Horné ohraničenie energie grafu

V tejto časti ukážeme odvodenie pre horné ohraničenie energie grafu pomocou počtu vrcholov n, počtu hrán m a determinantu matice susednosti $\det A$. Nasledujúce tvrdenie aj s dôkazom preberáme z [1].

Tvrdenie 1.2. *[1, Theorem 4.1] Nech G je jednoduchý regulárny graf s n vrcholmi a m hranami. Potom platí*

$$\Lambda_{pow}(G) \leq 2m - \frac{2m}{n}\left(\frac{2m}{n} - 1\right) - \ln\left(\frac{n|\det A|}{2m}\right) \tag{1.7}$$

Rovnosť platí práve vtedy, keď $G \cong K_n$.

Dôkaz. Keďže uvažujeme regulárny graf, nutne platí $\lambda_i \neq 0, \forall i = 1, ..., n$, teda platí

$$|\det A| = \prod_{i=1}^{n} |\lambda_i| > 0.$$

Keďže je graf G regulárny, neobsahuje žiadne izolované vrcholy. Pripomeňme si, že d_i označuje stupeň i-teho vrcholu v grafe. Platí teda, že

$$2m = \sum_{i=1}^{n} d_i \geq n \quad \text{alebo,} \quad \frac{2m}{n} \geq 1.$$

Uvažujme funkciu

$$f(x) = x^2 - x + \ln x, \quad x > 0.$$

Platí

$$\frac{d}{dx} f(x) = 2x - 1 + \frac{1}{x},$$

teda funkcia f je rastúca na intervale $[1, \infty)$ a klesajúca na intervale $(0, 1]$.

Preto $\forall x > 0 : f(x) > f(1) = 0$, čo implikuje $\forall x > 0 : x \leq x^2 - \ln x$. Rovnosť nastáva len v prípade, keď $x = 1$.

Pomocou tohto výsledku pre energiu grafu dostávame

$$\begin{aligned}
\Lambda_{pow}(G) = \sum_{i=1}^{n} |\lambda_i| &= \lambda_1 + \sum_{i=2}^{n} |\lambda_i| \leq \lambda_1 + \sum_{i=2}^{n} (\lambda_i^2 - \ln |\lambda_i|) \\
&= \lambda_1 + 2m - \lambda_1^2 - \ln \left(\prod_{i=1}^{n} |\lambda_i| \right) + \ln \lambda_1 \\
&= 2m + \lambda_1 - \lambda_1^2 - \ln |\det A| + \ln \lambda_1.
\end{aligned}$$

Uvažujme funkciu $g(x) = 2m + x - x^2 - \ln |\det A| + \ln x$. Táto funkcia je klesajúca na intervale $[1, \infty)$. Z lemy 1.5 máme $\lambda_1 \geq \frac{2m}{n} \geq 1$. Preto platí

$$\begin{aligned}
\Lambda_{pow}(G) \leq g(\lambda_1) \leq g(\frac{2m}{n}) &\leq 2m + \lambda_1 - \lambda_1^2 - \ln |\det A| + \ln \lambda_1 \\
&\leq 2m + \frac{2m}{n} - \left(\frac{2m}{n} \right)^2 - \ln |\det A| + \ln \left(\frac{2m}{n} \right) \\
&\leq 2m - \frac{2m}{n} \left(\frac{2m}{n} - 1 \right) - \ln \left(\frac{n |\det A|}{2m} \right),
\end{aligned}$$

čím je nerovnosť (1.7) dokázaná. □

1.1.3 Nordhausovo-Gaddumovo ohraničenie

V tejto časti sa pozrieme na ďalšie horné a dolné ohraničenia pre jednoduchý graf G a jeho komplement $\overline{G}$. Nasledujúce dve tvrdenia spolu s dôkazmi preberáme z [1].

Tvrdenie 1.3. *[1, Theorem 5.1] Nech G a $\overline{G}$ sú jednoduché súvislé regulárne grafy a nech G má n vrcholov a m hrán. Potom platí*

$$3(n-1)+\ln\left(\frac{n^2|det(A\overline{A})|}{2m(n(n-1)-2m)}\right)\leq\Lambda_{pow}(G)+\Lambda_{pow}(\overline{G})\leq 2(n-1)$$

$$+\frac{4m(n(n-1)-2m)}{n^2}-\ln\left(\frac{n^2|det(A\overline{A})|}{2m(n(n-1)-2m)}\right). \tag{1.8}$$

Dôkaz. Z (1.3) dostávame

$$\Lambda_{pow}(G)+\Lambda_{pow}(\overline{G})\geq\frac{2m+2\overline{m}}{n}+2(n-1)+\ln\left(\frac{n|\det A|}{2m}\right)+\ln\left(\frac{n|\det\overline{A}|}{2\overline{m}}\right),$$

kde $\overline{m}$ resp. $\overline{A}$ sú počet vrcholov resp. matica susednosti grafu $\overline{G}$.

Hrany grafu G a $\overline{G}$ spolu tvoria kompletný graf K_n. Preto platí $2m+2\overline{m}=n(n-1)$. Z toho vyplýva

$$\Lambda_{pow}(G)+\Lambda_{pow}(\overline{G})\geq(n-1)+2(n-1)+\ln\left(\frac{n^2|\det(A)||\det(\overline{A})|}{2m2\overline{m}}\right)$$
$$\Lambda_{pow}(G)+\Lambda_{pow}(\overline{G})\geq 3(n-1)+\ln\left(\frac{n^2|\det(A\overline{A})|}{2m(n(n-1)-2m)}\right).$$

Z 1.2 dostávame

$$\begin{aligned}
&\Lambda_{pow}(G) + \Lambda_{pow}(\overline{G}) \\
&\leq 2m + 2\overline{m} - \frac{2m}{n}\left(\frac{2m}{n} - 1\right) - \frac{2\overline{m}}{n}\left(\frac{2\overline{m}}{n} - 1\right) \\
&- \ln\left(\frac{n|\det A|}{2m}\right) - \ln\left(\frac{n|\det \overline{A}|}{2\overline{m}}\right) \\
&\leq 2m + 2\overline{m} + \frac{2m + 2\overline{m}}{n} - \frac{4m^2 + 4\overline{m}^2}{n^2} - \ln\left(\frac{n|\det A|}{2m}\right) - \ln\left(\frac{n|\det \overline{A}|}{2\overline{m}}\right) \\
&\leq n(n-1) + (n-1) - \frac{(2m + 2\overline{m})^2 - 8m\overline{m}}{n^2} - \ln\left(\frac{n^2|\det(A\overline{A})|}{2m(n(n-1) - 2m)}\right) \\
&\leq (n-1)(n+1) - (n-1)^2 + \frac{8m\overline{m}}{n^2} - \ln\left(\frac{n^2|\det(A\overline{A})|}{2m(n(n-1) - 2m)}\right) \\
&\leq (n+1-n+1)(n-1) + \frac{8m(\frac{n(n-1)-2m}{2})}{n^2} - \ln\left(\frac{n^2|\det(A\overline{A})|}{2m(n(n-1) - 2m)}\right) \\
&\leq 2(n-1) + \frac{4m(n(n-1) - 2m)}{n^2} - \ln\left(\frac{n^2|\det(A\overline{A})|}{2m(n(n-1) - 2m)}\right).
\end{aligned}$$

Tým je dôkaz tvrdenia 1.3 hotový. □

Tvrdenie 1.4. *[1, Theorem 5.2] Nech G je graf s n vrcholmi a m hranami. Potom platí*

$$\begin{aligned}
&\Lambda_{pow}(G) + \Lambda_{pow}(\overline{G}) \leq n + \Delta - \delta - 1 \\
&+ \left[(n-1)\left(n - 1 + \frac{4m(n(n-1) - 2m)}{n^2} + a_{m,n}\right)\right]^{\frac{1}{2}},
\end{aligned}$$

kde $a_{m,n} = \frac{2}{n^2}\sqrt{2m(2m+n)(n^2-2m)(n^2-2m-n)}$ a Δ a δ sú maximálny a minimálny stupeň vrchola v grafe G.

Dôkaz. Z lemy 1.3 vyplýva

$$\left(\sum_{i=2}^{n}(|\lambda_i| + |\overline{\lambda_i}|)^2\right)^{\frac{1}{2}} \leq \left(\sum_{i=2}^{n}\lambda_i^2\right)^{\frac{1}{2}} + \left(\sum_{i=2}^{n}\overline{\lambda_i}^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

Keďže platí

$$\sum_{i=1}^{n}\lambda_i^2 = 2m \quad , \quad \sum_{i=1}^{n}\overline{\lambda_i}^2 = 2\overline{m} \quad , \quad \lambda_1 \geq \frac{2m}{n} \quad , \quad \overline{\lambda_1} \geq \frac{2\overline{m}}{n},$$

dostávame

$$\sum_{i=2}^{n}(|\lambda_i|+|\overline{\lambda_i}|)^2 \leq \sum_{i=2}^{n}\lambda_i^2+\sum_{i=2}^{n}\overline{\lambda_i}^2+2\sqrt{\sum_{i=2}^{n}\lambda_i^2\sum_{i=2}^{n}\overline{\lambda_i}^2}$$
$$= 2m-\lambda_1^2+2\overline{m}-\overline{\lambda_1}^2+2\sqrt{(2m-\lambda_1^2)\left(2\overline{m}-\overline{\lambda_1}^2\right)}$$
$$\leq n(n-1)-\frac{4m^2+4\overline{m}^2}{n^2}+2\sqrt{\frac{4m\overline{m}}{n^4}(n^2-2m)(2m+n)}$$
$$= n-1+\frac{4m(n(n-1)-2m)}{n^2}+\frac{2}{n^2}\sqrt{2m(n^2-2m-n)(n^2-2m)(2m+n)}. \tag{1.9}$$

Označme $a_{m,n}=\frac{2}{n^2}\sqrt{2m(2m+n)(n^2-2m)(n^2-2m-n)}$. Keďže $\lambda_1 \leq \Delta$ a $\overline{\lambda_1} \leq n-\delta-1$, dostávame použitím Cauchy-Schwarz nerovnosti

$$\Lambda_{pow}(G)+\Lambda_{pow}(\overline{G}) = |\lambda_1|+|\overline{\lambda_1}|+\sum_{i=2}^{n}(|\lambda_i|+|\overline{\lambda_i}|)$$
$$\leq \Delta+n-\delta-1+\sqrt{(n-1)\sum_{i=2}^{n}(|\lambda_i|+|\overline{\lambda_i}|)^2}.$$

Dosadením (1.9) dostávame

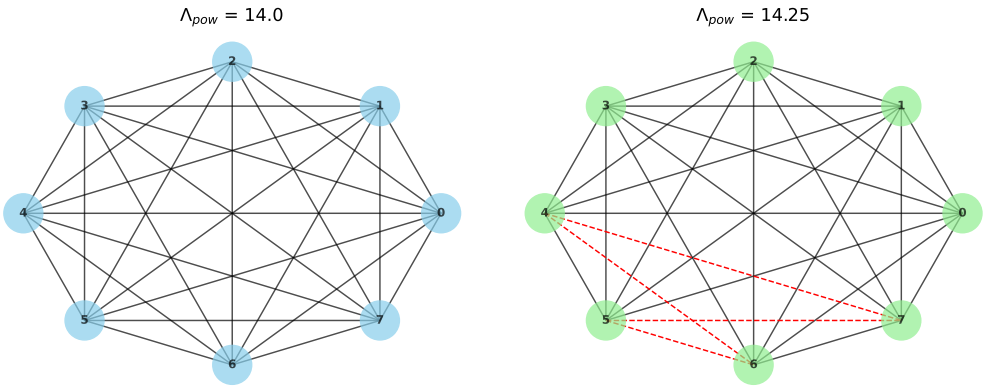
$$\Lambda_{pow}(G)+\Lambda_{pow}(\overline{G}) \leq \Delta+n-\delta-1$$
$$+\sqrt{(n-1)(n-1+\frac{4m(n(n-1)-2m)}{n^2}+a_{m,n})}.$$

Čím je dôkaz tvrdenia (1.4) hotový. □

Kapitola 2

Hyperenergetické a hypoenergetické grafy

Pre grafy s počtom vrcholov menším alebo rovným 7 platí, že najväčšiu energiu dosahuje kompletný graf ($\Lambda_{pow}(K_n) = 2n - 2$). Pre grafy s počtom vrcholov 8 a viac sa táto situácia mení a sme schopní nájsť grafy, ktorých energia je väčšia ako energia kompletného grafu aj napriek tomu, že obsahujú menej hrán, viď obr. 2.1.



Obr. 2.1: Príklad kompletného grafu s počtom vrcholov 8 v porovnaní s hyperenergetickým grafom. V tomto prípade sme kompletnému grafu odstránili 4 hrany.

Nech K_n je kompletný graf na n vrcholoch a nech G_k je graf na $1 \leq k \leq n$ vrcholoch. Pomocou $K_n^{-G_k}$ označíme graf na n vrcholoch, ktorý vznikne

odstránením podgrafu G_k z K_n. Jeho matica susednosti bude mať tvar

$$A(K_n^{-G_k}) = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_k\mathbf{1}_k^T - I_k - G_k & \mathbf{1}_k^T\mathbf{1}_m^T \\ \mathbf{1}_m^T\mathbf{1}_k^T & \mathbf{1}_m^T\mathbf{1}_m^T - I_m \end{pmatrix}, \tag{2.1}$$

kde $m = n-k$, I_k je $k \times k$ matica identity a $\mathbf{1}_k = (1, 1, ..., 1)^T \in \mathbf{R}^k$ je vektor jednotiek. Maticu $A(K_n^{-G_k})$ budeme pre jednoduchosť označovať ako A.

Nech $\lambda \in \mathbf{R}$ je vlastné číslo matice A, t.j $\exists(x, y) \in \mathbf{R}^k \times \mathbf{R}^m$, $(x, y) \neq (0, 0)$ taký, že platí

$$A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}.$$

Teda musia byť splnené rovnosti

$$\begin{aligned} \mathbf{1}_k\mathbf{1}_k^T x - x - G_k x + \mathbf{1}_k\mathbf{1}_m^T y &= \lambda x \\ \mathbf{1}_m\mathbf{1}_k^T x + \mathbf{1}_m\mathbf{1}_m^T y - y &= \lambda y. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Označme $\alpha = \mathbf{1}_k^T x$ a $\beta = \mathbf{1}_m^T y$. Potom je 2.2 ekvivalentné s

$$(\alpha + \beta)\mathbf{1}_k = (G_k + (\lambda + 1)I_k)x \tag{2.3}$$

$$(\alpha + \beta)\mathbf{1}_m = (\lambda + 1)y. \tag{2.4}$$

Tvrdenie 2.1. *$\lambda = -1$ je vlastná hodnota matice A s násobnosťou $p+n-k-1$, kde $p = dim(Ker(G_k))$.*

Dôkaz. Ak $\lambda = -1 \in \sigma(A)$, potom z 2.4 vyplýva $\alpha + \beta = 0$ a z 2.3 vyplýva $G_k x = 0$. Dimenzia priestoru $\{y \in \mathbf{R}^m, \mathbf{1}_m^T y = 0\}$ je presne $m-1 = n-k-1$. Preto platí

$$\begin{aligned} &dim(\{(x, y) \in \mathbf{R}^k \times \mathbf{R}^m, G_k x = 0, \mathbf{1}_k^T x + \mathbf{1}_m^T y = 0\}) = \\ &dim(Ker(G_k)) + m - 1 = p + n - k - 1. \end{aligned}$$

□

Tvrdenie 2.2. *Predpokladajme, že $\lambda \neq -1$ a $G_k + (\lambda+1)I_k$ je regulárna matica, t.j $-(\lambda + 1) \notin \sigma(G_k)$. Potom $\lambda \in \sigma(A) \iff \lambda$ je riešením disperznej rovnice*

$$\frac{\lambda + 1 - n + k}{\lambda + 1} = \mathbf{1}_k^T(G_k + (\lambda + 1)I_k)^{-1}\mathbf{1}_k. \tag{2.5}$$

Dôkaz. Nech $\lambda \in \sigma(A)$ je vlastná hodnota s nenulovým vlastným vektorom $(x, y) \neq (0, 0)$. Potom z 2.3 a 2.4 vyplýva

$$\begin{aligned} x &= (\alpha + \beta)(G_k + (\lambda + 1)I_k)^{-1}\mathbf{1}_k, \\ y &= \frac{\alpha + \beta}{\lambda + 1}\mathbf{1}_m, \end{aligned}$$

kde $\alpha = \mathbf{1}_k^T x$ a $\beta = \mathbf{1}_m^T y$ a $m = n - k$. Zrejme platí $\alpha + \beta \neq 0$, inak by nebola splnená podmienka $(x, y) \neq (0, 0)$. Naviac platí $\beta \neq 0$, lebo

$$\beta = \mathbf{1}_m^T y = \frac{\alpha + \beta}{\lambda + 1} \mathbf{1}_m^T \mathbf{1}_m = \frac{\alpha + \beta}{\lambda + 1} m \neq 0.$$

Ďalej platí

$$\alpha + \beta = \frac{\lambda + 1}{m} \beta \implies \alpha = \frac{\lambda + 1 - m}{m} \beta.$$

Nakoniec

$$\alpha = \mathbf{1}_k^T x = (\alpha + \beta) \mathbf{1}_k^T (G_k + (\lambda + 1) I_k)^{-1} \mathbf{1}_k.$$

Keďže platí $\frac{\alpha}{\alpha+\beta} = \frac{\lambda+1-m}{\lambda+1}$, dostávame, že λ rieši rovnicu

$$\frac{\lambda + 1 - m}{\lambda + 1} = \mathbf{1}_k^T (G_k + (\lambda + 1) I_k)^{-1} \mathbf{1}_k,$$

čo znamená, že rieši 2.5. □

Tvrdenie 2.3. *Predpokladajme, že $\lambda \neq -1$ a $-(\lambda + 1) \in \sigma(G_k)$. Potom λ je vlastná hodnota A s násobnosťou $dim(Ker(G_k + (\lambda + 1) I_k - \frac{\lambda+1}{\lambda+1-m} \mathbf{1}_k \mathbf{1}_k^T))$.*

Dôkaz. Ak $(x, y) \neq (0, 0)$ je vlastný vektor , tak

$$(G_k + (\lambda + 1) I_k) x = (\alpha + \beta) \mathbf{1}_k$$
$$y = \frac{\alpha + \beta}{\lambda + 1} \mathbf{1}_m.$$

Z rovnice pre y plynie

$$\beta = \mathbf{1}_m^T y = \frac{\alpha + \beta}{\lambda + 1} m \implies \beta = \frac{\alpha m}{\lambda + 1 - m}$$
$$\implies \alpha + \beta = \left(1 + \frac{m}{\lambda + 1 - m}\right) \alpha = \frac{\lambda + 1}{\lambda + 1 - m} \mathbf{1}_k^T x.$$

Teda platí

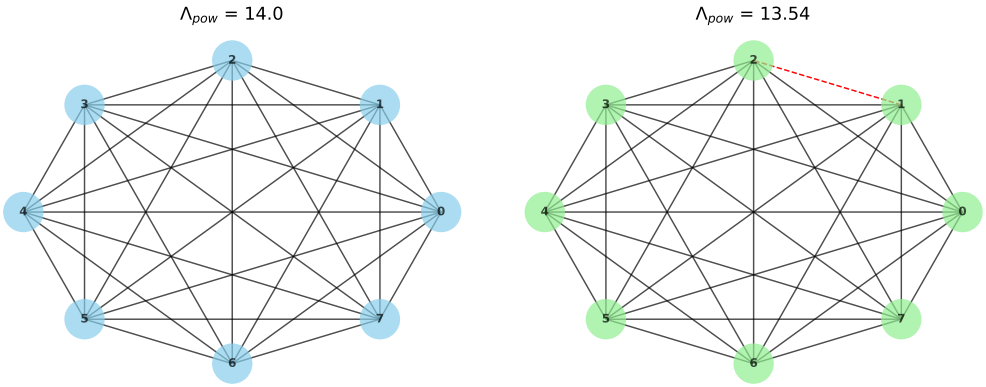
$$(G_k + (\lambda + 1) I_k) x = \frac{\lambda + 1}{\lambda + 1 - m} \mathbf{1}_k \mathbf{1}_k^T x$$
$$\left(G_k + (\lambda + 1) I_k - \frac{\lambda + 1}{\lambda + 1 - m} \mathbf{1}_k \mathbf{1}_k^T\right) x = 0$$
$$\implies x \in Ker \left(G_k + (\lambda + 1) I_k - \frac{\lambda + 1}{\lambda + 1 - m} \mathbf{1}_k \mathbf{1}_k^T\right).$$

□

2.1 Kompletné grafy s jednou odstránenou hranou

Nech K_n je kompletný graf s n vrcholmi. Potom K_n^{-e} bude označovať graf, ktorý vznikne z kompletného grafu odstránením jednej hrany, viď obr. 2.2. Matica susednosti takéhoto grafu je určená vzťahom 2.1 pre $k = 2$ a

$$G_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$



Obr. 2.2: Príklad kompletného grafu s počtom vrcholov 8 v porovnaní s redukovaným grafom, ktorému sme odstránili jednu hranu.

Spustením simulácie pre $n \in \{2, 3, ..., 15\}$ sa zdá, že energia K_n^{-e} je vždy menšia ako energia kompletného grafu. Pre väčšie n sa energie grafov prakticky zhodujú, viď obr. 2.3.

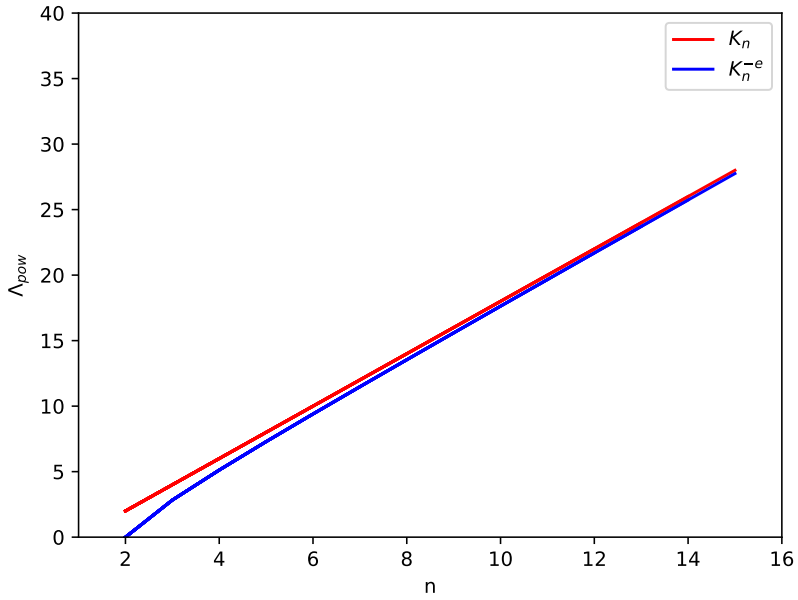
Tvrdenie 2.4. $\Lambda_{pow}(K_n^{-e}) < \Lambda_{pow}(K_n) \quad \forall n \geq 2.$

Dôkaz. Pre energiu kompletného grafu platí $\Lambda_{pow}(K_n) = 2n - 2$, kde n predstavuje počet vrcholov v grafe.

Matica G_2 je regulárna matica, teda podľa tvrdenia 2.1 bude $p = 0$ a počet vlastných hodnôt $A(K_n^{-e})$ rovných -1 bude $n - 3$.

Z tvrdenia 2.3 výplýva, že ak $\lambda \neq -1$ a $-(\lambda+1) \in \sigma(G_2)$ (t.j $\lambda = 0$ alebo $\lambda = -2$), bude vlastná hodnota matice $A(K_n^{-e})$ s násobnosťou

$$dim\left(Ker\begin{pmatrix} \lambda+1-\frac{\lambda+1}{\lambda+3-n} & 1-\frac{\lambda+1}{\lambda+3-n} \\ 1-\frac{\lambda+1}{\lambda+3-n} & \lambda+1-\frac{\lambda+1}{\lambda+3-n} \end{pmatrix}\right) = \begin{cases} 1 & \text{ak } \lambda = 0, \\ 0 & \text{ak } \lambda = -2. \end{cases}$$



Obr. 2.3: Porovanie energií kompletných grafov a grafov s jednou odstránenou hranou.

Teda dostávame ďalšiu vlastnú hodnotu $\lambda = 0$. Nakoniec, ak platí $\lambda \neq -1$ a $-(\lambda+1) \notin \sigma(G_2)$ (t.j $\lambda \neq 0$, $\lambda \neq -2$), tak podľa tvrdenia 2.2 platí, že $\lambda \in \sigma(A(K_n^{-e})) \iff \lambda$ rieši disperznú rovnicu

$$\frac{\lambda+1-n+2}{\lambda+1} = \begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda+1 & 1\\ 1 & \lambda+1\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}.$$

Keďže platí

$$\begin{pmatrix}\lambda+1 & 1\\ 1 & \lambda+1\end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{(\lambda+1)^2-1}\begin{pmatrix}\lambda+1 & -1\\ -1 & \lambda+1\end{pmatrix},$$

dostávame

$$\frac{\lambda-n+3}{\lambda+1} = \frac{1}{\lambda(\lambda+2)}\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda+1 & -1\\ -1 & \lambda+1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{2}{\lambda+2},$$
$$(\lambda+3-n)(\lambda+2) = 2(\lambda+1),$$
$$\lambda^2+(3-n)\lambda+4-2n = 0,$$

$$\lambda^{\pm} = \frac{n-3\pm\sqrt{n^2-2n-7}}{2}, \; |\lambda^-| = -\lambda^- = \frac{\sqrt{n^2+2n-7}-(n-3)}{2}.$$

Týmto sme dostali zvyšné dve vlastné hodnoty. Energia grafu K_n^{-e} teda bude

$$\Lambda_{pow}(K_n^{-e}) = \sum_{i=1}^{n} |\lambda_i| = (n-3)|-1|+|\lambda_+|+|\lambda^-|+1*|0| = n-3+\sqrt{n^2+2n-7}.$$

Platí

$$\begin{aligned} n^2+2n-7 &< n^2+2n+1 \\ n^2+2n-7 &< (n+1)^2 \\ \sqrt{n^2+2n-7} &< n+1 \\ n-3+\sqrt{n^2+2n-7} &< 2n-2 \\ \Lambda_{pow}(K_n^{-e}) &< \Lambda_{pow}(K_n) \quad \forall n \geq 2. \end{aligned}$$

□

Dôsledok 2.1. *Pre každé $n \geq 2$ platí*

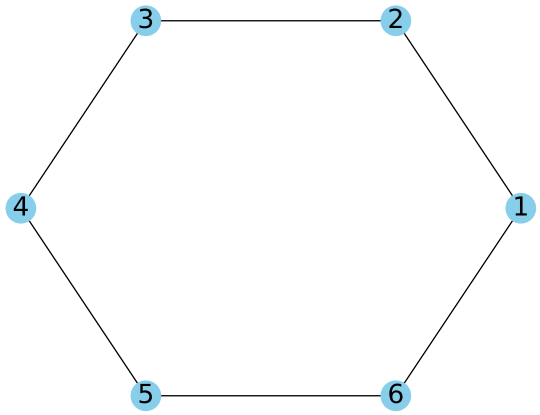
$$\frac{\Lambda_{pow}(K_n^{-e})}{\Lambda_{pow}(K_n)} < 1 \; a \; \lim_{n\to\infty} \left(\frac{\Lambda_{pow}(K_n^{-e})}{\Lambda_{pow}(K_n)} \right) = 1,$$

teda sme dostali nekonečnú hypoenergetickú postupnosť grafov.

2.2 Kompletné grafy s odstránenou Hamiltonovou kružnicou

Cyklus alebo kružnica je každý graf tvorený uzavretou postupnosťou prepojených vrcholov. Graf cyklu je označovaný ako C_k. Hamiltonova kružnica predstavuje cyklus obsahujúci všetky vrcholy grafu. Príklad cyklu uvádzame na obrázku 2.4.

Odstránením jednej hrany nie je možné zvýšiť energiu grafu. Môžme skúsiť odstrániť viacero hrán a pozrieť sa ako sa bude vyvíjať energia grafov. Odstránením Hamiltonovej kružnice, teda n hrán z tohto grafu vznikne graf, ktorý označíme K_n^{-c}. Pre počet vrcholov 12 máme takýto graf znázornený na obrázku 2.5. Predpis matice susednosti takéhoto grafu



Obr. 2.4: Príklad cyklu so šiestimi vrcholmi.

bude vzťah 2.1 pre $k = n$ a

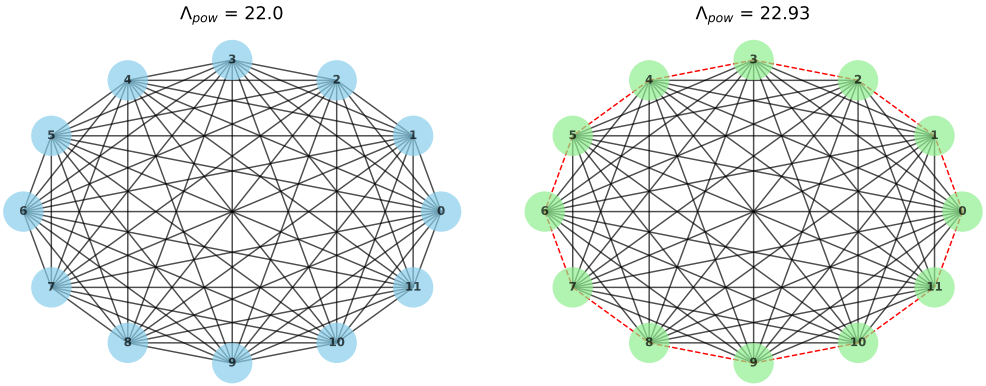
$$G_n = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Matica susednosti bude mať tvar

$$A(K_n^{-c}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & \cdots & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 1 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Môžme spustiť simuláciu pre tento typ grafov a porovnať ich energiu s energiou kompletného grafu.

Na obrázku 2.6 vidíme, že do veľkosti grafu $n = 500$ rastie energia kompletných grafov pomalšie ako energia redukovaných grafov. Pre grafy do veľkosti 9 je energia kompletného grafu vyššia ako energia redukovaného grafu.



Obr. 2.5: Príklad kompletného grafu s počtom vrcholov 12 v porovnaní s redukovaným grafom, z ktorého sme odstránili Hamiltonovu kružnicu.

Naša matica susednosti predstavuje tzv. Toeplitzovu cirkulantnú maticu. Nasledujúcu definíciu a lemu preberáme z [5].

Definícia 2.1. *[5, Definition 1]* $n \times n$ *matica tvaru*

$$C = \begin{bmatrix} c_0 & c_{n-1} & \cdots & c_2 & c_1 \\ c_1 & c_0 & c_{n-1} & & c_2 \\ \vdots & c_1 & c_0 & \ddots & \vdots \\ c_{n-2} & & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ c_{n-1} & c_{n-2} & \cdots & c_1 & c_0 \end{bmatrix}$$

sa nazýva Toeplitzova cirkulantná matica.

Lemma 2.1. *Vlastné hodnoty* $n \times n$ *cirkulantnej matice sú dané predpisom:*

$$\lambda_j = c_0 + c_1\omega_j + c_2\omega_j^2 + \cdots + c_{n-1}\omega_j^{(n-1)}, \quad j = 0, 1, \ldots, n-1,$$

kde

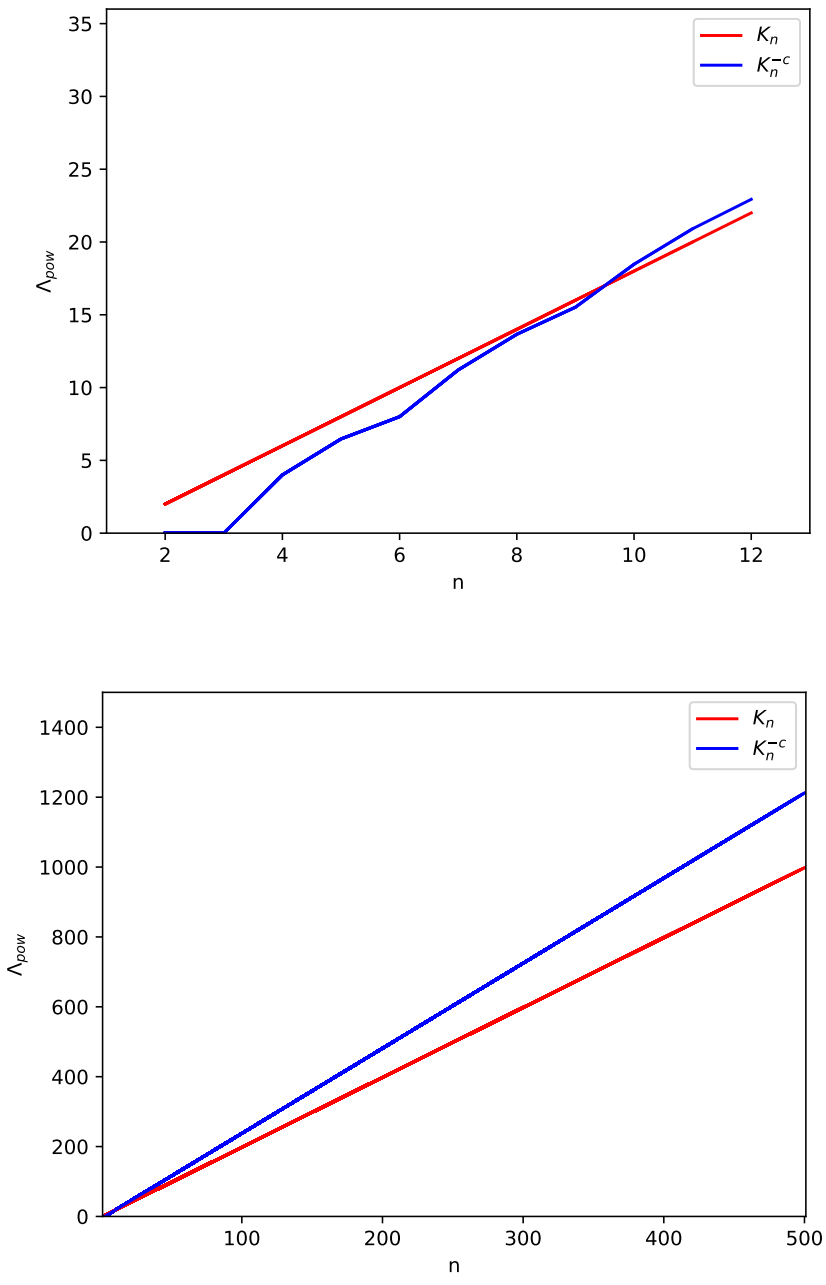
$$\omega_j = \exp\left(\tfrac{2\pi j}{n} i\right).$$

$\omega_0, ..., \omega_{n-1}$ *sú komplexnými koreňmi rovnice* $z^n = 1$. *Pre tieto koreňe platí*

$$\sum_{k=0}^{n-1} \omega_j^k = 0. \tag{2.6}$$

V našom prípade je $c_0 = c_1 = c_{n-1} = 0$ *a* $c_i = 1$ *pre* $i = 2, ..., n-2$.

Tvrdenie 2.5. $\Lambda_{pow}(K_n^{-c}) > \Lambda_{pow}(K_n) \quad \forall n \geq 10.$



Obr. 2.6: Porovanie energií kompletných grafov a grafov s odstráneným cyklom.

Dôkaz. Matica $A(K_n^{-c})$ je symetrická, teda bude nadobúdať len reálne vlastné hodnoty, a platí

$$\lambda_j = \sum_{k=0}^{n-1} c_k \Re\omega_j^k,$$

kde

$$\Re\omega_j^k = \Re \exp\left(\tfrac{2\pi kj}{n} i\right) = \cos\left(\frac{2\pi jk}{n}\right).$$

Pre n párne platí:

$$\Re\omega_n^k = \cos(2\pi k) = 1,$$
$$\Re\omega_{\frac{n}{2}}^k = \cos(\pi k) = (-1)^k.$$

Pre $j = 1, ..., \frac{n}{2} - 1$ platí:

$$\Re\omega_{n-j}^k = \cos\left(\frac{2\pi(n-j)k}{n}\right) = \cos\left(2\pi k - \frac{2\pi jk}{n}\right) = \cos\left(\frac{2\pi jk}{n}\right) = \Re\omega_j^k.$$

Ak je n nepárne, platí:

$$\Re\omega_n^k = \cos(2\pi k) = 1,$$

Pre $j = 1, ..., \frac{n-1}{2}$ platí:

$$\Re\omega_{n-j}^k = \cos\left(\frac{2\pi(n-j)k}{n}\right) = \cos\left(2\pi k - \frac{2\pi jk}{n}\right) = \cos\left(\frac{2\pi jk}{n}\right) = \Re\omega_j^k.$$

Pre λ_n platí

$$\lambda_n = \sum_{k=0}^{n-1} c_k \Re\omega_n^k = \sum_{k=0}^{n-1} c_k \cos(2\pi k) = \sum_{k=2}^{n-2} 1 = n - 3.$$

Použitím (2.6) pre $j = 1, ..., n-1$ platí

$$\lambda_j = \sum_{k=0}^{n-1} c_k \Re\omega_j^k = \sum_{k=2}^{n-2} \Re\omega_j^k = -1 - \Re\omega_j - \Re\omega_j^{n-1} = -1 - 2\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right).$$

Aj v tomto prípade vieme jednoducho ukázať, že pre párne n platí

$$\lambda_{\frac{n}{2}} = 1,$$
$$\lambda_{n-j} = \lambda_j, \quad j = 1, ..., \frac{n}{2} - 1$$

a pre nepárne n platí

$$\lambda_{n-j} = \lambda_j, \quad j = 1, ..., \frac{n-1}{2}.$$

Teda platí

$$\Lambda_{pow}(K_n^{-c}) = \begin{cases} 2\sum_{j=1}^{\frac{n}{2}-1} \left|1 + 2\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right)\right| + n - 2 & \text{ak n je párne} \\ 2\sum_{j=1}^{\frac{n-1}{2}} \left|1 + 2\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right)\right| + n - 3 & \text{ak n je nepárne.} \end{cases} \tag{2.7}$$

Uvažujme ďalej grafy s počtom vrcholov $n = 6k$, pre $k \geq 2$. Energia takýchto grafov bude daná vzťahom

$$\Lambda_{pow}(K_{6k}^{-c}) = 2\sum_{j=1}^{3k-1} \left|1 + 2\cos\left(\frac{2\pi j}{6k}\right)\right| + 6k - 2$$

Označme $f(j,k) = 1 + 2\cos\left(\frac{\pi j}{3k}\right)$. Platí

$$\begin{cases} f(j,k) \geq 0, \text{ pre } j = 1, ..., 2k, \\ f(j,k) < 0, \text{ pre } j = 2k+1, ..., 3k-1. \end{cases}$$

Teda energia grafu sa dá napísať ako

$$\Lambda_{pow}(K_{6k}^{-c}) = 2\sum_{j=1}^{2k} f(j,k) - 2\sum_{j=2k+1}^{3k-1} f(j,k) + 6k - 2,$$

$$\Lambda_{pow}(K_{6k}^{-c}) = 2\left(\sum_{j=1}^{k} f(j,k) + f(j+k,k) - f(j+2k,k)\right) + 2f(3k,k) + 6k - 2.$$

Platí $f(3k,k) = 1 + 2cos(\pi) = -1$ a

$$f(j+k,k) = 1 + 2\cos\left(\frac{\pi(j+k)}{3k}\right) = 1 + 2\cos\left(\frac{\pi j}{3k} + \frac{\pi}{3}\right),$$

$$f(j+k,k) = 1 + 2\left(\cos\left(\frac{\pi j}{3k}\right)\cos\left(\frac{\pi}{3}\right) - \sin\left(\frac{\pi j}{3k}\right)\sin\left(\frac{\pi}{3}\right)\right),$$

$$f(j+k,k) = 1 + \cos\left(\frac{\pi j}{3k}\right) - \sqrt{3}\sin\left(\frac{\pi j}{3k}\right).$$

Podobne dostaneme

$$f(j+2k,k) = 1 - \cos\left(\frac{\pi j}{3k}\right) - \sqrt{3}\sin\left(\frac{\pi j}{3k}\right)$$

a teda pre energiu grafu platí

$$\Lambda_{pow}(K_{6k}^{-c}) = 8\sum_{j=1}^{k}\cos\left(\frac{\pi j}{3k}\right) + 8k - 4.$$

Súčet kosínusov vieme reprezentovať pomocou tzv. Dirichletovho jadra nasledovne

$$D_k(\Theta) = 1 + 2\sum_{j=1}^{k}\cos(j\Theta) = \frac{\sin\left(\left(k+\frac{1}{2}\right)\Theta\right)}{\sin(\frac{\Theta}{2})}.$$

V našom prípade platí

$$\begin{aligned}
1 + 2\sum_{j=1}^{k}\cos(j\frac{\pi}{3k}) &= \frac{\sin\left(\left(k+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{3k}\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right)} \\
&= \frac{\sin\left(\frac{\pi}{3}+\frac{\pi}{6k}\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right)} = \frac{\sin\left(\frac{\pi}{3}\right)\cos\left(\frac{\pi}{6k}\right)+\cos\left(\frac{\pi}{3}\right)\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right)}, \\
1 + 2\sum_{j=1}^{k}\cos(j\frac{\pi}{3k}) &= \frac{\frac{\sqrt{3}}{2}\cos\left(\frac{\pi}{6k}\right)+\frac{1}{2}\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\cot\left(\frac{\pi}{6k}\right)+\frac{1}{2}. \\
8\sum_{j=1}^{k}\cos(j\frac{\pi}{3k}) &= -2 + 2\sqrt{3}\cot\left(\frac{\pi}{6k}\right).
\end{aligned}$$

Teda platí

$$\Lambda_{pow}(K_{6k}^{-c}) = 2\left(\sqrt{3}\cot\left(\frac{\pi}{6k}\right) + 4k - 3\right).$$

Ostáva nám ukázať, že energia redukovaných grafov je pre $k \geq 2$ vždy väčšia ako energia kompletného grafu, teda že platí

$$\forall k \geq 2 :\ 2\left(\sqrt{3}\cot\left(\frac{\pi}{6k}\right) + 4k - 3\right) > 12k - 2.$$

Označme

$$f(k) = \frac{\sqrt{3}\cot\left(\frac{\pi}{6k}\right) + 4k - 3}{6k-1}.$$

Dá sa ukázať, že táto funkcia je rastúca pre $k \geq 2$. Platí $f(2) \approx 1.04$ a

$$\begin{aligned}
\lim_{k\to\infty} f(k) &= \lim_{k\to\infty}\frac{\sqrt{3}\frac{\cos\left(\frac{\pi}{6k}\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right)} + 4k - 3}{6k-1} = \lim_{k\to\infty}\frac{\sqrt{3}\cos\left(\frac{\pi}{6k}\right) + 4k\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right) - 3\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right)(6k-1)}, \\
\lim_{k\to\infty} f(k) &= \frac{\lim_{k\to\infty}\sqrt{3}\cos\left(\frac{\pi}{6k}\right) + 4k\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right) - 3\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right)}{\lim_{k\to\infty}\frac{\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right)}{\frac{1}{6k-1}}}.
\end{aligned}$$

V menovateli môžeme použiť L´Hospitalovo pravidlo a dostaneme

$$\lim_{k\to\infty} f(k) = \frac{\sqrt{3}\lim_{k\to\infty}\cos\left(\frac{\pi}{6k}\right) + 4\lim_{k\to\infty} k\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right) - 3\lim_{k\to\infty}\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right)}{\lim_{k\to\infty}\frac{-\frac{\pi\cos\left(\frac{\pi}{6k}\right)}{6k^2}}{-\frac{6}{(6k-1)^2}}},$$

$$\lim_{k\to\infty} f(k) = \frac{\sqrt{3} + 4\lim_{k\to\infty} k\sin\left(\frac{\pi}{6k}\right)}{\lim_{k\to\infty}\frac{\pi\cos\left(\frac{\pi}{6k}\right)(6k-1)^2}{36k^2}} = \frac{\sqrt{3} + 4\frac{\pi}{6}\lim_{x\to 0}\frac{1}{x}\sin(x)}{\pi\lim_{k\to\infty}\cos\left(\frac{\pi}{6k}\right)\left(\frac{6k-1}{6k}\right)^2}$$
$$= \frac{\sqrt{3} + \frac{2\pi}{3}}{\pi} \approx 1.22.$$

Teda naozaj platí

$$\Lambda_{pow}(K_{6k}^{-c}) > \Lambda_{pow}(K_{6k}) \quad \forall k \geq 2,$$

čím dostávame nekonečnú postupnosť hyperenergetických grafov.

Pre počet vrcholov n nie nutne deliteľný šiestimi môžeme výraz 2.7 aproximovať pomocou Riemannovych súčtov:

$$\lim_{n\to\infty}\frac{n + 2\sum_{j=1}^{\frac{n}{2}}\left|1 + 2\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right)\right|}{2n} = \frac{1}{2} + \int_0^{\frac{1}{2}} |1 + 2\cos(2\pi\xi)|\, d\xi$$

Po substitúcií $2\pi\xi = x$ a $d\xi = \frac{1}{2\pi}dx$ dostaneme

$$\frac{1}{2} + \lim_{n\to\infty}\frac{\sum_{j=1}^{\frac{n}{2}}\left|1 + 2\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right)\right|}{n} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi} |1 + 2\cos(x)|\, dx.$$

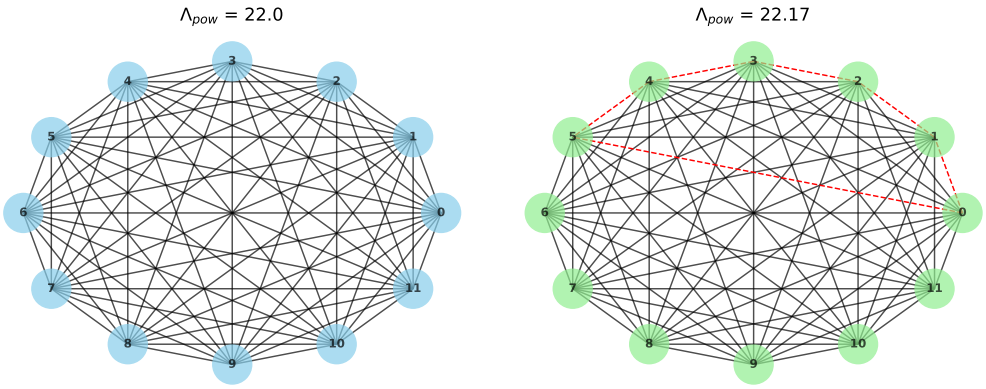
Výraz $1 + 2\cos(x)$ je nezáporný pre $x \in (0, \frac{2\pi}{3}]$ a záporný pre $x \in (\frac{2\pi}{3}, \pi]$, teda dostávame

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi} |1 + 2\cos(x)|\, dx$$
$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi}\left(\int_0^{\frac{2\pi}{3}} 1 + 2\cos(x)\ dx - \int_{\frac{2\pi}{3}}^{\pi} 1 + 2\cos(x)\ dx\right)$$
$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi}\left([x + 2\sin(x)]_0^{\frac{2\pi}{3}} - [x + 2\sin(x)]_{\frac{2\pi}{3}}^{\pi}\right) = \frac{\sqrt{3} + \frac{2\pi}{3}}{\pi} \approx 1.22.$$

Teda dostávame rovnaký výsledok ako pre grafy s počtom vrcholov deliteľným šiestimi a platí, že každý kompletný graf s počtom vrcholov 10 a viac s odstránenou Hamiltonovou kružnicou bude hyperenergetický. □

2.3 Kompletné grafy s odstráneným cyklom

V tejto sekcií si ukážeme ako sa bude správať energia grafov, z ktorých odstránime cyklus C_k veľkosti $k < n$. Príklad takéhoto grafu vidno na obrázku 2.7.



Obr. 2.7: Príklad kompletného grafu s počtom vrcholov 12 v porovnaní s redukovaným grafom, z ktorých sme odstránili cyklus veľkosti 6.

Matica susednosti takéhoto grafu bude vyzerať nasledovne

$$A(K_n^{-C_k}) = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_k\mathbf{1}_k^T - I_k - C_k & \mathbf{1}_k^T\mathbf{1}_m^T \\ \mathbf{1}_m^T\mathbf{1}_k^T & \mathbf{1}_m^T\mathbf{1}_m^T - I_m \end{pmatrix},$$

kde

$$C_k = \begin{pmatrix} 0 & 1 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & & 0 \\ \vdots & 1 & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & & \ddots & \ddots & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix}_{k\times k},$$

$\mathbf{1}$ je vektor jednotiek a $m + k = n$. Vlastné hodnoty matice $A(K_n^{-C_k})$ musia spĺňať nasledujúcu rovnicu

$$\begin{pmatrix} \mathbf{1}_k\mathbf{1}_k^T - I_k - C_k & \mathbf{1}_k\mathbf{1}_m^T \\ \mathbf{1}_m\mathbf{1}_k^T & \mathbf{1}_m\mathbf{1}_m^T - I_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \tag{2.8}$$

kde $x \in \mathbf{R}^k$ a $y \in \mathbf{R}^m$.

Keďže C_k je v tomto prípade regulárna matica, tak podľa tvrdenia 2.1 bude $p = 0$ a počet vlastných hodnôt $A(K_n^{-C_k})$ rovných -1 bude $m - 1$.

V ľavom hornom rohu máme maticu $A(K_k^{-c})$. Vlastné hodnoty tejto Toeplitzovej cirkulantnej matice sme si rozobrali v predošlej časti. Nech μ je vlastná hodnota $A(K_k^{-c})$ s prislúchajúcim vlastným vektorom a. Potom platí

$$\begin{pmatrix} \mathbf{1}_k\mathbf{1}_k^T - I_k - C_k & \mathbf{1}_k\mathbf{1}_m^T \\ \mathbf{1}_m\mathbf{1}_k^T & \mathbf{1}_m\mathbf{1}_m^T - I_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu a \\ \mathbf{1}_m \sum_{j=1}^{k} a_i \end{pmatrix}.$$

Ak platí, že súčet zložiek vlastného vektora a je rovný 0, potom je μ vlastná hodnota matice $A(K_n^{-C_k})$. Vieme, že pre $A(K_k^{-c})$ platí, že nenulový súčet zložiek má len jeden vlastný vektor zodpovedajúci vlastnej hodnote $k-3$. Teda dostávame ďalších $k-1$ vlastných hodnôt matice $A(K_n^{-C_k})$.

Označme $\alpha = \mathbf{1}_k^T x$ a $\beta = \mathbf{1}_m^T y$. Z rovnosti 2.8 dostávame systém rovníc

$$\begin{aligned} \alpha\mathbf{1}_k - C_k x + \beta\mathbf{1}_k &= (\lambda+1)x, \\ \alpha\mathbf{1}_m + \beta\mathbf{1}_m &= (\lambda+1)y. \end{aligned}$$

Z druhej rovnosti dostávame

$$\begin{aligned} \alpha m + \beta m &= (\lambda+1)\beta, \\ \beta &= \frac{\alpha m}{\lambda+1-m}, \\ \alpha + \beta = \alpha + \frac{\alpha m}{\lambda+1-m} &= \frac{\alpha(\lambda+1)}{\lambda+1-m}. \end{aligned}$$

Ďalej z prvej rovnosti dostávame

$$\begin{aligned} -C_k x + (\alpha+\beta)\mathbf{1}_k &= (\lambda+1)x, \\ x &= (C_k + (\lambda+1)I)^{-1}\mathbf{1}_k(\alpha+\beta), \\ \alpha &= \mathbf{1}_k^T(C_k + (\lambda+1)I)^{-1}\mathbf{1}_k \frac{\alpha(\lambda+1)}{\lambda+1-m}. \end{aligned}$$

Za predpokladu $\alpha \neq 0$ dostávame

$$1 = \mathbf{1}_k^T(C_k + (\lambda+1)I)^{-1}\mathbf{1}_k \frac{\lambda+1}{\lambda+1-m} \tag{2.9}$$

Podľa [12] platí, že inverzná matica k cirkulantnej matici je tiež cirku-

lantná matica. Pre inverznú maticu k $C_k + (\lambda+1)I$ platí rovnosť

$$\begin{pmatrix} b_0 & b_1 & \cdots & b_{k-2} & b_{k-1} \\ b_{k-1} & b_0 & b_1 & & b_{k-2} \\ \vdots & b_{k-1} & b_0 & \ddots & \vdots \\ b_2 & & \ddots & \ddots & b_1 \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_{k-1} & b_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda+1 & 1 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & \lambda+1 & 1 & & 0 \\ \vdots & 1 & \lambda+1 & \ddots & \vdots \\ 0 & & \ddots & \ddots & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 1 & \lambda+1 \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & & 0 \\ \vdots & 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ 0 & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Pre zložky inverznej matice musí platiť

$$\begin{aligned} b_0(\lambda+1) + b_1 + b_{k-1} &= 1 \\ b_{k-1}(\lambda+1) + b_0 + b_{k-2} &= 0 \\ &\vdots \\ b_1(\lambda+1) + b_2 + b_0 &= 0 \end{aligned}$$

Sčítaním rovníc dostaneme

$$\sum_{j=0}^{k-1} b_i = \frac{1}{\lambda+3}.$$

Z rovnosti 2.9 d'alej dostávame

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{k}{\lambda+3}\frac{\lambda+1}{\lambda+1-m} \\ \lambda^2 + \lambda(1-n+3) + 3 - 3n + 2k &= 0 \\ \lambda_{1,2} &= \frac{-4+n \pm \sqrt{(4-n)^2 - 4(3-3n+2k)}}{2} \\ \lambda_{1,2} &= \frac{-4+n \pm \sqrt{n^2+4n+4-8k}}{2}. \end{aligned}$$

Teda dostávame posledné dve vlastné hodnoty matice $A(K_n^{-C_k})$. Pre každé $n > 3$ platí

$$-4 + n - \sqrt{n^2+4n+4-8k} < 0.$$

Pre energiu grafu s $n > 3$ hranami s odstráneným cyklom veľkosti $k \leq n$ bude platiť

$$\Lambda_{pow}(K_n^{-C_k}) = \sum_{j=1}^{k-1} |\mu_i| + m - 1 + \sqrt{n^2 + 4n + 4 - 8k},$$

kde $\mu_i \in \sigma(A(K_k^{-c}))$. V predošlých častiach sme odvodili, že platí

$$\sum_{j=1}^{k} |\mu_i| > 2k - 2.$$

Keďže $\mu_k = k - 3$, dostávame

$$\sum_{j=1}^{k-1} |\mu_i| > k + 1.$$

Energiu grafu $K_n^{-C_k}$ môžeme zospodu ohraničiť nasledovne

$$\Lambda_{pow}(K_n^{-C_k}) > k + 1 + m - 1 + \sqrt{n^2 + 4n + 4 - 8k} = n + \sqrt{n^2 + 4n + 4 - 8k}.$$

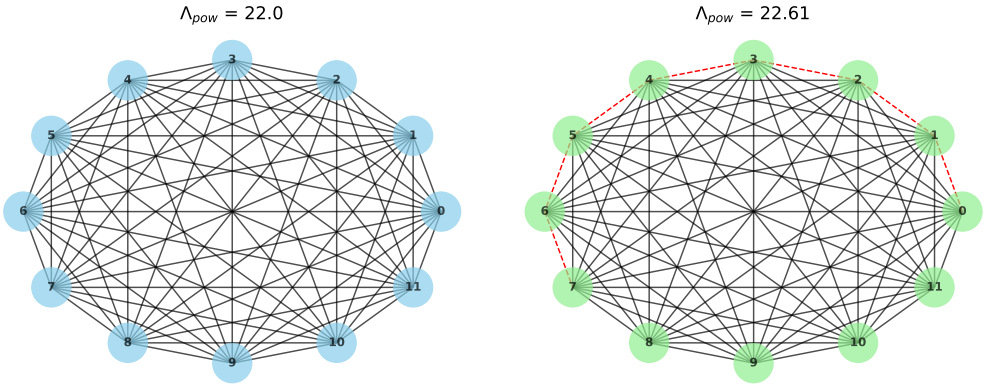
Graf bude hyperenergetický, ak platí $\Lambda_{pow}(K_n^{-C_k}) \geq 2n - 2$, čo platí pre každé $n \geq k$. Vo všeobecnosti platí, že ak je graf K_k^{-c} hyperenergetický, potom je hyperenergetický aj graf $K_n^{-C_k}$.

2.4 Kompletné grafy s odstránenou cestou

Prirodzene by nás mohlo zaujímať, ako sa bude vyvíjať energia grafov, ktorým neodstránime celý cyklus, ale len cestu P_{k-1} veľkosti $k - 1 < n$. Príklad grafu s odstránenou cestou uvádzame na obrázku 2.8.

V tvrdení 2.4 sme ukázali, že kompletné grafy, ktorým odstránime cestu veľkosti 1 budú vždy hypoenergetické a ich energia sa pre rastúci počet vrcholov bude blížiť k energií kompletného grafu. Pre grafy s odstránenou cestou veľkosti $k - 1 < n$ budeme mať maticu susednosti $A(K_n^{-P_{k-1}})$ zo vzťahu 2.1, kde

$$P_{k-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & & 0 \\ \vdots & 1 & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix}_{k \times k}.$$



Obr. 2.8: Príklad kompletného grafu s počtom vrcholov 12 v porovnaní s redukovaným grafom, z ktorého sme odstránili cestu veľkosti 8.

Táto matica je z triedy Toeplitzovych tridiagonálnych matíc. Aby sme našli vlastné hodnoty matice P_{k-1} budeme riešiť systém

$$det\left(P_{k-1} - \lambda I_k\right) = 0.$$

Označme $\Delta_k = det(P_{k-1} - \lambda I_k)$. Laplaceovým rozvojom determinantu podľa prvého stĺpca a následne podľa prvého riadku dostaneme

$$\Delta_k = -\lambda\Delta_{k-1} - det\left(\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 & & 0 \\ \vdots & 1 & -\lambda & \ddots & \vdots \\ 0 & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & -\lambda \end{pmatrix}_{k-1\times k-1}\right) = -\lambda\Delta_{k-1} - \Delta_{k-2}.$$

Teda dostávame diferenčnú rovnicu $\Delta_k + \lambda\Delta_{k-1} + \Delta_{k-2} = 0$, kde $\Delta_1 = -\lambda$ a $\Delta_2 = \lambda^2 - 1$. Dosadením do diferenčnej rovnice dostaneme $\Delta_0 = 1$. Charakteristický polynóm diferenčnej rovnice bude

$$x^2 + \lambda x + 1 = 0,$$
$$x = \frac{-\lambda \pm \sqrt{\lambda^2 - 4}}{2}.$$

Všeobecné riešenie bude dané lineárnou kombináciou dvoch partikulárnych riešení

$$\Delta_k = c_1\left(\frac{-\lambda + \sqrt{\lambda^2 - 4}}{2}\right)^k + c_2\left(\frac{-\lambda - \sqrt{\lambda^2 - 4}}{2}\right)^k.$$

Zostáva dopočítať koeficienty c_1, c_2 z počiatočných podmienok. Musí platiť

$$c_1 + c_2 = 1,$$
$$c_1\left(\frac{-\lambda+\sqrt{\lambda^2-4}}{2}\right) + c_2\left(\frac{-\lambda-\sqrt{\lambda^2-4}}{2}\right) = -\lambda$$

Vyriešením sústavy rovníc dostaneme

$$c_1 = \frac{-\lambda+\sqrt{\lambda^2-4}}{2\sqrt{\lambda^2-4}}, \qquad c_2 = \frac{\lambda+\sqrt{\lambda^2-4}}{2\sqrt{\lambda^2-4}}$$

a teda výsledné riešenie bude mať tvar

$$\Delta_k = \frac{1}{\sqrt{\lambda^2-4}}\left(\left(\frac{-\lambda+\sqrt{\lambda^2-4}}{2}\right)^{k+1} - \left(\frac{-\lambda-\sqrt{\lambda^2-4}}{2}\right)^{k+1}\right) \tag{2.10}$$

Platí, že výraz 2.10 je nulový, ak je splnené

$$\left(\frac{-\lambda-\sqrt{\lambda^2-4}}{-\lambda+\sqrt{\lambda^2-4}}\right)^{k+1} = 1 \implies w_j = \frac{-\lambda_j-\sqrt{\lambda_j^2-4}}{-\lambda_j+\sqrt{\lambda_j^2-4}},$$

kde w_j označuje $(k+1)$-tu odmocninu z 1. Úpravami dostaneme rovnicu pre λ_j

$$\lambda_j = \frac{w_j+1}{\sqrt{w_j}}.$$

Keďže platí $w_j = e^{i\frac{2\pi j}{k+1}}$, bude

$$\lambda_j = \frac{e^{i\frac{2\pi j}{k+1}}+e^{i0}}{e^{i\frac{\pi j}{k+1}}} = e^{i\frac{\pi j}{k+1}} + e^{-i\frac{\pi j}{k+1}} = 2\cos(\frac{\pi j}{k+1}) \text{ pre } j = 1, ..., k.$$

Pre párne k dostaneme vlastné hodnoty

$$\lambda_j = \pm 2\cos(\frac{\pi j}{k+1}) \text{ pre } j = 1, ..., \frac{k}{2}$$

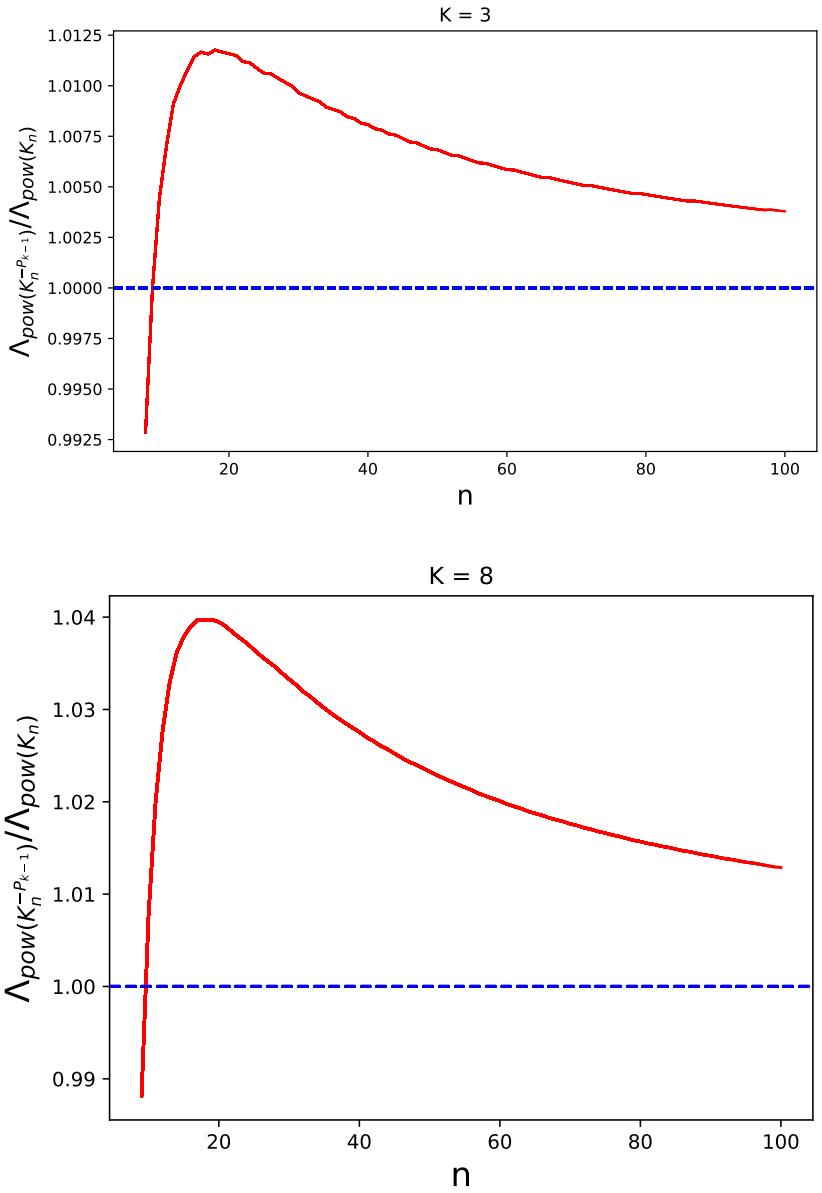
a pre k nepárne dostaneme

$$\lambda_j = \pm 2\cos(\frac{\pi j}{k+1}) \text{ pre } j = 1, ..., \frac{k-1}{2}$$

a jednu zvyšnú vlastnú hodnotu

$$\lambda_{\frac{k+1}{2}} = 0.$$

V tomto prípade bude mať podľa tvrdenia 2.1 matica $A(K_n^{-P_{k-1}})$ vlastnú hodnotu -1 s násobnosťou $n-k-1$, ak je k párne a $n-k$ ak je k nepárne. K ďalším vlastným hodnotám matice $A(K_n^{-P_{k-1}})$ toho zatiaľ veľa povedať nevieme. V tvrdení 2.4 sme zistili, že ak odstránime kompletnému grafu 1 hranu, dostaneme hypoenergetickú postupnosť s limitou 1. Môžme sa pozrieť na to, ako sa bude vyvíjať pomer energií redukovaných grafov a kompletných grafov pre iné počty odstránených hrán, viď obr. 2.9.

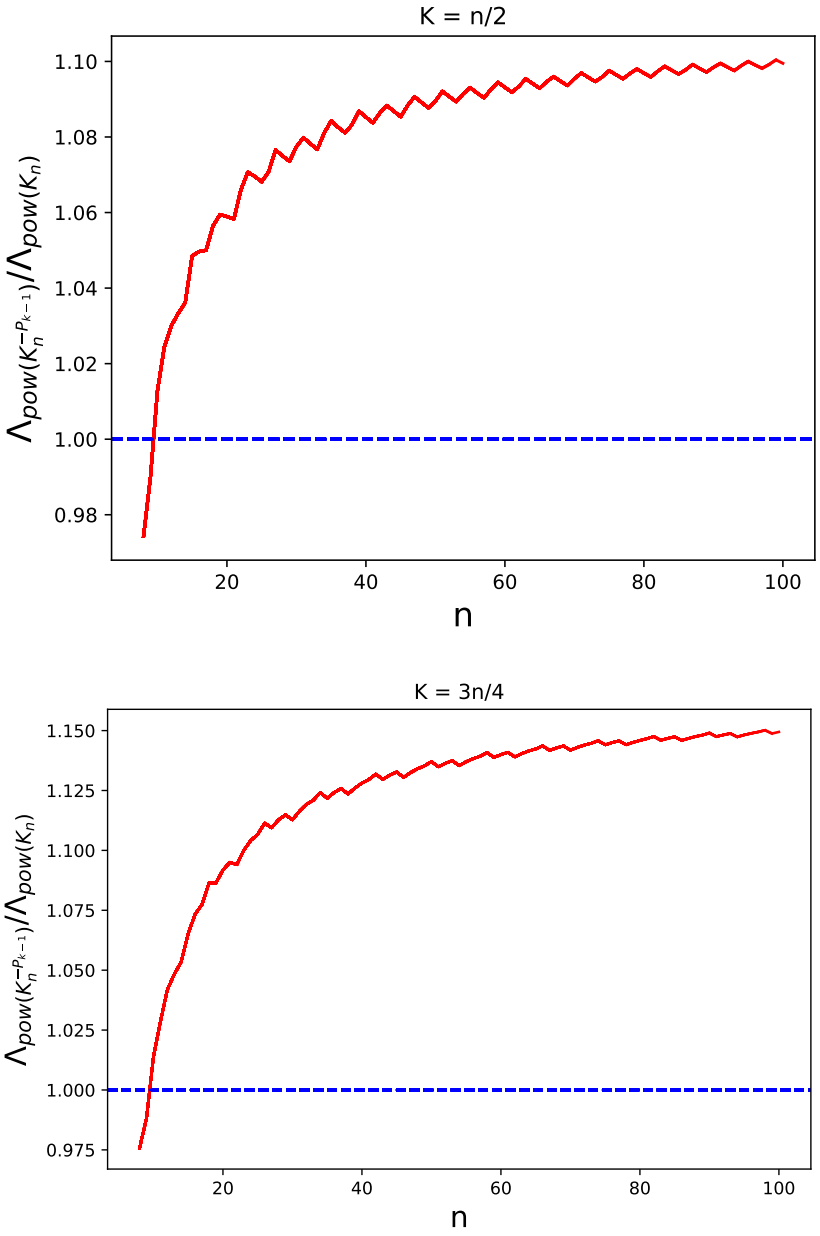


Obr. 2.9: Porovanie pomeru energií redukovaných grafov s odstránenými 2 a 7 hranami a energií kompletných grafov.

Zdá sa, že by mohlo platiť, že keď odstránime viac ako jednu hranu, tak dostaneme hyperenergetickú postupnosť s limitou rovnou 1.

Skúsme ďalej odstraňovať počet hrán, ktorý je úmerný počtu vrcholov, viď obr. 2.10.

V tomto prípade sa zdá, že znova pôjde o hyperenergetickú postup-



Obr. 2.10: Porovanie pomeru energií redukovaných grafov s odstránenými $\frac{n}{2}$ a $\frac{3n}{4}$ hranami a energií kompletných grafov.

nosť, tentokrát s limitou väčšou ako 1. Naskytá sa teda stanoviť hypotézu:

Hypotéza 2.1. *Nech K_n je kompletný graf a $K_n^{-P_{k-1}}$ nech je graf ktorý vznikne z kompletného grafu odstránením cesty veľkosti $k-1$. Ak platí $k \approx O(1)$ a $k > 2$,*

potom existuje číslo $n > 7$ od ktorého sú grafy $K_n^{-P_{k-1}}$ hyperenergetické a platí

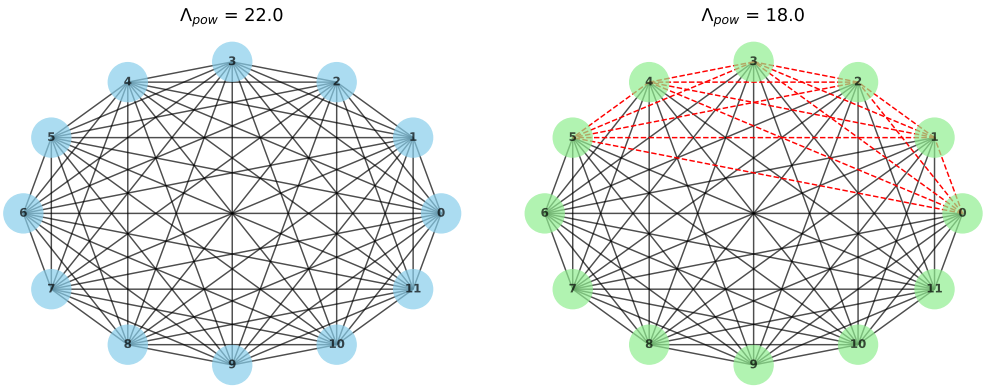
$$\lim_{n\to\infty}\left(\frac{\Lambda_{pow}(K_n^{-P_{k-1}})}{\Lambda_{pow}(K_n)}\right) = 1.$$

Ďalej ak platí $k \approx O(n)$, potom takisto existuje číslo $n > 7$, od ktorého sú grafy $K_n^{-P_{k-1}}$ hyperenergetické a platí

$$\lim_{n\to\infty}\left(\frac{\Lambda_{pow}(K_n^{-P_{k-1}})}{\Lambda_{pow}(K_n)}\right) = \alpha, \text{ kde } 1 < \alpha < \infty.$$

2.5 Kompletné grafy s odstráneným kompletným podgrafom

Nech je ďalej $G_k = K_k$, teda kompletnému grafu veľkosti n odstránime kompletný podgraf veľkosti $k \leq n$, viď obr. 2.11.



Obr. 2.11: Príklad kompletného grafu s počtom vrcholov 12 v porovnaní s redukovaným grafom, z ktorého sme odstránili kompletný podgraf veľkosti 6.

Kompletný graf neobsahuje žiadnu nulovú vlastnú hodnotu, preto podľa tvrdenia 2.1 bude mať matica $A(K_n^{-K_k})$ $n-k-1$ vlastných hodnôt rovných -1.

Pre vlastnú hodnotu $\mu = -1$ matice K_k platí z tvrdenia 2.3, že matica $K_n^{-K_k}$ bude mať vlastnú hodnotu $\lambda = 0$ s násobnosťou

$$dim\left(Ker\left(K_k + I_k + \frac{1}{m}\mathbf{1}\mathbf{1}^T\right)\right) = dim\left(Ker\left(\left(\frac{1}{m}+1\right)\mathbf{1}\mathbf{1}^T\right)\right) = k-1.$$

Rovnako pre vlastnú hodnotu $\mu = k - 1$ matice K_k platí z tvrdenia 2.3, že matica $K_n^{-K_k}$ bude mať vlastnú hodnotu $\lambda = k$ s násobnosťou

$$dim\left(Ker\left(K_k + (1-k)I_k + \frac{k-1}{1-k-m}\mathbf{1}\mathbf{1}^T\right)\right)$$
$$= dim\left(Ker\left(kI_k + \frac{m}{1-k-m}\mathbf{1}\mathbf{1}^T\right)\right) = 0.$$

Posledné dve vlastné hodnoty nájdeme podľa tvrdenia 2.2 vyriešením disperznej rovnice

$$\frac{\lambda + 1 - n + k}{\lambda + 1} = \mathbf{1}_k^T (K_k + (\lambda+1)I_k)^{-1}\mathbf{1}_k \tag{2.11}$$

Matica $K_k + (\lambda+1)I_k$ je Toeplitzova cirkulantná matica, teda jej inverzná matica musí spĺňať

$$\begin{pmatrix} b_0 & b_1 & \cdots & b_{k-2} & b_{k-1} \\ b_{k-1} & b_0 & b_1 & & b_{k-2} \\ \vdots & b_{k-1} & b_0 & \ddots & \vdots \\ b_2 & & \ddots & \ddots & b_1 \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_{k-1} & b_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda+1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & \lambda+1 & 1 & & 1 \\ \vdots & 1 & \lambda+1 & \ddots & \vdots \\ 1 & & \ddots & \ddots & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & \lambda+1 \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & & 0 \\ \vdots & 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ 0 & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Pre zložky inverznej matice musí platiť

$$b_0(\lambda+1) + \sum_{i=0}^{k-1} b_i - b_0 = 1$$
$$b_{k-1}(\lambda+1) + \sum_{i=0}^{k-1} b_i - b_{k-1} = 0$$
$$\vdots$$
$$b_1(\lambda+1) + \sum_{i=0}^{k-1} b_i - b_1 = 0$$

Sčítaním rovníc dostaneme

$$(\lambda+1)\sum_{i=0}^{k-1} b_i + (n-1)\sum_{i=0}^{k-1} b_i = 1 \implies \sum_{i=0}^{k-1} b_i = \frac{1}{\lambda+n}.$$

Teda rovnica 2.11 nadobudne tvar

$$\frac{\lambda+1-n+k}{\lambda+1} = \frac{k}{\lambda+n},$$

čo predstavuje kvadratickú rovnicu, ktorej vyriešením dostaneme dve vlastné hodnoty

$$\lambda_{\pm} = \frac{n-1-k \pm \sqrt{(1-n+k)^2+4(kn-k^2)}}{2}.$$

Keďže platí $|\lambda_+| = \lambda_+$ a $|\lambda_+| = -\lambda_-$, energia grafu $K_n^{-K_k}$ bude

$$\Lambda_{pow}(K_n^{-K_k}) = n-k-1+\sqrt{(1-n+k)^2+4(kn-k^2)}.$$

Platí, že $\Lambda_{pow}(K_n^{-K_k}) \leq 2n-2$ pre každé $n \geq 1$ a $k \leq n$, teda sa jedná o hypoenergetické grafy. Ďalej platí

$$\lim_{n\to\infty} \frac{n-k-1+\sqrt{(1-n+k)^2+4(kn-k^2)}}{2n-2} = 1,$$

teda energia redukovaných grafov sa bude blížiť ku energií kompletného grafu.

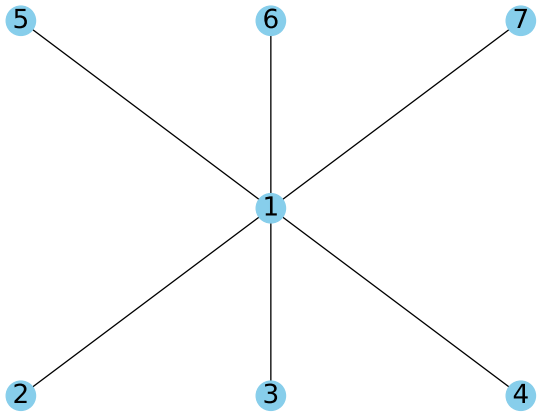
2.6 Kompletné grafy s odstráneným hviezdicovým grafom

V tejto časti budeme z kompletného grafu odtráňovať tzv. hviezdicové podgrafy, viď obr. 2.12.

Poznámka 2.1. *Hviezdicové grafy reprezentujú tzv. pseudo-inverzné grafy. príklad hviezdicového grafu spolu s jeho pseudo-inverzným grafom uvádzame v sekcií 3.2 kapitoly 3.*

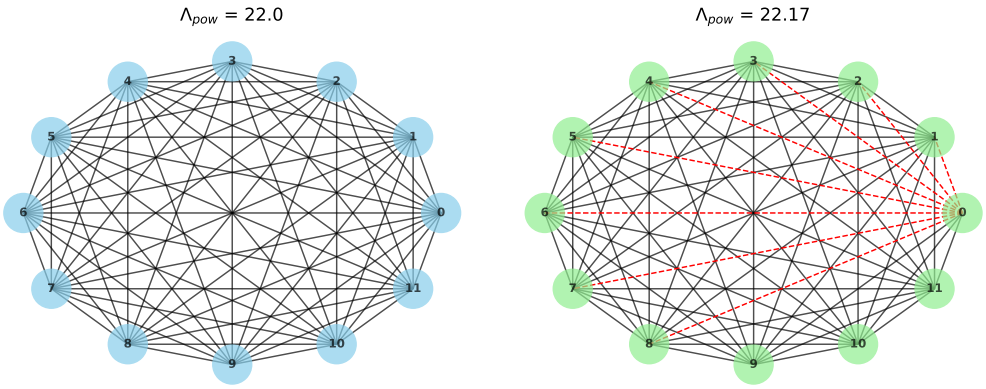
Označme maticu susednosti hviezdicového grafu na k vrcholoch ako S_k. Príklad takéhoto grafu je znázornený na obrázku 2.13. Platí

$$S_k = \begin{pmatrix} 0 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & & 0 \\ \vdots & 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ 1 & & \ddots & \ddots & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$



Obr. 2.12: Príklad hviezdicového grafu s počtom vrcholov 7.

Graf, ktorý vznikne z kompletného grafu odstránením hviezdicového grafu označme $K_n^{-S_k}$.



Obr. 2.13: Príklad kompletného grafu s počtom vrcholov 12 v porovnaní s redukovaným grafom, z ktorého sme odstránili hviezdicový podgraf veľkosti 9.

Keďže matica S_k má $k-2$ lineárne závislých riadkov, bude mať $k-2$ nulových vlastných hodnôt a teda matica $K_n^{-S_k}$ bude mať $n-3$ vlastných hodnôt rovných -1 podľa tvrdenia 2.1. Ak označíme zvyšné dve vlastné hodnoty matice S_k ako μ_+ a μ_-, tak pre ne musí platiť $\mu_+^2 + \mu_-^2 = 2(k-1)$ a $\mu_+ + \mu_- = 0$. Vyriešením sústavy rovníc dostaneme $\mu_\pm = \pm\sqrt{k-1}$. Ďalej

označme $\mu = \lambda + 1$. Platí

$$(S_k + \mu I_k)^{-1}$$
$$= \frac{1}{\mu^3 - (k-1)\mu} \begin{pmatrix} \mu^2 & -\mu & \cdots & -\mu & -\mu \\ -\mu & \mu^2 - (k-2) & 1 & & 1 \\ \vdots & 1 & \mu^2 - (k-2) & \ddots & \vdots \\ -\mu & & \ddots & \ddots & 1 \\ -\mu & 1 & \cdots & 1 & \mu^2 - (k-2) \end{pmatrix}.$$

Ďalšie vlastné hodnoty matice $K_n^{-S_k}$ dostaneme podľa tvrdenia 2.2 vyriešením disperznej rovnice

$$\frac{\lambda + 1 + k - n}{\lambda + 1} = \mathbf{1}^T (S_k + \mu I_k)^{-1} \mathbf{1} = \frac{k\mu^2 - 2(k-1)\mu}{\mu^3 - (k-1)\mu} = \frac{k\lambda + 2 - k}{\lambda^2 + 2\lambda + 2 - k},$$
$$(\lambda + 1 + k - n)(\lambda^2 + 2\lambda + 2 - k) = (\lambda + 1)(k\lambda + 2 - k),$$
$$\lambda^3 - (n-3)\lambda^2 + (k + 2 - 2n)\lambda + (k-2)(n-k) = 0.$$

Teda dostávame kubickú rovnicu, ktorej vyriešením dostaneme posledné 3 vlastné hodnoty:

$$\lambda_1 = \frac{1}{3}(-3 + n) - \frac{2^{\frac{1}{3}} a_n}{3 c_n} + \frac{c_n}{2^{\frac{1}{3}} 3},$$
$$\lambda_2 = \frac{1}{3}(-3 + n) + \frac{(1 + i\sqrt{3}) a_n}{2^{\frac{2}{3}} 3 c_n} - \frac{(1 - i\sqrt{3}) c_n}{2^{\frac{1}{3}} 6},$$
$$\lambda_3 = \frac{1}{3}(-3 + n) + \frac{(1 - i\sqrt{3}) a_n}{2^{\frac{2}{3}} 3 c_n} - \frac{(1 + i\sqrt{3}) c_n}{2^{\frac{1}{3}} 6},$$

kde

$$a_n = -3 + 3k - n^2,$$
$$b_n = -27k + 27k^2 + 36n - 36kn + 2n^3,$$
$$c_n = (b_n + \sqrt{4a_n^3 + b_n^2})^{\frac{1}{3}}.$$

Pre veľké n platí $a_n \approx -n^2$, $b_n \approx 2n^3$ a $c_n \approx (2n^3 + \sqrt{-4n^6 + 4n^6})^{\frac{1}{3}} \approx 2^{\frac{1}{3}} n$.

Z toho dostávame

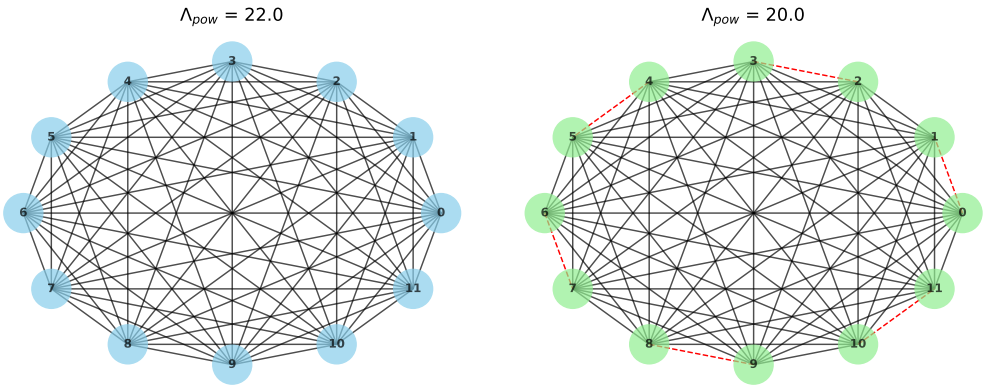
$$\begin{aligned}
\lim_{n\to\infty}\frac{|\lambda_1|}{2n} &= \frac{1}{2}\lim_{n\to\infty}\frac{1}{3}(-\frac{3}{n}+1)+\frac{1}{3}=\frac{1}{2},\\
\lim_{n\to\infty}\frac{|\lambda_2|}{2n} &= \frac{1}{2}\lim_{n\to\infty}\frac{1}{3}(-\frac{3}{n}+1)-\frac{(1+i\sqrt{3})}{6}-\frac{(1-i\sqrt{3})}{6}\\
&= \frac{1}{6}-\frac{(1+i\sqrt{3})}{12}-\frac{(1-i\sqrt{3})}{12}=0,\\
\lim_{n\to\infty}\frac{|\lambda_3|}{2n} &= \frac{1}{2}\lim_{n\to\infty}\frac{1}{3}(-\frac{3}{n}+1)-\frac{(1-i\sqrt{3})}{6}-\frac{(1+i\sqrt{3})}{6}\\
&= \frac{1}{6}-\frac{(1-i\sqrt{3})}{12}-\frac{(1+i\sqrt{3})}{12}=0.
\end{aligned}$$

Teda pre energiu grafu $K_n^{-S_k}$ platí

$$\lim_{n\to\infty}\frac{\Lambda_{pow}(K_n^{-S_k})}{2n}=\lim_{n\to\infty}\frac{n-3}{2n}+\frac{|\lambda_1|}{2n}=1.$$

2.7 Kompletné grafy s odstráneným 1-faktorom

Z kompletného grafu môžeme odstrániť aj tzv. 1-faktor, viď obr. 2.14.



Obr. 2.14: Príklad kompletného grafu s počtom vrcholov 12 v porovnaní s redukovaným grafom, z ktorého sme odstránili 1-faktor.

Nech n je párne ($n = 2k$). Blokovo diagonálna matica 1-faktora F_{2k}

bude vyzerať nasledovne

$$F_{2k} = \begin{pmatrix} \begin{matrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{matrix} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \begin{matrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{matrix} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \begin{matrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{matrix} \end{pmatrix}.$$

Vlastné hodnoty matice F_{2k} budú ± 1, obe s násobnosťou k. Matica susednosti grafu, ktorý vznikne z kompletného grafu vyhodením 1-faktora bude pre n párne

$$A(K_n^{-F_{2k}}) = \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T - I_n - F_{2k}.$$

Ak n je nepárne ($n = 2k + 1$), potom

$$A(K_n^{-F_{2k}}) = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{2k}\mathbf{1}_{2k}^T - I_{2k} - F_{2k} & \mathbf{1}_{2k} \\ \mathbf{1}_{2k}^T & 0 \end{pmatrix}.$$

Keďže matica F_{2k} má vlastnú hodnotu rovnú -1 s násobnosťou k , bude mať matica $A(K_n^{-F_k})$ nulovú vlastnú hodnotu s násobnosťou

$$dim(Ker(M_n)) = dim\left(Ker\left(\begin{pmatrix} \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{matrix} & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{matrix} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -1 \\ -1 & \cdots & -1 & \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{matrix} \end{pmatrix} \right) \right)$$

podľa tvrdenia 2.3. Pre lineárne nezávislé vektory

$$v_1 = (1, -1, 0, 0, 0, ..., 0)^T, ..., v_{k-1} = (0, 0, 0, 0, ..., 1, -1)^T$$

platí $M_n v_i = 0$, teda dimenzia jadra bude k.

Pre vlastnú hodnotu matice F_{2k} rovnú 1 a n párne bude mať matica $A(K_n^{-F_{2k}})$ vlastnú hodnotu $\mu = -(\lambda + 1) = -2$ s násobnosťou

$$dim(Ker(M_n)) = dim\left(Ker\left(\begin{pmatrix} \begin{matrix} -2 & 0 \\ 0 & -2 \end{matrix} & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & \begin{matrix} -2 & 0 \\ 0 & -2 \end{matrix} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -1 \\ -1 & \cdots & -1 & \begin{matrix} -2 & 0 \\ 0 & -2 \end{matrix} \end{pmatrix} \right) \right)$$

podľa tvrdenia 2.3. Pre lineárne nezávislé vektory

$$v_1 = (-1, -1, 1, 1, 0, ..., 0)^T, ..., v_{k-1} = (-1, -1, 0, 0, ..., 1, 1)^T$$

platí $M_n v_i = 0$, teda dimenzia jadra bude $k-1$. Pre n nepárne dostaneme tiež $k-1$ vlastných hodnôt rovných -2 a vlastné vektory matice M_n budú

$$\hat{v}_1 = \begin{pmatrix} v_1 \\ 0 \end{pmatrix}, ..., \hat{v}_{k-1} = \begin{pmatrix} v_{k-1} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Pre n párne dostaneme jednu zvyšnú vlastnú hodnotu $\lambda = n-2$ pre vlastný vektor $x = (1, ..., 1)^T$. Pre n nepárne nám zostáva nájsť posledné dve vlastné hodnoty, ktoré dostaneme vyriešením sústavy rovníc

$$\begin{aligned} -2(k-1) + \lambda_+ + \lambda_- &= 0, \\ 4(k-1) + \lambda_+^2 + \lambda_-^2 &= \frac{2k(2k-1)}{2} - k + 2k = 4k^2, \end{aligned}$$

z čoho dostaneme

$$\lambda_\pm = k - 1 \pm \sqrt{1 + k^2}.$$

Energia grafu s odstráneným 1-faktorom teda bude

$$\Lambda_{pow}(K_n^{-F_{2k}}) = \begin{cases} 2(k-1) + n - 2 = 2n - 4 & \text{ak } n = 2k, \\ 2(k-1) + \lambda_+ - \lambda_- = 2(k - 1 + \sqrt{1+k^2}) & \text{ak } n = 2k+1. \end{cases}$$

V oboch prípadoch sa jedná o hyperenergetické grafy a platí

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\Lambda_{pow}(K_n^{-F_{2k}})}{2n} = 1,$$

teda energia grafov s odstráneným 1-faktorom sa bude pre veľké n blížiť ku energií kompletných grafov.

Podobným postupom môžeme odstrániť 1-faktor na $2k < n$ vrcholoch. Matica susednosti bude

$$A(K_n^{-F_{2k}}) = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{2k}\mathbf{1}_{2k}^T - I_{2k} - F_{2k} & \mathbf{1}_{2k}\mathbf{1}_m^T \\ \mathbf{1}_m\mathbf{1}_{2k}^T & \mathbf{1}_m\mathbf{1}_m^T \end{pmatrix}.$$

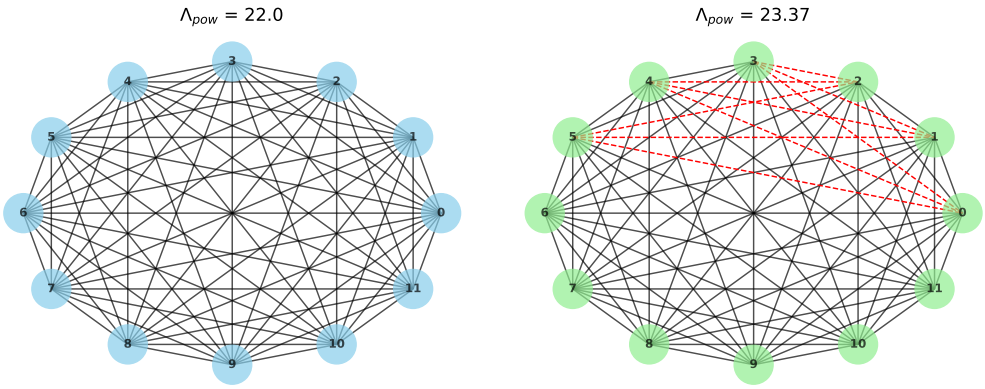
Dostaneme, že aj v tomto prípade bude mať matica $A(K_n^{-F_{2k}})$ počet nulových vlastných hodnôt rovný k. Počet vlastných hodnôt rovných -2 bude $k-1$. Z tvrdenia 2.1 pribudne $n-2k-1$ vlastných hodnôt rovných -1. Posledné dve vlastné hodnoty výjdu

$$\lambda_\pm = \frac{n-3}{2} \pm \frac{\sqrt{n^2 + 2n - 8k + 1}}{2}$$

a aj v tomto prípade pôjde o hypoenergetické grafy s limitou 1.

2.8 Kompletné grafy s odstráneným kompletným bipartitným podgrafom

V tejto časti sa budeme venovať energii kompletných grafov, z ktorých odstránime kompletný bipartitný podgraf. Príklad takéhoto grafu uvádzame na obrázku 2.15.



Obr. 2.15: Príklad kompletného grafu s počtom vrcholov 12 v porovnaní s redukovaným grafom, z ktorého sme odstránili kompletný bipartitný podgraf.

Nech $k \leq n$ a $k_1+k_2 = k$. $G_k = K_{k_1,k_2}$ predstavuje kompletný bipartitný graf medzi k_1 a k_2 vrcholmi. Pre jeho maticu susednosti platí

$$A(K_{k_1,k_2}) = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1_{k_1}}\mathbf{1_{k_2}^T} \\ \mathbf{1_{k_2}}\mathbf{1_{k_1}^T} & 0 \end{pmatrix}$$

V kapitole 3 dôsledku 3.1 sa ukáže, že pre vlastné hodnoty takéhoto grafu platí

$$\begin{aligned} \lambda_1, ..., \lambda_{n-2} &= 0, \\ \lambda_{n-1} &= \sqrt{k_1 k_2}, \\ \lambda_n &= -\sqrt{k_1 k_2}, \end{aligned}$$

Matica $A(K_n^{-K_{k_1,k_2}})$ bude mať $n-3$ vlastných hodnôt rovných -1 vychádzajúc z vety 2.1 . Z vety 2.2 dostaneme zvyšné vlastné hodnoty vyriešením príslušnej disperznej rovnice. Označme

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} \mathbf{1_{k_1}} \\ \mathbf{1_{k_2}} \end{pmatrix} \text{ a } \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = (K_{k_1,k_2} + (\lambda+1)I)^{-1}\mathbf{1}.$$

Potom musí platiť

$$\beta \mathbf{1_{k_1}} + (\lambda+1)x = \mathbf{1_{k_1}},$$
$$\alpha \mathbf{1_{k_2}} + (\lambda+1)y = \mathbf{1_{k_2}},$$

kde $\alpha = \mathbf{1_{k_1}^T} x$ a $\beta = \mathbf{1_{k_2}^T} y$. Ďalej prenásobením prvej rovnice vektorom $\mathbf{1_{k_1}^T}$ a druhej $\mathbf{1_{k_2}^T}$ dostávame

$$\beta k_1 + (\lambda+1)\alpha = k_1,$$
$$\alpha k_2 + (\lambda+1)\beta = k_2.$$

Vyriešením sústavy rovníc dostaneme

$$\alpha = \frac{k_1(\lambda+1) - k_1k_2}{(\lambda+1)^2 - k_1k_2},$$
$$\beta = \frac{k_2(\lambda+1) - k_1k_2}{(\lambda+1)^2 - k_1k_2}.$$

Sčítaním týchto rovníc dostaneme

$$\alpha+\beta = \mathbf{1_{k_1}^T}x + \mathbf{1_{k_2}^T}y = \mathbf{1^T}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \mathbf{1^T}(K_{k_1,k_2}+(\lambda+1)I)^{-1}\mathbf{1} = \frac{(\lambda+1)k - 2k_1k_2}{(\lambda+1)^2 - k_1k_2}.$$

Disperzná rovnica nadobudne tvar

$$\frac{\lambda+1-n+k}{\lambda+1} = \frac{(\lambda+1)k - 2k_1k_2}{(\lambda+1)^2 - k_1k_2}.$$

Úpravami dostaneme

$$(\lambda+1)^3 - n(\lambda+1)^2 + (\lambda+1)k_1k_2 + (n-k)k_1k_2 = 0,$$

čo je kubická rovnica, ktorej vyriešením dostaneme zvyšné 3 vlastné hodnoty:

$$\lambda_1 = \frac{a}{3 * 2^{\frac{1}{3}}} - \frac{2^{\frac{1}{3}}b}{3a} + \frac{n}{3} - 1,$$
$$\lambda_2 = -\frac{(1-i\sqrt{3})a}{6 * 2^{\frac{1}{3}}} + \frac{(1+i\sqrt{3})b}{3 * 2^{\frac{2}{3}}a} + \frac{n}{3} - 1,$$
$$\lambda_3 = -\frac{(1+i\sqrt{3})a}{6 * 2^{\frac{1}{3}}} + \frac{(1-i\sqrt{3})b}{3 * 2^{\frac{2}{3}}a} + \frac{n}{3} - 1,$$

kde

$$\begin{aligned} a &= (\sqrt{(-36k_1k_2n + 27kk_1k_2 + 2n^3)^2 + 4(3k_1k_2 - n^2)^3} \\ &\quad - 36k_1k_2n + 27kk_1k_2 + 2n^3)^{\frac{1}{3}} \approx 2^{\frac{1}{3}}n, \\ b &= 3k_1k_2 - n^2 \approx -n^2. \end{aligned}$$

Ďalej platí

$$\begin{aligned} \lim_{n\to\infty} \frac{|\lambda_1|}{2n} &= \lim_{n\to\infty} \frac{2^{\frac{1}{3}}n}{2n * 3 * 2^{\frac{1}{3}}} + \frac{2^{\frac{1}{3}}n^2}{6n^2 * 2^{\frac{1}{3}}} + \frac{1}{6} - \frac{1}{2n} = \frac{1}{2}, \\ \lim_{n\to\infty} \frac{|\lambda_2|}{2n} &= -\frac{(1 - i\sqrt{3})2^{\frac{1}{3}}n}{2n * 6 * 2^{\frac{1}{3}}} - \frac{(1 + i\sqrt{3})n^2}{12n^2} + \frac{1}{6} - \frac{1}{2n} = 0, \\ \lim_{n\to\infty} \frac{|\lambda_3|}{2n} &= -\frac{(1 + i\sqrt{3})2^{\frac{1}{3}}n}{2n * 6 * 2^{\frac{1}{3}}} - \frac{(1 - i\sqrt{3})n^2}{12n^2} + \frac{1}{6} - \frac{1}{2n} = 0. \end{aligned}$$

Pomer energií redukovaných grafov a kompletných grafov bude pre pevne zvolené k:

$$\begin{aligned} \lim_{n\to\infty} \frac{\Lambda_{pow}(K_n^{-K_{k_1,k_2}})}{2n} &= \lim_{n\to\infty} \frac{n-3}{2n} + \frac{|\lambda_1|}{2n} + \frac{|\lambda_2|}{2n} + \frac{|\lambda_3|}{2n} \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 0 + 0 = 1, \end{aligned}$$

teda dostávame ďalšiu postupnosť grafov s limitou pomerov rovnou 1.

Poznámka 2.2. *Niektoré z podgrafov, ktoré sme odstraňovali v predošlých sekciách môžeme reprezentovať ako bipartitné grafy. Napríklad sekcii 2.6 sme odstraňovali hviezdicový podgraf, ktorý predstavuje bipartitný graf $K_{1,k-1}$. Graf $K_{1,1}$ predstavuje cestu s dĺžkou 2 a $K_{1,2}$ cestu s dĺžkou 3, ktoré sme rozobrali v sekcií 2.4. Napokon odstránenie cyklu dĺžky 4 zo sekcie 2.3 predstavuje odstránenie bipartitného grafu $K_{2,2}$.*

2.9 Počet hyperenergetických grafov

Čo sa týka počtu hyperenergetických grafov, vieme, že pre grafy s počtom vrcholov 7 a menej neexistuje žiaden hyperenergetický graf. Pre grafy s počtom vrcholov $n = 8, 9, 10$ sú údaje znázornené v tabuľke 2.1.

Tabuľka 2.1: Tabuľka počtu hyperenergetických grafov pre $n = 8, 9, 10$. V poslednom stĺpci máme percentuálny podiel všetkých hyperenergetických grafov.

	# **všetkých grafov**	$\Lambda_{pow} > 2n-2$	$\Lambda_{pow} = 2n-2$	%
$n = 8$	11117	20	7	0.1
$n = 9$	261080	2532	19	1
$n = 10$	11716571	454073	184	3.9

Zdá sa, že podiel hyperenergetických grafov rastie s rastúcim počtom vrcholov. Ako sa ukáže v nasledovnom tvrdení, skoro všetky grafy so symetrickou maticou susednosti pozostávajúcu z núl a jednotiek spĺňajú vlastnosť hyperenergetickosti s asymptotikou $o(n^{\frac{3}{2}})$. Tvrdenie aj dôkaz preberáme z práce Li, Shi a Gutmana [2].

Tvrdenie 2.6. *[2, Theorem 5.24] Pre skoro všetky grafy platí*

$$\left(\frac{1}{4} + o(1)\right) n^{\frac{3}{2}} < \Lambda_{pow}(G) < \left(\frac{1}{2} + o(1)\right) n^{\frac{3}{2}}, \tag{2.12}$$

kde n je počet vrcholov grafu G.

Dôkaz. Podľa [2, Theorem 5.9] platí $\Lambda_{pow}(G) \leq \frac{n}{2}(1 + \sqrt{n})$. Nech $\lambda_1 \geq ... \geq \lambda_n$ sú usporiadané vlastné hodnoty matice $A = A(G)$. Pre ľubovoľnú maticu A platí $\lambda_1^2 + ... + \lambda_n^2 = tr(AA^T) = \|A\|_2^2$ a teda platí $\|A\|_2^2 - \lambda_1^2 = \lambda_2^2 + ... + \lambda_n^2 \leq \lambda_2(\Lambda_{pow}(G) - \lambda_1)$. Teda ak platí $\lambda_2 > 0$, potom

$$\Lambda_{pow}(G) \geq \lambda_1 + \frac{\|A\|_2^2 - \lambda_1^2}{\lambda_2}.$$

Nech $A(n, \frac{1}{2})$ je matica susednosti náhodného grafu $G(n, \frac{1}{2})$. $A(n, \frac{1}{2})$ je symetrická matica s nulovou diagonálou a náhodnými zložkami a_{ij}, ktorých stredná hodnota je $\frac{1}{2}$ pre každé $1 \leq i < j \leq n$ a $k \geq 1$. Z práce Füredihо a Kolmósa [13] pre vlastné hodnoty matice $A(n, \frac{1}{2})$ platí

$$\lambda_1 = \left(\frac{1}{2} + o(1)\right) n,$$
$$\lambda_2 < (1 + o(1))\, n^{\frac{1}{2}}.$$

Teda dostávame

$$\left(\frac{1}{2} + o(1)\right) n^{\frac{3}{2}} > \Lambda_{pow}(G) > \left(\frac{1}{2} + o(1)\right) n + \frac{\left(\frac{1}{4} + o(1)\right) n^2}{(1 + o(1))\, n^{\frac{1}{2}}} = \left(\frac{1}{4} + o(1)\right) n^{\frac{3}{2}}$$

pre skoro všetky grafy. □

Dôsledok 2.2. *Tvrdenie 2.6 zahŕňa všetky súvislé/nesúvislé, izomorfné/neizomorfné grafy s maticou susednosti rozmerov $n \times n$. Počet všetkých takýchto grafov je presne*

$$a_n = 2^{\frac{n(n-1)}{2}} \approx 2^{0.5n^2}.$$

Označme počet všetkých grafov, ktoré spĺňajú rovnosť (2.12) ako b_n. Potom platí

$$\lim_{n\to\infty} \frac{b_n}{a_n} = 1.$$

Bender, Canfield a Mckay vo svojej práci uvádzajú aproximáciu pre počet neizomorfných súvislých grafov

$$c_n \approx \omega_0 10^{\omega_1(n-9)+\omega_2(n-9)^2}, \text{ kde } \omega_0 = 261080, \omega_1 = 1.4, \omega_2 = 0.09.$$

Pre veľké n zrejme platí $c_n \approx 2^{0.3n^2}$ a

$$\lim_{n\to\infty} \frac{c_n}{a_n} = \lim_{n\to\infty} 2^{-0.2n^2} = 0.$$

Teda tvrdenie 2.6 neplatí pre triedu neizomorfných súvislých grafov.

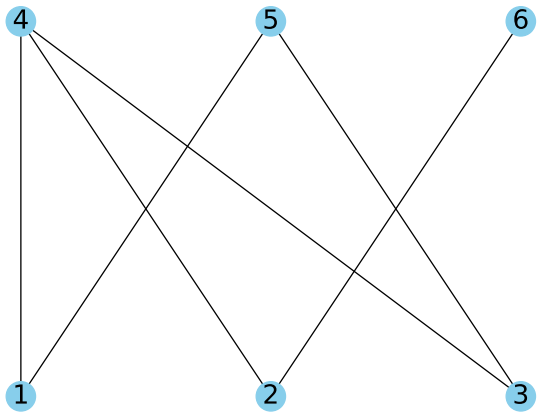
Kapitola 3

Energia špeciálnych grafov

V tejto kapitole si predstavíme niektoré špeciálne triedy grafov. Budeme sa venovať ich vlastnostiam a pozrieme sa na veľkosť energie takýchto grafov.

3.1 Multipartitné grafy

Multipartitným grafom rozumieme súvislý graf, ktorého vrcholy môžeme rozdeliť do niekoľkých množín navzájom neprepojených vrcholov. Príklad tzv. bipartitného grafu je znázornený na obrázku 3.1. V nasledujúcej časti sa pozrieme na odvodenie horného ohraničenia pre index Λ_{pow} pre takéto grafy. Tvrdenie aj s dôkazom preberáme z [6].



Obr. 3.1: Príklad bipartitného grafu.

Tvrdenie 3.1. *[6, Proposition 1] Označme $K_{m_1,...,m_k}$ kompletný multipartitný graf s počtom vrcholov m a veľkosťami jednotlivých celkov $m_1, ..., m_k$. Platí $1 \leq m_1 \leq ... \leq m_k$ a $m_1 + ... + m_k = m$. Nech A je matica susednosti kompletného multipartitného grafu. Potom platí $\Lambda_{pow}(K_{m_1,...,m_k}) \leq 2(m - \frac{m}{k})$.*

Dôkaz. Matica susednosti A grafu $K_{m_1,...,m_k}$ má blokový tvar

$$A = \mathbf{1}\mathbf{1}^T - diag(D_1, ..., D_k),$$

kde $\mathbf{1} = (1, ..., 1)^T \in \mathbf{R}^m$ a D_i je $m_i \times m_i$ jednotková matica. Nech λ je nenulová vlastná hodnota matice A a $x = (x_1, ..., x_m)^T$ je k nej prislúchajúci vlastný vektor. Potom platí

$$\alpha - \alpha_p = \lambda x_l, \text{ pre všetky } l = \mu_{p-1}+1, \ldots, \mu_p, \quad \alpha_p = \sum_{l=1+\mu_{p-1}}^{\mu_p} x_l, \quad \mu_p = \sum_{r=1}^{p} m_r, \tag{3.1}$$

pre $p = 1, ..., k$. Platí $\alpha = \sum_{j=1}^{m} x_j$. Ak je napríklad $p = 1$, platí

$$\alpha - \sum_{j=1}^{m_1} x_j = \lambda x_l, \text{ pre } l = 1, ..., m_1.$$

Sčítaním týchto rovníc dostaneme

$$\alpha m_1 - m_1 \sum_{j=1}^{m_1} x_j = \lambda \sum_{j=1}^{m_1} x_j,$$
$$\sum_{j=1}^{m_1} x_j = \frac{\alpha m_1}{\lambda + m_1}, \text{ kde } \lambda \neq -m_1.$$

Podobné výsledky dostaneme aj pre zvyšné časti $m_2, ..., m_k$. V prípade $\alpha = 0$ platí $\lambda \in \{-m_1, ..., -m_k\}$. Ak $\alpha \neq 0$ platí $\lambda \notin \{-m_1, ..., -m_k\}$ a vlastná hodnota λ spĺňa

$$\alpha = \sum_{i=1}^{k} \sum_{l=1+\mu_{i-1}}^{\mu_i} x_l = \alpha \sum_{i=1}^{k} \frac{m_i}{\lambda + m_i},$$
$$\psi(\lambda) = \sum_{i=1}^{k} \frac{m_i}{\lambda + m_i} = 1.$$

Naopak ak $\lambda \notin \{-m_1, ..., -m_k\}$ spĺňa $\psi(\lambda) = 1$, tak vektor $x \in \mathbf{R}^m$ taký, že

$$x = (\underbrace{y_1, \ldots, y_1}_{m_1 \text{ krát}}, \underbrace{y_2, \ldots, y_2}_{m_2 \text{ krát}}, \ldots, \underbrace{y_k, \ldots, y_k}_{m_k \text{ krát}})^T, \text{ kde } y_i = \frac{m_i}{\lambda + m_i},$$

je vlastný vektor matice A, lebo platí

$$\psi(\lambda) = \sum_{i=1}^{k} y_i = 1,$$
$$\alpha \sum_{i=1}^{k} y_i = \alpha = \sum_{i=1}^{k} y_i m_i,$$
$$\alpha y_1 + ... + \alpha y_k = y_1 m_1 + ... + y_k m_k.$$

Z toho vyplýva, že $m_1 = m_2 = ... = m_k = \alpha$ a teda platí

$$\alpha - \alpha_p = m_i - y_i m_i = m_i(1 - \frac{m_i}{\lambda + m_i}) = m_i(\frac{\lambda + m_i - m_i}{\lambda + m_i}) = \lambda y_i,$$
$$\forall i = 1 + \mu_{p-1}, ..., \mu_p.$$

Zoberme teraz funkciu $\Phi(\xi_1, ..., \xi_k) = \sum_{i=1}^{k} \frac{\xi_i}{\lambda + \xi_i}$ pre fixné $\lambda > 0$. Platí

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \xi_i^2}(\xi_1, ..., \xi_k) = \left(\frac{(\lambda + \xi_i) - \xi_i}{(\lambda + \xi_i)^2}\right)' = \left(\frac{\lambda}{(\lambda + \xi_i)^2}\right)' = -\frac{2\lambda}{(\lambda + \xi_i)^3}, \forall i = 1, ..., k.$$

Fukcia je pre $\xi > 0$ konkávna. Deriváciou Lagrageovej funkcie $L(\xi, \mu) = \Phi(\xi_1, ..., \xi_k) - \mu \sum_{i=1}^{k} \xi_i$ dostaneme

$$\frac{\lambda}{(\lambda + \xi_i)^2} - \mu = 0, \forall i = 1, .., k.$$

V maxime funkcie Φ platí $\xi_1 = ... = \xi_k$. Keďže požadujeme aby $\sum_{i=1}^{k} \xi_i = m$, bude funkcia $\Phi(\xi_1, ..., \xi_k)$ nadobúdať maximum v bode $\hat{\xi} = (\frac{m}{k}, ..., \frac{m}{k})^T$, teda pre každé $\lambda > 0$ platí

$$\psi(\lambda) = \sum_{i=1}^{k} \frac{m_i}{\lambda + m_i} = \phi(m_1, \ldots, m_k) \leq \phi\left(\frac{m}{k}, \ldots, \frac{m}{k}\right) = \frac{m}{\lambda + \frac{m}{k}}$$

Pre $\lambda > 0$ platí $\psi(\lambda) = 1$ a teda $\lambda + \frac{m}{k} \leq m$ a $0 < \lambda \leq m - \frac{m}{k}$. Podľa [7] má kompletný multipartitný graf práve jednu kladnú vlastnú hodnotu. Teda platí

$$\Lambda_{pow}(K_{m_1,...,m_k}) = \sum_{i=1}^{k} |\lambda_i| = 2\lambda_1 \leq 2(m - \frac{m}{k}).$$

□

Nasledujúci dôsledok preberáme z [6].

Dôsledok 3.1. *[6, Remark 2] Z predošlého dôkazu a z rovnosti $\alpha - \alpha_1 = \lambda x_l$, pre všetky $l = \mu_{p-1} + 1, \ldots, \mu_p$, dostaneme sčítaním rovíc*

$$m_1\alpha_2 + ... + m_1\alpha_k = \lambda\alpha_k.$$

Podobne môžeme postupovať pre $p = 2, ..., k$ a dostaneme, že platí, že λ je vlastná hodnota matice A, práve vtedy, keď vektor $z = (\alpha_1, ..., \alpha_k)^T \in \mathbf{R}^k$ je vlastným vektorom matice B, teda platí $Bz = \lambda z$, kde $B_{ij} = m_i$, ak $i \neq j$ a $B_{ii} = 0$. Uvažujme kompletný bipartitný graf. Graf bude mať $m_1 + m_2 - 2$ nulových vlastných hodnôt a dve nenulové. Nenulové vlastné hodnoty K_{m_1,m_2} musia spĺňať

$$\begin{bmatrix} 0 & m_1 \\ m_2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix},$$
$$det\left(\begin{bmatrix} -\lambda & m_1 \\ m_2 & -\lambda \end{bmatrix}\right) = 0,$$
$$\lambda^2 = m_1m_2 \implies \lambda = \pm\sqrt{m_1m_2}.$$

Teda energia kompletného bipartitného grafu bude

$$\Lambda_{pow}(K_{m_1,m_2}) = 2\sqrt{m_1m_2}.$$

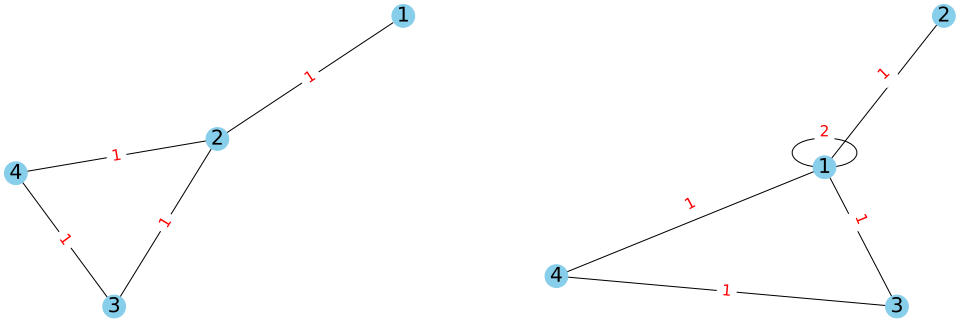
3.2 Invertovatelné grafy

V tejto časti sa oboznámime s pojmom invertovatelného grafu a ukážeme konštrukciu nekonečnej množiny tzv. záporne celočíselne invertovatelných grafov. Nech G je jednoduchý graf s maticou susednosti A_G. Inverzná matica k matici susednosti jednoduchého grafu nemusí nutne reprezentovať nový graf. Ak platí $det(A_G) = 0$, potom hovoríme, že graf G je singulárny a teda neexistuje k nemu inverzný graf. Ďalej ak je matica A_G regulárna, jej inverzia stále nemusí reprezentovať graf, keďže A_G^{-1} môže obsahovať zároveň kladné aj záporné prvky. Godsil [8] vo svojej práci predstavil nasledovnú definíciu invertovatelných grafov.

Definícia 3.1. *Hovoríme, že graf G s maticou susednosti A_G je kladne invertovatelný, ak $det(A_G) \neq 0$ a existuje diagonálna matica signatúry D, taká, že $D_{ij} = \pm 1$, ak $i = j$ a $D_{ij} = 0$, ak $i \neq j$, ktorá spĺňa*

$$DA_G^{-1}D \geq 0.$$

Matica $DA_G^{-1}D$ predstavuje maticu susednosti grafu inverzného ku grafu G.



Obr. 3.2: Kladne invertovatelný graf (naľavo) a k nemu prislúchajúci inverzný graf (napravo).

Táto definícia spĺňa požadovanú vlastnosť inverzie, keďže platí $(G^{-1})^{-1} = G$. Príklad kladne invertovatelného grafu a jeho inverzného grafu znázorňujeme na obrázku 3.2.

V článkoch [9, 10] rozšírili Pavlíková a Ševčovič túto definíciu na záporne invertovatelné grafy. Pre negatívne invertovatelný graf G analogicky platí $DA_G^{-1}D \leq 0$ a matica $-DA_G^{-1}D$ prestavuje maticu susednosti grafu inverzného ku grafu G.

Nasledujúce tvrdenie spolu s dôkazom preberáme z [11].

Tvrdenie 3.2. *[11, Proposition 3.2] Nech G^A je graf s párnym počtom vrcholov m a maticou susednosti A, ktorý sme získali z jednoduchého grafu G^B s počtom vrcholov $\frac{m}{2}$ pridaním nového vrcholu s hranou ku každému z existujúcich vrcholov. Potom platí*

1. *G^A je záporne celočíselne invertovatelný graf,*

2. $\Lambda_{pow}(G^A) = \sum_{\mu\in\sigma(B)} \sqrt{\mu^2+4} \geq \max\{\Lambda_{pow}(G^B), m\}$.

Dôkaz. Matica susendosti grafu G^A a jej inverzia majú nasledovný blokový tvar

$$A = \begin{bmatrix} 0 & I \\ I & B \end{bmatrix}, \qquad A^{-1} = \begin{bmatrix} -B & I \\ I & 0 \end{bmatrix},$$

kde B je matica susednosti grafu G^B. Teda A je celočíselne invertovatelná matica. Ďalej platí, že existuje matica $D = diag(I, -I)$, pre ktorú platí

$$DA^{-1}D = \begin{bmatrix} -B & -I \\ -I & 0 \end{bmatrix} \leq 0,$$

teda matica A je záporne celočíselne invertovatelná. Ďalej predpokladajme, že vektor $\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$ je vlastným vektorom matice A s prislúchajúcou vlastnou hodnotou $\lambda \neq 0$. Platí

$$\begin{bmatrix} 0 & I \\ I & B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix},$$
$$\begin{bmatrix} y \\ x + By \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}.$$

Musia byť teda splnené rovnosti

$$y = \lambda x,$$
$$x + By = \lambda y \implies Bx = \frac{\lambda^2 - 1}{\lambda} x.$$

Ak μ je vlastná hodnota matice B pre vlastný vektor x, platí

$$\mu = \frac{\lambda^2 - 1}{\lambda} \implies \lambda^2 - \lambda\mu - 1 = 0 \implies \lambda = \frac{\mu \pm \sqrt{\mu^2 + 4}}{2}, \text{ pre } \mu \in \sigma(B).$$

Potom $\lambda \in \sigma_+(B)$ práve vtedy, keď $\lambda = \frac{\mu + \sqrt{\mu^2+4}}{2}$ pre nejaké $\mu \in \sigma(B)$. Keďže platí $\sum_{\lambda \in \sigma(A)} \lambda = 0$, a $\sum_{\mu \in \sigma(B)} \mu = 0$, dostávame

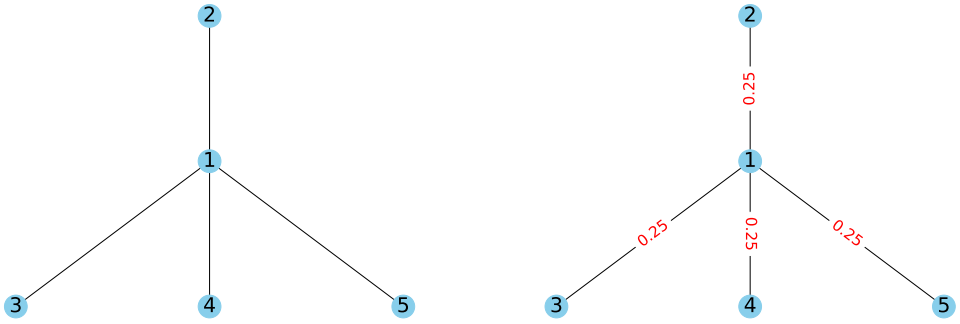
$$\Lambda_{pow}(G^A) = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} |\lambda| = \sum_{\lambda \in \sigma_+(A)} \lambda - \sum_{\lambda \in \sigma_-(A)} \lambda = 2 \sum_{\lambda \in \sigma_+(A)} \lambda = \sum_{\mu \in \sigma(B)} \sqrt{\mu^2 + 4},$$

Pretože platí $\sqrt{\mu^2 + 4} \geq \max\{|\mu|, 2\}$, platí aj

$$\Lambda_{pow}(G^A) = \sum_{\mu \in \sigma(B)} \sqrt{\mu^2 + 4} \geq \sum_{\mu \in \sigma(B)} \max\{|\mu|, 2\} = \max\{\Lambda_{pow}(G^B), m\}.$$

□

Poznámka 3.1. *Všeobecne pre grafy so singulárnou maticou susednosti neexistuje ich inverzný graf. Pavlíková a Ševčovič [10] vo svojej práci rozobrali problematiku tzv. Moore-Penrose pseudo-inverzie, pomocou ktorej vieme niektorým singulárnym grafom priradiť ich pseudo-inverzný graf. Za zmienku stojí napríklad hviezdicový graf, ktorý sme rozobrali v sekcií 2.6 kapitoly 2. Na obrázku 3.3 môžeme vidieť spomínaný hviezdicový graf na piatich vrcholoch spolu s jeho pseudo-inverzným grafom.*



Obr. 3.3: Singulárny hviezdicový graf (naľavo) a k nemu prislúchajúci pseudo-inverzný graf (napravo).

3.3 Premostené grafy

V nasledujúcej časti sa budeme venovať tzv. premosteným grafom a pozrieme sa ako sa vyvíja energia grafov, ktoré vznikajú premosťovaním menších grafov. Nasledujúcu definíciu premosteného grafu preberáme z [9].

Definícia 3.2. *Nech G_A a G_B sú neorientované grafy a nech G_A je stupňa n a G_B je stupňa m. Pomocou $\mathbf{B}_k(G_A, G_B)$ označíme graf G_C stupňa $n+m$, ktorý vznikne premostením posledných k vrcholov grafu G_A s prvými k vrcholmi grafu G_B. Matica susednosti C grafu G_C má tvar*

$$C = \begin{bmatrix} A & H \\ H^T & B \end{bmatrix},$$

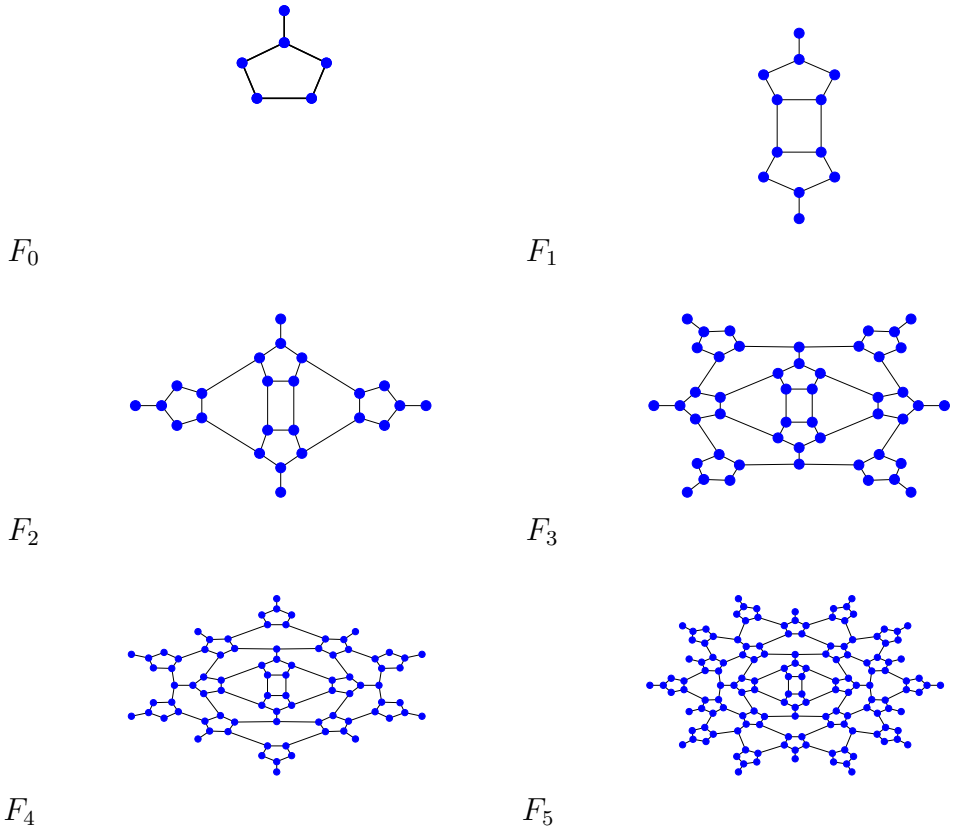
kde $n \times m$ matica H má blokový tvar

$$H = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ I & 0 \end{bmatrix} = FE^T, \text{ kde } F = \begin{bmatrix} 0 \\ I \end{bmatrix}, \; E = \begin{bmatrix} I \\ 0 \end{bmatrix},$$

a I je $k \times k$ matica identity.

Pavlíková a Ševčovič vo svojej práci [9] spomínajú graf molekuly fulvénu, ktorý predstavuje negatívne invertovatelný graf. Taktiež ukázali, že grafy, ktoré vzniknú premosťovaním základných fulvénových grafov si zachovávajú vlastnosť negatívnej invertibility, viď obr. 3.4. Tiež platí, že tieto grafy budú asymptoticky kubické, teda každý vrchol bude mať stupeň 3.

Pozrime sa ďalej na energie grafov, ktoré vzniknú premosťovaním grafov fulvénu.



Obr. 3.4: Základný graf molekuly fulvénu spolu s prvými piatimi iteráciami premostených grafov.

Z tabuľky 3.1 vidno, že energie premostených grafov fulvénu sú menšie ako energie kompletného grafu s rovnakým počtom vrcholov. Premostené fulvénové grafy teda predstavujú hypoenergetické grafy.

Uvažujme teraz dve kópie ľubovoľného neorientovaného grafu G_A so stupňom n. Nový graf $G_C = \mathbf{B}_n(G_A, G_A)$ vznikne premostením všetkých n vrcholov pôvodných grafov pomocou vopred určenej permutácie π. Ak pre premosťovanie zoberieme permutáciu zodpovedajúcu identite, teda $\pi : \{1, ..., n\} \to \{1, ..., n\}$, matica susednosti grafu G_C bude mať tvar

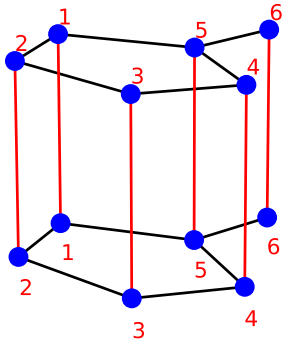
$$C = \begin{bmatrix} A & I \\ I & A \end{bmatrix}.$$

Pre základný graf fulvénu je premostený graf pomocou permutácie identity znázornený na obrázku 3.5.

Tabuľka 3.1: Tabuľka energií premostených fulvénových grafov, počtu vrcholov a energií kompletných grafov

	F_0	F_1	F_2	F_3	F_4	F_5	F_6
# vrcholov	6	12	24	48	84	144	240
$\Lambda_{pow}(F_i)$	7.45	15.68	32.56	66.53	117.47	202.47	338.45
$\Lambda_{pow}(K_n)$	10	22	46	94	166	286	478
$\frac{\Lambda_{pow}(F_i)}{\Lambda_{pow}(K_n)}$	0.745	0.713	0.708	0.708	0.708	0.708	0.708

	F_7	F_8	F_9	F_{10}	F_{11}	F_{12}
# vrcholov	396	648	1056	1716	2784	4512
$\Lambda_{pow}(F_i)$	559.46	916.45	1494.56	2429.46	3942.47	6390.49
$\Lambda_{pow}(K_n)$	790	1294	2210	3430	5566	9022
$\frac{\Lambda_{pow}(F_i)}{\Lambda_{pow}(K_n)}$	0.708	0.708	0.708	0.708	0.708	0.708



Obr. 3.5: Dve kópie fulvénového grafu premostené pomocou permutácie $\pi : \{1, 2, 3, 4, 5, 6\} \to \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$.

Nech λ je vlastná hodnota matice A s prislúchajúcim vlastným vektorom $x \implies$ Ax = λx. Pre maticu C platí

$$C \begin{bmatrix} x \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Ax + x \\ x + Ax \end{bmatrix} = (\lambda + 1) \begin{bmatrix} x \\ x \end{bmatrix}.$$

Teda $\lambda + 1$ je vlastná hodnota matice C pre $\lambda \in \sigma(A)$. Ďalej platí

$$C \begin{bmatrix} -x \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -Ax + x \\ -x + Ax \end{bmatrix} = (\lambda - 1) \begin{bmatrix} -x \\ x \end{bmatrix}.$$

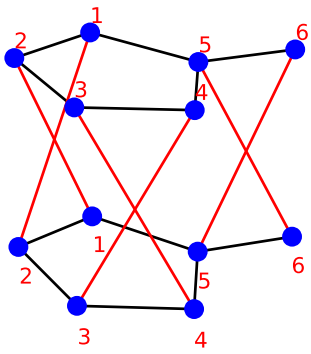
Teda $\lambda - 1$ je tiež vlastná hodnota matice C. Pre energiu grafu G_C platí

$$\Lambda_{pow}(G_C) = \sum_{i=1}^{n} |\lambda_i + 1| + |\lambda_i - 1|, \text{ kde } \lambda_i \in \sigma(A).$$

Ďalej uvažujme ľubovoľnú permutáciu $\pi : \{1, ..., n\} \to \{\pi_1, ..., \pi_n\}$. Ak platí, že permutácia π je symetrická, teda jej zodpovedá symetrická permutačná matica P, pre ktorú platí $P^2 = I$, platí

$$C = \begin{bmatrix} A & P \\ P & A \end{bmatrix}.$$

Pre základný graf fulvénu je premostený graf pomocou permutácie $\pi : \{1, 2, 3, 4, 5, 6\} \to \{2, 1, 4, 3, 6, 5\}$ znázornený na obrázku 3.6.



Obr. 3.6: Dve kópie fulvénového grafu premostené pomocou permutácie $\pi : \{1, 2, 3, 4, 5, 6\} \to \{2, 1, 4, 3, 6, 5\}$.

Pre tento typ grafov platí

$$\begin{aligned} det(C-\lambda I) &= det\left(\begin{bmatrix} A-\lambda I & P \\ P & A-\lambda I \end{bmatrix}\right) \\ &= det\left(\begin{bmatrix} I & I \\ 0 & I \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A-\lambda I & P \\ P & A-\lambda I \end{bmatrix}\begin{bmatrix} I & -I \\ 0 & I \end{bmatrix}\right), \\ det(C-\lambda I) &= det\left(\begin{bmatrix} A-\lambda I+P & 0 \\ P & A-\lambda I-P \end{bmatrix}\right) \\ &= det\,(A-\lambda I+P)\,det\,(A-\lambda I-P)\,. \end{aligned}$$

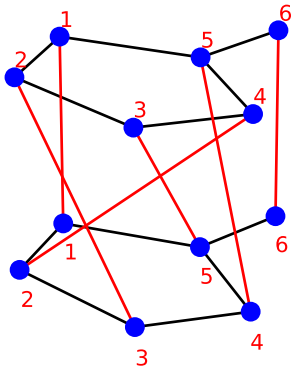
Teda energia grafu bude daná vzťahom

$$\Lambda_{pow}(G_C) = \sum_{i=1}^{n} |\mu_i| + |\nu_i|, \text{ kde } \mu_i \in \sigma(A+P) \text{ a } \nu_i \in \sigma(A-P).$$

Keďže platí, že celkový počet v permutácií (symetrických aj nesymetrických) je $n!$, v prípade fulvénových grafov 120, môžeme numericky spočítať energiu premosteného grafu pre každú z permutácií a zistiť, ktorá z nich dosahuje najväčšiu energiu. Dostaneme, že optimálne $\Lambda_{pow}(G_C) \doteq 18.916$ a nadobúda sa pre 8 rôznych permutácii

$$\begin{aligned} \pi_1 &: \{1,2,3,4,5,6\} \to \{1,4,2,5,3,6\}, \\ \pi_2 &: \{1,2,3,4,5,6\} \to \{2,5,3,1,4,6\}, \\ \pi_3 &: \{1,2,3,4,5,6\} \to \{3,1,4,2,5,6\}, \\ \pi_4 &: \{1,2,3,4,5,6\} \to \{4,2,5,3,1,6\}, \\ \pi_5 &: \{1,2,3,4,5,6\} \to \{4,1,3,5,2,6\}, \\ \pi_6 &: \{1,2,3,4,5,6\} \to \{5,2,4,1,3,6\}, \\ \pi_7 &: \{1,2,3,4,5,6\} \to \{1,3,5,2,4,6\}, \\ \pi_8 &: \{1,2,3,4,5,6\} \to \{2,4,1,3,5,6\}. \end{aligned}$$

Prvá z nich je znázornená na obr. 3.7.



Obr. 3.7: Dve kópie fulvénového grafu premostené pomocou permutácie $\pi : \{1, 2, 3, 4, 5, 6\} \to \{1, 4, 2, 5, 3, 6\}$.

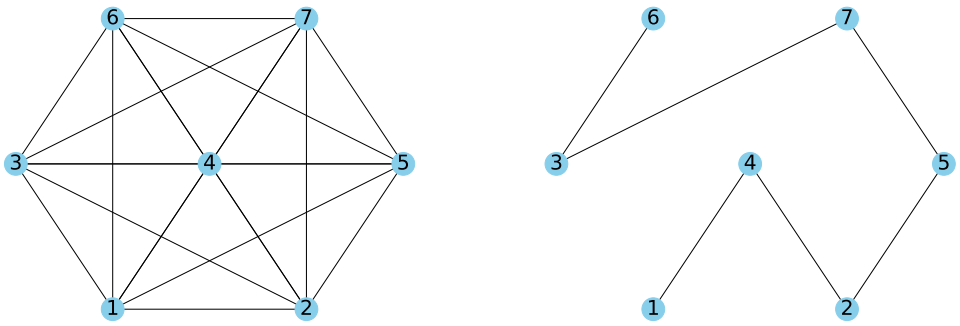
Kapitola 4

Hľadanie minimálnej kostry grafu

V tejto kapitole si uvedieme ďalšie využitie vlastných hodnôt grafu. Pôjde o hľadanie tzv. najmenšej kostry grafu. Kapitola bola pridaná na počesť profesora Otakara Borůvku, ktorý je známy svojim celkovým prínosom do diferenciálnej geometrie a teórie grafov. V druhej polovici minulého storočia pôsobil aj na Univerzite Komenského v Bratislave.

Kostrou súvislého grafu rozumieme taký podgraf, ktorý obsahuje všetky vrcholy pôvodného grafu a hrany vybrané tak aby bol tento graf tiež súvislý a zároveň neobsahoval žiaden cyklus. Príklad uvádzame na obrázku 4.1.

Je zrejmé, že najmä pre grafy s veľkým počtom hrán bude kostier príliš veľa na to aby sme ich prechádzali jednotlivo a následne vybrali najlepšiu. Napríklad pre kompletný graf s počtom vrcholov n je počet všetkých kostier n^{n-2}. Pre iné grafy vieme počet kostier vypočítať z tzv. Laplaciánu grafu. Nech G je súvislý graf na n vrcholoch s maticou susednosti $A(G)$.



Obr. 4.1: Pôvodný graf (naľavo) a jedna z jeho kostier (napravo).

Potom jeho Laplacián je definovaný ako

$$L(G) = D(G) - A(G),$$

kde $D(G)$ je diagonálna matica so stupňami jednotlivých vrcholov. Nech $\sigma(L(G)) = \{\lambda_1, ..., \lambda_n\}$ a $\tau(G)$ nech je počet všetkých kostier grafu G. Ďalej platí, že Laplacián súvislého grafu má práve jednu nulovú vlastnú hodnotu a platí

$$\tau(G) = \prod_{i:\lambda_i \neq 0} \lambda_i.$$

4.1 Borůvkov algoritmus

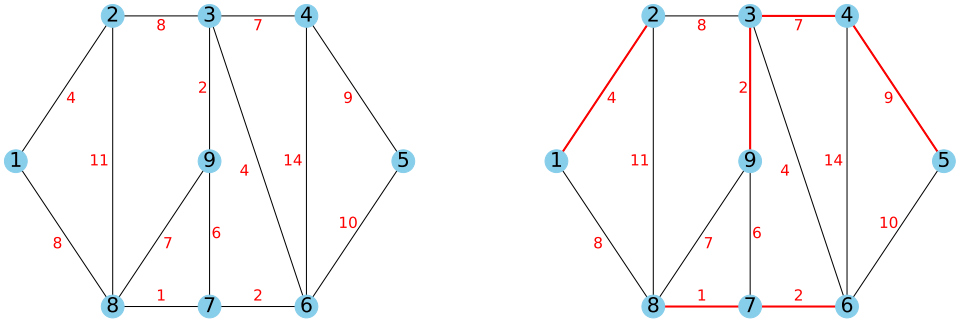
Z dôvodu príliš veľkého počtu kostier sa pri hľadaní optimálnej kostry spoliehame na rôzne heuristiky a algoritmy. Algoritmy na hľadanie najmenšej kostry sa používajú aj na váhovaných grafoch. Medzi najpoužívanejšie patria napríklad Primov algoritmus, Kruskalov algoritmus alebo historicky prvý algoritmus na hľadanie minimálnej kostry grafu - Borůvkov algoritmus. Profesor Otakar Borůvka ho publikoval v roku 1926.

Algorithm 1 Borůvkov algoritmus pre hľadanie najmenšej kostry grafu.

1: **procedure** BORUVKA(G) ▷ Vstupom je súvislý váhovaný neorientovaný graf.
2: V prvom kroku inicializujeme každý z vrcholov ako samostatný komponent. Celkový počet komponentov označíme ako "k".
3: Inicializujeme prázdnu množinu hrán, ktoré tvoria minimálnu kostru ako MST.
4: **while** $k > 1$ **do**
5: Pre každý komponent nájsť najbližšiu spojnicu s iným komponentom a spojiť tieto dva komponenty.
6: Pridať spojnicu do MST, ak tam ešte nie je.
7: **end while**
8: **return** MST.
9: **end procedure**

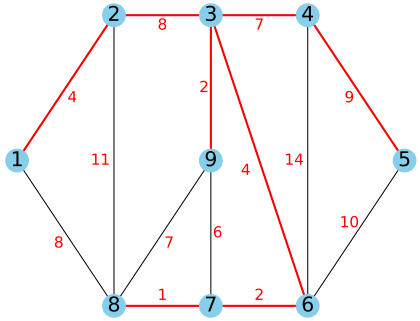
Aplikáciu Borůvkovho algoritmu si môžeme ukázať na jednoduchom váženom grafe na obrázku 4.2.

Na začiatku máme 9 komponentov. Začneme od jednotky a zistíme, že najbližšia spojnica s iným komponentom je hrana (1,2). Teda spojíme tieto



Obr. 4.2: Nultá a prvá iterácia Borůvkovho algoritmu.

dva vrcholy a vytvoríme nový komponent. Podobne budeme postupovať po všetkých vrcholoch. Po prvej iterácii sa nám sformujú tri komponenty. Proces zopakujeme a dostaneme výslednú minimálnu kostru znázornenú na obrázku 4.3.



Obr. 4.3: Minimálna kostra získaná pomocou Borůvkovho algoritmu.

Záver

V tejto diplomovej práci sme sa venovali vlastným číslam grafu a z nich odvodených indexov. Prvotným cieľom tejto práce bolo hľadanie vlastných čísel grafov pomocou optimalizačných metód. Ku samotnej optimalizácii sme sa v práci nedostali, no hľadanie vlastných hodnôt grafov sme prevádzali najmä analyticky na niektorých vybraných skupinách grafov. Z nich sme následne odvodzovali energiu spektra grafov a porovnávali jednotlivé skupiny grafov na základe tejto energie.

V prvých častiach kapitoly 1 sme si predstavili základné pojmy a identity, s ktorými sme v práci ďalej pracovali. Ukázali sme si odvodenie ohraničení pre energiu grafu podľa [1]. Uviedli sme aj niektoré známe dolné ohraničenia pre energiu grafu. V tvrdení 1.4 sme si ukázali odvodenie preďalšie dolné ohraničenie pre energiu grafu. Následne sme sa venovali horným ohraničeniam energie grafu a v tvrdení 1.2 sme si ukázali odvodenie pre jedno z nich. Následne sme v tvrdeniach 1.3 a 1.4 uviedli dôkaz tzv. Nordhaus-Gaddumovho horného ohraničenia pre súčet energie jednoduchého grafu a energie jeho komplementu.

V druhej kapitole sme sa venovali téme hyperenergetických grafov. Uviedli sme si príklady takýchto grafov znázornených na obrázkoch v prvej časti kapitoly. Uviedli sme si tvrdenia pre vlastné hodnoty grafov, ktoré vzniknú z kompletných grafov odstránením niektorých hrán.

Najskôr sme s kompletného grafu skúsili odstrániť jednu hranu. Zistili sme, že takto vzniknuté grafy tvoria tzv. hypoenergetickú postupnosť a že ich energia sa pre rastúci počet vrcholov blíži ku energii kompletných grafov.

Následne sme z grafu odstraňovali Hamiltonovu kružnicu. Pomocou simulácie sme zistili, že by takéto grafy mohli byť hyperenergetické a naozaj sa neskôr ukázalo, že takto vzniknuté grafy tvoria hyperenergetickú postupnosť. Limita pomerov energii grafov s odstránenou Hamiltonovou

kružnicou ku energii kompletných grafov vyšla približne 1.22, čo znamená, že ich energia rastie rýchlejšie ako energia kompletného grafu.

V ďalšej časti sme z grafu odstraňovali menší cyklus, čo viedlo k zisteniu, že takto vzniknuté grafy taktiež tvoria hyperenergetickú postupnosť. Limita pomerov v tomto prípade závisí od veľkosti odstráneného cyklu.

Následne sme z grafu odstraňovali cestu veľkosti $k < n$. V tomto prípade sa nám nepodarilo presne určiť o aký typ postupnosti sa jedná. Simulácie naznačovali, že keď odstraňujeme z grafu cestu s fixnou dĺžkou veľkosti $k > 1$, dostaneme hyperenergetickú postupnosť s limitou pomerov rovnou 1. Pre grafy s odstránenou cestou s veľkosťou úmernou počtu hrán grafu sa zdá, že by sa mohlo jednať znova o hyperenergetické grafy s limitou pomerov väčšou ako 1.

Ďalej sme z kompletného grafu odstraňovali menší kompletný podgraf. Takáto konštrukcia znova viedla k nekonečnej postupnosti hypoenergetikých grafov, ktorých vlastné hodnoty sme vedeli presne spočítať.

V ďalších dvoch sekciách sme odstraňovali tzv. hviezdicové grafy a grafy tzv. 1-faktora. V oboch prípadoch sme zistili, že sa jedná o hypoenergetickú postupnosť grafov s limitou pomerov rovnou 1.

V poslednej časti zaoberajúcej sa redukovanými grafmi sme z kompletného grafu odstraňovali kompletný bipartitný podgraf. Takto skonštruované grafy tvoria postupnosť s limitou pomerov rovnou 1.

V poslednej časti kapitoly sme sa venovali celkovému počtu hyperenergetických grafov. V tvrdení 2.6 sme ukázali dôkaz toho, že skoro všetky grafy sú hyperenergetické. To však zahŕňalo všetky izomorfné jednoduché grafy. V prípade, že berieme do úvahy len neizomorfné súvislé grafy, sme zistili, že pomer počtu hyperenergetických grafov k počtu všetkých grafov sa pre veľký počet vrcholov blíži k 0.

V tretej kapitole sme sa pozreli na niektoré špeciálne skupiny grafov. V prvej časti sme si uviedli pojem multipartiného grafu a ukázali odvodenie pre horné ohraničenie sily spektra takýchto grafov. Pre tzv. bipartitné grafy sme si ukázali, že sa dá nájsť presný vzorec pre výpočet ich energie.

V ďalšej časti sme sa venovali invertibilite grafu a uviedli sme sme si pojmy pozitívnej a negatívnej invertibility. Ukázali sme odvodenie pre dolné ohraničenie pre silu spektra niektorých invertovatelných grafov.

Následne sme sa venovali tzv. premosteným grafom. Uviedli sme si definíciu premosteného grafu a ukázali niektoré iterácie premosťovania grafov fulvénu. Taktiež sme pre niektoré špeciálne triedy grafov našli predpis pre ich vlastné hodnoty pomocou vlastných hodnôt ich podgrafov.

V poslednej kapitole sme si predstavili pojem Laplaciánu grafu a kostry grafu. Ukázali sme si princíp Borůvkovho algoritmu a na konkrétnych grafoch sme demonštrovali jednotlivé iterácie.

Literatúra

[1] K. Ch. Das and I. Gutman, *Bounds for the energy of graphs*, Hacettepe Journal of Mathematics and Statistics, Volume 45 (3) (2016), 695 – 703.

[2] X. Li, Y. Shi and I. Gutman, *Graph Energy*, Springer, New York (2012).

[3] B.J. McClelland, *Properties of the latent roots of a matrix: The estimation of π-electron energies*, J. Chem. Phys. 54 (1971), 640–643.

[4] K. Ch. Das, S.A. Mojallal and I. Gutman, *Improving McClelland's lower bound for energy.* MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 70 (2013), 663–668.

[5] I. Kra and S. Simanca, *On Circulant Matrices* , Notices of the AMS, Vol.59, no. 3 (2012), 2 - 5.

[6] S. Pavlíková and D. Ševčovič, J. Širáň, *Extreme and statistical properties of eigenvalue indices of simple connected graphs* , Discrete Mathematics (2023), 113635.

[7] D. Cvetkovic, M. Doob and H. Sachs, *Spectra of Graphs - Theory and Application* , 3rd ed., Heidelberg-Leipzig (1995).

[8] C.D. Godsil, *Inverses of trees* , Combinatorica 5 (1985) 33–39.

[9] S. Pavlíková and D. Ševčovič, *On a construction of integrally invertible graphs and their spectral properties* , Linear Algebra and its Applications 532, Elsevier (2017), 512-533.

[10] S. Pavlíková and D. Ševčovič, *On the Moore-Penrose pseudo-inversion of block symmetric matrices and its application in the graph theory* , Linear Algebra and its Applications. 673 (2023), 280-303.

[11] S. Pavlíková and D. Ševčovič, *Qualitative, statistical, and extreme properties of spectral indices of signable pseudo-invertible graphs*, The Electronic Journal of Linear Algebra. 40 (1987), 343-360.

[12] M. Chen, *On the solution of circulant linear systems*, SIAM Journal on Numerical Analysis 24 (1987), 668-683.

[13] Z. Füredi and J. Komlos, *The eigenvalues of random symmetric matrices*, Combinatorica 1 (1981), 233-241.

[14] E. Bender, E. Canfield and B. McKay, *The asymptotic number of labeled connected graphs with a given number of vertices and edges*, Random Structures & Algorithms. 1 (2006), 127 - 169.