TECHNISCHE UNIVERSITÄT WIEN
Vienna | Austria

Graphen-Spektren

Bachelorarbeit aus Diskreter Mathematik

Richard Weiss

TU Wien, Vienna, Austria

12. April 2021

Definitionen (1 / 5)

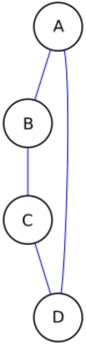
Man erinnere sich an die Definitionen der LVA „Diskrete und geometrische Algorithmen“ WS 2020-21.

Definition (Mehr Graphen)

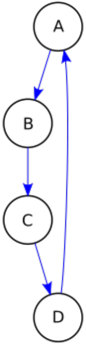
Ungerichtete und gerichtete Graphen mit **Schleifen** haben auch Singletons bzw. Diagonal-Elemente der Knoten-Menge als Kanten.
Bei **Multi-Graphen** ist die Kanten-Menge eine Multi-Menge.

Wir werden nur endliche Graphen brauchen.

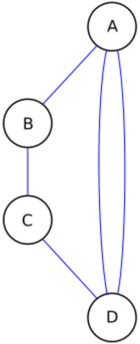
Mehr Graphen: Beispiele



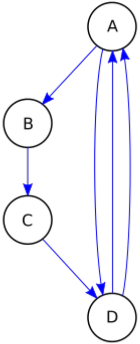
(a) Ungerichteter Graph ohne Mehrfach- kanten



(b) Gerichteter Graph ohne Mehrfach- kanten



(c) Ungerichteter Graph mit Mehrfachkanten



(d) Gerichteter Graph mit Mehrfachkanten

Definition (Graphen-Matrizen)

Sei $G = (V, E)$ ein (un)gerichteter (Mulit-)Graph mit oder ohne Schleifen und $V = \{v_1, \ldots, v_n\}$ sowie $E = \{e_1, \ldots, e_m\}$. Für $i, j = 1, \ldots, n$ und $k = 1, \ldots, m$ sei $a_{i,j}$ die Anzahl der Kanten von v_i nach v_j, d_i der (Eingangs-)Grad (ungerichtete Schleifen zählen doppelt) von v_i und die Inzidenz zwischen v_i und e_k

$$b_{i,k} = \begin{cases} 1, & v_i \in e_k, \\ 0, & \text{sonst}, \end{cases} \quad \text{bzw.} \quad b_{i,k} = \begin{cases} 1, & \exists v \in V : e_k = (v_i, v), \\ -1, & \exists v \in V : e_k = (v, v_i), \\ 0, & \text{sonst}. \end{cases}$$

Wir nennen $\mathbf{A} := (a_{i,j})_{i,j=1}^{n}$ eine **Adjazenz-Matrix**, $\mathbf{D} := \operatorname{diag}(d_1, \ldots, d_n)$ eine **Valenz-Matrix**, $\mathbf{C} := \mathbf{D} - \mathbf{A}$ eine **Laplace-Matrix** und $\mathbf{B} := (b_{i,k})_{i,k=1}^{n,m}$ eine **Inzidenz-Matrix** von G.

Graphen-Matrizen: Beispiele (0 / 4)

Betrachte die Graphen aus der vorherigen Abbildung.

$$v_1 := A, v_2 := B, v_3 := C, v_4 := D,$$
$$e_1 := \overline{AB}, e_2 := \overline{BC}, e_3 := \overline{CD}, e_4 := \overline{DA},$$
$$e_{4,-1} := \overline{AD}, e_{4,1} := \overline{DA}^{(1)}, e_{4,2} := \overline{DA}^{(2)}$$

Die Mehrfachkanten seien dabei die letzteren 2. Die Kanten seien lexikographisch bzgl. ihrer Indizes geordnet.

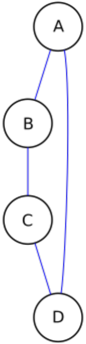


Abbildung: Ungerichteter Graph ohne Mehrfachkanten

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

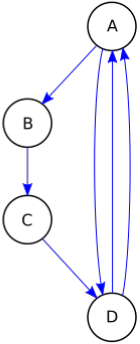


Abbildung: Gerichteter Graph mit Mehrfachkanten

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Bemerkung

Ein Graph G ist durch eine seiner Adjazenz-Matrizen eindeutig bestimmt. Die Umkehrung gilt im Allgemeinen nur modulo Spalten- und Zeilen-Reihenfolge, d.h.

$$\forall \mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2 \in \mathcal{A}(G) : \exists \mathbf{P} \text{ Permutations-Matrix} : \mathbf{A}_1 = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}_2\mathbf{P},$$

d.h. G ist durch seine Klasse $\mathcal{A}(G)$ von Adjazenz-Matrizen eindeutig bestimmt. Adjazenz-Matrizen desselben Graphen haben dasselbe Spektrum. Dies rechtfertigt folgende Definition.

Definition (Gewöhnliches Spektrum & Charakteristisches Polynom)

Finde numerische Werte $\overline{v} \in \mathbb{R}$ für die Knoten $v \in V$ (als Variablen) eines Graphen $G = (V, E)$ mit $|V| = n$, sodass für alle Knoten v das Verhältnis zwischen der Summe $\overline{s}_v$ der Werte der nach v Knoten $w \to v$ (die über eine Kante nach v führen) und $\overline{v}$ konstant ist, d.h.

$$\exists \lambda \in \mathbb{C} : \forall v \in V : \overline{s}_v = \sum_{w \to v} \overline{w} = \lambda \overline{v}.$$

Sei $\mathbf{A} \in \mathcal{A}(G)$, dann können wir das umformulieren zu $\mathbf{Av} = \lambda \mathbf{v}$.
Eine notwendige und hinreichende Bedingung für die Existenz eines solchen $\mathbf{v}$ ist, dass λ Nullstelle des **gewöhnlichen Charakteristischen Polynoms** $P_G(\mu) := \det(\mu \mathbf{I}_n - \mathbf{A})$.
λ ist dann Teil des **gewöhnlichen Spektrums** $\sigma_P(G) := \sigma(\mathbf{A})$ von G.

Zusammenfassung: „spektrale“ Eigenschaften von Graphen

- Graphen-Matrizen z.B. $\mathbf{A}$, $\mathbf{D}$, $\ldots$,
- (Koeffizienten von) verschiedene(n) Charakteristische(n) Polynome(n) z.B. $P_G(\lambda)$, $Q_G(\lambda)$, $\ldots$
- Graphen-Spektren z.B. $\sigma_P(G)$, $\sigma_Q(G)$, $\ldots$

Definition (Kanten-Graph)

Der **Kanten-Graph** $L(G) = (V', E')$ eines ungerichteten Graphen $G = (V, E)$ hat als Knoten die Kanten von G und diese sind adjazent, wenn sie als G-Kante einen gemeinsamen G-Knoten habend, d.h.

$$V' = E, \quad E' = \{\{e_1, e_2\} : e_1, e_2 \in E, e_1 \cap e_2 \neq \emptyset\}.$$

Definition

Die **direkte Summe** $G = G_1 \dotplus G_2$ der Graphen $G_1 = (V_1, E_1)$ und $G_2 = (V_2, E_2)$ mit $E_1 \cap E_2 = \emptyset$ ist $G = (V, E)$ mit $V = V_1 \cup V_2$ und $E = E_1 \cup E_2$.

Definitionen (5 / 5)

Definition (NEPS)

Seien $G_1 = (V_1, E_1), \dots, G_n = (V_n, E_n)$ Graphen. Deren **NEPS** („Non-complete Extended P-Sum") bzgl. $\mathcal{B} \subseteq \{0,1\}^n \setminus \{(0,\dots,0)\}$ sei der Graph G mit folgender Knoten- bzw. Kanten-Menge.

$$V := \prod_{i=1}^{n} V_i,$$

$$E := \{((x_1,\dots,x_n),(y_1,\dots,y_n)) \in V^2 : \exists(\beta_1,\dots,\beta_n) \in \mathcal{B} :$$
$$\forall i = 1,\dots,n : (\beta_i = 1 \implies (x_i, y_i) \in E_i), (\beta_i = 0 \implies x_i = y_i)\}.$$

Wichtige Fragestellungen

- Zusammenhänge zwischen (unter) verschiedenen „spektralen“ Eigenschaften
- „spektrale“ Eigenschaften ...
  - von prominenter Graphen (und deren Zusammenhänge),
  - von Graphen durch Graphen-Operationen (vs. Graphen-Matrix-Operationen z.B. $+$, $\cdot$, det, $\otimes$, ...),
  - (effiziente) Berechnung
  - Zusammenhänge zum Graphen selbst (geometrische Eigenschaften) in beide Richtungen!

Ende des Crashkurses!

Aussicht auf Spezialisierung

Jedes chemische Molekül kann als **molekularer Graph** dargestellt werden: Die Ecken entsprechen Atomen und die Kanten deren Bindungen. Die π-Elektronen-Energie (Energie der Elektronen in π-Orbitalen) von Kohlen-Wasserstoffen entspricht der ...

Definition (Energie eines Graphen)

Sei G ein Graph, dann lautet seine Energie

$$\mathcal{E}(G) := \sum_{\lambda \in \sigma_P(G)} |\lambda|.$$

To be continued ... am 7. Juni 2021.