S-transformacija*i grafovska energija

Edis Ujkanović
Novi Pazar

Abstract

Grafovska energija je pojam koji je prvobitno nastao iz organske Hemije.U Matematici je grafovska energija predmet proučavanja već nekoliko decenija unazad,neophodan matematički aparat je spektralna teoriji grafova.Najveći akcenat o ovom radu je posveićen Seidelovoj energiji i primeni S-transformacije kako na "običnu" matricu susedstva tako i na Seidelovu matricu.Proučavana je grafovska energija pre i posle S-transformacije,dokazano je da odredjen broj sopstvenih vrednosti matrice susedstva ostaje invarijantan u odnosu na S-transformaciju.Ispitana je uloga S-transformacije u Seidelovoj matrici.Dokazano je sveukupno nekoliko gornjih,odnosno,donjih ograničenja za Seidelovu energiju.Haemers je 2012. postavio hipotezu da je Seidelova energija već ili jednaka od energija kompletnog grafa.Hameresova hipoteza je dokazana za jako regularne grafove,a kao trivijalni dokazi se javljaju i za graf zvezdu,odnosno za kompletan bipartitni graf.

1 Osnovni pojmovi o grafovskoj energiji

Svaki graf se može predstaviti pomoću matrice M,koju na neki odredjeni način pridružujemo grafu.Tako možemo govoriti o kvadratnim matricama: matrici sesedstva,Seidelovoj matrici,neoznačenoj Laplasovoj matrici i drugim.Ovde ćemo razmatrati samo matricu susedstva koja će biti obeležavana sa A i Seidelovu matricu koja će biti obeležavana sa S.

Element a_{ij} u preseku i-te vrste i j-te kolone matrice susedstva jednak je broju grana koje vode od čvora x_i do čvora x_j,obzirmo da razmatramo samo proste,neorjentisane grafove elementi matrice susedstva mogu biti 1 ili 0. Lako mozemo primetiti da je matrica A simetrična. Matrica susedstva za graf na slici ispod je

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

Definicija 1 *Neka je Γ graf sa n čvorova sa matricom susedstva A.Neka su $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ sopstvene vrednosti matrice A .Grafovska energija u oznaci $E(A)$ se definiše kao*

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

*S-transformacija je u stranoj literaturi poznata kao Seidel switching

Najvažnija pitanja u izučavanju grafovske energije su uspostavljanje gornjih i donjih ograničenja. 1971. McClelland je otkrio prvu gornju granicu za $E(A)$,vazi

$$\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i| \leq \sqrt{2mn} \tag{1}$$

Dokaz je jednostav,samo primenimo Košijevu nejednakost na brojeve
$\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ i $\underbrace{1, 1, \cdots, 1}_{n-jedinica}$.
Koulen i Moulton su dokazali da je obična grafovska energija manja ili jednaka od $n(1+\sqrt{2})/2$,gde jednakost važi akko je graf jako regularan sa odredjenim parametrima.

2 Regularna particija[1]

Neka je $X = \{1, 2, \cdots, n\}$ skup čvorova grafa Γ čija je matrica susedstva A.Neka $\{X_1, \cdots, X_m\}$ bude m-particija skupa X.Karakteristična matrica S dimenzija $n \times m$ je matrica čija je j-ta kolona krakteristični vektor od $X_j (j = 1, \cdots, m)$.Neka je $n_i = |X_i|$ i $K = diag(n_1, \cdots, n_m)$.Dalje neka je A prema odgovarajućoj particija čvorova predstavljena kao

$$A = \begin{pmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & \cdots & A_{1,m} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & \cdots & A_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m,1} & A_{m,2} & \cdots & A_{m,m} \end{pmatrix}$$

gde svaki A_{ij} predstavlja podmatricu(blok) od A.Ako je zbir u svakoj vrsta podmatrice A_{ij} konstantan,odnonsno jednak nekom b_{ij} onda se particija naziva regularnom.Matrica

$$B = \begin{pmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} & \cdots & b_{1,m} \\ b_{2,1} & b_{2,2} & \cdots & b_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m,1} & b_{m,2} & \cdots & b_{m,m} \end{pmatrix}$$

se naziva odnosnom matricom matrice A.Lako možemo da je spektar matrice B sadržan u spektru matrice A,jer za svaki sopstvenih vektor v koji odgovara sopstvenoj vrednosti λ matrice B,vektor Sv predstavlja sopstveni vektor matrice A za istu sopstvenu vrednost λ.Odavde direktno sledi da sopstveni vektori matrice A leže u prostoru Ω spanovanim nad karakterističnim vektorima od $X_j (j = 1, \cdots, m)$,za sve one zajedničke sopstvene vrednosti matrice A i matrice B.Sada lako možemo zaključiti da su ostali sopstveni vektori matrice A ortogonalni u prostoru spanovanim nad karakteristicnim vektorima od $X_j (j = 1, \cdots, m)$,jer u suprotnom bi sopstvene vrednosti koje odgovaraju tim sopstvenim vektorima pripadale spektru matrice B,sto je u suprotnosti.

[1] Ovaj pojam se u stranoj literaturi može naći pod imenom equitable partitions

3 S-transformacija

Neka je dat graf Γ sa skupom čvorova X i skupom Y takav da $Y \subset X$.S-transformacija u odnosu na skupove čvorova Y i $X\ Y$ znači,transformacija svih susednih čvorova izmedju Y i $X \backslash Y$ u nesusedne i transformacija svih nesusednih čvorova izmedju Y i $X \backslash Y$ u susedne.Možemo primetiti da je S-transformacija relacije ekvivalencije na skupu čvorova.S-transformacija je specijalan slučaj GM[2]-transformacije.
Ako matricu susedstva A predstavimo u specijalnom slučaju regularne particije sa 2-particijom,onda

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ A_2^T & A_3 \end{pmatrix}$$

Primenom S-transformacije se matrica A prevodi u matricuA' oblika

$$A' = \begin{pmatrix} A_1 & J - A_2 \\ J - A_2^T & A_3 \end{pmatrix}$$

jer će S-transformacije sve nule u podmatricma A_2 i A_2^T pretvoriti u jedinice i sve jedinice pretvoriti u nule,zbog toga je ove matrice dovoljno oduzeti od matrice J.Podmatrice A_1 i A_3 predstavljaju medjusobnu susednost onih čvorova u Y i $X \backslash Y$ čija se medjusobna susednosto naravno ne menja S-transformacijom,tako da podmatrice A_1 i A_3 ostaju neizmenjene.
Ako matrice A i A' imaju iste odnosne matrice tj.ako $B = B'$,onda matrice imaju isti spektar odnosno istu grafovsku energije,jer, pošto su sopstvene vrednosti matrice B i matrice B' jednake,te se sopstvene vrednosti moraju sadržati i u spektru matrice A i matrice A',zbog toga sto je $B = B'$,ostali sopstveni vektori i od A i od A' su ortogonalni na karakteristične vektore od Y i $X \backslash Y$ šsto znači da su ti sopstveni vektori jednaki,sto direktno povlači i to da su i ostale sopstvene vrednosti od A i A' jednake.Dakle,ako je $B = B'$ onda matrice A i A' imaju isti spektar,odnosno,graf Γ pre i posle S-transformacije ima istu grafovsku energiju.
Sada lako zaključujemo da ako je , svaki čvor iz Y susedsan sa tačno pola čvorova iz XY onda, graf ima istu energije i pre i posle S-transformacije,zato sto je upravo u ovom slučaju odnosna matrica pre i posle S-transformacije jednaka.

Naredna teorema govori nam o tome da graf Γ pre i posle S-transformacije ima istu energiju za sopstvene vektore u prostoru Ω^T.

Teorema 1 *Neka je dat graf Γ sa regularnom particijom skupa čvorova i sa odnosnom matricom B.Neka je Γ' graf dobijem primenom S-transformacije na grafu Γ i neka mu je odnosna matrica B'.Ako B ima ne negativne sopstvene vrednosti,onda $E(\Gamma) \leq E(\Gamma')$,jednakost vredi akko matrica B' ima ne negativne sopstvene vrednosti.*

Dokaz: Neka je

$$A' = \begin{pmatrix} A_1 & J - A_2 \\ J - A_2^T & A_3 \end{pmatrix}$$

[2]GM-Godsil-McKay transformacija(eng.switching)

posmatrajmo sopstvene vektore matrice A' ortogonalne na Ω.Sopstveni vektor se neće promeniti ako matricu A' transformišemo kao

$$C = \begin{pmatrix} A_1 & -A_2 \\ -A_2^T & A_3 \end{pmatrix}$$

Primetimo dalje da su matrice C i A slične,jer je $C = DAD$,gde je D dijagonalna matrica koja na odgovarajućim mestima na dijagonali ima 1 ili -1.Znaci A i A' imaju iste sopstvene vrednosti za odgovarajuće sopstvene vektore ortogonalne u Ω.
Neka su $a_1, a_2, \cdots, a_m$ sopstvene vrednosti odnosne matrice B i neka su $b_1, b_2, \cdots, b_m$ sopstvene vrednosti odnosne matrice B',tada su $a_1, a_2, \cdots, a_m$ sopstvene vrednosti od A za sopstvene vektore koji lež u prostoru Ω i $b_1, b_2, \cdots, b_m$ sopstvene vrednosti od A' za sopstvene vektore koji leže u prostoru Ω.Ocigledno $trB = trB'$ i zato što po uslovu teoreme matrica B ima nenegativne sopstvene vrednosti imamo $\sum_{i=1}^{m} |a_i| = \sum_{i=1}^{m} a_i = \sum_{i=1}^{m} b_i \leq \sum_{i=1}^{m} |b_i|$,sa jednakošću ako$b_i \geq 0$ za $i = 1, \cdots, m$. $\square$

4 Seidelova matrica

Graf možemo predstaviti i tzv. Seidelovom matricom susedstva.Za graf čiji su čvorovi numerisani od $1, 2, \cdots, n$ elemente Seidelove matrice možemo definisati kao

$$s_{ab} = \begin{cases} -1 & \text{ako su čvorovi a i b susedni} \\ 1 & \text{ako čvorovi a i b nisu susedni} \\ 0 & \text{inače} \end{cases}$$

Dalje potpuno analogno kao kod obične energije, definišemo i Seidelovu energiju u oznaci $S(\Gamma)$ kao sumu apsolutnih vrednosti sopstvenih vrednosti Seidelove matrice susedstva.Ako je A matrica susedstva ,a S Seidelova matrica nekog grafa Γ onda očigledno važi jednakost

$$S = J - I - 2A$$

gde je I jedinična matrica ,a J matrica čiji su svi elemetni jednaki 1. Neka je Γ graf sa skupom čvorova X i neka je $Y \subset X$.Neka je D dijagonalna matrica definisana kao

$$D_{xx} = \begin{cases} -1 & \text{ako je x} \in \text{Y} \\ 1 & \text{inače} \end{cases}$$

onda je $S' = DSD$ gde je S' Seidelova matrica posle S-transformacija,što znači da je Seidelov spektar odnosno Seidelova energija invarijantnan u odnosu na S-transformaciju.Primetimo takodje da se primenom S-transformacije na neki čvor i menja znak u i-oj vrsti i u i-oj koloni Seidelove matrice.Naravno S-transformacija u odnosu na neki skup čvorova je očigledno ekvivalenta,pojedinačnoj S-transformaciji za svaki čvor iz tog skupa ponaosob.
Ako je graf Γ r-regularan onda njegovoj matrici susedstva A očigledno odgovara sopstveni vektor j čiji su svi elementi jednaki 1 kom odgovara sopstvena vrednost r.Seidelovom matrici takodje odgovara sopstveni vektor j čiji su svi elementi jednaki 1,ali uz sopstvenu vrednosti $n - 1 - 2r$.Ostali sopstveni vektori

matrica A i S imaju sopstvene vektore koji su ortogonalni na j.Ako je x jedan takav vektor i $Ax = \lambda x$ onda

$$Sx = (J - I - 2A)x = Jx - x - 2Ax = (-1 - 2\lambda)x$$

znači za svaku sopstvenu vrednost λ koja odgovara matrici A, $-1-2\lambda$ odgovara Seidelovoj matrici. Znači da možemo odrediti Seidelov spektar grafa ako je poznat obični spektar grafa i obrnuto.

Teorema 2 *Neka dat graf* Γ *sa* n *čvorova,onda je* $E(S) \leq n\sqrt{n-1}$

Dokaz: Kako je m broj grana u grafu Γ uvek važi $m \leq \frac{n(n-1)}{2}$.Sada prema jednačini (1) imamo

$$\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i| \leq \sqrt{2mn} \leq \sqrt{2n \cdot \frac{n(n-1)}{2}} = n\sqrt{n-1}$$

□

Posledica: $E_{max}(S) = n\sqrt{n}(1 + o(n))$

Dokaz: Neka je n broj čvorova grafa Γ i neka p najveći prost broj za takav da je $p \leq \sqrt{n}$.Važ $p \equiv_4 1$ za svako p,postoji graf Γ' reda p^2+1,koji prema prethodnoj gornjoj nejednakosti može imati maskimalnu energiju $E(\Gamma') = p(p^2+1)$.Konstruišimo sada iz grafa Γ' graf Γ samo dodavanjem $n - p^2 - 1$ izolovanih čvorova grafu Γ',øcigledno Γ je po graf od Γ.Tada je

$$E(S) \geq p(p^2+1) > (\sqrt{n} - \sqrt{n^{\frac{21}{40}}})(n - 2\sqrt{n^{\frac{61}{40}}} + \sqrt{n^{\frac{42}{20}}} + 1) > (\sqrt{n} - \sqrt{n^{\frac{21}{40}}})(n - 2\sqrt{n^{\frac{61}{40}}})$$

Pa je $E(S) = n\sqrt{n}(1 + o(n))$. □ Sledeća teorema dokazuje donju granicu za Seidelovu energiju

Teorema 3 *Ako je* Γ *graf sa* $n > 2$ *čvorova,onda važi* $S(\Gamma) \geq \sqrt{2n(n-1)}$

Dokaz:

Neka je S Seidelova matrica grafa Γ.Ako su $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ sopstvene vrednosti matrice S,takve da $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$.Tvrdimo daje $\lambda_i = 0$ za sve osim za samo dve vrednosti i.Pretpostavimo suprotno,bez umanjenja opštosti da je $\lambda_1 \geq \lambda_2 > 0 > \lambda_n$.Izaberimo a i b $(a \geq b)$ takva da je $a + b = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_n$ i $a^2 + b^2 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_n^2$. Ako kvadriramo prvu jednakost dobijamo $ab = \lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_n + \lambda_1\lambda_n$,odakle se dobija

$$a - b = \sqrt{(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda_n)^2 - 4\lambda_1\lambda_2} < \lambda_1 + \lambda_2 - \lambda_n$$

Lako vidimo da je takodje

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_n = x + y < \lambda_1 + \lambda_2 - \lambda_n, -x - y = -(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_n) < \lambda_1 + \lambda_2 - \lambda_n$$

Predefinišimo sada vrednosti $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_n$ sa $\lambda_1 = a, \lambda_2 = 0, \lambda_n = y$,sopstvene vrednosti λ_i zadovoljavaju prethodne nejednakosti.. Poznato je da je suma apsolutnih vrednosti matrice jednaka tragu te matrice,zbog toga je $\sum_i \lambda_i = 0$ i takodje znamo da je suma kvadrata sopstvenih vrednosti matrice jednaka dvostrukom broju grana m,uzećemo,da je $m = n - 1$ najveći broj grana koje mogu polaziti iz jednog čvora tj.$\sum_i \lambda_i^2 = n(n-1)$.Tada je

$$\sum_i \lambda_i = \lambda_1 + \lambda_n = 0 \Rightarrow \lambda_1 = -\lambda_n, \lambda_1^2 = \lambda_n^2 = \frac{n(n-1)}{2}, |\lambda_1| = |\lambda_n| = \sqrt{\frac{n(n-1)}{2}}$$

sve ostale sopstvene vrednosti λ_i za $i = \overline{2, n-1}$ su jednake 0.Pa dobijamo

$$S(\Gamma) \geq \sqrt{2n(n-1)}$$

.. $\square$

5 Haemersova hipoteza-na neke specijalne vrste grafova

Ako je graf Γ kompletan u oznaci K_n,onda za njegovu Seidelovu matricu S i njegovu matricu susedstva A važ $A = -S$,što znači da je spektri matrice S i matrice A jednaki.Kako matrica susedstva kompletnog grafa u spektru ima dve sopstvene vrednosti -1 i $n-1$ sa višestrukostima $n-1$ i 1 redom,obična energija je $2n-2$,pa je prema tome i Seidelova energija kompletnog grafa $2n-2$.Nije poznat nijedna graf sa Seidelovom energijom manjom od $2n-2$ i hipoteza je da Seidelova energija svih grafova sa n čvorova nije manja od energije kompletnog grafa.Provereno je kompjuterski da je hipoteza tačna za $n \leq 10$.
Sledeću teoremu navodimo bez dokaza.

Teorema 4 *Neka je Γ graf sa n čvorova i neka su λ_i $i = \overline{1, n}$ sopstvene vrednosti Seidelove matrice S grafa Γ. Tada za*

$$|detS| \geq n-1$$

i za svako $0 < \alpha < 2$ važi

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^{\alpha} \geq (n-1)^{\alpha} + (n-1)$$

.

Iz ove teoreme kao posledica direktno sledi za $\alpha = 1$,$S(\Gamma) \geq 2(n-1)$ ako i samo ako je $detS \geq n-1$ Hamersova hipoteza bi ovim bila dokazana da je apsolutna vrednost determinanta svake Seidelove matrice veća ili jednaka od $n-1$.Medjutim sledeći graf na primer ima vrednost Seidelove determinante 0.Dokaz ove teoreme je ne elementaran,baziran je na KKT teoremi iz nelinearnog programiranja.

Lako možemo dokazati da kompletan graf i kompletan bipartitni graf imaju isti Seidelov spektar samim tim i energiju.Kao što je poznato kompletan bipartitni graf ima particiju skupa čvorova na dva disjunktna podskupa,gde se nalaze sve moguće grane izmedju čvorova ta dva podskupa,dok bilo koja dva čvora u samim tim podskupovima ostaju nepovezana..Sada direktno primenom S-transformacije u odnosu ta dva disjunktna podskupa brišu se sve te grane tako da dobijamo prazan graf.Kako su kompletan bipartitni graf i prazan graf iz iste S-klase oni imaju istu Seidelovu energiju,prazan graf ima Seidelovu matricu jednaku običnoj matrici susedstva kompletnog grafa,pa je njegova Seidelova energija jednaka 2n-2,to je ujedno i Seidelova energija kompletnog bipartitnog grafa.