



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ (ΕΜΠ)
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ
ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ

ΙΔΙΑΖΟΝΤΑ ΓΡΑΦΗΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΝΕΡΓΕΙΑ ΙΔΙΑΖΟΝΤΩΝ ΓΡΑΦΗΜΑΤΩΝ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ
ΕΙΡΗΝΗΣ ΤΡΙΑΝΤΑΦΥΛΛΟΥ

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ:
Α. ΠΑΠΑΪΩΑΝΝΟΥ

ΑΘΗΝΑ, ΜΑΡΤΙΟΣ 2014



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ (ΕΜΠ)
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ
ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ

ΙΔΙΑΖΟΝΤΑ ΓΡΑΦΗΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΝΕΡΓΕΙΑ ΙΔΙΑΖΟΝΤΩΝ ΓΡΑΦΗΜΑΤΩΝ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ
ΕΙΡΗΝΗΣ ΤΡΙΑΝΤΑΦΥΛΛΟΥ

**ΤΡΙΜΕΛΗΣ ΣΥΜΒΟΥΛΕΥΤΙΚΗ
ΕΠΙΤΡΟΠΗ**

Α. ΠΑΠΑΪΩΑΝΝΟΥ, Αν. Καθ. Ε.Μ.Π.
Χ. ΚΟΥΚΟΥΒΙΝΟΣ, Καθ. Ε.Μ.Π.
Π. ΨΑΡΡΑΚΟΣ, Αν. Καθ. Ε.Μ.Π.

**ΕΠΤΑΜΕΛΗΣ ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ
ΕΠΙΤΡΟΠΗ**

Α. ΠΑΠΑΪΩΑΝΝΟΥ, Αν. Καθ. Ε.Μ.Π.
Χ. ΚΟΥΚΟΥΒΙΝΟΣ, Καθ. Ε.Μ.Π.
Π. ΨΑΡΡΑΚΟΣ, Αν. Καθ. Ε.Μ.Π.
Ε. ΖΑΧΟΣ, Καθ. Ε.Μ.Π.
Π. ΤΣΙΚΟΥΡΑΣ, Καθ. Παν. Πειραιώς
Α. ΣΥΜΒΩΝΗΣ, Καθ. Ε.Μ.Π.
Α. ΑΡΒΑΝΙΤΑΚΗΣ, Επιχ. Καθ. Ε.Μ.Π.

ΑΘΗΝΑ, ΜΑΡΤΙΟΣ 2014

“Προσπάθησε να μάθεις κάτι απ’ όλα και όλα για κάτι.”

Thomas Henry Huxley

Περίληψη

Στο πρώτο κεφάλαιο της παρούσας διατριβής θα ασχοληθούμε με την πολλαπλότητα μηδενός των ιδιαζόντων γραφημάτων. Ο χαρακτηρισμός όλων των γραφημάτων με πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G) > 0$ τέθηκε πρώτα από τους L. Collatz και U. Sinogowitz το 1957 (βλ. [17]). Καθώς το πρόβλημα που αφορά τη σχέση ανάμεσα στη δομή ενός γραφήματος και την πολλαπλότητα μηδενός αυτού είναι επιλύσιμο μόνο για κάποιες περιπτώσεις γραφημάτων, το πρόβλημα χαρακτηρισμού των ιδιαζόντων γραφημάτων συνεχίζει να απασχολεί μέχρι σήμερα έντονα τη βιβλιογραφία. Στη συγκεκριμένη εργασία εξετάζουμε γραφήματα με μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός, $M(G)$, χρησιμοποιώντας τον αριθμό επιβολής μηδέν, $Z(G)$, μια παράμετρο που αποτελεί ένα άνω φράγμα για την πολλαπλότητα μηδενός ενός γραφήματος. Προσδιορίζουμε συγκεκριμένα γραφήματα για τα οποία ισχύει η ισότητα $M(G) = Z(G)$, όπως είναι το γράφημα Gray, το Tutte-Coxeter γράφημα, αλλά και το knight γράφημα και συμπληρώνουμε έτσι κατά ένα μέρος τον κατάλογο γραφημάτων που είχε παρουσιασθεί στην εργασία [1]. Επιπλέον, παρέχουμε κάποιες εναλλακτικές αποδείξεις για ακρότατα γραφήματα στηρίζοντας αυτές τις αποδείξεις στη χρήση του αριθμού επιβολής μηδέν.

Στο δεύτερο κεφάλαιο αυτής της διατριβής εξετάζουμε τον πυρήνα ενός γραφήματος, δηλαδή το υπογράφημα εκείνο που συνδέεται με το μη-μηδενικό μέρος του ιδιοδιανύσματος που αντιστοιχεί στη μηδενική ιδιοτιμή. Με τη βοήθεια μίας άλλης παραμέτρου, της μηδενικής έκτασης μίας κορυφής u , $z_u(G) = Z(G) - Z(G - u)$, παρέχουμε ικανές και αναγκαίες συνθήκες για να είναι ένα γράφημα γράφημα-πυρήνας και βρίσκουμε τότε μία κορυφή είναι core-forbidden. Τέλος, εξετάζουμε τον αριθμό επιβολής μηδέν των singular configuration γραφημάτων σε σχέση με τον πυρήνα τους και παρέχουμε μία ικανή και αναγκαία συνθήκη για να είναι ένα γράφημα extremal singular.

Στο τρίτο κεφάλαιο της παρούσας διατριβής ερευνούμε την ενέργεια των ιδιαζόντων γραφημάτων. Αποδεικνύουμε ότι η αλλαγή στην ενέργεια ενός ιδιαίζοντος γραφήματος, G , με την αφαίρεση μίας κορυφής του, u , εξαρτάται από την έκταση μηδενός της κορυφής αυτής. Με αυτό τον τρόπο, βελτιώνουμε το άνω φράγμα για το παραγόμενο υπογράφημα $G - u$. Στην περίπτωση των minimal configuration γραφημάτων παρέχουμε κάποια νέα φράγματα και συνδέουμε την ενέργεια του γραφήματος με την ενέργεια του πυρήνα. Ακόμη, βρίσκουμε ένα άνω φράγμα για την μικρότερη σε απόλυτη τιμή ιδιοτιμή ενός minimal configuration γραφήματος. Τέλος, μελετούμε συγκεκριμένα γραφήματα των οποίων η ενέργεια αυξάνεται μετά την αφαίρεση μίας πλευράς, όπως είναι το πλήρες πολυμερές γράφημα και ο υπερκύβος με άρτιο αριθμό κορυφών.

Abstract

In this thesis we study the nullity and the energy of singular graphs. The problem of characterising all graphs with nullity $\eta(G) > 0$ was first set by L. Collatz and U. Sinogowitz in 1957. Since the problem of finding a relation between the structure of a graph and its nullity has been partially solved for some classes of graphs, such as trees and r -partite graphs, the characterization of singular graphs remains an open problem.

In the first chapter of this thesis, we study graphs with maximum nullity, $M(G)$, by taking into consideration the zero forcing number, $Z(G)$, a parameter that upper bounds the maximum nullity of a graph. More specifically, we determine certain graphs for which the equality $M(G) = Z(G)$ holds, such as the Gray graph, the Tutte-Coxeter graph, and the knight's graph. We also provide some alternative proofs for graphs that are extremal with regard to their nullity, by using the zero forcing parameter.

In the second chapter of this thesis, we study the core of a graph, which is the subgraph of a singular graph related to the non-zero part of the graph's kernel eigenvector. With the aid of another zero forcing parameter, the zero spread of a vertex u , $z_u(G) = Z(G) - Z(G - u)$, we provide necessary and sufficient conditions for a singular graph to be a core graph and determine when a vertex is core-forbidden. In the case of singular configuration graphs, we study the zero forcing number in relation to the graph's core. Finally, we establish a sufficient and necessary condition for a graph to be extremal singular (in relation to the zero forcing number of the graph).

The third chapter of this thesis focuses on the energy of singular graphs. The energy of a graph, $E(G)$, was first defined by I. Gutman as the sum of the absolute values of the eigenvalues of the graph's adjacency matrix $A(G)$. In this thesis, we prove that the change in the energy of a singular graph by deleting a vertex, u , is related to the type of vertices of the graph. Furthermore, we improve some upper bounds for the energy of the induced subgraph, $G - u$, which is obtained by deleting vertex u .

We also obtain some new bounds for the energy of the minimal configuration graphs and provide an upper bound for the smallest eigenvalue in absolute value of a minimal configuration graph.

Finally, we obtain an upper bound for the energy of a complete multipartite graph and study certain graphs that increase their energy when an edge is deleted, such as the complete multipartite graphs and the hypercube of even order.

Ευχαριστίες

Με την ολοκλήρωση της διδακτορικής μου διατριβής, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή μου, κ. Αλέξανδρο Χ. Παπαϊωάννου για την πολύτιμη βοήθειά του και την ουσιαστική συμβολή του κατά την διάρκεια εκπόνησής της. Οι γνώσεις και οι ιδέες του αποτέλεσαν τη βάση για αυτή την εργασία, που ολοκληρώθηκε κάτω από τη συνεχή καθοδήγησή του.

Θα ήθελα να εκφράσω την ευγνωμοσύνη μου στον καθηγητή κ. Θεμιστοκλή Ρασσιά για όλες τις συμβουλές του, την εμπιστοσύνη που μου έδειξε, και το χρόνο που μου αφιέρωσε κατά τη διάρκεια των σπουδών μου.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον καθηγητή κ. Παναγιώτη Ψαρράκο για τις πολύτιμες υποδείξεις του και για το ενδιαφέρον που έδειξε κατά την πορεία της προσπάθειάς μου αυτής.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω ιδιαίτερα τον καθηγητή κ. Χρήστο Κουκουβίνο για την καθοδήγησή του στις μεταπτυχιακές μου σπουδές.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά το μέλος της επταμελούς επιτροπής, τον καθηγητή κ. Παναγιώτη Τσικούρα για τα σημαντικά σχόλια και τις ουσιαστικές υποδείξεις του που συνέβαλαν στη βελτίωση του κειμένου της διδακτορικής αυτής διατριβής.

Τέλος, θα ήθελα να αφιερώσω την διδακτορική μου διατριβή στη μνήμη της λέκτορα Νίκης Πάλλα, η οποία με στήριξε από την αρχή των μεταπτυχιακών σπουδών μου με πολύτιμες συμβουλές.

Ξεχωριστά, θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου για την υποστήριξη που μου παρείχαν όλα αυτά τα χρόνια.

Περιεχόμενα

Περίληψη	ii
Ευχαριστίες	v
1 Ιδιάζοντα γραφήματα	1
1.1 Εισαγωγή	1
1.2 Υπολογισμός πολλαπλότητας μηδενός μέσω του αριθμού επιβολής μηδέν	13
1.3 Γραφήματα με μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός	21
2 Ένας χαρακτηρισμός ιδιάζόντων γραφημάτων	24
2.1 Πυρήνας γραφήματος	24
2.2 Γραφήματα με πολλαπλότητα μηδενός ίσον με ένα	29
2.3 Μέγιστος πυρήνας σε ελάχιστη βάση	34
3 Ενέργεια ιδιάζόντων γραφημάτων	38
3.1 Ενέργεια γραφημάτων	38
3.2 Ενέργεια ιδιάζόντων γραφημάτων	49
3.2.1 Ενέργεια υπογραφημάτων	49
3.2.2 Ενέργεια ιδιάζόντων γραφημάτων	52
3.2.3 Αφαίρεση πλευράς-Μεταβολή ενέργειας	56
3.2.4 Μέγιστη και ελάχιστη ενέργεια ιδιάζόντων γραφημάτων	60
3.2.5 Δείκτης Estrada	62
Βιβλιογραφία	68

*Στους γονείς μου Γιώργο και Ρούλα,
στις αδερφές μου Αμαλία και Θωμαή,
στον Παναγιώτη.*

Κεφάλαιο 1

Ιδιάζοντα γραφήματα

1.1 Εισαγωγή

Ένα γράφημα $G = G(V, E)$ έχει σύνολο κορυφών $V = V_G = \{1, 2, \dots, n\}$ και σύνολο πλευρών E , που αποτελείται από ζευγάρια κορυφών. Η τάξη, $|G|$, ενός γραφήματος G είναι ο αριθμός n των κορυφών του. Τα γραφήματα που θα εξετάσουμε είναι απλά, δηλαδή χωρίς πολλαπλές πλευρές ή βρόχους. Ο πίνακας γειτνίασης ενός γραφήματος G είναι (a_{ij}) , όπου $a_{ij} = 1$ αν ij είναι πλευρά και 0 αλλιώς.

Το φάσμα, $Sp(G)$, ενός γραφήματος G αποτελείται από το σύνολο των ιδιοτιμών του G με τις αλγεβρικές πολλαπλότητες τους, οι οποίες είναι λύσεις της χαρακτηριστικής εξίσωσης $\det(\lambda I - G) = 0$.

Η πολλαπλότητα της ιδιοτιμής 0 αναφέρεται ως πολλαπλότητα μηδενός (nullity), $\eta(G)$, του G . Ο βαθμός του γραφήματος G συμβολίζεται με $r(G)$ και ισούται με $n - \eta(G)$, ένα αποτέλεσμα το οποίο αναφέρεται ως το Θεώρημα Διάστασης (Dimension Theorem). Ένα γράφημα G με n κορυφές ονομάζεται *ιδιάζον* (singular) αν $\eta(G) > 0$: αν υπάρχει, δηλαδή, $x \neq 0$, τέτοιο ώστε $Gx = 0$, όπου κάθε είσοδος του διανύσματος 0 είναι 0. Αφού το G ικανοποιεί την εξίσωση $Gx = \lambda x$ για την ιδιοτιμή $\lambda = 0$, καλούμε το x *ιδιοδιάνυσμα* του πυρήνα $\ker(G) = \{x : Gx = 0\}$ του G . Θα συμβολίζουμε το κενό γράφημα με N_n και το πλήρες γράφημα με K_n . Τον κύκλο και το μονοπάτι με n κορυφές θα τα συμβολίζουμε με C_n και P_n αντίστοιχα.

Πρώτοι οι L. Collatz και U. Sinogowitz ([17]) έθεσαν το ερώτημα χαρακτηρισμού όλων των γραφημάτων G με πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G) > 0$. Αυτό το ερώτημα έχει εξαιρετικό ενδιαφέρον ιδιαίτερα στη Χημεία, αφού έχει αποδειχθεί ότι ένα χημικό μόριο είναι ασταθές, αν η πολλαπλότητα μηδενός του διμερούς γραφήματος στο οποίο αντιστοιχεί είναι $\eta(G) > 0$, δεδομένου ότι οι κορυφές του μοριακού γραφήματος αντιστοιχούν σε άτομα του χημικού μορίου και οι πλευρές του στους χημικούς

δεσμούς μεταξύ των ατόμων. Μάλιστα, όσο αυξάνεται η πολλαπλότητα μηδενός του μοριακού γραφήματος τόσο πιο ασταθές είναι το χημικό μόριο. Ο χαρακτηρισμός όλων των ιδιάζοντων γραφημάτων παραμένει ακόμη και σήμερα ένα ανοιχτό πρόβλημα. Σημαντικά βήματα προς αυτή την κατεύθυνση έγιναν τα τελευταία χρόνια από διάφορους συγγραφείς, όπως από τους D. Cvetković, I. Gutman ([21]) αλλά και από άλλους πιο πρόσφατα ([81], [16], [49]).

Για κάποιες οικογένειες γραφημάτων είναι γνωστό το φάσμα των ιδιοτιμών τους και κατά συνέπεια και η πολλαπλότητα μηδενός τους. Θα παραθέσουμε κάποια παραδείγματα.

Λήμμα 1.1. Έστω G ένα γράφημα με n κορυφές. Τότε $\eta(G) = n$ αν και μόνο αν το G είναι ένα γράφημα χωρίς πλευρές (κενό γράφημα).

Λήμμα 1.2. [79]

(i) Το φάσμα του πλήρους γραφήματος K_n αποτελείται από δύο διακριτές ιδιοτιμές $n - 1$ και -1 , με αντίστοιχες πολλαπλότητες 1 και $n - 1$. Έτσι, $\eta(K_n) = 1$ για $n = 1$ και $\eta(K_n) = 0$ για $n > 1$.

(ii) Οι ιδιοτιμές του μονοπατιού P_n είναι της μορφής $2 \cos \frac{\pi r}{n+1}$, $r = 1, 2, \dots, n$. Έτσι,

$$\eta(P_n) = \begin{cases} 1, & n = 2k + 1 \\ 0, & n = 2k. \end{cases}$$

(iii) Οι ιδιοτιμές του κύκλου C_n είναι $2 \cos \frac{2\pi r}{n}$, $r = 0, 1, \dots, n - 1$. Κατά συνέπεια,

$$\eta(C_n) = \begin{cases} 2, & n \equiv 0 \pmod{4} \\ 0, & \text{αλλιώς.} \end{cases}$$

Λήμμα 1.3. (i) Έστω H ένα παραγόμενο υπογράφημα του G . Τότε $r(H) \leq r(G)$.

(ii) Έστω $G = G_1 \cup G_2 \cup \dots \cup G_t$, όπου G_1, G_2, \dots, G_t είναι συνεκτικές συνιστώσες του G . Τότε, $r(G) = \sum_{i=1}^t r(G_i)$, δηλαδή $\eta(G) = \sum_{i=1}^t \eta(G_i)$.

Θυμίζουμε ότι η απόσταση δύο κορυφών x, y , που συμβολίζεται με $d(x, y)$ είναι το μήκος του συντομότερου (x, y) -μονοπατιού στο G . Αν δεν υπάρχει τέτοιο μονοπάτι, ορίζουμε την απόσταση $d(x, y)$ ως άπειρη. Η μεγαλύτερη απόσταση ανάμεσα σε κάθε δύο κορυφές στο γράφημα G είναι η διάμετρος του G , την οποία συμβολίζουμε με $\text{diam}(G)$.

Παρακάτω δίνουμε κάποια χρήσιμα άνω φράγματα για την πολλαπλότητα μηδενός ενός γραφήματος, τα οποία είναι άμεση συνέπεια των παραπάνω.

Λήμμα 1.4. [16] Έστω G ένα απλό γράφημα με n κορυφές, και έστω ότι το πλήρες γράφημα K_p είναι ένα υπογράφημα του G , όπου $2 \leq p \leq n$. Τότε, $\eta(G) \leq n - p$.

Λήμμα 1.5. [16] Έστω G ένα απλό μη-κενό γράφημα με n κορυφές και $\omega(G)$ ο αριθμός κλίκας του G . Τότε, $\eta(G) + \omega(G) \leq n$.

Από το Λήμμα 1.3 και το Λήμμα 1.2 (iii) έχουμε:

Λήμμα 1.6. [16] Έστω G ένα απλό γράφημα με n κορυφές και έστω ότι ο κύκλος C_p είναι ένα παραγόμενο υπογράφημα του G , όπου $3 \leq p \leq n$. Τότε,

$$\eta(G) \leq \begin{cases} n - p + 2, & p \equiv 0 \pmod{4} \\ n - p, & \text{αλλιώς.} \end{cases}$$

Το μήκος του μικρότερου κύκλου σε ένα γράφημα G είναι η περιφέρεια του G , και συμβολίζεται με $gir(G)$. Μια σχέση ανάμεσα στη πολλαπλότητα μηδενός και την περιφέρεια του γραφήματος δίνεται από το παρακάτω Πρόρισμα.

Πόρισμα 1.7. [16] Έστω G ένα απλό γράφημα με n κορυφές, και έστω ότι το G περιλαμβάνει ένα τουλάχιστον κύκλο ως υπογράφημα. Τότε,

$$\eta(G) \leq \begin{cases} n - gir(G) + 2, & \text{αν } gir(G) \equiv 0 \pmod{4} \\ n - gir(G), & \text{αλλιώς.} \end{cases}$$

Αν λάβουμε υπόψη τα Λήμματα 1.3 και 1.2 (ii) έχουμε:

Λήμμα 1.8. [16] Έστω G ένα απλό γράφημα με n κορυφές, και έστω ότι το μονοπάτι P_k είναι ένα παραγόμενο υπογράφημα του G , όπου $2 \leq k \leq n$. Τότε,

$$\eta(G) \leq \begin{cases} n - k + 1, & \text{αν } k \text{ περιττός} \\ n - k, & \text{αλλιώς.} \end{cases}$$

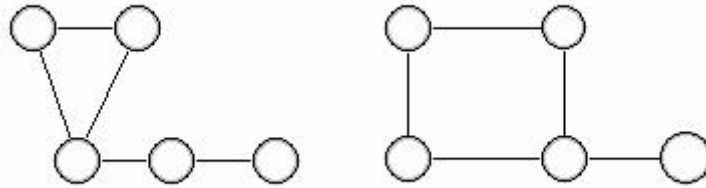
Πόρισμα 1.9. [16] Έστω δύο κορυφές x, y του γραφήματος G και έστω ότι υπάρχει ένα (x, y) -μονοπάτι στο G . Τότε,

$$\eta(G) \leq \begin{cases} n - d(x, y), & \text{αν } d(x, y) \text{ άρτιος} \\ n - d(x, y) - 1, & \text{αλλιώς.} \end{cases}$$

Πόρισμα 1.10. [16] Έστω G ένα απλό συνεκτικό γράφημα με n κορυφές. Τότε,

$$\eta(G) \leq \begin{cases} n - diam(G), & \text{αν } diam(G) \text{ άρτιος} \\ n - diam(G) - 1, & \text{αλλιώς.} \end{cases}$$

Στη γενική περίπτωση είναι δύσκολο να βρούμε σχέσεις μεταξύ της πολλαπλότητας μηδενός και της δομής του γραφήματος. Για παράδειγμα, η πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G)$ δεν καθορίζεται από την ακολουθία βαθμών των κορυφών του γραφήματος G (Σχήμα 1.1).



ΣΧΗΜΑ 1.1: Η πολλαπλότητα μηδενός του αριστερού γραφήματος είναι $\eta(G) = 0$ ενώ το δεξιό γράφημα έχει πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G) = 1$.

Στη συνέχεια, θα ασχοληθούμε κυρίως με διμερή γραφήματα αν και κάποια από τα θεωρήματα μπορούν να επεκταθούν και σε μη-διμερή γραφήματα. Πριν προχωρήσουμε, θα δώσουμε κάποιους χρήσιμους ορισμούς. Ένα ταίριασμα ενός γραφήματος G είναι μια συλλογή από ανεξάρτητες πλευρές του G . Ένα max-ταίριασμα είναι ένα ταίριασμα με το μέγιστο δυνατό πλήθος πλευρών. Το μέγεθος ενός max-ταιριάσματος του G συμβολίζεται με $m = m(G)$. Ας συμβολίσουμε με $P_G(\lambda)$ το χαρακτηριστικό πολυώνυμο του G . Έστω

$$P_G(\lambda) = |\lambda I - A| = \lambda^n + a_1 \lambda^{n-1} + \dots + a_n.$$

Τότε,

$$a_i = \sum_U (-1)^{p(U)} 2^{c(U)}, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

όπου U είναι όλα τα υπογραφήματα του G που αποτελούνται από ξένες μεταξύ τους πλευρές και κύκλους και καθένα από τα οποία έχει ακριβώς i κορυφές. Αν U είναι ένα τέτοιο υπογράφημα, τότε $p(U)$ είναι ο αριθμός των συνιστωσών του, εκ των οποίων οι $c(U)$ συνιστώσες είναι κύκλοι. Για κάποιες κλάσεις διμερών γραφημάτων είναι δυνατή η εύρεση της σχέσης μεταξύ της δομής του γραφήματος G και της πολλαπλότητας μηδενός $\eta(G)$. Το πρόβλημα αυτό έχει λυθεί για τα δέντρα, όπως αποδεικνύεται από το παρακάτω θεώρημα.

Θεώρημα 1.11. [41] Έστω T ένα δέντρο με $n \geq 1$ κορυφές και έστω m το μέγεθος του max-ταιριάσματος του. Τότε η πολλαπλότητα μηδενός ισούται με $\eta(T) = n - 2m$.

Το θεώρημα 1.11 είναι μια ειδική περίπτωση ενός πιο γενικού θεωρήματος που διατυπώνεται παρακάτω.

Θεώρημα 1.12. [22] Αν ένα διμερές γράφημα G με $n \geq 1$ κορυφές δεν περιλαμβάνει κάποιο κύκλο μήκους $4s$ ($s = 1, 2, \dots$), τότε η πολλαπλότητα μηδενός ισούται με

$$\eta(G) = n - 2m,$$

όπου m είναι το μέγεθος του max-ταιριάσματος του.

Απόδειξη. Σύμφωνα με την υπόθεση, το διμερές γράφημα G δε περιλαμβάνει κάποιο γράφημα U με κύκλους μήκους $4s$ ($s = 1, 2, \dots$). Έτσι, το $p(U)$ ισούται με το συνολικό πλήθος των κύκλων μήκους $4s + 2$ ($s = 1, 2, \dots$) και των γραφημάτων K_2 . Έστω $4t_i + 2$ ($i = 1, 2, \dots, p(U)$) ο αριθμός των κορυφών που περιλαμβάνονται σε αυτούς τους κύκλους ή τα γραφήματα K_2 . Αν U είναι ένα υπογράφημα με $2q$ ($2q \leq n$) κορυφές, έχουμε

$$\sum_{i=1}^{p(U)} (4t_i + 2) = 2q \quad \text{και} \quad 2 \sum_{i=1}^{p(U)} t_i + p(U) = q.$$

Έτσι, $p(U) \equiv q \pmod{2}$ και όλοι οι όροι στην σχέση για τον συντελεστή a_{2q} του χαρακτηριστικού πολυωνύμου έχουν το ίδιο πρόσημο. Κατά συνέπεια $a_{2q} \neq 0$ αν και μόνο αν υπάρχει ένα τουλάχιστον υπογράφημα U με $2q$ κορυφές. Αφού m είναι το μέγεθος του max-ταιριάσματος του γραφήματος έπεται το αποτέλεσμα. \square

Το πρόβλημα που αφορά τη σχέση ανάμεσα στη δομή ενός διμερούς γραφήματος και της πολλαπλότητας μηδενός του, μπορεί να αναχθεί σε ένα πιο απλό πρόβλημα, το οποίο για κάποιες περιπτώσεις είναι επιλύσιμο. Οι κορυφές ενός διμερούς γραφήματος μπορούν να αριθμηθούν έτσι ώστε ο πίνακας γειτνίασης να έχει τη παρακάτω μορφή:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^T & 0 \end{pmatrix}.$$

Ο πίνακας B είναι ο πίνακας πρόσπτωσης των συνόλων X και Y των κορυφών του διμερούς γραφήματος $G = (X, Y, U)$ (U είναι το σύνολο των πλευρών).

Θεώρημα 1.13. [64] Για το διμερές γράφημα G με n κορυφές και πίνακα πρόσπτωσης B , ισχύει ότι: $\eta(G) = n - 2r(B)$, όπου $r(B)$ είναι ο βαθμός του πίνακα B .

Αφού για $G = (X, Y, U)$ έχουμε $r(B) \leq \min(|X|, |Y|)$, από το παραπάνω θεώρημα έπεται ότι:

Πόρισμα 1.14.

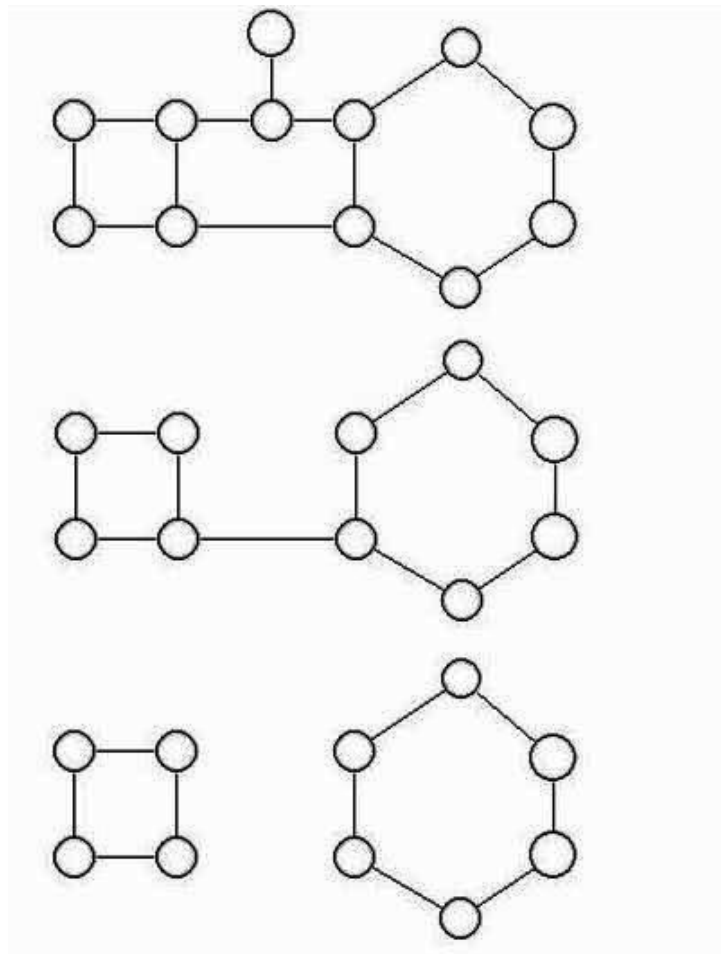
$$\eta(G) \geq \max(|X|, |Y|) - \min(|X|, |Y|).$$

Θεώρημα 1.15. [21] Έστω δυο γραφήματα $G_1 = (X_1, Y_1, U_1)$ και $G_2 = (X_2, Y_2, U_2)$, όπου $|X_1| = n_1$, $|Y_1| = n_2$, $n_1 \leq n_2$ και $\eta(G_1) = n_2 - n_1$. Αν το γράφημα G προκύπτει από τα G_1, G_2 με την ένωση (οποιοδήποτε) κορυφών του συνόλου X_1 με κορυφές του Y_2 (ή του X_2), τότε ισχύει η σχέση $\eta(G) = \eta(G_1) + \eta(G_2)$.

Πόρισμα 1.16. [21] Αν ένα διμερές γράφημα G περιλαμβάνει μία τερματική κορυφή, και αν το παραγόμενο υπογράφημα H του G προκύπτει αν αφαιρέσουμε αυτή την κορυφή μαζί με τη γειτονική της, τότε $\eta(G) = \eta(H)$.

Το παραπάνω Πόρισμα αποδεικνύεται αν πάρουμε στο Θεώρημα 1.15 το πλήρες γράφημα με δυο κορυφές σαν το G_1 και το γράφημα H σαν το G_2 .

Πόρισμα 1.17. [21] Έστω G_1 και G_2 δύο διμερή γραφήματα. Αν $\eta(G_1) = 0$, και το γράφημα G προκύπτει με την ένωση μίας τυχαίας κορυφής του G_1 με μία τυχαία κορυφή του G_2 , τότε $\eta(G) = \eta(G_2)$.

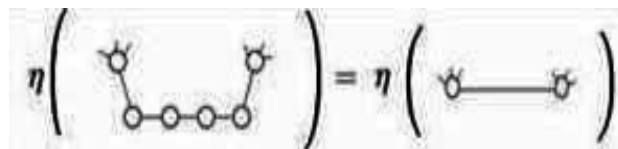


ΣΧΗΜΑ 1.2: Υπολογισμός της πολλαπλότητας μηδενός του γραφήματος G , $\eta(G) = 2$, μετά την αφαίρεση μίας τερματικής κορυφής και της γειτονικής της κορυφής, και μίας πλευράς που ενώνει δυο διμερή γραφήματα, τον κύκλο C_4 και τον κύκλο C_6 .

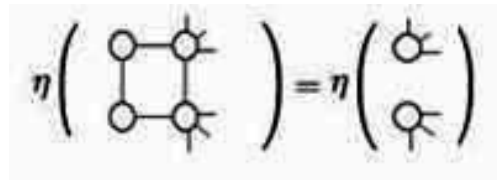
Θεώρημα 1.18. [22] Ένα μονοπάτι με τέσσερις κορυφές βαθμού 2 σε ένα διμερές γράφημα G μπορεί να αντικατασταθεί από μια πλευρά (Σχήμα 1.3) χωρίς να αλλάξει η πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G)$.

Θεώρημα 1.19. [22] Δύο κορυφές και τέσσερις πλευρές ενός κύκλου μήκους 4, που είναι στις θέσεις που απεικονίζονται στο Σχήμα 1.4, μπορούν να αφαιρεθούν χωρίς να αλλάξει η πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G)$.

Παρατήρηση 1.20. Το Πρόρισμα 1.16 όπως και τα Θεωρήματα 1.18 και 1.19 ισχύουν και στην περίπτωση που το γράφημα δεν είναι διμερές.

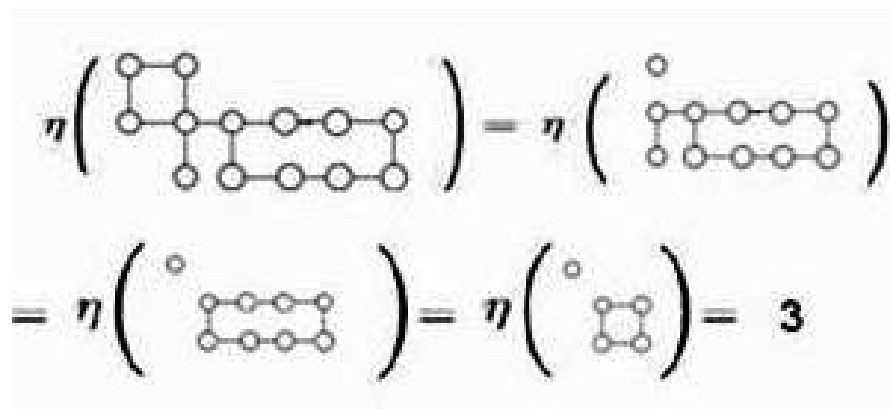


ΣΧΗΜΑ 1.3



ΣΧΗΜΑ 1.4

Παράδειγμα 1.21. Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζεται ένας τρόπος υπολογισμού της πολλαπλότητας μηδενός με την αφαίρεση δυο κορυφών και τεσσάρων πλευρών ενός κύκλου, την αφαίρεση μίας τερματικής κορυφής και της γειτονικής της, και την αντικατάσταση μονοπατιού με τέσσερις κορυφές βαθμού 2 από μια πλευρά.



ΣΧΗΜΑ 1.5

Είναι γνωστό ότι $0 \leq \eta(G) \leq n - 2$ αν το γράφημα G είναι ένα απλό γράφημα με n κορυφές, το οποίο δεν είναι ισόμορφο με το nK_1 . Ο χαρακτηρισμός όλων των γραφημάτων G με πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G) > 0$ παραμένει ένα ανοιχτό

πρόβλημα. Όπως είδαμε και παραπάνω μόνο για τα δέντρα και για κάποια διμερή γραφήματα έχουν προκύψει αποτελέσματα. Ένα ερώτημα που προκύπτει είναι πώς να χαρακτηρίσουμε τα ακρότατα εκείνα γραφήματα τα οποία πετυχαίνουν το άνω φράγμα $n - 2$ και το δεύτερο άνω φράγμα $n - 3$.

Θεώρημα 1.22. [16] Έστω ότι το G είναι ένα απλό γράφημα με n κορυφές και $n \geq 2$. Τότε $\eta(G) = n - 2$ αν και μόνο αν το G είναι ισόμορφο με το $K_{n_1, n_2} \cup kK_1$, όπου $n_1 + n_2 + k = n$, $n_1, n_2 > 0$ και $k \geq 0$.

Θεώρημα 1.23. [16] Έστω ότι το G είναι ένα απλό γράφημα με n κορυφές και $n \geq 3$. Τότε $\eta(G) = n - 3$ αν και μόνο αν το G είναι ισόμορφο με το $K_{n_1, n_2, n_3} \cup kK_1$, όπου $n_1 + n_2 + n_3 + k = n$, $n_1, n_2, n_3 > 0$ και $k \geq 0$.

Για κάθε κορυφή $x \in V(G)$ ορίζουμε:

$$\Gamma(x) = \{u : u \in V(G) \text{ και } u \text{ γειτονική της } x\}.$$

Θα δώσουμε πρώτα το ακόλουθο Λήμμα.

Λήμμα 1.24. [16] Έστω ότι το G είναι ένα απλό γράφημα με n κορυφές και ότι το G δεν έχει μεμονωμένες κορυφές. Έστω x μια τυχαία κορυφή του G . Έστω $Y = \Gamma(x)$ και $X = V(G) - Y$. Αν $r(G) \leq 3$, τότε

- (i) Κανένα ζεύγος κορυφών στο X δεν είναι γειτονικές μεταξύ τους.
- (ii) Κάθε κορυφή από το σύνολο X και κάθε κορυφή από το σύνολο Y είναι γειτονικές.

Απόδειξη. (i) Ας υποθέσουμε ότι $x_1 \in X$, $x_2 \in X$ και x_1, x_2 γειτονικές. Αφού $x_1 \in X$, οι κορυφές x_1, x δεν είναι γειτονικές. Αφού το G δεν έχει μεμονωμένες κορυφές, η κορυφή x δεν είναι μεμονωμένη. Άρα το Y είναι ένα μη-κενό σύνολο. Ας διαλέξουμε μια οποιαδήποτε κορυφή στο Y . Τότε το παραγόμενο υπογράφημα του G , $G[x_1, x_2, y]$ είναι ισόμορφο με το γράφημα $K_2 + K_1$, ή το $K_{1,2}$ ή το K_3 . Αν το $G[x_1, x_2, y]$ είναι ισόμορφο με το γράφημα $K_2 + K_1$, τότε το $G[x, x_1, x_2, y]$ είναι ισόμορφο με το $P_2 + P_2$. Τότε όμως, $r(P_2 + P_2) = r(P_2) + r(P_2) = 2 + 2 = 4$, και κατά συνέπεια $r(G) \geq 4$, που είναι άτοπο. Αν το $G[x_1, x_2, y]$ είναι ισόμορφο με το γράφημα $K_{1,2}$, τότε το $G[x, x_1, x_2, y]$ είναι ισόμορφο με το P_4 . Έτσι $r(G) \geq r(P_4) = 4$, που είναι άτοπο.

Αν το $G[x_1, x_2, y]$ είναι ισόμορφο με το γράφημα K_3 , τότε αφού ούτε το x_1 ούτε το x_2 είναι γειτονικά με το x , $r(G[x, x_1, x_2, y]) = 4$, που είναι άτοπο. Έτσι, καμία κορυφή του συνόλου X δεν είναι γειτονική με άλλη κορυφή που ανήκει στο ίδιο σύνολο.

- (ii) Ας υποθέσουμε ότι υπάρχουν κορυφές $x_1 \in X$, $y_1 \in Y$ τέτοιες ώστε οι x_1, y_1 δεν είναι γειτονικές κορυφές. Αφού οι x, y_1 είναι γειτονικές κορυφές, οι κορυφές

x, x_1 είναι διακεκριμένες. Επίσης, το γράφημα G δεν έχει μεμονωμένες κορυφές, επομένως μπορούμε να διαλέξουμε μία κορυφή z στο G η οποία να είναι γειτονική στη κορυφή x_1 . Από το (i) ερώτημα όμως, $z \in Y$. Έτσι, x, z είναι γειτονικές κορυφές. Αν οι y_1, z δεν είναι γειτονικές, τότε το παραγόμενο υπογράφημα $G[x, x_1, y_1, z]$ είναι ισόμορφο με το μονοπάτι P_4 . Έτσι $r(G[x, x_1, y_1, z]) > 3$, που είναι άτοπο. Αν οι y_1, z είναι γειτονικές, τότε αφού ούτε η y_1 ούτε η x είναι γειτονικές με την x_1 , μπορούμε εύκολα να επιβεβαιώσουμε ότι $r(G[x, x_1, y_1, z]) = 4$, που είναι άτοπο. Έτσι, κάθε κορυφή από το σύνολο X και κάθε κορυφή από το σύνολο Y είναι γειτονικές. \square

Λήμμα 1.25. [16] Έστω ότι το G είναι ένα απλό γράφημα με n κορυφές, $n \geq 2$ και ότι το G δεν έχει μεμονωμένες κορυφές. Τότε $\eta(G) = n - 2$ αν και μόνο αν το G είναι ισόμορφο με το πλήρες διμερές γράφημα K_{n_1, n_2} , όπου $n_1 + n_2 = n$, $n_1, n_2 > 0$.

Απόδειξη. Το ικανό είναι προφανές αφού οι ιδιοτιμές για το πλήρες διμερές γράφημα είναι γνωστές και κατά συνέπεια είναι γνωστή και η πολλαπλότητα μηδενός. Για να αποδείξουμε το αναγκαίο, διαλέγουμε μια τυχαία κορυφή x στο γράφημα G . Έστω $Y = \Gamma(x)$ και $X = V(G) - Y$. Αφού το G δεν έχει μεμονωμένες κορυφές, η κορυφή x δεν είναι μεμονωμένη. Έτσι, το σύνολο Y είναι μη-κενό. Ακόμη, αφού $x \in X$, το X είναι επίσης μη-κενό σύνολο.

Θα αποδείξουμε τώρα ότι κάθε δύο κορυφές στο Y δεν είναι γειτονικές. Έστω ότι υπάρχουν $y_1 \in Y$ και $y_2 \in Y$ έτσι ώστε y_1, y_2 να είναι γειτονικές. Τότε το γράφημα $G[x, y_1, y_2]$ είναι ένα τρίγωνο και άρα $\eta(G) \leq n - 3$, που είναι άτοπο.

Από το Λήμμα 1.24, γνωρίζουμε ότι:

- (i) κάθε δύο κορυφές του συνόλου X δεν είναι γειτονικές και
 - (ii) κάθε κορυφή του συνόλου X και κάθε κορυφή του συνόλου Y είναι γειτονικές.
- Έτσι, το γράφημα G είναι ισόμορφο με ένα πλήρες διμερές γράφημα. \square

Το Θεώρημα 1.22 προκύπτει άμεσα από το παραπάνω Λήμμα.

Λήμμα 1.26. [16] Έστω ότι το G είναι ένα απλό γράφημα με n κορυφές ($n \geq 3$) και ότι το G δεν έχει μεμονωμένες κορυφές. Τότε $\eta(G) = n - 3$ αν και μόνο αν το G είναι ισόμορφο με το πλήρες τριμερές γράφημα K_{n_1, n_2, n_3} , όπου $n_1 + n_2 + n_3 = n$, $n_1, n_2, n_3 > 0$.

Απόδειξη. Αν το G είναι ισόμορφο με το πλήρες τριμερές γράφημα, τότε $r(G) = 3$, δηλαδή $\eta(G) = n - 3$.

Για να αποδείξουμε το αναγκαίο, διαλέγουμε μια τυχαία κορυφή του G . Έστω $Y = \Gamma(x)$ και $X = V(G) - Y$. Αφού το G δεν έχει μεμονωμένες κορυφές, η κορυφή x δεν είναι μεμονωμένη κορυφή. Έτσι, το σύνολο Y είναι μη-κενό. Ακόμη, αφού $x \in X$

το X είναι επίσης μη-κενό σύνολο.

Από το Λήμμα 1.24 γνωρίζουμε ότι:

- (i) κάθε δύο κορυφές του συνόλου X δεν είναι γειτονικές και
- (ii) κάθε κορυφή του συνόλου X και κάθε κορυφή του συνόλου Y είναι γειτονικές.

Θεωρούμε το σύνολο $G - X$ και αποδεικνύουμε ότι $r(G - X) = 2$.

Έστω $r(G - X) > 2$. Αφού $r(G - X) \leq r(G) = 3$, $r(G - X) = 3$. Από γνωστό Λήμμα υπάρχει ένα παραγόμενο υπογράφημα H του $G - X$ τέτοιο ώστε ο βαθμός του H είναι 3 και $r(H) = 3$. Τότε το H είναι ένα τρίγωνο. Αφού η κορυφή x είναι γειτονική με κάθε κορυφή του H , το K_4 είναι ένα υπογράφημα του G . Έτσι $\eta(G) \leq n - 4$, που είναι άτοπο. Άρα, $r(G - X) \leq 2$.

Έστω $r(G - X) < 2$, τότε $r(G - X) = 0$ και $G - X = \emptyset$. Επομένως $r(G) = 2$, το οποίο έρχεται σε αντίθεση με $\eta(G) = n - 3$. Επομένως, $r(G - X) = 2$.

Από το Θεώρημα 1.22 το γράφημα $G - X$ είναι ισόμορφο με το $K_{n_1, n_2} + kK_1$, όπου $n_1, n_2 > 0$ και $k \geq 0$. Αν $k > 0$ τότε ο πίνακας $A(G)$ είναι μεταθετικά όμοιος με τον πίνακα

$$\begin{bmatrix} 0 & J & J & J \\ J & 0 & J & 0 \\ J & J & 0 & 0 \\ J & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Τότε $r(G) = 4$, που είναι άτοπο. Έτσι $k = 0$ και το $G - X$ είναι ισόμορφο με το K_{n_1, n_2} . Επομένως, το γράφημα G είναι ισόμορφο με το πλήρες τριμερές γράφημα K_{n_1, n_2, n_3} , όπου $n_1, n_2, n_3 > 0$. □

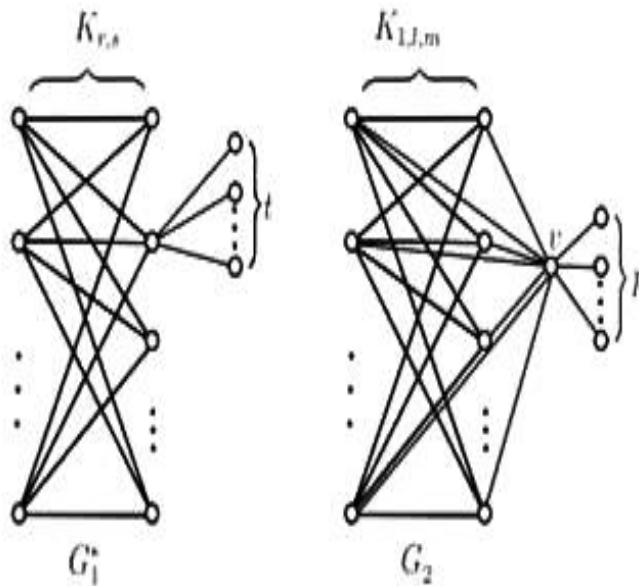
Το Θεώρημα 1.23 είναι άμεση συνέπεια του παραπάνω Λήμματος.

Πριν προχωρήσουμε σε κάποια αποτελέσματα για γραφήματα με πολλαπλότητα μηδενός $\eta = n - t$, $t > 3$ θα δώσουμε κάποιους χρήσιμους ορισμούς.

Έστω G_1^* ένα γράφημα με n κορυφές το οποίο κατασκευάζεται από το πλήρες διμερές $K_{r, s}$ και από το star γράφημα $K_{1, t}$ αν ταυτίσουμε μία κορυφή του $K_{r, s}$ με το κέντρο του $K_{1, t}$, όπου $r, s, t \geq 1$ και $r + s + t = n$.

Έστω $K_{1, l, m}$ ένα πλήρες τριμερές γράφημα με τη μεγαλύτερου βαθμού κορυφή u , όπου $l, m > 0$. Έστω G_2 το γράφημα με n κορυφές, το οποίο κατασκευάζεται από το $K_{1, l, m}$ και από το star γράφημα $K_{1, p}$ αν ταυτίσουμε την κορυφή u με το κέντρο του $K_{1, p}$, όπου $l, m, p \geq 1$ και $l + m + p + 1 = n$.

Θεώρημα 1.27. [62] Έστω ότι το G είναι ένα συνεκτικό γράφημα με n κορυφές εκ των οποίων κάποιες είναι τερματικές κορυφές. Τότε $\eta(G) = n - 4$ αν και μόνο αν το G είναι ισόμορφο με το γράφημα G_1^* ή το γράφημα G_2^* , όπου το G_1^* απεικονίζεται στο σχήμα 1.6 αριστερά, και το G_2^* είναι ένα συνεκτικό παράγον υπογράφημα του G_2 (σχήμα 1.6 δεξιά) το οποίο περιλαμβάνει το $K_{l,m}$ ως υπογράφημα.



ΣΧΗΜΑ 1.6

Απόδειξη. (\Rightarrow) Έστω $G \cong G_i^*$ ($i = 1, 2$). Γνωρίζουμε ότι αν u είναι μια τερματική κορυφή και v η γειτονική της κορυφή, τότε $\eta(G) = \eta(G - u - v)$, όπου $G - u - v$ το παραγόμενο υπογράφημα του G αν αφαιρέσουμε τις κορυφές u και v . Τότε από το Λήμμα 1.25 εύκολα διαπιστώνουμε ότι $\eta(G) = n - 4$.

(\Leftarrow) Έστω $\eta(G) = n - 4$. Διαλέγουμε μια τερματική κορυφή του G , έστω x . Έστω $\Gamma(x) = y$. Αφαιρούμε τις κορυφές x, y του G και έστω ότι το γράφημα που προκύπτει είναι το $G_1 = G_{11} \cup G_{12} \cup \dots \cup G_{1t}$, όπου $G_{11}, G_{12}, \dots, G_{1t}$ είναι συνεκτικές συνιστώσες του G_1 . Κάποιες από αυτές τις συνιστώσες μπορεί να είναι τετριμμένες, δηλαδή K_1 . Όμως δεν είναι όλες οι συνιστώσες τετριμμένες διαφορετικά με την προσθήκη των x, y στο G_1 παίρνουμε ένα star γράφημα, το οποίο είναι άτοπο.

Μάλιστα υπάρχει μια μοναδική μη-τετριμμένη συνιστώσα στο G_1 . Πράγματι, ας υποθέσουμε ότι υπάρχουν i μη-τετριμμένες συνεκτικές συνιστώσες, όπου $i \geq 2$. Αν καθεμία από τις μη-τετριμμένες συνιστώσες δεν έχει τερματικές κορυφές τότε

$$\eta(G) = \sum_{j=1}^i \eta(G_{1j}) + z\eta(K_1) \leq \sum_{j=1}^i (|V(G_{1j})| - 2) + z,$$

όπου z είναι ο αριθμός των μεμονωμένων κορυφών στο G_1 και η παραπάνω ισότητα ισχύει αν και μόνο αν καθένα από τα $G_{11}, G_{12}, \dots, G_{1i}$ είναι πλήρη διμερή γραφήματα. Έτσι,

$$\eta(G) \leq \sum_{j=1}^i |V(G_{1j})| - 2i + z = (n - 2 - z) - 2i + z = n - 2i - 2 \leq n - 6,$$

για $i \geq 2$ που είναι άτοπο.

Αν υπάρχει μία τερματική κορυφή u σε μία από αυτές τις μη-τετριμμένες συνιστώσες τότε αφαιρούμε αυτή την κορυφή μαζί με τη γειτονική της, την οποία ως συμβολίσουμε με w . Τότε το γράφημα $G - \{x, y, u, w\}$ έχει βαθμό $n - 4$. Από την άλλη μεριά, $\eta(G - \{x, y, u, w\}) = \eta(G) = n - 4$. Έτσι, το γράφημα $G - \{x, y, u, w\}$ είναι το κενό γράφημα. Αλλά αυτό είναι αδύνατο, γιατί αφαιρώντας δυο κορυφές σε κάποια από τις συνιστώσες του G_1 δε μπορούμε να αφαιρέσουμε τις πλευρές στις άλλες συνιστώσες.

Έτσι, υπάρχει μια μοναδική μη-τετριμμένη συνιστώσα στο G_1 . Χωρίς απώλεια της γενικότητας ως υποθέσουμε ότι η G_{11} είναι μη-τετριμμένη. Έστω $\nu(G_{11}) = n_1$, τότε $G_1 = G_{11} \cup (n - n_1 - 2)K_1$. Κατά συνέπεια,

$$\begin{aligned} \eta(G) &= \eta(G_{11}) + (n - n_1 - 2) \\ &\leq n_1 - 2 + (n - n_1 - 2) \\ &= n - 4 \end{aligned}$$

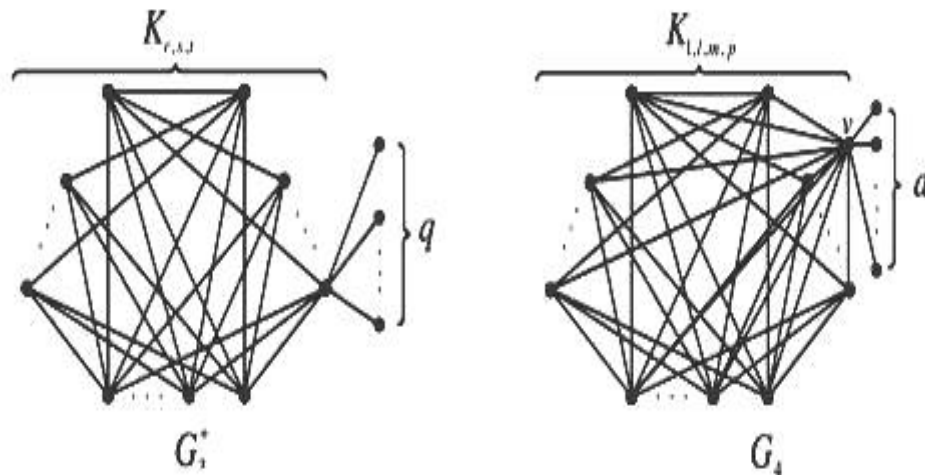
και η ισότητα ισχύει αν το G_{11} είναι ένα πλήρες διμερές γράφημα.

Προκειμένου να πάρουμε το γράφημα G από το G_1 με την προσθήκη των x, y , πρέπει να ενώσουμε με πλευρές την κορυφή y με καθεμία από τις $(n - n_1 - 2)$ μεμονωμένες κορυφές του G_1 και με την κορυφή x . Αυτό δίνει ένα star γράφημα S_{n_2} , όπου $n_2 = n - n_1$. Έχουμε δυο τρόπους να πάρουμε το G . Ο ένας είναι να ενώσουμε το κέντρο του S_{n_2} με κάποιες κορυφές του G_{11} . Τότε εύκολα διαπιστώνουμε ότι το γράφημα που προκύπτει είναι ένα συνεκτικό παράγον υπογράφημα του G_2 το οποίο περιλαμβάνει το G_{11} , ένα πλήρες διμερές γράφημα ως υπογράφημα. Δηλαδή, $G \cong G_2^*$. Ο δεύτερος τρόπος είναι να ενώσουμε το κέντρο του S_{n_2} με καθεμία από τις κορυφές που ανήκουν σε ένα από τα σύνολα του πλήρους διμερούς γραφήματος G_{11} . Τότε, το γράφημα που προκύπτει είναι ισόμορφο με το G_1^* . \square

Έστω G_3^* ένα γράφημα με n κορυφές το οποίο κατασκευάζεται από το πλήρες τριμερές $K_{r,s,t}$ και από το star γράφημα $K_{1,q}$ αν ταυτίσουμε μία κορυφή του $K_{r,s,t}$ με το κέντρο του $K_{1,q}$, όπου $r, s, t, q > 0$ και $r + s + t + q = n$. Έστω $K_{1,l,m,p}$ ένα 4-μερές γράφημα με τη μεγαλύτερου βαθμού κορυφή u , όπου $l, m, p > 0$. Έστω G_4 το γράφημα με n κορυφές το οποίο κατασκευάζεται από το $K_{1,l,m,p}$ και από το star

γράφημα $K_{1,d}$ αν ταυτίσουμε την κορυφή u με το κέντρο του $K_{1,d}$, όπου $l, m, p, d \geq 1$ και $l + m + p + d + 1 = n$.

Θεώρημα 1.28. [62] Έστω ότι το G είναι ένα συνεκτικό γράφημα με n κορυφές εκ των οποίων κάποιες είναι τερματικές κορυφές. Τότε $\eta(G) = n - 5$ αν και μόνο αν το G είναι ισόμορφο με το γράφημα G_3^* ή το γράφημα G_4^* , όπου το G_3^* απεικονίζεται στο σχήμα 1.7 αριστερά, και το G_4^* είναι ένα συνεκτικό παράγον υπογράφημα του G_4 (σχήμα 1.7 δεξιά) το οποίο περιλαμβάνει το $K_{l,m,p}$ ως υπογράφημα.



ΣΧΗΜΑ 1.7

Χρησιμοποιώντας παρόμοιες μεθόδους όπως αυτή στο Θεώρημα 1.27 μπορούμε να κατασκευάσουμε όλα τα γραφήματα με n κορυφές τα οποία έχουν τερματικές κορυφές με $\eta(G) = n - 6, n - 7, n - 8$, κλπ. Δηλαδή, μπορούμε να καθορίσουμε όλα τα γραφήματα με n κορυφές που έχουν τερματικές κορυφές τα οποία ικανοποιούν τη σχέση $\eta(G) > 0$.

1.2 Υπολογισμός πολλαπλότητας μηδενός μέσω του αριθμού επιβολής μηδέν

Στο κεφάλαιο αυτό, εξετάζουμε γραφήματα με μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός, $M(G)$, χρησιμοποιώντας τον αριθμό επιβολής μηδέν, $Z(G)$, μια παράμετρο που αποτελεί ένα άνω φράγμα για την πολλαπλότητα μηδενός του γραφήματος. Η εισαγωγή του αριθμού επιβολής μηδέν έγινε στην εργασία [1] και από τότε έχει υπάρξει έντονο ενδιαφέρον στην βιβλιογραφία (βλ. [6], [49], [48]).

Σε αυτό το κομμάτι της παρούσας διατριβής, προσδιορίζουμε συγκεκριμένα γραφήματα για τα οποία ισχύει η ισότητα $M(G) = Z(G)$, όπως είναι το γράφημα Gray, το

Tutte-Coxeter γράφημα, αλλά και το knight γράφημα και συμπληρώνουμε έτσι κατά ένα μέρος τον κατάλογο γραφημάτων που είχε παρουσιασθεί στην εργασία [1].

Ορισμός 1.29. • Κανόνας αλλαγής-χρώματος

Αν G είναι ένα γράφημα με κάθε κορυφή χρωματισμένη άσπρη ή μαύρη, u είναι μια μαύρη κορυφή του G και ακριβώς μια γειτονική κορυφή v της u είναι άσπρη, τότε άλλαξε το χρώμα της v σε μαύρο.

- Με δεδομένο ένα χρωματισμό του G , ο παραγόμενος χρωματισμός είναι το αποτέλεσμα του κανόνα αλλαγής χρώματος, έως ότου δεν είναι δυνατές άλλες αλλαγές.
- Ένα σύνολο επιβολής μηδέν για ένα γράφημα G είναι το υποσύνολο κορυφών Z , τέτοιο ώστε, αν αρχικά οι κορυφές του Z είναι μαύρες και οι υπόλοιπες κορυφές άσπρες, ο παραγόμενος χρωματισμός του G είναι όλες οι κορυφές μαύρες.
- Ο αριθμός επιβολής μηδέν (zero forcing number), $Z(G)$, είναι το ελάχιστο των $|Z|$, όλων των συνόλων επιβολής μηδέν $Z \subseteq V(G)$.
- Ένα βέλτιστο σύνολο επιβολής μηδέν (optimal forcing set) είναι ένα σύνολο επιβολής μηδέν με τον ελάχιστο αριθμό στοιχείων.

Για παράδειγμα, η τερματική κορυφή ενός μονοπατιού είναι σύνολο επιβολής μηδέν για το μονοπάτι. Στον κύκλο, κάθε σύνολο δυο γειτονικών κορυφών είναι σύνολο επιβολής μηδέν. Ο παραγόμενος χρωματισμός (ενός συγκεκριμένου χρωματισμού) είναι στη πραγματικότητα μοναδικός, αφού κάθε κορυφή που αλλάζει σε μαύρη, κάτω από μια σειρά εφαρμογών του κανόνα αλλαγής χρώματος, μπορεί πάντα να αλλάξει σε μαύρη, ανεξάρτητα από τη σειρά των αλλαγών του χρώματος. Αυτό, μπορεί να αποδειχτεί με μια επαγωγή του αριθμού των χρωματικών αλλαγών που είναι απαραίτητες για να αλλάξει η κορυφή σε μαύρη, αλλά στη παρούσα εργασία η μοναδικότητα του παραγόμενου χρωματισμού δεν είναι απαραίτητη και για αυτό δεν θα επεκταθούμε. Η υποβόσκουσα ιδέα είναι ότι μια μαύρη κορυφή σχετίζεται με μια συντεταγμένη σε ένα ιδιοδιάνυσμα, η οποία απαιτείται να είναι μηδενική, ενώ η άσπρη κορυφή σχετίζεται με μια συντεταγμένη που μπορεί να είναι μηδενική ή μη-μηδενική. Η αλλαγή μιας κορυφής, από άσπρη σε μαύρη, είναι η επιβολή του μηδενός στη συντεταγμένη του αντίστοιχου ιδιοδιανύσματος. Για αυτό, χρησιμοποιείται και ο όρος «σύνολα επιβολής μηδέν».

Πρόταση 1.30. [1] Αν F είναι ένα σώμα, $A \in F^{n \times n}$ και $\text{corank}(A) > k$, τότε υπάρχει ένα μη-μηδενικό ιδιοδιάνυσμα x του $\ker(A)$, το οποίο έχει k μηδενικές εισόδους σε k καθορισμένες θέσεις. Δηλαδή αν W είναι ένα σύνολο k δεικτών, τότε υπάρχει μη-μηδενικό διάνυσμα x του $\ker(A)$, τέτοιο ώστε, $\text{supp}(x) \cap W = \emptyset$, όπου $\text{supp}(x)$ είναι το σύνολο δεικτών i , έτσι ώστε, $x_i \neq 0$.

Απόδειξη. Έστω $1 \leq i_1 \leq i_2 \leq \dots \leq i_k \leq n$ και έστω

$$V_k = \{x \in F^n : x_{i_1} = x_{i_2} = \dots = x_{i_k} = 0\}.$$

Τότε, $\dim V_k = n - k$. Έστω $N = \ker(A)$. Τότε,

$$\dim(V_k \cap N) = \dim(V_k) + \dim(N) - \dim(V_k + N) > n - k + k - n = 0$$

αφού, $\dim N = \text{corank}(A) > k$ και $\dim(V_k + N) \leq \dim(F^n) = n$. Έτσι, $V_k \cap N \neq \emptyset$. \square

Έστω γράφημα G με n κορυφές και u μια κορυφή του G . Γραφούμε $u \sim v$, αν u γειτονική της v και $u \not\sim v$, αν $u \neq v$ και u δεν είναι γειτονική της v . Τότε,

$$\begin{aligned} (Ax)_u &= a_{uu}x_u + \sum_{u \sim v} a_{uv}x_v + \sum_{u \not\sim v} a_{uv}x_v = \\ &= a_{uu}x_u + \sum_{u \sim v} a_{uv}x_v. \end{aligned}$$

Πρόταση 1.31. [1] Έστω Z ένα σύνολο επιβολής μηδέν του $G = (V, E)$. Αν x ιδιοδιάνυσμα του $\ker(A)$ και $\text{supp}(x) \cap Z = \emptyset$, τότε $x = 0$.

Απόδειξη. Αν $Z = V$ τότε δεν υπάρχει κάτι να κάνουμε, οπότε υποθέτουμε ότι $Z \neq V$. Αφού το Z είναι σύνολο επιβολής μηδέν, θα μπορούμε να κάνουμε μια χρωματική αλλαγή. Δηλαδή, υπάρχει μια κορυφή u χρωματισμένη μαύρη (x_u απαιτείται να είναι 0), με ακριβώς μια κορυφή v χρωματισμένη άσπρη (οπότε x_v δεν απαιτείται ακόμη να είναι 0). Η ισότητα $(Ax)_u = 0$ τότε γράφεται $a_{uv}x_u = 0$, που συνεπάγεται ότι $x_v = 0$. Ομοίως, κάθε άλλη χρωματική αλλαγή αντιστοιχεί στην απαίτηση μια ακόμη είσοδος του x να είναι μηδέν. Έτσι, $x = 0$. \square

Ορισμός 1.32. Η μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός ενός γραφήματος G είναι

$$M(G) = \max \{ \text{null} A : A \in S(G) \},$$

όπου $S(G)$ είναι το σύνολο των συμμετρικών πινάκων που περιγράφονται από το γράφημα G .

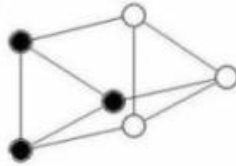
Πρόταση 1.33. [1] Έστω $G = (V, E)$ γράφημα και $Z \subseteq V$ ένα σύνολο επιβολής μηδέν. Τότε $M^F(G) \leq |Z|$ και έτσι $M^F(G) \leq Z(G)$, για κάθε σώμα F .

Απόδειξη. Ας υποθέσουμε ότι $M^F(G) > |Z|$, και έστω A πίνακας γειννιάσης με πολλαπλότητα μηδενός $\text{corank}(A) > |Z|$. Από την Πρόταση 1.30, υπάρχει ένα μη-μηδενικό ιδιοδιάνυσμα x του $\ker(A)$ με μηδενικές εισόδους σε όλες τις συντεταγμένες που αντιστοιχούν στις κορυφές του Z . Από την Πρόταση 1.31 συνεπάγεται ότι $x = 0$, που είναι άτοπο. \square

Η παρακάτω πρόταση δίνει ένα άνω όριο για την παράμετρο Z και κάθε καρτεσιανό γινόμενο. Το σχήμα 1.8 απεικονίζει την Πρόταση 1.34 για το καρτεσιανό γινόμενο $K_2 \square C_3$.

Πρόταση 1.34. [1] Για κάθε γράφημα G, H , $Z(G \square H) \leq \min \{Z(G) |H|, Z(H) |G|\}$.

Απόδειξη. Το σύνολο των κορυφών που συνδέεται με (το ίδιο) σύνολο επιβολής μηδέν σε κάθε αντίγραφο του G είναι σύνολο επιβολής μηδέν για το $G \square H$. Έτσι, $Z(G \square H) \leq Z(G) |H|$. Ομοίως, $Z(G \square H) \leq Z(H) |G|$. \square



ΣΧΗΜΑ 1.8: Απεικόνιση ενός συνόλου επιβολής μηδέν για το $K_2 \square C_3$.

Προφανώς, δεν ικανοποιούν όλα τα γραφήματα τη σχέση $M(G) = Z(G)$, όπως φαίνεται στο παρακάτω παράδειγμα όπου το $Z(G)$ είναι αυστηρώς μεγαλύτερο από το $M(G)$.

Παράδειγμα 1.35. Έστω το καρτεσιανό γινόμενο του Σχήματος 1.8. Το σύνολο που αποτελείται από τις μαύρες κορυφές είναι ένα σύνολο επιβολής μηδέν, αλλά επειδή δεν υπάρχει μικρότερο σύνολο επιβολής μηδέν, $Z(K_2 \square C_3) = 3$. Όμως, $M(K_2 \square C_3) = 2$.

Θα εξετάσουμε τώρα την ισότητα $M(G) = Z(G)$ για τα δένδρα. Μια κάλυψη μονοπατιού (path cover) για ένα δένδρο, T , είναι ένα σύνολο ξένων, ως προς τις κορυφές, μονοπατιών, τα οποία υπάρχουν ως (παραγόμενα) υπογραφήματα του T και καλύπτουν όλες τις κορυφές του. Μια ελάχιστη κάλυψη μονοπατιού (minimum path cover) είναι μια κάλυψη μονοπατιού με τα λιγότερα πιθανά μονοπάτια, ανάμεσα σε όλες τις καλύψεις μονοπατιού του T . Ο αριθμός κάλυψης μονοπατιού του T (path cover number), $P(T)$, είναι ο αριθμός των μονοπατιών σε μια ελάχιστη κάλυψη μονοπατιού. Για κάθε δένδρο, $M(T) = P(T)$ ([58]).

Πρόταση 1.36. [1] Για κάθε δένδρο T , $M(T) = Z(T)$.

Απόδειξη. Ένα σύνολο επιβολής μηδέν, Z , για το T μπορεί να βρεθεί με την επιλογή μιας ελάχιστης κάλυψης μονοπατιού και την επιλογή μιας τερματικής κορυφής σε κάθε μονοπάτι στην ελάχιστη κάλυψη μονοπατιού. Το ότι ένα τέτοιο σύνολο Z είναι σύνολο επιβολής μηδέν, μπορεί να αποδειχτεί με επαγωγή στο $P(T)$. Είναι προφανές ότι, ισχύει για $P(T) = 1$. Έστω ότι ισχύει για όλα τα δένδρα T , έτσι ώστε, $P(T) < P(T_1)$. Διαλέγουμε μια ελάχιστη κάλυψη μονοπατιού για το T_1 , και έστω Z το σύνολο που αποτελείται από μια τερματική κορυφή του κάθε μονοπατιού στην ελάχιστη κάλυψη μονοπατιού (στη συνέχεια θα αναφέρονται ως μαύρες τερματικές κορυφές). Προσδιορίζουμε ένα μονοπάτι P_1 στην ελάχιστη κάλυψη μονοπατιού, το οποίο συνδέεται με το υπόλοιπο T_1 με μια μόνο πλευρά uv , η οποία δεν ανήκει στο P_1 , και έστω ότι $v \in V(P_1)$. Τότε, με την εφαρμογή του κανόνα αλλαγής-χρώματος επαναληπτικά και ξεκινώντας από τη μαύρη τερματική κορυφή του P_1 , όλες οι κορυφές από τη μαύρη τερματική κορυφή ως την v είναι χρωματισμένες μαύρες. Τώρα, το μονοπάτι P_1 δεν έχει καμία συνέπεια στην ανάλυση του δένδρου $T_1 - V(P_1)$, οπότε σύμφωνα με την επαγωγική υπόθεση, οι μαύρες τερματικές κορυφές των υπολοίπων μονοπατιών αποτελούν ένα σύνολο επιβολής μηδέν για το $T_1 - V(P_1)$, και όλες οι κορυφές που δε βρίσκονται στο P_1 , μεταξύ αυτών και η u , μπορούν να χρωματιστούν μαύρες. Έτσι, το Z είναι σύνολο επιβολής μηδέν του T_1 . \square

Πριν προχωρήσουμε στον υπολογισμό της μέγιστης πολλαπλότητας μηδενός των γραφημάτων Gray, Tutte-Coxeter, και του knight γραφήματος παραθέτουμε κάποιες οικογένειες γραφημάτων για τις οποίες έχει υπολογισθεί η μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός $M(G)$ μέσα από τον αριθμό επιβολής μηδέν $Z(G)$ (βλ.[1]).

Γράφημα	Τάξη	Μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός
Υπερκύβος	2^n	2^{n-1}
Υπερτρίγωνο	$\frac{1}{2}n(n+1)$	n
$K_s \square P_t$	st	s
$P_s \square P_t$	st	$\min\{s, t\}$
$C_s \square P_t$	st	$\min\{s, 2t\}$
<i>Möbius ladder</i>	$2n$	4
$K_s \square K_t$	st	$st - s - t + 2$
$C_s \square K_t, s \geq 4$	st	$2t$

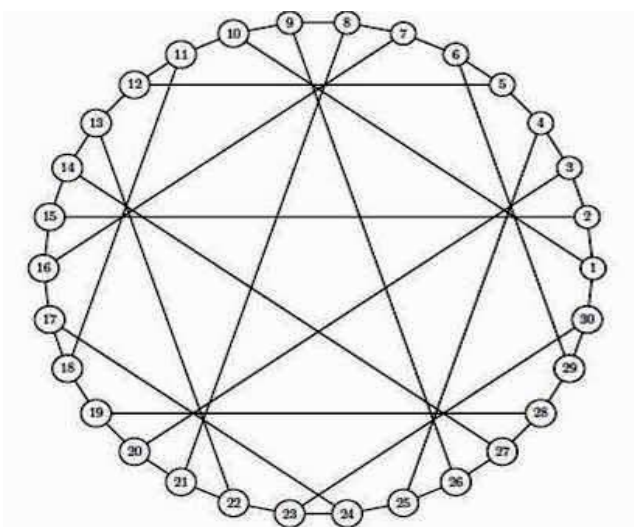
Για ένα δεδομένο σύνολο επιβολής μηδέν κατασκευάζουμε τον παραγόμενο χρωματισμό, σημειώνοντας όλες τις δυνάμεις που επιβάλλουν στις άσπρες κορυφές του γραφήματος να χρωματιστούν μαύρες με τη σειρά με την οποία εκτελούνται. Αυτή η λίστα είναι μια χρονολογική λίστα των δυνάμεων. Μια βέλτιστη χρονολογική λίστα είναι μια χρονολογική λίστα δυνάμεων ενός βέλτιστου συνόλου επιβολής μηδέν. Μια αλυσίδα δυνάμεων (forcing chain), για μια συγκεκριμένη χρονολογική λίστα δυνάμεων, είναι μια ακολουθία των κορυφών (u_1, u_2, \dots, u_s) , έτσι ώστε για $i = 1, 2, \dots, s-1$,

$u_i \rightarrow u_{i+1}$. Μια μεγιστική αλυσίδα δυνάμεων είναι μια αλυσίδα δυνάμεων, η οποία δεν είναι υπακολουθία άλλης αλυσίδας δυνάμεων.

Ορισμός 1.37. Έστω G γράφημα και Z ένα σύνολο επιβολής μηδέν. Έστω F μια χρονολογική σειρά δυνάμεων του Z . Το σύνολο αλυσίδων (chain set) του F είναι το σύνολο των μεγιστικών αλυσίδων του F . Αν ένα σύνολο αλυσίδων, C , περιλαμβάνει μια αλυσίδα, (u) , που αποτελείται από μια μόνο κορυφή, τότε λέμε ότι η C περιλαμβάνει την u ως μοναδιαία (singleton). Ένα βέλτιστο σύνολο αλυσίδων είναι ένα σύνολο αλυσίδων μιας χρονολογικής λίστας ενός βέλτιστου συνόλου επιβολής μηδέν. Οι κορυφές σε μια αλυσίδα δυνάμεων παράγουν ένα μονοπάτι στο G , επειδή οι δυνάμεις σε μια αλυσίδα συμβαίνουν χρονολογικά με την τάξη της αλυσίδας (εφόσον μόνο οι μαύρες κορυφές είναι δυνάμεις). Οι μεγιστικές αλυσίδες δυνάμεων, σε ένα βέλτιστο σύνολο αλυσίδων, είναι ξένες μεταξύ τους και μαζί περιλαμβάνουν όλες τις κορυφές του G . Τα στοιχεία του Z είναι οι αρχικές κορυφές αυτών των αλυσίδων.

Το γράφημα Tutte-Coxeter (ή Tutte's cage) είναι ο $(3, 8)$ -κλωβός και έχει τάξη 30. Είναι ένα γράφημα μεταβατικό ως προς τις κορυφές του και 5-μεταβατικό ως προς τις πλευρές του.

Πρόταση 1.38. Για το Tutte-Coxeter γράφημα, $M(G) = Z(G)$.



ΣΧΗΜΑ 1.9: Το Tutte-Coxeter γράφημα.

Απόδειξη. Το χαρακτηριστικό πολυώνυμο του γραφήματος Tutte-Coxeter είναι $x^{10}(x-3)(x-2)^9(x+2)^9(x+3)$. Όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.9 ένα σύνολο επιβολής μηδέν για το γράφημα είναι το $Z = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 11, 16, 29, 30\}$. Μια χρονολογική λίστα δυνάμεων περιγράφεται παρακάτω.

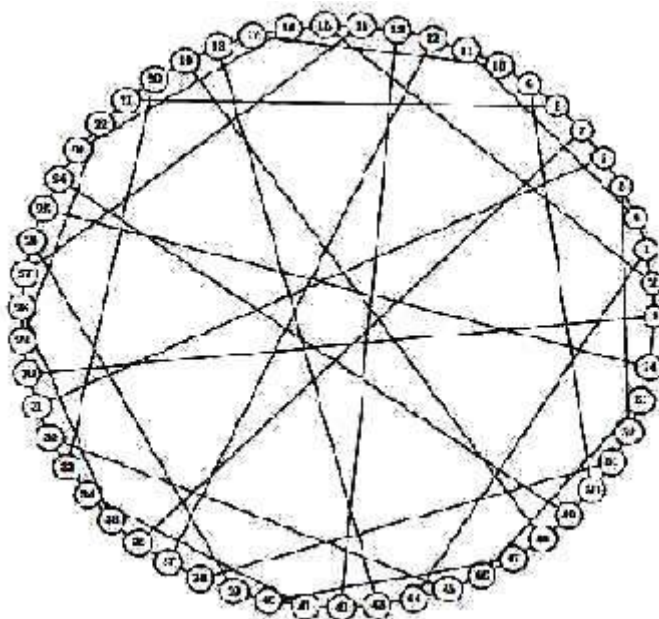
$$1 \longrightarrow 10 \longrightarrow 9, 5 \longrightarrow 12 \longrightarrow 13, 2 \longrightarrow 15 \longrightarrow 14 \longrightarrow 27,$$

$$6 \rightarrow 7 \rightarrow 8 \rightarrow 21, 3 \rightarrow 20 \rightarrow 19, 11 \rightarrow 18 \rightarrow 17 \rightarrow 24,$$

$$4 \rightarrow 25 \rightarrow 26, 29 \rightarrow 28, 30 \rightarrow 23 \rightarrow 22, 16.$$

Αφού $|Z| = 10$ και $M(G) \leq Z(G)$, το σύνολο Z είναι ένα βέλτιστο σύνολο επιβολής μηδέν και η πολλαπλότητα μηδενός του γραφήματος πετυχαίνει την ισότητα στην παραπάνω ανισότητα. \square

Το γράφημα Gray είναι ένα 3-κανονικό γράφημα με 54 κορυφές. Είναι γνωστό ότι το γράφημα Gray είναι το μικρότερο κυβικό ημι-συμμετρικό γράφημα.



ΣΧΗΜΑ 1.10: Το γράφημα Gray.

Πρόταση 1.39. Για το γράφημα Gray, $M(G) = Z(G)$.

Απόδειξη. Το χαρακτηριστικό του πολυώνυμο είναι $x^{16}(x-3)(x+3)(x^2-6)^6(x^2-3)^{12}$. Με ανάλογο τρόπο, όπως για το Tutte-Coxeter γράφημα βρίσκουμε ότι ένα βέλτιστο σύνολο επιβολής μηδέν για το γράφημα Gray είναι το:

$$Z = \{1, 2, 3, 4, 7, 14, 23, 27, 28, 31, 34, 45, 48, 52, 53, 54\}.$$

Επομένως, $M(Z) = Z(G) = 16$. \square

Ορίζουμε ως knight γράφημα για μια $n \times n$ σκακιέρα, το $G = (V, E)$ γράφημα, όπου $V = \{(i, j) | 1 \leq i, j \leq n\}$ και $E = \{((i, j), (k, l)) | \{|i - k|, |j - l|\} = \{1, 2\}\}$. Δηλαδή, κάθε κορυφή αντιστοιχεί σε ένα τετράγωνο στη σκακιέρα και δύο κορυφές

ενώνονται με πλευρά μόνο αν υπάρχει μία κίνηση του ίππου από τη μία κορυφή στην άλλη. Ένα knight γράφημα έχει n^2 κορυφές και $4n^2-12n+8$ πλευρές.

Θεώρημα 1.40. Ένα $(2, n)$ -knight γράφημα είναι μη-ιδιάζον αν $n \equiv 0 \pmod{4}$ και είναι ιδιάζον με πολλαπλότητα μηδενός $M(G)$ αν:

$$M(G) = \begin{cases} 2, & n \equiv 1 \pmod{4} \\ 4, & n \equiv 2 \pmod{4} \\ 2, & n \equiv 3 \pmod{4} \end{cases}$$

Απόδειξη. Αφού το $(2, n)$ -knight γράφημα, G , είναι ένα διμερές γράφημα με $2n$ κορυφές, χωρίζουμε τις κορυφές του σε δύο σύνολα, $A = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ and $B = \{w_1, w_2, \dots, w_n\}$. Θεωρούμε τα τέσσερα, ξένα μεταξύ τους, παραγόμενα μονοπάτια στο γράφημα. Στην περίπτωση όπου $n = 4k$, $A = \{u_1, u_2, \dots, u_{4k}\}$ και $B = \{w_1, w_2, \dots, w_{4k}\}$. Τα μονοπάτια τότε έχουν την μορφή:

- $u_1 \longrightarrow w_3 \longrightarrow u_5 \longrightarrow w_7 \longrightarrow \dots \longrightarrow u_{4k-3} \longrightarrow w_{4k-1}$
- $u_2 \longrightarrow w_4 \longrightarrow u_6 \longrightarrow w_8 \longrightarrow \dots \longrightarrow u_{4k-2} \longrightarrow w_{4k}$
- $w_1 \longrightarrow u_3 \longrightarrow w_5 \longrightarrow u_7 \longrightarrow \dots \longrightarrow w_{4k-3} \longrightarrow u_{4k-1}$
- $w_2 \longrightarrow u_4 \longrightarrow w_6 \longrightarrow u_8 \longrightarrow \dots \longrightarrow w_{4k-2} \longrightarrow u_{4k}$

και κάθε μονοπάτι έχει $2k$ κορυφές. Αφού οι συνεκτικές συνιστώσες του $(2, 4k)$ -knight γραφήματος είναι τα τέσσερα P_{2k} μονοπάτια, από Λήμμα 1.2 (ii) και Λήμμα 1.3 έχουμε ότι $M(G) = 4M(P_{2k}) = 0$.

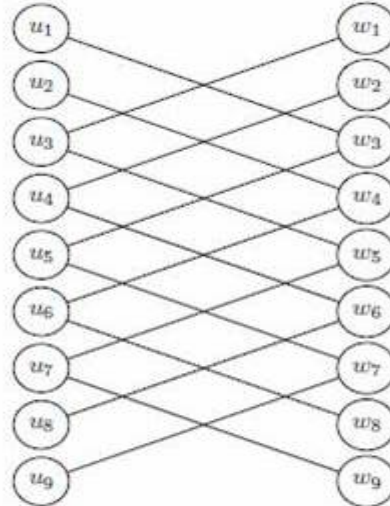
Στην περίπτωση όπου $n = 4k + 1$, $A = \{u_1, u_2, \dots, u_{4k+1}\}$ και $B = \{w_1, w_2, \dots, w_{4k+1}\}$. Τα τέσσερα, ξένα ως προς τις κορυφές, μονοπάτια έχουν τότε τη μορφή:

- $u_1 \longrightarrow w_3 \longrightarrow u_5 \longrightarrow w_7 \longrightarrow \dots \longrightarrow w_{4k-1} \longrightarrow u_{4k+1}$
- $u_2 \longrightarrow w_4 \longrightarrow u_6 \longrightarrow w_8 \longrightarrow \dots \longrightarrow u_{4k-2} \longrightarrow w_{4k}$
- $w_1 \longrightarrow u_3 \longrightarrow w_5 \longrightarrow u_7 \longrightarrow \dots \longrightarrow u_{4k-1} \longrightarrow w_{4k+1}$
- $w_2 \longrightarrow u_4 \longrightarrow w_6 \longrightarrow u_8 \longrightarrow \dots \longrightarrow w_{4k-2} \longrightarrow u_{4k}$.

Το πρώτο και το τρίτο από τα παραπάνω μονοπάτια έχουν από $2k+1$ κορυφές, ενώ το δεύτερο και τέταρτο μονοπάτι από $2k$ κορυφές. Επομένως,

$$M(G) = 2M(P_{2k+1}) + 2M(P_{2k}) = 2.$$

Το αποτέλεσμα προκύπτει αν εφαρμόσουμε την ίδια μέθοδο και στην περίπτωση όπου $n \equiv 2(\text{mod}4)$ και $n \equiv 3(\text{mod}4)$. \square



ΣΧΗΜΑ 1.11: Το $(2,9)$ -knight γράφημα.

Θεώρημα 1.41. Έστω G ένα $(2, n)$ -knight γράφημα με $2n$ κορυφές. Τότε $M(G) = Z(G)$, αν και μόνο αν, $n \equiv 2(\text{mod}4)$.

Απόδειξη. Αφού ο αριθμός επιβολής μηδέν σε ένα μονοπάτι είναι ένα, ο αριθμός επιβολής μηδέν του $(2, n)$ -knight γραφήματος είναι τέσσερα. Από Πρόταση 1.33 $M(G) \leq Z(G)$ και $M(G) = Z(G) = 4$, μόνο στην περίπτωση όπου $n \equiv 2(\text{mod}4)$ (Θεώρημα 1.40). \square

1.3 Γραφήματα με μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός

Σε αυτή την ενότητα εξετάζουμε τα γραφήματα με μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός που περιγράψαμε στην παράγραφο 1.1, χρησιμοποιώντας τον αριθμό επιβολής μηδέν.

Λήμμα 1.42. Έστω G ένα γράφημα με n κορυφές. Τότε $Z(G) = n$, αν και μόνο αν, το G είναι το κενό γράφημα.

Απόδειξη. Αν το G είναι το κενό γράφημα, τότε προφανώς ο αριθμός επιβολής μηδέν είναι n . Έστω ότι $Z(G) = n$. Τότε, δεν μπορούμε να εκτελέσουμε κάποια χρωματική αλλαγή στο γράφημα, επομένως κάθε κορυφή είναι μεμονωμένη. \square

Πρόταση 1.43. Έστω G ένα συνεκτικό γράφημα με n κορυφές. Τότε $Z(G) = n - 1$, αν και μόνο αν, το G είναι ένα πλήρες γράφημα.

Απόδειξη. Αν το G είναι ένα πλήρες γράφημα τότε είναι προφανές ότι $Z(G) = n - 1$. Έστω ότι $Z(G) = n - 1$, και ας υποθέσουμε ότι κάποια κορυφή, u , του G έχει βαθμό μικρότερο από $n - 1$, έστω k . Αν διαλέξουμε την u και όλες τις γειτονικές της κορυφές, εκτός από μία, να είναι χρωματισμένες μαύρες, τότε μπορούμε να εκτελέσουμε ακριβώς μία χρωματική αλλαγή, και οι μαύρες κορυφές του γραφήματος είναι τώρα $k + 1$. Έστω ότι w είναι μία από τις k μαύρες κορυφές. Τότε, η w μπορεί να έχει το πολύ $(n - k - 1)$ γειτονικές κορυφές που είναι άσπρες. Αν διαλέξουμε όλες, εκτός από μία, από τις γειτονικές της κορυφές (και τις υπόλοιπες από τις μη-γειτονικές κορυφές της w) να είναι μαύρες, τότε μπορούμε να εκτελέσουμε ακριβώς μία χρωματική αλλαγή, και έτσι ο παραγόμενος χρωματισμός είναι όλες οι κορυφές του γραφήματος να είναι μαύρες. Το σύνολο που αποτελείται από τις $k + (n - k - 2) = n - 2$ μαύρες κορυφές είναι ένα σύνολο επιβολής μηδέν για το γράφημα G . Όμως ο ελάχιστος αριθμός επιβολής μηδέν είναι $Z(G) = n - 1$, άτοπο. \square

Παρατήρηση 1.44. Ένα γράφημα G με n κορυφές έχει πολλαπλότητα μηδενός n , αν και μόνο αν, είναι το κενό γράφημα.

Απόδειξη. Είναι προφανές ότι αν το G είναι το κενό γράφημα, τότε η πολλαπλότητα μηδενός ισούται με την τάξη του γραφήματος. Έστω ότι $M(G) = n$. Τότε αφού $Z(G) \geq M(G) = n$, από Λήμμα 1.42 το G είναι το κενό γράφημα. \square

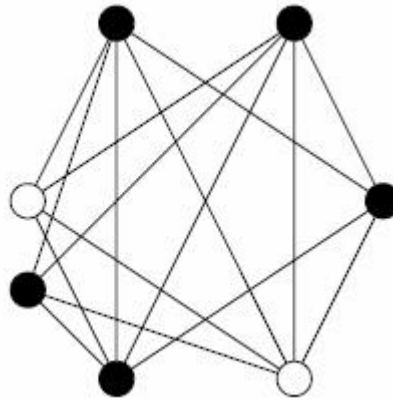
Πρόταση 1.45. Δεν υπάρχουν συνεκτικά γραφήματα με n κορυφές και πολλαπλότητα μηδενός $n - 1$.

Απόδειξη. Έστω ότι το G είναι ένα γράφημα με πολλαπλότητα μηδενός $n - 1$. Τότε, $Z(G) \geq M(G)$. Αν $Z(G) = n - 1$, και το G είναι συνεκτικό τότε από Πρόταση 1.43 το G είναι ένα πλήρες γράφημα. Όπως είναι γνωστό το πλήρες γράφημα έχει δύο διακεκριμένες ιδιοτιμές, τις $n - 1$ και -1 , με πολλαπλότητες 1 και $n - 1$, αντίστοιχα. Αν $Z(G) = n$, τότε όπως είδαμε παραπάνω το G είναι το κενό γράφημα με πολλαπλότητα μηδενός n . Έτσι, δεν υπάρχουν συνεκτικά γραφήματα με πολλαπλότητα μηδενός $n - 1$. \square

Παρατήρηση 1.46. Ο αριθμός επιβολής μηδέν για το πλήρες διμερές γράφημα K_{n_1, n_2} είναι $Z(K_{n_1, n_2}) = n - 2$, αφού αν u είναι μία μαύρη κορυφή που ανήκει σε ένα από

τα δύο σύνολα κορυφών για να μπορέσουμε να εκτελέσουμε μία χρωματική αλλαγή, μόνο μία κορυφή v από το άλλο σύνολο κορυφών πρέπει να είναι άσπρη. Αφού το ίδιο ισχύει και για την κορυφή v , από Λήμμα 1.25 $Z(K_{n_1, n_2}) = n - 2 = M(K_{n_1, n_2})$.

Παρόλα αυτά δεν πετυχαίνουν όλα τα γραφήματα με μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός το άνω φράγμα στην ανισότητα $M(G) \leq Z(G)$. Για παράδειγμα, γνωρίζουμε από Λήμμα 1.26 ότι η πολλαπλότητα μηδενός ενός πλήρους τριμερούς γραφήματος είναι $n - 3$. Όπως μπορούμε να δούμε όμως στο παρακάτω σχήμα, ο αριθμός επιβολής μηδέν για το πλήρες τριμερές $K_{2,2,3}$ είναι $n - 2$.



ΣΧΗΜΑ 1.12: Ένα σύνολο επιβολής μηδέν για το πλήρες τριμερές $K_{2,2,3}$.

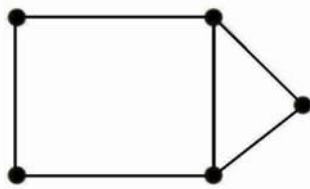
Κεφάλαιο 2

Ένας χαρακτηρισμός ιδιαζόντων γραφημάτων

2.1 Πυρήνας γραφήματος

Σε αυτή την παράγραφο της παρούσας διατριβής εξετάζουμε τον πυρήνα ενός γραφήματος, δηλαδή το υπογράφημα εκείνο που συνδέεται με το μη-μηδενικό μέρος του ιδιοδιανύσματος που αντιστοιχεί στη μηδενική ιδιοτιμή. Πιο συγκεκριμένα, με τη βοήθεια μίας άλλης παραμέτρου, της μηδενικής έκτασης μίας κορυφής u , $z_u(G) = Z(G) - Z(G - u)$, παρέχουμε ικανές και αναγκαίες συνθήκες για να είναι ένα γράφημα γράφημα-πυρήνας. Ακόμη, βρίσκουμε τότε μία κορυφή είναι core-forbidden.

Ορισμός 2.1. Έστω $x \in \mathbb{R}^n$, $n \geq 3$, ένα ιδιοδιάνυσμα του πυρήνα του G , το οποίο συμβολίζουμε με $x = (x_F, 0)^t$, με κάθε είσοδο του x_F μη-μηδενική. Οι κορυφές που αντιστοιχούν στο x_F ανήκουν σε ένα υπογράφημα F , του οποίου ο πίνακας γειτνίασης είναι ο αντίστοιχος κύριος $|F| \times |F|$ υποπίνακας F του G που ικανοποιεί την εξίσωση $Fx_F = 0$. Θα καλούμε το γράφημα (F, x_F) ή απλώς F , πυρήνα (core) του G . Αν $x = x_F$, τότε $G = F$ και το γράφημα G λέγεται γράφημα-πυρήνας (core-graph).

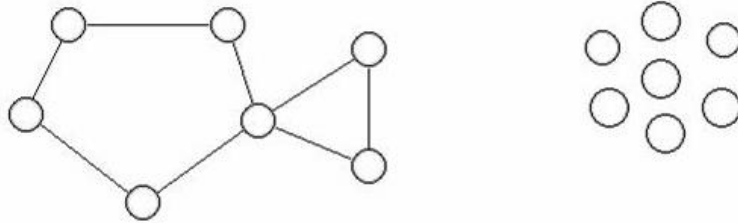


ΣΧΗΜΑ 2.1

Παράδειγμα 2.2. Το γράφημα του σχήματος 2.1 έχει ιδιοδιάνυσμα $(1, 1, -1, -1, 0)^T$. Το μη-μηδενικό μέρος, $(1, 1, -1, -1)^T$, του ιδιοδιανύσματος αντιστοιχεί στις 4 κορυφές που σχηματίζουν το τετράγωνο και αποτελούν τον πυρήνα του γραφήματος.

Γραμμικώς ανεξάρτητα ιδιοδιανύσματα του διανυσματικού χώρου $\ker(G)$ ορίζουν διακεκριμένους πυρήνες του G . Το σύνολο, CV , των κορυφών-πυρήνα (core vertices), αποτελείται από εκείνες τις κορυφές που ανήκουν σε κάποιο πυρήνα του G . Αν μια κορυφή δεν ανήκει σε κανένα πυρήνα, αυτή ονομάζεται core forbidden.

Για παράδειγμα, στο προηγούμενο σχήμα η πέμπτη κορυφή που δεν ανήκει στο τετράγωνο είναι core forbidden, αφού δεν ανήκει στον πυρήνα του γραφήματος. Ένα γράφημα-πυρήνας χωρίς μεμονωμένες κορυφές με πολλαπλότητα μηδενός ίσον με ένα ονομάζεται nut graph. Η μικρότερη τάξη ενός nut graph είναι 7 και υπάρχουν 3 γραφήματα τάξης 7.



ΣΧΗΜΑ 2.2: Δύο γραφήματα-πυρήνες με πολλαπλότητα μηδενός, $\eta(G) = 1$ και $\eta(G) = 7$, αντίστοιχα.

Λήμμα 2.3. [80] Ο πυρήνας F ενός ιδιάζοντος γραφήματος G , που αντιστοιχεί στο ιδιοδιάνυσμα u_0 του $\ker(G)$, είναι ένα παραγόμενο υπογράφημα του G το οποίο είναι επίσης ιδιάζον και έχει ιδιοδιάνυσμα με κάθε είσοδο μη-μηδενική.

Απόδειξη. Έστω u_0 ένα ιδιοδιάνυσμα του $\ker(G)$ με t μη-μηδενικές εισόδους. Ονομάζουμε τις κορυφές του G , έτσι ώστε, οι πρώτες t κορυφές να αντιστοιχούν στο μη-μηδενικό μέρος του u_0 . Αν $u_0 = (a_1, a_2, \dots, a_t, 0, \dots, 0)^T$, $a_i \neq 0$, $\forall i$, $1 < t \leq n$ και A ο πίνακας γειτνίασης του G , τότε $F(= F_t) = \langle u_1, u_2, \dots, u_t \rangle$. Ο κύριος υποπίνακας, $t \times t$, του A είναι ο πίνακας γειτνίασης του υπογραφήματος F και έχει ένα ιδιοδιάνυσμα $u'_0 = (a_1, a_2, \dots, a_t)^T$. Επομένως, το γράφημα F είναι ιδιάζον. Επίσης, κάθε είσοδος a_i του u'_0 είναι μη-μηδενική. \square

Ορισμός 2.4. Ο αριθμός των κορυφών ενός πυρήνα καλείται μέγεθος πυρήνα. Αν το γράφημα έχει πολλαπλότητα μηδενός ίσον με ένα, το μέγεθος του πυρήνα θα αναφέρεται ως αριθμός πυρήνα του ιδιάζοντος γραφήματος.

Ορισμός 2.5. Η περιφέρεια, P , ενός ιδιάζοντος γραφήματος (σε σχέση με το ιδιοδιάνυσμα u_0 του $\ker(G)$) είναι το σύνολο κορυφών $V(G) - V(F)$, όπου F είναι ο πυρήνας που αντιστοιχεί στο u_0 .

Παρατήρηση 2.6. Αν το γράφημα G έχει πολλαπλότητα μηδενός ίσον με ένα, τότε ο πυρήνας F και η περιφέρεια P είναι μοναδικά.

Θα εξετάσουμε τον πυρήνα ενός γραφήματος αλλά και τα γραφήματα-πυρήνες χρησιμοποιώντας μία παράμετρο που αναφέρεται ως έκταση (spread) κορυφής. Η εισαγωγή της έννοιας της έκτασης μίας κορυφής έγινε στην εργασία [4].

Ορισμός 2.7. Η έκταση βαθμού (rank spread) της κορυφής u ορίζεται ως

$$r_u(G) = mr(G) - mr(G - u),$$

όπου $mr(G)$ είναι ο ελάχιστος βαθμός (minimum rank) γραφήματος, και είναι γνωστό [70] ότι

$$0 \leq r_u(G) \leq 2.$$

Ορισμός 2.8. Έστω G γράφημα και u μια κορυφή του.

1. Η έκταση της πολλαπλότητας μηδενός (null spread) της u είναι:

$$n_u(G) = M(G) - M(G - u).$$

2. Η έκταση μηδενός (zero spread) της u είναι:

$$z_u(G) = Z(G) - Z(G - u).$$

Παρατήρηση 2.9. Για κάθε γράφημα G και κάθε κορυφή u του G ,

$$r_u(G) + n_u(G) = 1,$$

και έτσι

$$-1 \leq n_u(G) \leq 1.$$

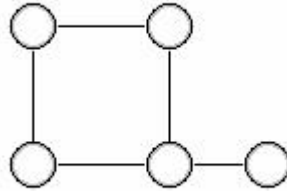
Θεώρημα 2.10. [28] Για κάθε γράφημα G και κορυφή u του G ,

$$-1 \leq z_u(G) \leq 1.$$

Απόδειξη. Έστω Z ένα βέλτιστο σύνολο επιβολής μηδέν για το $G - u$. Τότε, το $Z \cup \{u\}$ είναι ένα σύνολο επιβολής μηδέν για το G , οπότε $Z(G) \leq Z(G - u) + 1$ και $z_u(G) \leq 1$. Έστω τώρα, Z ένα βέλτιστο σύνολο επιβολής μηδέν για το G . Κατασκευάζουμε μια συγκεκριμένη χρονολογική λίστα δυνάμεων F . Αν η δύναμη

$u \rightarrow v$ εμφανίζεται στην F , για κάποια κορυφή v , τότε το $Z \cup \{v\}$ είναι ένα σύνολο επιβολής μηδέν για το $G - u$, με χρονολογική λίστα δυνάμεων που αποκτήθηκαν από την F με τη διαγραφή της $u \rightarrow v$. Αλλιώς, το Z είναι σύνολο επιβολής μηδέν για το $G - u$. Σε κάθε περίπτωση, $Z(G - u) \leq Z(G) + 1$ και $-1 \leq z_u(G)$. \square

Παράδειγμα 2.11. Έστω v η τερματική κορυφή του γραφήματος G , όπως φαίνεται στο σχήμα 2.3. Γνωρίζουμε ότι $M(G) = 1$, $Z(G) = 2$ και $Z(G - v) = 2$. Τότε $M(G - v) = 2$. Άρα, $n_u(G) = -1 < 0 = z_u(G)$.



ΣΧΗΜΑ 2.3

Παρατήρηση 2.12. Έστω G γράφημα, τέτοιο ώστε, $M(G) = Z(G)$ και u κορυφή του G . Τότε,

1. $n_u(G) \geq z_u(G)$.
2. Αν $z_u(G) = 1$, τότε $n_u(G) = 1$.
3. Αν $n_u(G) = -1$, τότε $z_u(G) = -1$.

Θεώρημα 2.13. [28] Έστω $G = (V, E)$ γράφημα και u μια κορυφή του. Τότε, υπάρχει ένα βέλτιστο σύνολο αλυσίδων του G το οποίο περιέχει την u ως μοναδιαία, αν και μόνο αν, $z_u(G) = 1$.

Απόδειξη. Έστω G γράφημα, u κορυφή του G και Z ένα βέλτιστο σύνολο επιβολής μηδέν του G , όπου υπάρχει ένα βέλτιστο σύνολο αλυσίδων του Z το οποίο περιέχει την u ως μοναδιαία. Προφανώς, το $Z - u$ είναι ένα σύνολο επιβολής μηδέν για το $G - u$. Επομένως, $Z(G - u) \leq Z(G) - 1$. Έτσι, $z_u(G) \geq 1$. Όμως, από το Θεώρημα 2.10 $z_u(G) \leq 1$, οπότε $z_u(G) = 1$. Αντιστρόφως, έστω G γράφημα και u κορυφή του G , τέτοια ώστε, $z_u(G) = 1$. Έστω Z ένα βέλτιστο σύνολο επιβολής μηδέν για το $G - u$ και ορίζουμε $Z' = Z \cup \{u\}$. Προφανώς, το Z' είναι ένα σύνολο επιβολής μηδέν για το G με την ίδια χρονολογική λίστα δυνάμεων F , όπως έχει το Z για το $G - u$. Εφόσον $z_u(G) = 1$, το Z' είναι βέλτιστο σύνολο επιβολής μηδέν και προφανώς η κορυφή u είναι μοναδιαία στο σύνολο αλυσίδων του F . \square

Θεώρημα 2.14. [28] Έστω $G = (V, E)$ γράφημα και u κορυφή του. Αν $z_u(G) = -1$, τότε $u \notin Z$ για όλα τα βέλτιστα σύνολα επιβολής μηδέν Z του G . Ισοδύναμα, αν $u \in Z$ για κάποιο βέλτιστο σύνολο επιβολής μηδέν Z , τότε $z_u(G) \geq 0$.

Απόδειξη. Θα αποδείξουμε τη δεύτερη πρόταση. Έστω, Z ένα βέλτιστο σύνολο επιβολής μηδέν για το G . Αν στη χρονολογική λίστα δυνάμεων συμβαίνει $u \rightarrow v$, τότε έστω $Z' = Z \setminus \{u\} \cap \{v\}$, ενώ αν δε συμβαίνει έστω $Z' = Z \setminus \{u\}$. Προφανώς, το Z' είναι σύνολο επιβολής μηδέν για το $G - u$ και $|Z'| \leq |Z|$, έτσι $z_u(G) \geq 0$. \square

Θεώρημα 2.15. [28] Δεν υπάρχει γράφημα τέτοιο ώστε κάθε κορυφή του να έχει έκταση μηδενός -1 .

Θεώρημα 2.16. Έστω $G = (V, E)$ ένα ιδιάζον γράφημα με τουλάχιστον δύο κορυφές. Το γράφημα G είναι γράφημα-πυρήνας, αν και μόνο αν, $n_u(G) = 1, \forall u \in V$.

Απόδειξη. Έστω G ένα γράφημα-πυρήνας με πολλαπλότητα μηδενός $M(G)$ και $M(G)$ ιδιοδιανύσματα πυρήνα. Έστω A' ο πίνακας γειτνίασης του παραγόμενου υπογραφήματος $G - u$, $u \in V$, όπου ο πίνακας A γράφεται

$$A = \begin{pmatrix} 0 & u \\ u^T & A' \end{pmatrix}.$$

Αφού η κορυφή u είναι κορυφή του πυρήνα απαιτούμε μόνο ένα από τα ιδιοδιανύσματα του πυρήνα του γραφήματος να μην είναι ορθογώνιο στο διάνυσμα $e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T$. Αν περιορίσουμε τα υπόλοιπα ιδιοδιανύσματα (τα οποία είναι ορθογώνια στο e_1) στο παραγόμενο υπογράφημα $G - u$, τότε αυτά είναι ιδιοδιανύσματα του πυρήνα του $G - u$. Ακόμη, αν το υπογράφημα $G - u$ είχε περισσότερα από $M(G) - 1$ ιδιοδιανύσματα πυρήνα, τότε η πολλαπλότητα μηδενός του G θα ήταν μεγαλύτερη από $M(G)$. Επομένως, $M(G - u) = M(G) - 1$ και $n_u(G) = 1$.

Έστω $n_u(G) = 1, \forall u \in V$. Αφού η πολλαπλότητα μηδενός μειώνεται με την αφαίρεση της κορυφής u , θα πρέπει να υπάρχει τουλάχιστον ένα ιδιοδιάνυσμα του πυρήνα το οποίο δεν είναι ορθογώνιο στο διάνυσμα e_u . Έτσι, η κορυφή $u, \forall u \in V$, είναι κορυφή του πυρήνα. \square

Θεώρημα 2.17. Έστω $G = (V, E)$ ένα ιδιάζον γράφημα τέτοιο ώστε $M(G) = Z(G)$. Αν $z_u(G) = 1, \forall u \in V$, τότε το G είναι γράφημα πυρήνας.

Απόδειξη. Έστω $z_u(G) = 1, \forall u \in V$. Από Παρατήρηση 2.12 $n_u(G) = 1, \forall u \in V$, και έτσι από Θεώρημα 2.16, το γράφημα G είναι γράφημα πυρήνας. \square

Πρόταση 2.18. Έστω G ένα ιδιάζον γράφημα και $u \in V$ μία κορυφή τέτοια ώστε $M(G - u) = Z(G - u)$. Αν $z_u(G) \leq 0$, τότε η κορυφή u δεν ανήκει σε κανένα πυρήνα του γραφήματος G .

Απόδειξη. Έστω ότι η u είναι κορυφή κάποιου πυρήνα του G . Τότε αν αφαιρέσουμε την u , η πολλαπλότητα μηδενός μειώνεται κατά ένα, όπως δείξαμε στο Θεώρημα 2.16. Αφού $z_u(G) \leq 0$, συνεπάγεται ότι $Z(G) \leq M(G) - 1$, άτοπο αφού από Πρόταση 1.33 $M(G) \leq Z(G)$. \square

Πόρισμα 2.19. Έστω $G = (V, E)$ ένα ιδιάζον γράφημα τέτοιο ώστε $M(G) = Z(G)$. Έστω ότι για κάθε κορυφή $u \in V$ υπάρχει ένα βέλτιστο σύνολο αλυσίδων του G το οποίο περιλαμβάνει την κορυφή u ως μοναδιαία. Τότε, το G είναι γράφημα πυρήνας.

Απόδειξη. Άμεση συνέπεια των Θεωρημάτων 2.13 και 2.17. \square

2.2 Γραφήματα με πολλαπλότητα μηδενός ίσον με ένα

Η ιδέα που οδηγεί στον ορισμό ενός singular configuration γραφήματος είναι η κατασκευή του. Αν, σύμφωνα με το θεώρημα πεπλεγμένων ιδιοτιμών (interlacing theorem), σε ένα γράφημα-πυρήνα (F, x_F) πολλαπλότητας μηδενός $\eta(F) \geq 1$ προσθέσουμε $\eta(F) - 1$ κορυφές, γειτονικές μόνο στις κορυφές του F , η πολλαπλότητα μηδενός μειώνεται κατά ένα με κάθε προσθήκη κορυφής, έτσι ώστε, το γράφημα N που προκύπτει έχει πολλαπλότητα μηδενός ίσον με ένα. Αν επιπλέον, θέσουμε ως προϋπόθεση το x_F να παραμείνει το μη-μηδενικό κομμάτι του ιδιοδιανύσματος του $\ker(N)$, τότε το N είναι ένα ιδιάζον γράφημα με πολλαπλότητα μηδενός ίσον με ένα, και με τον ελάχιστο αριθμό κορυφών και πλευρών που έχει το x_F σα μη-μηδενικό μέρος του ιδιοδιανύσματος του.

Σε αυτό το κεφάλαιο εξετάζουμε τον αριθμό επιβολής μηδέν ενός singular configuration γραφήματος σε σχέση με τον πυρήνα του.

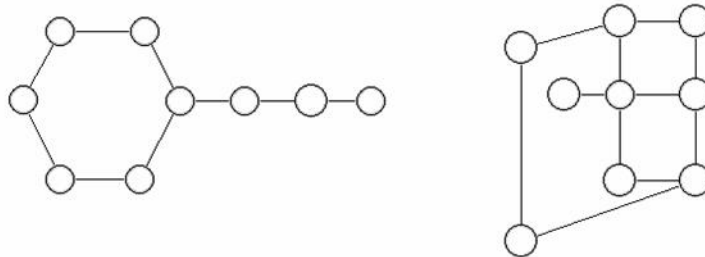
Ορισμός 2.20. Ένα ιδιάζον γράφημα G , τάξης ≥ 3 , με πυρήνα F_t και περιφέρεια $P := V(G) - V(F_t)$ είναι minimal configuration γράφημα, με αριθμό πυρήνα t , αν ικανοποιούνται οι παρακάτω συνθήκες:

i) $\eta(G) = 1$

ii) $P = \emptyset$ ή το P παράγει ένα κενό γράφημα

iii) στην περίπτωση που $P \neq \emptyset$, η διαγραφή μιας κορυφής $u \in P$ αυξάνει την πολλαπλότητα μηδενός του G .

Διάφορα minimal configuration γραφήματα μπορούν να κατασκευαστούν για τον ίδιο πυρήνα F και ιδιοδιάνυσμα x_F . Τα minimal configuration γραφήματα του παρακάτω σχήματος έχουν τον ίδιο πυρήνα $F = \bar{K}_5$ και $(1, 1, -2, -1, 2)$ στα μη-μηδενικό μέρος του ιδιοδιανύσματος.



ΣΧΗΜΑ 2.4

Λήμμα 2.21. [80] Ένα minimal configuration γράφημα (N, F_t) είναι προέκταση του πυρήνα F_t , έτσι ώστε, να είναι συνεκτικό γράφημα. Ο βαθμός κάθε κορυφής της περιφέρειας είναι τουλάχιστον 2.

Απόδειξη. Έστω ότι το N δεν είναι συνεκτικό γράφημα. Τότε έχει μια συνεκτική συνιστώσα, η οποία περιλαμβάνει μερικές ή όλες τις κορυφές του πυρήνα F_t . Ο πίνακας γειτνίασης του N μπορεί να διαχωριστεί ως εξής:

$$A(N) = \begin{pmatrix} A(K) & 0 \\ \dots\dots\dots\vdots & \dots\dots\dots \\ 0 & \vdots A(H) \end{pmatrix}$$

Έστω u_0 ένα ιδιοδιάνυσμα του $\ker(N)$. Αν ο πυρήνας είναι υπογράφημα του K τότε οι κορυφές του H ανήκουν στην περιφέρεια και άρα το H είναι κενό γράφημα. Τότε όμως η πολλαπλότητα μηδενός του N θα ήταν μεγαλύτερη του ένα, άτοπο.

Αν ο πυρήνας έχει κορυφές και στο K και στο H τότε $u_0 = (a_1, a_2, \dots, a_r, 0, 0, \dots, 0, b_1, b_2, \dots, b_s, 0, \dots, 0)^T$, όπου τα a_i είναι οι μη-μηδενικές θέσεις που αντιστοιχούν στις κορυφές του K , και b_j αντιστοιχούν στις κορυφές του H . Τότε, καθένα από τα διανύσματα $(a_1, a_2, \dots, a_r, 0, \dots, 0)^T$ και $(0, 0, \dots, 0, b_1, b_2, \dots, b_s, 0, \dots, 0)^T$ είναι ιδιοδιανύσματα του $\ker(N)$, το οποίο είναι επίσης άτοπο. Άρα, το N είναι συνεκτικό γράφημα. Επιπλέον, οι κορυφές στο P (αν $P \neq \emptyset$) δεν ενώνονται μεταξύ τους με πλευρές και άρα είναι γειτονικές μόνο στις κορυφές του πυρήνα F_t . Άρα, το N είναι επέκταση του πυρήνα.

Έστω ότι $u \in P$ και u μια τερματική κορυφή γειτονική στη κορυφή u_j του πυρήνα. Τότε, αν το a_j είναι στη θέση j του ιδιοδιανύσματος u_0 που αντιστοιχεί στην κορυφή

u_j , $A(N)(u_0) = 0 \Rightarrow a_j = 0$, άτοπο. Άρα, ο βαθμός μιας κορυφής στην περιφέρεια είναι τουλάχιστον 2. \square

Για ένα minimal configuration γράφημα, N , αν ονομάσουμε πρώτα τις κορυφές του πυρήνα και μετά εκείνες της περιφέρειας P , τότε για $x = \begin{bmatrix} x_F \\ 0 \end{bmatrix}$, $Nx = 0$. Η περιφέρεια είναι το σύνολο των ανεξάρτητων κορυφών, τα διανύσματα-στήλων των οποίων δίνονται από τις τελευταίες $s - 1$ στήλες του N , και καθορίζουν τις πλευρές που ενώνουν το P με τις κορυφές του πυρήνα. Παρατηρούμε ότι, αν προσθέσουμε πλευρές που ενώνουν όλα ή μερικά από τα διακριτά ζευγάρια κορυφών στο P , τότε το γράφημα S που παράγεται ικανοποιεί την $S \begin{bmatrix} x_F \\ 0 \end{bmatrix} = 0$.

Ορισμός 2.22. Ένα γράφημα G , $|G| \geq 3$, είναι singular configuration γράφημα (SC), με πυρήνα (F, x_F) , αν είναι ιδιάζον γράφημα με πολλαπλότητα μηδενός ίσον με ένα, έχει $|F| + \eta(F) - 1$ κορυφές, έχει το F σαν παραγόμενο υπογράφημα και ικανοποιεί τις σχέσεις: $|F| \geq 2$, $Fx_F = 0$ και την $G \begin{bmatrix} x_F \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$.

Λήμμα 2.23. [81] Ένα singular configuration γράφημα έχει πολλαπλότητα μηδενός ίσον με ένα.

Απόδειξη. Έστω S ένα SC γράφημα με παραγόμενο minimal configuration (MC) γράφημα, N . Θα δείξουμε ότι, ένα ιδιοδιάνυσμα του N είναι επίσης ιδιοδιάνυσμα του S .

Αν $S = \begin{pmatrix} F & B^t \\ B & P \end{pmatrix}$, όπου F είναι ένας $r \times r$ πίνακας και P είναι ένας $(n - r) \times (n - r)$

πίνακας, τότε το παραγόμενο υπογράφημα MC έχει πίνακα $N = \begin{pmatrix} F & B^t \\ B & 0 \end{pmatrix}$. Αφού

$Nx = 0$ και το P αντιστοιχεί στο μηδενικό μέρος του x , το ιδιοδιάνυσμα $x = \begin{bmatrix} x_F \\ 0 \end{bmatrix}$ του N ικανοποιεί την εξίσωση $Sx = 0$.

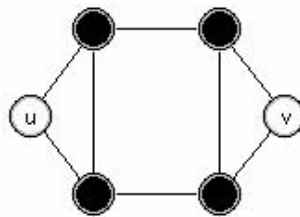
Απομένει να δείξουμε ότι, το S δεν έχει ιδιοδιάνυσμα γραμμικώς ανεξάρτητο του x . Πράγματι, με κάθε προσθήκη μιας στήλης B^t στο F , η πολλαπλότητα μηδενός μειώνεται κάθε φορά κατά ένα. Επομένως, δεν υπάρχουν γραμμικοί συνδυασμοί του B^t που συνεισφέρουν στο $\text{Ker}([FB^t])$. Αφού οι πρώτες r στήλες των S και N είναι ίδιες, οι μόνες μη-μηδενικές εισοδοί στο ιδιοδιάνυσμα του $\text{ker}(S)$ αντιστοιχούν στις κορυφές του F . Έτσι, S και N μοιράζονται το ίδιο μοναδικό ιδιοδιάνυσμα. \square

Λήμμα 2.24. [85] Ένα singular configuration γράφημα είναι συνεκτικό.

Απόδειξη. Έστω ότι ένα SC δεν είναι συνεκτικό. Τότε, χωρίς απώλεια της γενικότητας, έχει μια συνεκτική συνιστώσα S_1 , $|S_1| \geq 3$, που έχει ένα μη-μηδενικό ιδιοδιάνυσμα x_1 . Αν ονομάσουμε πρώτα τις κορυφές του S_1 , τότε $S \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ και $S_1 x_1 = 0$. Θα πρέπει να παρατηρήσουμε ότι, το S_1 δε μπορεί να έχει μεμονωμένες κορυφές, αφού τότε αυτές θα συνεισέφεραν στην πολλαπλότητα μηδενός, και τότε, $\eta(S)$ θα ήταν μεγαλύτερη από ένα. Αφού, $x_1 \neq 0$ τότε $x_2 = 0$, αλλιώς $\begin{pmatrix} x_1 \\ 0 \end{pmatrix}$ και $\begin{pmatrix} 0 \\ x_2 \end{pmatrix}$ θα ήταν δυο γραμμικώς ανεξάρτητα ιδιοδιανύσματα του $\ker(S)$, οπότε πάλι η πολλαπλότητα μηδενός θα ήταν μεγαλύτερη από ένα. Έτσι, ο μοναδικός πυρήνας βρίσκεται στην S_1 . Έστω ότι, το x_2 αντιστοιχεί στις κορυφές των μη-ιδιαζουσών συνιστωσών. Τότε όμως, το S δεν έχει ένα ελάχιστο αριθμό κορυφών για τον πυρήνα F . Άτοπο, άρα $S = S_1$. \square

Λήμμα 2.25. [81] Ένα γράφημα G , χωρίς μεμονωμένες κορυφές, με πολλαπλότητα μηδενός ίσον με ένα, και πυρήνα (F, x_F) έχει (τουλάχιστον) ένα παραγόμενο υπογράφημα, το οποίο είναι SC με τον ίδιο πυρήνα (F, x_F) .

Απόδειξη. Ας ονομάσουμε πρώτα τις κορυφές του F . Τότε, οι πρώτες $|F|$ γραμμές του G μπορούν να χωριστούν σε $(F|C)$ και $(F|C)^t(x_F) = 0$. Επιπλέον, $r((F|C)) = |F| - 1$. Αν το F δεν είναι MC, η πολλαπλότητα μηδενός του F είναι μεγαλύτερη του 1. Υπάρχουν $\eta(F) - 1$ διανύσματα-στηλών του πίνακα C , που είναι αμοιβαίως γραμμικώς ανεξάρτητα και επίσης ανεξάρτητα από τις στήλες του F . Αυτά τα διανύσματα στηλών σχηματίζουν τον πίνακα C' , έτσι ώστε, $r((F|C')) = r((F|C)) = |F| - 1$. Ο κύριος υποπίνακας του $A(G)$, που ορίζεται από $((F|C'))$, είναι της μορφής $A' = \begin{pmatrix} A(F) & C' \\ (C')^t & Q \end{pmatrix}$, όπου Q ένας τετράγωνος πίνακας. Ο πίνακας γειτνίασης A' ορίζει ένα παραγόμενο υπογράφημα του G και ικανοποιεί όλες τις συνθήκες για να είναι αυτό SC. \square



ΣΧΗΜΑ 2.5

Παράδειγμα 2.26. Στο Σχήμα 2.5 το γράφημα έχει πολλαπλότητα μηδενός ίσον με ένα. Ο πυρήνας του γραφήματος G αποτελείται από τις 4 μαύρες κορυφές του

κύκλου C_4 . Παρά το ότι το G έχει πολλαπλότητα μηδενός ίσον με ένα, δεν είναι minimal αφού τα ισόμορφα γραφήματα $G - u$ και $G - v$ έχουν επίσης πολλαπλότητα μηδενός ίσον με ένα, και έχουν τον ίδιο πυρήνα με το G . Τα υπογραφήματα αυτά είναι MC.

Πρόταση 2.27. [81] Έστω S , ένα SC με πυρήνα F τάξης ρ , και $u = (x_F, 0, \dots, 0)$ ένα ιδιοδιάνυσμα του διανυσματικού χώρου της ιδιοτιμής $\lambda = 0$ του S (με καθεμία από τις ρ εισόδους του x_F μη-μηδενικές). Έστω S υπογράφημα ενός γραφήματος G με ονομασία κορυφών τέτοια ώστε, οι πρώτες ρ γραμμές του $A(G)$ είναι $Y = [A(F)|C'|Q]$, όπου $[A(F)|C']$ οι πρώτες ρ γραμμές του $A(S)$. Αν $x_F \in (\text{colsp}(Q))^\perp$ τότε G είναι ιδιάζων πίνακας με πυρήνα F .

Απόδειξη. Έχουμε $A' = \begin{pmatrix} F & C' \\ (C')^t & P \end{pmatrix}$, όπου P είναι ο $(r - \rho) \times (r - \rho)$ πίνακας γειτνίασης του υπογραφήματος που παράγεται από την περιφέρεια P , και όπου C' περιγράφει τις πλευρές μεταξύ των κορυφών της περιφέρειας και αυτών του πυρήνα. Ισχύει ότι, $A(S)u = 0$. Επίσης οι πρώτες ρ γραμμές του $A(G)$ είναι $Y = [A(F)|C'|Q]$, όπου οι μη-μηδενικές εισοδοί του Q περιγράφουν τις πλευρές μεταξύ F και $R = G - V(S)$. Αφού $Q^t x_F = 0$, συνεπάγεται ότι $Y^t x_F = 0$. \square

Πρόταση 2.28. [81] Αν το SC, S , με πυρήνα (F, x_F) και περιφέρεια P είναι υπογράφημα ενός γραφήματος G και το γράφημα $G - P$, το οποίο προκύπτει αν αφαιρέσουμε από το G τις κορυφές του P είναι επίσης ιδιάζον με πυρήνα (F, x_F) , τότε το G είναι ιδιάζον με πυρήνα (F, x_F) .

Απόδειξη. Έστω r η τάξη του S . Αν $A(S) = \begin{pmatrix} A(F) & C' \\ (C')^t & 0 \end{pmatrix}$, και οι πρώτες ρ γραμμές του $A(G)$ είναι $Y = [A(F)|C'|Q]$, τότε για την ίδια λεξικογραφική ονομασία των κορυφών, οι πρώτες ρ γραμμές του $G - P$ είναι $[A(F)|Q]$. Αφού (F, x_F) πυρήνας του $G - P$, συνεπάγεται ότι $Q^t x_F = 0$. Έτσι, $Y^t x_F = 0$. \square

Παρακάτω εξετάζουμε την σχέση ανάμεσα στον αριθμό επιβολής μηδέν ενός singular configuration γραφήματος και στον αριθμό επιβολής μηδέν του πυρήνα του.

Λήμμα 2.29. Έστω H ένα singular configuration γράφημα με πυρήνα (F, x_F) και έστω P η περιφέρεια του H . Τότε,

$$Z(H) \leq Z(F) + Z(Q) + |R|,$$

όπου $R = \{u_j \in V_P : u_j \sim w_k, w_k \in Z(F)\}$ και $Q = \{u_i \in V_P \setminus R : u_j, w_l \not\sim u_i, u_j \in R, w_l \in F \setminus Z(F)\}$.

Απόδειξη. Έστω $Z(F)$ ένα βέλτιστο σύνολο επιβολής μηδέν για τον πυρήνα F , και έστω u_j κορυφές της περιφέρειας P τέτοιες ώστε $u_j \sim w_k, w_k \in Z(F)$ (Το H από Λήμμα 2.24 είναι συνεκτικό γράφημα). Έστω ότι οι κορυφές u_j είναι χρωματισμένες μαύρες. Τότε, οι κορυφές που ανήκουν στο $Z(F)$ μπορούν να επιβάλλουν σε όλες τις άσπρες κορυφές w_i στο F να χρωματιστούν μαύρες. Αν για τις υπόλοιπες κορυφές u_i στην περιφέρεια, $w_i \rightarrow u_i$ ή $u_j \rightarrow u_i$, τότε το $Z(F) + |R|$ είναι ένα σύνολο επιβολής μηδέν για το H . Διαφορετικά διαλέγουμε ένα βέλτιστο σύνολο επιβολής μηδέν, $Z(Q)$, για αυτές τις κορυφές. Αφού $Z(H)$ είναι ένα σύνολο επιβολής μηδέν με τον ελάχιστο αριθμό στοιχείων, $Z(H) \leq Z(F) + Z(Q) + |R|$. \square

Πρόταση 2.30. Έστω ένα singular configuration γράφημα με πυρήνα (F, x_F) . Τότε, $Z(H) \leq 2Z(F) - 1$.

Απόδειξη. Από Λήμμα 2.29, $Z(H) \leq Z(F) + Z(Q) + |R|$, όπου Q και R είναι σύνολα τα οποία περιλαμβάνουν κορυφές της περιφέρειας P . Προφανώς, $Z(Q) + |R| \leq |P|$. Αφού $|P| = M(F) - 1$ και $M(F) \leq Z(F)$, συνεπάγεται ότι $Z(H) \leq 2Z(F) - 1$. \square

2.3 Μέγιστος πυρήνας σε ελάχιστη βάση

Θα κλείσουμε το κεφάλαιο αυτό της παρούσας διατριβής με κάποια επιπλέον συμπεράσματα σχετικά με τον αριθμό επιβολής μηδέν μέγιστου πυρήνα σε ελάχιστη βάση. Επίσης, παρέχουμε μία ικανή και αναγκαία συνθήκη για να είναι ένα γράφημα extremal singular.

Παρατήρηση 2.31. [82] Το σύνολο CV των κορυφών πυρήνα είναι αμετάβλητο για ένα γράφημα G .

Απόδειξη. Μια βάση B για το διανυσματικό χώρο της ιδιοτιμής $\lambda = 0$ μπορεί να μετατραπεί σε μια άλλη B' , με γραμμικούς συνδυασμούς των διανυσμάτων του B . Όμως, η συλλογή των θέσεων των μη-μηδενικών εισόδων είναι ίδια για όλες τις βάσεις. Άρα, ο διαχωρισμός των κορυφών $V(G)$ σε CV και core-forbidden κορυφές $V(G) \setminus CV$ είναι ανεξάρτητος από τη βάση που χρησιμοποιείται στο διανυσματικό χώρο της ιδιοτιμής $\lambda = 0$. \square

Ορισμός 2.32. Έστω ότι το $wt(u)$ δηλώνει το βάρος (τον αριθμό των μη-μηδενικών εισόδων) του διανύσματος $u \in \mathbb{R}^n$. Αν u_1, u_2, \dots, u_n είναι τα διανύσματα σε μια βάση του $Ker(A)$ ενός $n \times n$ πραγματικού πίνακα A , σε μια μη-φθίνουσα σειρά βάρους, έτσι ώστε $\sum wt(u_i)$ είναι ελάχιστο, τότε η βάση καλείται ελάχιστη βάση (minimal basis) και συμβολίζεται με $Bmin$.

Η εξίσωση $Gx = 0$, για τη μηδενική ιδιοτιμή $\lambda = 0$, ορίζει ότι το άθροισμα των εισόδων του x , που αντιστοιχούν στους γείτονες οποιασδήποτε κορυφής του G , είναι μηδέν. Αυτό είναι γνωστό και ως κανόνας μηδενικού-αθροίσματος (zero-sum rule).

Λήμμα 2.33. [82] *Αν η πολλαπλότητα μηδενός, $\eta(G)$, είναι $\eta(G) > k \geq 1$, τότε υπάρχει $x \in Ker(G)$, τέτοιο ώστε, το x έχει μηδενικές εισόδους σε οποιοσδήποτε k προκαθορισμένες θέσεις.*

Το παραπάνω Λήμμα εγγυάται ένα $x \in Ker(G)$ με μηδενικές εισόδους σε οποιοσδήποτε $\eta(G) - 1$ καθορισμένες θέσεις.

Λήμμα 2.34. [82] *Αν $x \in Bmin$ τότε το x έχει τουλάχιστον $\eta(G) - 1$ μηδενικές εισόδους.*

Πρόταση 2.35. [82] *Αν ο αριθμός των μηδενικών εισόδων σε ένα διάνυσμα $x \in Bmin$ είναι μικρότερο του k , τότε $\eta(G) \leq k$.*

Απόδειξη. Σύμφωνα με το Λήμμα 2.34, όλα τα διανύσματα $x \in Bmin$ έχουν $\eta(G) - 1$ ή παραπάνω μηδενικές εισόδους, έτσι ώστε $k - 1 \geq \eta(G) - 1$, όπως απαιτείται. \square

Ορισμός 2.36. Έστω $Bmin = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$, μία ελάχιστη βάση για το διανυσματικό χώρο $\varepsilon_0(A)$, όπου A ο πίνακας γειτνίασης ενός ιδιάζοντος γραφήματος G . Η ακολουθία των πυρήνων που αντιστοιχούν σε αυτή, $B' = \{F_{u_1}, F_{u_2}, \dots, F_{u_n}\}$, ονομάζεται βάση πυρήνων του G . Ο τελευταίος όρος F_{u_n} ορίζεται ως πλάτος-πυρήνα, $\tau(G)$, του γραφήματος G .

Πρόταση 2.37. [82] *Για ένα γράφημα G με n κορυφές, πολλαπλότητα μηδενός η και πλάτος-πυρήνα τ , ισχύει:*

$$\tau + \eta \leq n + 1.$$

Απόδειξη. Από τον ορισμό του πλάτους-πυρήνα τ , υπάρχει $y \in Bmin$ που έχει τ μηδενικές εισόδους. Αν το z δηλώνει τον αριθμό των μηδενικών εισόδων στο y , τότε $\tau + z = n$. Από Πρόταση 2.35, $z \geq \eta(G) - 1$. Άρα, $\tau + \eta \leq n + 1$, όπως απαιτείται. \square

Πόρισμα 2.38. [82] *Ένα ιδιάζον γράφημα G , με πολλαπλότητα μηδενός η , δεν μπορεί να έχει πυρήνα F_t τάξης t , αν $t > n + 1 - \eta$.*

Απόδειξη. Άμεση συνέπεια της Πρότασης 2.37. \square

Ορισμός 2.39. Έστω n η τάξη ενός ιδιάζοντος γραφήματος G . Αν η πολλαπλότητα μηδενός είναι η και το πλάτος-πυρήνα είναι τ , τότε το G ονομάζεται extremal singular αν $\eta + \tau = n + 1$.

Πρόταση 2.40. [82] Ένα γράφημα G είναι *extremal singular* με πολλαπλότητα μηδενός η , αν και μόνο αν, είναι γράφημα-πυρήνας, και ο μεγαλύτερος πυρήνας σε μια ελάχιστη βάση πυρήνων είναι ένα *nut* γράφημα N , και υπάρχουν ακριβώς $\eta - 1$ κορυφές του G που δεν ανήκουν στο N .

Ορισμός 2.41. Έστω G γράφημα με χώρο πυρήνων $C_0(G)$. Ο πυρήνας με τη μεγαλύτερη τάξη, σε μια ελάχιστη βάση του $C_0(G)$, καλείται *μέγιστος πυρήνας σε ελάχιστη βάση* (min-max core).

Πριν προχωρήσουμε σε κάποια αποτελέσματα για μέγιστους πυρήνες σε ελάχιστη βάση χρησιμοποιώντας τον αριθμό επιβολής μηδέν, και στη διατύπωση μίας ικανής και αναγκαίας συνθήκης για να είναι ένα γράφημα *extremal singular*, ορίζουμε την εξής ποσότητα:

$$mz(G) = |G| - Z(G).$$

Πρόταση 2.42. Έστω G γράφημα και $M(G) = Z(G)$. Τότε, ο μέγιστος πυρήνας του σε μια ελάχιστη βάση έχει το πολύ $mz(G) + 1$ κορυφές.

Απόδειξη. Για οποιοδήποτε γράφημα G , n κορυφών, πολλαπλότητας μηδενός $M(G)$, και αριθμό min-max πυρήνα $\tau(G)$, ισχύει:

$$\tau(G) + M(G) \leq n + 1.$$

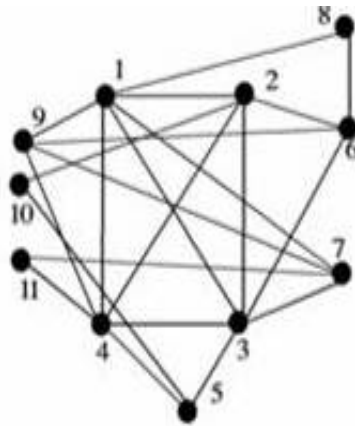
Αφού $M(G) = Z(G)$ και $mz(G) = |G| - Z(G)$, προκύπτει ότι ο min-max πυρήνας έχει το πολύ $mz(G) + 1$ κορυφές. \square

Θεώρημα 2.43. Έστω G γράφημα και $M(G) = Z(G)$. Το G είναι *extremal singular*, αν και μόνο αν, ο μέγιστος πυρήνας σε μια ελάχιστη βάση έχει ακριβώς $mz(G) + 1$ κορυφές.

Απόδειξη. Έστω ότι το G είναι *extremal singular* γράφημα. Τότε, $\tau(G) + M(G) = n + 1$. Αφού $M(G) = Z(G)$, ο min-max πυρήνας, $\tau(G)$, έχει $\tau(G) = (n - Z(G)) + 1$ κορυφές, δηλαδή, $\tau(G) = mz(G) + 1$.

Αντιστρόφως, έστω ότι ο πυρήνας έχει $mz(G) + 1$ κορυφές. Τότε $\tau(G) = n - Z(G) + 1$, οπότε το γράφημα G είναι *extremal singular*. \square

Παράδειγμα 2.44. Στο Σχήμα 2.6, $M(G) = Z(G) = 5$. Ένα βέλτιστο σύνολο επιβολής μηδέν είναι το $Z(G) = \{3, 5, 9, 10, 11\}$ και μία χρονολογική λίστα δυνάμεων του $Z(G)$ είναι η $\{5 \rightarrow 4, 10 \rightarrow 2, 9, 11 \rightarrow 7 \rightarrow 1 \rightarrow 8 \rightarrow 6\}$. Ο μέγιστος πυρήνας του γραφήματος έχει $mz(G) + 1 = (11 - 5) + 1 = 7$ κορυφές. Το υπογράφημα με



ΣΧΗΜΑ 2.6

κορυφές από 1 έως 7 είναι ένας μέγιστος πυρήνας, ο οποίος είναι και πυτ γράφημα.

Κεφάλαιο 3

Ενέργεια ιδιαζόντων γραφημάτων

3.1 Ενέργεια γραφημάτων

Η ενέργεια γραφημάτων είναι μία έννοια που τέθηκε πρώτη φορά από τον Ivan Gutman το 1978 [37] και προέρχεται από τη θεωρητική Χημεία (Hückel energy). Μέχρι και πριν από λίγα χρόνια η έννοια της ενέργειας γραφημάτων δεν είχε προκαλέσει το ενδιαφέρον των μαθηματικών. Την τελευταία δεκαετία όμως έχει υπάρξει πλούσια βιβλιογραφία από διάφορους συγγραφείς (βλ. [12], [68]). Αυτό κυρίως οφείλεται στη συνειδητοποίηση ότι η "χημική ενέργεια", όπως αυτή διατυπώθηκε από τον Hückel, διαφέρει σε πολλές περιπτώσεις από τη "μαθηματική ενέργεια", όπως επισήμανε ο Fowler [32]. Η βασική διαφορά είναι ότι η "χημική ενέργεια" λαμβάνει υπόψη συγκεκριμένες συνθήκες για τα μόρια που εξετάζει ενώ η "μαθηματική ενέργεια" εκφράζει όλα τα γραφήματα χωρίς να κάνει περιττές υποθέσεις.

Σε αυτή την ενότητα παρουσιάζουμε τα σημαντικότερα αποτελέσματα όσον αφορά την ενέργεια γραφημάτων.

Ορισμός 3.1. Έστω G γράφημα με n κορυφές και ιδιοτιμές $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$. Ορίζουμε ως ενέργεια γραφήματος το άθροισμα των απολύτων τιμών των ιδιοτιμών του πίνακα γειτνίασης του γραφήματος, δηλαδή:

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

Παρατήρηση 3.2. Σε κάποια γραφήματα είναι γνωστό το φάσμα των ιδιοτιμών τους και κατά συνέπεια είναι άμεσος ο υπολογισμός της ενέργειάς τους. Για παράδειγμα, η ενέργεια του μονοπατιού P_n είναι:

(i) $E(P_n) = \frac{2}{\sin \frac{\pi}{2(n+1)}} - 2$, αν $n \equiv 0 \pmod{2}$,

$$(ii) E(P_n) = \frac{2\cos\frac{\pi}{2(n+1)}}{\sin\frac{\pi}{2(n+1)}} - 2, \text{ αν } n \equiv 1(\text{mod}2).$$

Παρακάτω αναφέρουμε δύο από τις σημαντικότερες ιδιότητες των ιδιοτιμών του πίνακα γειτνίασης ενός γραφήματος.

(i) Το πλήθος των κλειστών δρόμων μήκους k σε ένα γράφημα G είναι $\sum_i \lambda_i^k$.

(ii) Θεώρημα πεπλεγμένων ιδιοτιμών (Interlacing Theorem [79]):

Έστω G γράφημα με φάσμα $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ και έστω ότι το φάσμα του παραγόμενου υπογραφήματος $G - u_1$, αν αφαιρέσουμε την κορυφή u_1 , είναι $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_{n-1}$. Τότε,

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

Κάποιες σχέσεις που θα χρησιμοποιήσουμε σε αρκετές από τις παρακάτω αποδείξεις είναι οι:

$$\sum_i \lambda_i = 0,$$

$$\sum_i \lambda_i^2 = 2m,$$

και ως άμεση συνέπεια αυτών,

$$\sum_{i < j} \lambda_i \lambda_j = -m.$$

Παρατήρηση 3.3. Έστω $G - u$ το παραγόμενο υπογράφημα του γραφήματος G αν αφαιρέσουμε μία κορυφή u . Τότε από το θεώρημα πεπλεγμένων ιδιοτιμών,

$$E(G - u) \leq E(G).$$

Ο McClelland [66] έδωσε τα παρακάτω φράγματα για την ενέργεια ενός γραφήματος G με n κορυφές και m πλευρές:

$$\sqrt{2m + n(n-1) |\det A|^{2/n}} \leq E(G) \leq \sqrt{2mn}.$$

Για το άνω φράγμα εφαρμόζουμε την ανισότητα Cauchy-Schwarz στα διανύσματα $(1, 1, \dots, 1)$ και $(|\lambda_1|, |\lambda_2|, \dots, |\lambda_n|)$ ώστε

$$E(G) \leq \sqrt{n} \sqrt{\sum_i \lambda_i^2} = \sqrt{n} \sqrt{2m} = \sqrt{2mn}.$$

Για το κάτω φράγμα χρησιμοποιούμε την ανισότητα αριθμητικού-γεωμετρικού μέσου:

$$\begin{aligned} E^2(G) &= \left(\sum_i |\lambda_i|\right)^2 = \sum_i |\lambda_i|^2 + 2 \sum_{i<j} |\lambda_i \lambda_j| \\ &= 2m + n(n-1)AM(|\lambda_i \lambda_j|) \geq 2m + n(n-1)GM(|\lambda_i \lambda_j|), \end{aligned}$$

όπου

$$\begin{aligned} GM(|\lambda_i \lambda_j|) &= \left(\prod |\lambda_i \lambda_j|\right)^{2/(n^2-n)} = \left(\prod |\lambda_i|^{n-1}\right)^{2/(n^2-n)} \\ &= \left(\prod |\lambda_i|\right)^{2/n} = |\det A|^{2/n}. \end{aligned}$$

Αν υποθέσουμε ότι $\det A \neq 0$, τότε το γράφημα G θα έχει τουλάχιστον $n/2$ πλευρές και αφού η ορίζουσα του πίνακα γειτνίασης ενός γραφήματος είναι ένας ακέραιος αριθμός, έχουμε

$$E(G) \geq \sqrt{2m + n(n-1)} \geq n.$$

Η παραπάνω ανισότητα δίνει ένα κάτω φράγμα για την ενέργεια γραφήματος λαμβάνοντας υπόψη μόνο τις κορυφές του.

Ένα άνω φράγμα για την ενέργεια που περιλαμβάνει μόνο τις κορυφές του γραφήματος είναι:

$$E(G) \leq \sqrt{2mn} \leq \sqrt{2 \cdot n(n-1)/2 \cdot n} = n\sqrt{n-1}.$$

Θεώρημα 3.4. [14] Έστω G ένα γράφημα με m πλευρές. Τότε

$$2\sqrt{m} \leq E(G) \leq 2m.$$

Απόδειξη.

$$\begin{aligned} E^2(G) &= 2m + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq n} |\lambda_i \lambda_j| \\ &\geq 2m + 2 \left| \sum_{1 \leq i < j \leq n} \lambda_i \lambda_j \right| \\ &= 2m + 2|-m| = 4m. \end{aligned}$$

Για το άνω φράγμα, γνωρίζουμε ότι ο μεγαλύτερος αριθμός κορυφών σε ένα γράφημα με m πλευρές και χωρίς μεμονωμένες κορυφές είναι $2m$ και το mK_2 είναι το μοναδικό γράφημα που το πετυχαίνει. Έτσι,

$$E(G) \leq \sqrt{2mn} \leq \sqrt{2m \cdot 2m} = 2m. \quad \square$$

Θεώρημα 3.5. [40] Αν G γράφημα χωρίς μεμονωμένες κορυφές, τότε

$$E(G) \geq 2\sqrt{n-1}.$$

Η ισότητα ισχύει αν το G είναι star γράφημα.

Απόδειξη. Αν το G είναι ένα συνεκτικό γράφημα, τότε $m \geq n-1$ και $E(G) \geq 2\sqrt{m} \geq 2\sqrt{n-1}$. Την ισότητα πετυχαίνει ένα πλήρες διμερές γράφημα με $m = n-1$ πλευρές.

Αν το G δεν είναι συνεκτικό γράφημα, αλλά έχει p συνιστώσες:

$$E(G) \geq 2(\sqrt{n_1-1} + \sqrt{n_2-1} + \dots + \sqrt{n_p-1}) \geq 2\sqrt{n-1+(p-1)^2}. \quad \square$$

Από το παραπάνω Θεώρημα προκύπτει ότι ανάμεσα σε όλα τα γραφήματα με n κορυφές, το star γράφημα έχει την ελάχιστη ενέργεια.

Για την ενέργεια γραφημάτων έχει δοθεί ο παρακάτω τύπος ολοκληρώματος από τον Coulson:

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

όπου $\phi(x)$ είναι το χαρακτηριστικό πολυώνυμο του γραφήματος G , και $\phi'(x)$ η πρώτη παράγωγός του. Σαν συνέπεια της παραπάνω σχέσης, έχουμε για τη διαφορά της ενέργειας δύο γραφημάτων G_1, G_2 με το ίδιο πλήθος κορυφών:

$$E(G_1) - E(G_2) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \log \frac{\phi_1(ix)}{\phi_2(ix)} dx.$$

Γνωρίζουμε ότι το χαρακτηριστικό πολυώνυμο ενός γραφήματος μπορεί να γραφτεί με τον εξής τρόπο:

$$\phi_j = \sum_L (-1)^{\text{comp}(L)} 2^{\text{cycl}(L)}, \quad j = 1, 2, \dots, n,$$

όπου L είναι όλα τα υπογραφήματα του G που αποτελούνται από, ξένες μεταξύ τους, πλευρές και κύκλους και καθένα από τα οποία έχει ακριβώς j κορυφές. Ακόμη, $\text{comp}(L)$ είναι ο αριθμός των συνιστωσών του και $\text{cycl}(L)$ είναι κύκλοι στο L . Αν G είναι ένα διμερές γράφημα, τότε το χαρακτηριστικό πολυώνυμο του G με βάση τα παραπάνω είναι

$$\phi_G = x^n + \sum_k (-1)^k b(G, 2k) x^{n-2k}.$$

Η ενέργεια του G είναι

$$E(G) = \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} x^{-2} \log(1 + \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} b(G, k)x^{2k}) dx.$$

Πρόταση 3.6. [12] Για κάθε δέντρο T ,

$$E(S_n) \leq E(T) \leq E(P_n),$$

όπου S_n είναι ένα star γράφημα και P_n ένα μονοπάτι με n κορυφές.

Θεώρημα 3.7. [59] Αν G είναι ένα γράφημα με n κορυφές, m πλευρές και $2m \geq n$, τότε ισχύει η ανισότητα

$$E(G) \leq \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1)[2m - (\frac{2m}{n})^2]}.$$

Η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν το G είναι το γράφημα $\frac{n}{2}K_2$, ή το K_n ή ένα μη-πλήρες, συνεκτικό, ισχυρά κανονικό γράφημα, με δύο διακεκριμένες ιδιοτιμές οι οποίες έχουν απόλυτη τιμή ίση με $\sqrt{(2m - (\frac{2m}{n})^2)/(n-1)}$.

Απόδειξη. Αφού,

$$\sum_{i=2}^n \lambda_i^2 = 2m - \lambda_1^2,$$

αν εφαρμόσουμε τη ανισότητα Cauchy-Schwarz στα διανύσματα $(1, \dots, 1)$ και $(|\lambda_2|, \dots, |\lambda_n|)$ τότε,

$$\sum_{i=2}^n |\lambda_i| \leq \sqrt{(n-1)(2m - \lambda_1^2)}.$$

Έτσι,

$$E(G) \leq \lambda_1 + \sqrt{(n-1)(2m - \lambda_1^2)}.$$

Η συνάρτηση

$$F(x) = x + \sqrt{(n-1)(2m - x^2)}$$

ελαττώνεται στο διάστημα $\sqrt{\frac{2m}{n}} < x \leq \sqrt{2m}$, και αφού $2m \geq n$,

$$\sqrt{\frac{2m}{n}} \leq \frac{2m}{n} \leq \lambda_1 \leq \sqrt{2m}.$$

Έτσι $F(\lambda_1) \leq F(2m/n)$, οπότε έχουμε

$$E(G) \leq \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1)[2m - (\frac{2m}{n})^2]}.$$

Από την ισότητα $F(\lambda_1) = F(2m/n)$, ισχύει ότι $\lambda_1 = \frac{2m}{n}$. Από την ανισότητα Cauchy-Schwarz θα πρέπει να ισχύει

$$|\lambda_i| = \sqrt{\frac{2m - (\frac{2m}{n})^2}{n-1}}.$$

Κατά συνέπεια το G είναι κανονικό γράφημα βαθμού $2m/n$ και είτε:

- (i) Το G έχει δύο ιδιοτιμές με ίσες απόλυτες τιμές, δηλαδή $G \cong \frac{n}{2}K_2$.
- (ii) Το G έχει δύο ιδιοτιμές με διακεκριμένες απόλυτες τιμές, δηλαδή $G \cong K_n$.
- (iii) Το G έχει τρεις ιδιοτιμές με διακεκριμένες απόλυτες τιμές, δηλαδή το G είναι ένα μη-πλήρες, συνεκτικό, ισχυρά κανονικό γράφημα. \square

Πόρισμα 3.8. [59] Αν G είναι ένα γράφημα με n κορυφές, m πλευρές και $2m \geq n$ τότε ισχύει η ανισότητα

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

Απόδειξη. Αν στο Θεώρημα 3.7 μεγιστοποιήσουμε τις m πλευρές, δηλαδή $m = \frac{n^2 + n\sqrt{n}}{4}$, παίρνουμε ένα άνω φράγμα για την ενέργεια το οποίο περιλαμβάνει μόνο τις κορυφές του γραφήματος, $E(G) \leq \frac{n(\sqrt{n}+1)}{2}$.

Η ισότητα ισχύει για ένα ισχυρά κανονικό γράφημα με παραμέτρους $(n, (n+\sqrt{n})/2, (n+2\sqrt{n})/4, (n+2\sqrt{n})/4)$. \square

Θεώρημα 3.9. [59] Αν G είναι ένα διμερές γράφημα με $n > 2$ κορυφές, m πλευρές και $2m \geq n$, τότε ισχύει η ανισότητα

$$E(G) \leq 2\left(\frac{2m}{n}\right) + \sqrt{(n-2)\left[2m - 2\left(\frac{2m}{n}\right)^2\right]}.$$

Η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν ισχύει τουλάχιστον ένα από τα παρακάτω:

- (i) $n = 2m$ και $G = mK_2$.
- (ii) $n = 2t$, $m = t^2$ και $G = K_{t,t}$.
- (iii) $n = 2u$, $2\sqrt{m} < n < 2m$ και G είναι ο πίνακας πρόσπτωσης ενός συμμετρικού $2 - (u, k, \lambda)$ σχεδιασμού με $k = \frac{2m}{n}$ και $\lambda = \frac{k(k-1)}{u-1}$.

Η απόδειξη στο παραπάνω θεώρημα είναι όμοια με αυτή του θεωρήματος 3.7, αφού λάβουμε υπόψη το συμμετρικό φάσμα των διμερών γραφημάτων.

Θεώρημα 3.10. [60] Αν το γράφημα G είναι διμερές και έχει n κορυφές, τότε

$$E(G) \leq \frac{1}{\sqrt{8}}n(\sqrt{n} + \sqrt{2}).$$

Ορίζουμε ως βαθμό δευτέρας τάξης, t_i , μίας κορυφής v_i το άθροισμα των βαθμών των κορυφών που γειτνιάζουν με τη v_i . Ένα γράφημα θα ονομάζεται ψευδό-κανονικό αν κάθε κορυφή του, v_i , έχει τον ίδιο μέσο βαθμό $\frac{t_i}{d_i}$, όπου d_i ο βαθμός της κορυφής. Ακόμη, ένα διμερές γράφημα $G(X, Y)$ θα ονομάζεται ψευδό-ημικανονικό, αν υπάρχουν δύο σταθερές, p_x, p_y , τέτοιες ώστε κάθε κορυφή του συνόλου X έχει τον ίδιο μέσο βαθμό $\frac{t_i}{d_i} = p_x$, και κάθε κορυφή του συνόλου Y έχει τον ίδιο μέσο βαθμό p_y .

Θεώρημα 3.11. [102] Έστω G ένα μη-κενό γράφημα με n κορυφές, m πλευρές, ακολουθία βαθμών d_1, d_2, \dots, d_n και ακολουθία βαθμών δευτέρας τάξης, t_1, t_2, \dots, t_n . Τότε,

$$E(G) \leq \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n t_i^2}{\sum_{i=1}^n d_i^2}} + \sqrt{(n-1)(2m - \frac{\sum_{i=1}^n t_i^2}{\sum_{i=1}^n d_i^2})}.$$

Η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν ισχύει τουλάχιστον ένα από τα παρακάτω:

(i) $G \cong \frac{n}{2}K_2$.

(ii) $G \cong K_n$.

(iii) Το G είναι ένα συνεκτικό, μη-διμερές p -ψευδό-κανονικό γράφημα, με τρεις διακεκριμένες ιδιοτιμές $(p, \sqrt{\frac{2m-p^2}{n-1}}, -\sqrt{\frac{2m-p^2}{n-1}})$, όπου $p > \sqrt{\frac{2m}{n}}$.

Απόδειξη. Έστω $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ οι ιδιοτιμές του γραφήματος G . Από την ανισότητα Cauchy-Schwarz:

$$\sum_{i=2}^n |\lambda_i| \leq \sqrt{(n-1)(2m - \lambda_1^2)}.$$

Έτσι,

$$E(G) \leq \lambda_1 + \sqrt{(n-1)(2m - \lambda_1^2)}.$$

Εύκολα διαπιστώνουμε ότι, η συνάρτηση $F(x) = x + \sqrt{(n-1)(2m - x^2)}$ ελαττώνεται στο διάστημα $\sqrt{\frac{2m}{n}} < x \leq \sqrt{2m}$. Γνωρίζουμε ότι [99]:

$$\lambda_1 \geq \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n t_i^2}{\sum_{i=1}^n d_i^2}},$$

και η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν το G είναι ένα ψευδό-κανονικό γράφημα ή ένα ψευδό-ημικανονικό διμερές γράφημα. Λαμβάνοντας υπόψη ότι,

$$t_1 + t_2 + \dots + t_n = d_1^2 + d_2^2 + \dots + d_n^2$$

έχουμε,

$$\lambda_1 \geq \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n t_i^2}{\sum_{i=1}^n d_i^2}} \geq \sqrt{\frac{(\sum_{i=1}^n t_i)^2}{n \sum_{i=1}^n d_i^2}} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i^2} \geq \sqrt{\frac{2m}{n}}.$$

Έτσι,

$$F(\lambda_1) \leq F\left(\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n t_i^2}{\sum_{i=1}^n d_i^2}}\right)$$

το οποίο συνεπάγεται ότι,

$$E(G) \leq \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n t_i^2}{\sum_{i=1}^n d_i^2}} + \sqrt{(n-1)\left(2m - \frac{\sum_{i=1}^n t_i^2}{\sum_{i=1}^n d_i^2}\right)}.$$

Αν το G είναι ένα από τα τρία γραφήματα που περιγράφονται για την ισότητα, τότε είναι εύκολο να διαπιστώσουμε ότι πράγματι ισχύει η ισότητα στην παραπάνω σχέση. Αντίστροφα, αν ισχύει η ισότητα τότε:

$$\lambda_1 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n t_i^2}{\sum_{i=1}^n d_i^2}},$$

το οποίο συνεπάγεται ότι το G είναι ένα ψευδό-κανονικό γράφημα ή ένα ψευδό-ημικανονικό διμερές γράφημα. Επιπλέον,

$$|\lambda_i| = \sqrt{\frac{2m - \lambda_1^2}{n-1}}, \quad 2 \leq i \leq n.$$

Έχουμε τις παρακάτω τρεις δυνατότητες:

(i) Το γράφημα G έχει δύο διακεκριμένες ιδιοτιμές. Αν οι διακεκριμένες ιδιοτιμές έχουν την ίδια απόλυτη τιμή, τότε

$$\lambda_1 = |\lambda_i| = \sqrt{\frac{2m - \lambda_1^2}{n-1}}, \quad 2 \leq i \leq n-1.$$

Τότε όμως [20],

$$|\lambda_i| = \sqrt{\frac{2m - \lambda_1^2}{n-1}} = 1.$$

Έτσι $2m = n$, το οποίο συνεπάγεται ότι $G \cong \frac{n}{2}K_2$.

(ii) Αν οι δύο διακεκριμένες ιδιοτιμές του G έχουν διαφορετικές απόλυτες τιμές, τότε $\lambda_i = -1$ ($2 \leq i \leq n$). Έτσι, το G είναι ένα πλήρες γράφημα τάξης n .

(iii) Το γράφημα G έχει τρεις διακεκριμένες ιδιοτιμές.

Σε αυτή την περίπτωση $\lambda_1 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n t_i^2}{\sum_{i=1}^n d_i^2}}$, και $|\lambda_i| = \sqrt{\frac{2m - \lambda_1^2}{n-1}}$ ($2 \leq i \leq n$). Επιπλέον, $\lambda_1 > \lambda_i$ και $\lambda_i \neq 0$.

Επομένως, το G είναι ένα συνεκτικό μη-διμερές p -ψευδό-κανονικό γράφημα με τρεις διακεκριμένες ιδιοτιμές $(p, \sqrt{\frac{2m-p^2}{n-1}}, -\sqrt{\frac{2m-p^2}{n-1}})$, όπου $p = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n t_i^2}{\sum_{i=1}^n d_i^2}} > \sqrt{\frac{2m}{n}}$. \square

Θεώρημα 3.12. [102] Έστω G ένα μη-κενό διμερές γράφημα με $n > 2$ κορυφές, m πλευρές, ακολουθία βαθμών d_1, d_2, \dots, d_n και ακολουθία βαθμών δευτέρας τάξης, t_1, t_2, \dots, t_n . Τότε,

$$E(G) \leq 2\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n t_i^2}{\sum_{i=1}^n d_i^2}} + \sqrt{(n-2)(2m - \frac{2\sum_{i=1}^n t_i^2}{\sum_{i=1}^n d_i^2})}.$$

Η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν ισχύει τουλάχιστον ένα από τα παρακάτω:

(i) $G \cong \frac{n}{2}K_2$.

(ii) $G \cong K_{t_1, t_2} \cup (n - t_1 - t_2)K_1$, όπου $t_1 t_2 = m$.

(iii) Το G είναι ένα συνεκτικό (p_x, p_y) -ψευδό-ημικανονικό γράφημα, με τέσσερις διακεκριμένες ιδιοτιμές $(\sqrt{p_x p_y}, \sqrt{\frac{2m-2p_x p_y}{n-2}}, -\sqrt{\frac{2m-2p_x p_y}{n-2}}, -\sqrt{p_x p_y})$, όπου $\sqrt{p_x p_y} > \sqrt{\frac{2m}{n}}$.

Απόδειξη. Η απόδειξη είναι όμοια με αυτή του Θεωρήματος 3.11. \square

Αν θεωρήσουμε τις ιδιάζουσες τιμές (singular values) του πίνακα γειτνίασης A , $\sigma_1(A) \geq \sigma_2(A) \geq \dots$, τότε μπορούμε να εκφράσουμε την ενέργεια του γραφήματος ως

$$E(G) = \sigma_1(A) + \sigma_2(A) + \dots$$

Θεώρημα 3.13. [25] Έστω A, B δύο $n \times n$ πίνακες. Τότε,

$$\sum_{i=1}^n \sigma_i(A+B) \leq \sum_{i=1}^n \sigma_i(A) + \sum_{i=1}^n \sigma_i(B).$$

Επιπλέον, η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν υπάρχει ένας ορθογώνιος πίνακας P , τέτοιος ώστε, PA και PB είναι θετικά ημιορισμένοι.

Απόδειξη. Από πολική παραγοντοποίηση, υπάρχει ένας ορθογώνιος πίνακας P τέτοιος ώστε $P(A+B) \geq 0$. Τότε,

$$\sum_{i=1}^n \sigma_i(A+B) = \sum_{i=1}^n \sigma_i(P(A+B))$$

$$\begin{aligned}
&= \operatorname{tr} P(A+B) \\
&= \operatorname{tr} \left(\frac{PA + PB + (PA)^* + (PB)^*}{2} \right) \\
&= \operatorname{tr} \left(\frac{PA + (PA)^*}{2} \right) + \operatorname{tr} \left(\frac{PB + (PB)^*}{2} \right) \\
&\leq \operatorname{tr} |PA| + \operatorname{tr} |PB| \\
&= \operatorname{tr} |A| + \operatorname{tr} |B| \\
&= \sum_{i=1}^n \sigma_i(A) + \sum_{i=1}^n \sigma_i(B).
\end{aligned}$$

Η ισότητα ισχύει, αν και μόνο αν, $\operatorname{tr} \left(\frac{PA + (PA)^*}{2} \right) = \operatorname{tr} |PA|$ και $\operatorname{tr} \left(\frac{PB + (PB)^*}{2} \right) = \operatorname{tr} |PB|$, το οποίο συνεπάγεται ότι οι πίνακες PA και PB είναι θετικά ημιορισμένοι. \square

Παρατήρηση 3.14. Στην Παρατήρηση 3.3, είδαμε ότι η ενέργεια του γραφήματος ελαττώνεται αν αφαιρέσουμε μία οποιαδήποτε κορυφή του. Δεν ισχύει όμως το ίδιο και αν αφαιρέσουμε μία πλευρά του γραφήματος. Σε αυτή την περίπτωση, η ενέργεια μπορεί να αυξηθεί, να μειωθεί ή να παραμείνει ίδια.

Ας θεωρήσουμε για παράδειγμα το πλήρες διμερές γράφημα $K_{2,3}$, το οποίο ως γνωστό έχει τις μη-μηδενικές ιδιοτιμές $\sqrt{6}$, $-\sqrt{6}$ στο φάσμα του.

Αν αφαιρέσουμε μία οποιαδήποτε πλευρά του, τότε το φάσμα των ιδιοτιμών του είναι $(-2.136, 2.136, -0.662, 0.662, 0)$, που σημαίνει ότι η ενέργεια του γραφήματος αυξάνεται με την αφαίρεση μίας πλευράς.

Στην περίπτωση του πλήρους διμερούς γραφήματος $K_{2,2}$ όμως, η αφαίρεση μίας πλευράς έχει ως αποτέλεσμα να μειώνεται η ενέργεια του γραφήματος. Πράγματι, γνωρίζουμε ότι το $K_{2,2}$ έχει ως μη μηδενικές ιδιοτιμές τις $-2, 2$. Αν αφαιρέσουμε οποιαδήποτε πλευρά του, το παραγόμενο υπογράφημα είναι το μονοπάτι P_3 , το οποίο γνωρίζουμε ότι έχει τις μη-μηδενικές ιδιοτιμές $-\sqrt{2}$, και $\sqrt{2}$.

Τέλος, ας θεωρήσουμε το γράφημα με πίνακα γειτνίασης:

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

Το φάσμα των ιδιοτιμών του είναι $(2.732, 1.414, 0, -0.732, -1.414, -2)$. Αν αφαιρέσουμε την πλευρά $\{3, 4\}$, τότε το φάσμα του είναι $(2.414, 1.732, -0.414, -1, -1, -1.732)$ και $E(G) = E(G - \{3, 4\}) = 8.292$, δηλαδή η ενέργεια του γραφήματος παραμένει ίδια. Στο κεφάλαιο 3.2.3 θα αναφερθούμε πιο αναλυτικά στην μεταβολή της ενέργειας μετά την αφαίρεση μίας πλευράς ενός ιδιαζοντος γραφήματος.

Το 1978 ο I. Gutman είχε υποθέσει ότι ανάμεσα σε όλα τα γραφήματα με n κορυφές, το πλήρες γράφημα K_n έχει τη μέγιστη ενέργεια (ίση με $2(n-1)$). Πολύ σύντομα όμως αυτή η υπόθεση διαψεύστηκε από τον C. Godsil.

Ορισμός 3.15. Ένα γράφημα G με n κορυφές και ενέργεια μεγαλύτερη από την ενέργεια του πλήρους γραφήματος K_n καλείται υπερενεργετικό γράφημα (hyperenergetic graph).

Θεώρημα 3.16. [3] Αν G είναι ένα k -κανονικό γράφημα, τότε

$$E(G) \leq k + \sqrt{k(n-1)(n-k)}.$$

Απόδειξη. Από το Θεώρημα 3.7 γνωρίζουμε ότι

$$E(G) \leq \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1)[2m - (\frac{2m}{n})^2]}.$$

Το αποτέλεσμα έπεται από την παραπάνω σχέση, αφού για το k -κανονικό γράφημα $k = \frac{2m}{n}$. □

Αν $k = 3$, το παραπάνω φράγμα γράφεται $E(G) \leq 3 + \sqrt{2(n-1)(n-3)}$. Για να είναι υπερενεργετικό το γράφημα αρκεί το παραπάνω φράγμα να είναι μικρότερο από $2(n-1)$ ή ισοδύναμα $(n-4)^2 \leq 0$, άτοπο. Άρα, όλα τα 3-κανονικά γραφήματα είναι μη-υπερενεργετικά.

Πρόταση 3.17. [77] Το γραμμογράφημα $L(K_n)$ του πλήρους γραφήματος K_n είναι υπερενεργετικό γράφημα για $n \geq 5$.

Απόδειξη. Αν το G είναι ένα κανονικό γράφημα βαθμού r , τότε το χαρακτηριστικό πολυώνυμο του $L(G)$ μπορεί να γραφτεί σε σχέση με το χαρακτηριστικό πολυώνυμο του G ως εξής:

$$\phi_{L(G)} = (x+2)^{n(r-2)/2} \phi_G(x-r+2).$$

Αφού $\phi_{K_n} = (x-n+1)(x+1)^{n-1}$, έχουμε για $n \geq 5$: $E(L(K_n)) = 2n^2 - 6n > n^2 - n - 2 = E(K_{n(n-1)/2})$. □

3.2 Ενέργεια ιδιαζόντων γραφημάτων

Σε αυτό το κεφάλαιο αποδεικνύουμε ότι η αλλαγή στην ενέργεια ενός ιδιαζοντος γραφήματος με την αφαίρεση μίας κορυφής εξαρτάται από την έκταση μηδενός της κορυφής. Με αυτό τον τρόπο βελτιώνουμε το άνω φράγμα για το παραγόμενο υπογράφημα $G - u$. Επιπλέον, δίνουμε κάποια νέα φράγματα για singular configuration γραφήματα που αποτελούν μια σημαντική τάξη των ιδιαζόντων γραφημάτων με πολλαπλότητα μηδενός ίσον με ένα. Τέλος, εξετάζουμε συγκεκριμένα γραφήματα των οποίων αυξάνεται η ενέργεια με την αφαίρεση οποιασδήποτε πλευράς τους, όπως είναι τα πλήρη πολυμερή γραφήματα και ο υπερκύβος με άρτιο αριθμό κορυφών.

3.2.1 Ενέργεια υπογραφημάτων

Έστω G ένα ιδιαζον γράφημα και $G - u$ το παραγόμενο υπογράφημα αν αφαιρέσουμε μία κορυφή u από το G . Σε αυτό το κομμάτι της παρούσας διατριβής, θα βελτιώσουμε το άνω φράγμα για το παραγόμενο υπογράφημα $G - u$ με τη βοήθεια της έκτασης μηδενός της κορυφής u .

Θεώρημα 3.18. Έστω $G = (V, E)$ γράφημα και $u \in V$. Αν $n_u(G) = 1$, τότε

$$E(G - u) \leq E(G).$$

Η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν η κορυφή u είναι μία μεμονωμένη κορυφή.

Απόδειξη. Αν αφαιρώντας την κορυφή u , η πολλαπλότητα μηδενός του γραφήματος μειωθεί κατά ένα, τότε στο φάσμα των γραφημάτων G και $G - u$ έχουμε το ίδιο πλήθος μη-μηδενικών ιδιοτιμών. Από το θεώρημα πεπλεγμένων ιδιοτιμών, $E(G - u) \leq E(G)$.

Θα αποδείξουμε τώρα πότε ισχύει η ισότητα.

Έστω u μία μεμονωμένη κορυφή. Τότε, αφού η u σχετίζεται με μηδενικές εισόδους στον πίνακα γειτνίασης και αντιστοιχεί σε μηδενική ιδιοτιμή στο φάσμα του γραφήματος, η αφαίρεσή της από το γράφημα δεν επηρεάζει το άθροισμα των απολύτων τιμών των μη-μηδενικών ιδιοτιμών του G . Έτσι, $E(G - u) = E(G)$.

Έστω τώρα ότι $E(G) = E(G - u)$ και $n_u(G) = 1$. Τότε $\sum_{i=1}^n |\lambda_i| = \sum_{i=1}^{n-1} |\mu_i|$, δηλαδή αν ταξινομήσουμε μόνο τις μη-μηδενικές ιδιοτιμές σε μη-φθίνουσα σειρά, $\lambda_i = \mu_i, \forall i$ και $\sum |\lambda_i|^2 = \sum |\mu_i|^2$. Είναι γνωστό ότι $\sum \lambda_i^2 = 2m$, για ένα γράφημα G με m πλευρές και έτσι η κορυφή u είναι μία μεμονωμένη κορυφή. \square

Θεώρημα 3.19. Έστω $G = (V, E)$ ένα γράφημα και $u \in V$. Αν $n_u(G) = -1$, τότε

$$E(G - u) \leq E(G) - (|\lambda_l| + |\lambda_m|),$$

όπου λ_l και λ_m η μικρότερη μη-αρνητική και η μεγαλύτερη μη-θετική ιδιοτιμή αντίστοιχα.

Στην περίπτωση όπου G είναι συνεκτικό γράφημα με πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G) = n - 2$, η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν το G είναι ένα star γράφημα και η κορυφή u είναι το κέντρο του star γραφήματος.

Απόδειξη. Αν με την αφαίρεση της κορυφής u η πολλαπλότητα μηδενός αυξηθεί κατά ένα, τότε το παραγόμενο υπογράφημα $G - u$ έχει δύο λιγότερες μη-μηδενικές ιδιοτιμές από το G . Από το θεώρημα πεπλεγμένων ιδιοτιμών, $\lambda_1 \geq \mu_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_l > 0 = \dots = 0 > \lambda_m \geq \mu_m \geq \dots \geq \lambda_n$, και αφού $E(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|$, έχουμε

$$E(G - u) \leq E(G) - (|\lambda_l| + |\lambda_m|).$$

Έστω τώρα ότι, το G είναι ένα star γράφημα με n κορυφές. Τότε, το G έχει δύο μη-μηδενικές ιδιοτιμές με πολλαπλότητα ένα η καθεμία, τις $-\sqrt{n-1}$ και $\sqrt{n-1}$, και $n-2$ μηδενικές ιδιοτιμές. Με την αφαίρεση του κέντρου του γραφήματος, το παραγόμενο υπογράφημα που προκύπτει είναι το κενό γράφημα και η πολλαπλότητα μηδενός αυξάνεται κατά ένα. Έτσι, $E(G - u) = 0 = E(G) - (|\sqrt{n-1}| + |-\sqrt{n-1}|)$.

Ας υποθέσουμε ότι το γράφημα G έχει πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G) = n - 2$. Τότε, αν αυξάνεται η πολλαπλότητα μηδενός με την αφαίρεση μίας κορυφής, το παραγόμενο υπογράφημα έχει $n - 1$ κορυφές και πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G - u) = n - 1$. Είναι γνωστό ότι το μόνο γράφημα με πολλαπλότητα μηδενός ίση με την τάξη του είναι το κενό γράφημα. Έτσι, το G είναι ένα star γράφημα, με την κορυφή u στο κέντρο του, και ισχύει η ισότητα $E(G - u) = E(G) - (|\lambda_l| + |\lambda_m|)$. \square

Παρατήρηση 3.20. Ένα ακόμη παράδειγμα γραφήματος με n κορυφές, που πετυχαίνει την ισότητα στο παραπάνω θεώρημα, είναι το γράφημα το οποίο είναι ένωση m πλήρων γραφήματων K_2 , και $n - 2m$ μεμονωμένων κορυφών. Η ενέργεια του γραφήματος $G = mK_2 \cup (n - 2m)K_1$ είναι $E(G) = m(|-1| + |1|)$. Με την αφαίρεση μίας κορυφής u από το πλήρες γράφημα K_2 , η πολλαπλότητα μηδενός αυξάνεται και η ενέργεια του παραγόμενου γραφήματος $G - u$ είναι $E(G - u) = (m - 1)(|-1| + |1|)$. Έτσι, $E(G - u) = E(G) - (|\lambda_l| + |\lambda_m|)$.

Θεώρημα 3.21. Έστω $G = (V, E)$ γράφημα και $u \in V$. Αν $n_u(G) = 0$ τότε,

$$E(G - u) \leq E(G) - |\lambda_i|,$$

όπου λ_i είναι είτε η μικρότερη μη-αρνητική ή η μεγαλύτερη μη-θετική ιδιοτιμή του G .

Απόδειξη. Για την απόδειξη δουλεύουμε όπως στα παραπάνω θεωρήματα με το θεώρημα πεπλεγμένων ιδιοτιμών. \square

Παράδειγμα 3.22. Παρακάτω δίνουμε ένα παράδειγμα για την ισότητα στο Θεώρημα 3.21. Το φάσμα του γραφήματος G στο Σχήμα 3.1 αριστερά, είναι $\{2, 0, -1, -1\}$, και η ενέργεια του γραφήματος είναι $E(G) = 4$. Με την αφαίρεση της άσπρης κορυφής u , το παραγόμενο υπογράφημα έχει ιδιοτιμές $\{1, 0, -1\}$ και η ενέργεια του $G - u$ είναι $E(G - u) = 2$. Έτσι, $n_u(G) = 0$ και $E(G) - E(G - u) = 2 = \lambda_l$, όπου λ_l είναι η μοναδική μη-αρνητική ιδιοτιμή του G .



ΣΧΗΜΑ 3.1

Παρατήρηση 3.23. Από τα παραπάνω θεωρήματα είναι φανερό ότι, ο τύπος των κορυφών όπως αυτός καθορίζεται από την έκταση μηδενός παίζει σημαντικό ρόλο στην ενέργεια ενός ιδιάζοντος γραφήματος. Παρόλα αυτά, παρόμοια αποτελέσματα μπορούν να προκύψουν και για μη-ιδιάζοντα γραφήματα και κάθε μη-μηδενική ιδιοτιμή λ .

Έστω $G = (V, E)$ γράφημα και $u \in V$. Ας υποθέσουμε ότι $m(G)$ είναι η πολλαπλότητα μίας μη-αρνητικής ιδιοτιμής λ του γραφήματος G , $m(G-u)$ η πολλαπλότητα της λ για το παραγόμενο υπογράφημα $G-u$, και $m_u(G) = m(G) - m(G-u)$ η έκταση κορυφής της ιδιοτιμής λ . Τότε στην περίπτωση όπου $m_u(G) = 0$, μπορούμε να δείξουμε με τη βοήθεια του θεωρήματος πεπλεγμένων ιδιοτιμών ότι:

$$E(G - u) \leq \max \{E(G) - \lambda_l, E(G) - |\lambda_m|\},$$

όπου λ_l (αντίστοιχα λ_m) είναι η μικρότερη θετική (αντίστοιχα μεγαλύτερη αρνητική) ιδιοτιμή του G .

Πόρισμα 3.24. Αν H είναι ένα παραγόμενο υπογράφημα του G , τότε

$$E(H) \leq E(G).$$

Απόδειξη. Άμεση συνέπεια των Θεωρημάτων 3.18-3.21. \square

3.2.2 Ενέργεια ιδιαζόντων γραφημάτων

Στην ενότητα αυτή μελετούμε την ενέργεια των ιδιαζόντων γραφημάτων. Πιο συγκεκριμένα, παρέχουμε κάποια νέα φράγματα για minimal configuration γραφήματα και βελτιώνουμε κάποια ήδη γνωστά φράγματα, στην περίπτωση όπου το γράφημα είναι ιδιάζον.

Πρόταση 3.25. Έστω G ένα minimal configuration γράφημα με τάξη πυρήνα τουλάχιστον τρία. Τότε, $E(G) > 2\sqrt{5}$.

Απόδειξη. Ένα minimal configuration γράφημα, με τάξη πυρήνα τουλάχιστον τρία, έχει το μονοπάτι P_4 σαν ένα παραγόμενο υπογράφημα [86]. Από Πρόσχημα 3.24 και αφού το μονοπάτι P_4 είναι μη-ιδιάζον, $E(G) > 2(\frac{1+\sqrt{5}+\sqrt{5}-1}{2})$. \square

Θεώρημα 3.26. Έστω G ένα minimal configuration γράφημα με πυρήνα F πολλαπλότητας μηδενός $\eta(F)$. Τότε,

$$E(G) \geq E(F) + (\eta(F) - 1)(|\lambda_l| + |\lambda_m|),$$

όπου λ_l και λ_m είναι αντίστοιχα η μικρότερη μη-αρνητική και η μεγαλύτερη μη-θετική ιδιοτιμή του G .

Απόδειξη. Έστω w_i , $i = 1, \dots, \eta(F) - 1$ οι κορυφές της περιφέρειας P . Από Θεώρημα 3.19, αφού $n_{w_i}(G) = -1$:

$$E(G - w_1) \leq E(G) - (|\lambda_l| + |\lambda_m|),$$

όπου λ_l και λ_m είναι αντίστοιχα η μικρότερη μη-αρνητική και η μεγαλύτερη μη-θετική ιδιοτιμή του G . Τότε, από το ίδιο Θεώρημα:

$$E(G - w_1 - w_2) \leq E(G - w_1) - (|\mu_{l-1}| + |\mu_m|),$$

όπου μ_{l-1} και μ_m είναι αντίστοιχα η μικρότερη μη-αρνητική και η μεγαλύτερη μη-θετική ιδιοτιμή του $G - w_1$. Από θεώρημα πεπελεγμένων ιδιοτιμών, αφού $|\mu_{l-1}| \geq |\lambda_l|$ και $|\mu_m| \geq |\lambda_m|$,

$$E(G - w_1 - w_2) \leq E(G - w_1) - (|\mu_{l-1}| + |\mu_m|) \leq E(G) - 2(|\lambda_l| + |\lambda_m|).$$

Είναι προφανές ότι,

$$E(G - w_1 - w_2 - \dots - w_{\eta(F)-1}) \leq E(G) - (\eta(F) - 1)(|\lambda_l| + |\lambda_m|). \quad \square$$

Λήμμα 3.27. [25] Έστω H ένα παραγόμενο υπογράφημα του γραφήματος G , με m πλευρές. Τότε, $E(G) - E(H) \leq E(G - m) \leq E(G) + E(H)$.

Πρόταση 3.28. Έστω G ένα minimal configuration γράφημα με πυρήνα F , περιφέρεια P , και πολλαπλότητα μηδενός του πυρήνα $\eta(F)$. Αν n_F είναι το πλήθος των κορυφών του πυρήνα που είναι γειτονικές με κάποια κορυφή της περιφέρειας και $|\lambda_k|$ είναι η μικρότερη σε απόλυτη τιμή ιδιοτιμή του γραφήματος, τότε:

$$|\lambda_k| < \frac{1}{2\sqrt{8}} \left(1 + \frac{n_F}{\eta(F) - 1}\right) (\sqrt{n_F + \eta(F) - 1} + \sqrt{2}).$$

Απόδειξη. Έστω ότι το πλήθος των πλευρών του πυρήνα F είναι m . Αφού ο πυρήνας F είναι ένα παραγόμενο υπογράφημα του minimal configuration γραφήματος G , από Λήμμα 3.27 $E(G) - E(F) \leq E(G - m)$. Αν αφαιρέσουμε τις πλευρές του πυρήνα, το γράφημα που προκύπτει αποτελείται μόνο από πλευρές μεταξύ του πυρήνα F και της περιφέρειας P . Αφού τα δύο αυτά σύνολα είναι ανεξάρτητα, το παραγόμενο υπογράφημα $G - m$ είναι διμερές. Τότε, από το Θεώρημα 3.10: $E(K_{F,P}) \leq \frac{n}{\sqrt{8}}(\sqrt{n} + \sqrt{2})$. Οι κορυφές του γραφήματος $G - m$ είναι οι $\eta(F) - 1$ κορυφές της περιφέρειας και οι κορυφές του πυρήνα, n_F , που είναι γειτονικές στις κορυφές της περιφέρειας. Από το Θεώρημα 3.26: $E(G) - E(F) > (\eta(F) - 1)(|\lambda_l| + |\lambda_m|)$, όπου λ_l και λ_m είναι αντίστοιχα η μικρότερη μη-αρνητική και η μεγαλύτερη μη-θετική ιδιοτιμή του G . Έτσι,

$$|\lambda_l| + |\lambda_m| < \frac{\eta(F) - 1 + n_F}{\sqrt{8}(\eta(F) - 1)} (\sqrt{\eta(F) - 1 + n_F} + \sqrt{2}),$$

ή, αν $|\lambda_k| = \min(|\lambda_l|, |\lambda_m|)$:

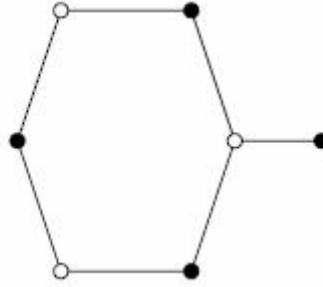
$$|\lambda_k| < \frac{1}{2\sqrt{8}} \left(1 + \frac{n_F}{\eta(F) - 1}\right) (\sqrt{n_F + \eta(F) - 1} + \sqrt{2}). \quad \square$$

Παρατήρηση 3.29. Έστω ότι θέλουμε να κατασκευάσουμε ένα minimal configuration γράφημα G από το κενό γράφημα N_p . Όπως έχουμε αποδείξει το minimal configuration γράφημα είναι ένα συνεκτικό γράφημα, που σημαίνει ότι όλες οι κορυφές του κενού γραφήματος θα είναι γειτονικές με κάποια κορυφή της περιφέρειας. Αφού η πολλαπλότητα μηδενός του κενού γραφήματος είναι ίση με την τάξη του, $\eta(F) = n_F = p$. Από την Πρόταση 3.28 για τη μικρότερη σε απόλυτη τιμή ιδιοτιμή του G , $|\lambda_k|$:

$$|\lambda_k| < \frac{1}{2\sqrt{8}} \left(1 + \frac{p}{p - 1}\right) (\sqrt{2p - 1} + \sqrt{2}).$$

Για παράδειγμα, αν κατασκευάσουμε ένα γράφημα από το κενό γράφημα N_4 , η μικρότερη σε απόλυτη τιμή ιδιοτιμή του δε μπορεί να είναι μεγαλύτερη από 1.67465.

Στο Σχήμα 3.2, το minimal configuration γράφημα που απεικονίζεται έχει την τιμή 1 σαν την μικρότερη σε απόλυτη τιμή ιδιοτιμή.



ΣΧΗΜΑ 3.2: Ένα minimal configuration γράφημα που κατασκευάστηκε από το κενό γράφημα N_4 .

Το άνω και κάτω φράγμα της ανισότητας που έδωσε ο McClelland [66]:

$$\sqrt{2m + n(n-1)|\det A|^{2/n}} \leq E(G) \leq \sqrt{2mn}$$

μπορούν να βελτιωθούν στην περίπτωση των ιδιαζόντων γραφημάτων όπως θα δούμε στην Πρόταση 3.30 και 3.31 αντίστοιχα.

Πρόταση 3.30. [38] Έστω G ένα γράφημα με n κορυφές και πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G)$. Τότε,

$$E(G) \leq \sqrt{2(n - \eta(G))m}.$$

Απόδειξη. Για την απόδειξη, αρκεί να θεωρήσουμε την ανισότητα Cauchy-Schwarz στα διανύσματα $(1, \dots, 1)$ και $(\lambda_1, \dots, \lambda_{n-\eta(G)})$. \square

Πρόταση 3.31. Έστω G ένα γράφημα με n κορυφές και πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G)$. Τότε,

$$E(G) \geq n - \eta(G).$$

Απόδειξη. Έστω $n - \eta(G)$ οι μη-μηδενικές ιδιοτιμές. Χρησιμοποιούμε την ανισότητα αριθμητικού-γεωμετρικού μέσου:

$$\frac{|\lambda_1| + |\lambda_2| + \dots + |\lambda_{n-\eta(G)}|}{n - \eta(G)} \geq \sqrt[n-\eta(G)]{|\lambda_1||\lambda_2| \dots |\lambda_{n-\eta(G)}|}.$$

Οι $n - \eta(G)$ μη-μηδενικές ιδιοτιμές ικανοποιούν το πολυώνυμο:

$$\lambda^{n-\eta(G)} + \alpha_1 \lambda^{n-\eta(G)-1} + \dots + \alpha_{n-\eta(G)},$$

που σημαίνει ότι $n-\eta(G)\sqrt{|\lambda_1||\lambda_2|\dots|\lambda_{n-\eta(G)}|} = n-\eta(G)\sqrt{|\alpha_{n-\eta(G)}|}$, όπου $\alpha_{n-\eta(G)}$ είναι ένας μη-μηδενικός ακέραιος. Είναι προφανές ότι η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν $|\lambda_i| = 1$, για κάθε $i = 1, 2, \dots, n - \eta(G)$, δηλαδή αν G είναι η ένωση $\frac{n-\eta(G)}{2}$ πλήρων γραφημάτων K_2 και $\eta(G)$ μεμονωμένων κορυφών. \square

Θα κλείσουμε αυτή την ενότητα με ένα άνω φράγμα για την ενέργεια των πλήρων πολυμερών γραφημάτων.

Πρόταση 3.32. Έστω G ένα πλήρες r -μερές γράφημα με n κορυφές και m πλευρές. Τότε,

$$E(G) \leq 2\sqrt{\frac{2(r-1)m}{r}}.$$

Απόδειξη. Γνωρίζουμε ότι ο βαθμός ενός πλήρους r -μερούς γραφήματος είναι ίσος με r [10]. Επομένως, η πολλαπλότητα μηδενός για το πλήρες r -μερές γράφημα είναι $\eta(G) = n - r$.

Πρώτα ταξινομούμε τις $n - \eta(G) = r$ μη-μηδενικές ιδιοτιμές του γραφήματος σε μη φθίνουσα σειρά ($\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{n-\eta(G)}$), αφού παραλείψουμε τις $\eta(G)$ μηδενικές ιδιοτιμές.

Εφαρμόζουμε την ανισότητα Cauchy-Schwarz στα διανύσματα $(1, 1, \dots, 1)$ και $(\lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_{n-\eta(G)})$.

$$\begin{aligned} \left(\sum_{i=2}^{n-\eta(G)} \lambda_i \right)^2 &\leq \sum_{i=2}^{n-\eta(G)} \lambda_i^2 \cdot \sum_{i=2}^{n-\eta(G)} 1^2 \\ &= (n - \eta(G) - 1) \sum_{i=2}^{n-\eta(G)} \lambda_i^2. \end{aligned}$$

Αφού, $-\lambda_1 = \sum_{i=2}^{n-\eta(G)} \lambda_i$: $\lambda_1^2 \leq (n - \eta(G) - 1) \sum_{i=2}^{n-\eta(G)} \lambda_i^2$ και $(n - \eta(G))\lambda_1^2 \leq (n - \eta(G) - 1) \sum_{i=1}^{n-\eta(G)} \lambda_i^2 = (n - \eta(G) - 1)2m$.

Γνωρίζουμε ότι το πλήρες r -μερές γράφημα G έχει μία μόνο θετική ιδιοτιμή [90] λ_1 , και $E(G) = 2\lambda_1$. Έτσι,

$$E(G) \leq 2\sqrt{\frac{2(n - \eta(G) - 1)m}{n - \eta(G)}}.$$

Είναι προφανές ότι η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν το G είναι ένα κανονικό r -μερές γράφημα. \square

Από το παραπάνω θεώρημα εύκολα προκύπτει το παρακάτω πόρισμα, το οποίο αποτελεί βελτίωση του αντίστοιχου θεωρήματος του Wilf [72] για ιδιάζοντα γραφήματα.

Πόρισμα 3.33. Αν G είναι ένα ιδιάζον γράφημα με πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G)$ και λ_1 είναι η μεγαλύτερη ιδιοτιμή του, τότε:

$$\lambda_1 \leq \sqrt{\frac{2(n - \eta(G) - 1)m}{n - \eta(G)}}.$$

3.2.3 Αφαίρεση πλευράς-Μεταβολή ενέργειας

Έχει αποδειχθεί ότι η ενέργεια ενός γραφήματος μπορεί να αυξηθεί, να μειωθεί ή να παραμείνει ίδια μετά την αφαίρεση μίας πλευράς [24]. Σε αυτή την ενότητα, μελετούμε συγκεκριμένα γραφήματα των οποίων η ενέργεια αυξάνεται μετά την αφαίρεση μίας πλευράς, όπως είναι το πλήρες πολυμερές γράφημα και ο υπερκύβος με άρτιο αριθμό κορυφών.

Πρόταση 3.34. Έστω $K_{p,q}$ ένα πλήρες διμερές γράφημα. Τότε, αν αφαιρέσουμε μια πλευρά e :

$$E(K_{p,q} - e) = 2\sqrt{pq - 1 + 2\sqrt{(p-1)(q-1)}}.$$

Απόδειξη. Έστω ο πίνακας γειτνίασης του γραφήματος $E(K_{p,q} - e)$:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

Ο πίνακας A έχει τέσσερις ανεξάρτητες γραμμές, οπότε $\eta(K_{p,q} - e) = p + q - 4$. Έστω, $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \mu_3 \geq \mu_4$ οι υπόλοιπες μη-μηδενικές ιδιοτιμές. Τότε, αφού το $K_{p,q} - e$ είναι διμερές γράφημα, $\mu_1 = -\mu_3$ και $\mu_2 = -\mu_4$. Το χαρακτηριστικό πολυώνυμο μπορεί να γραφτεί με την εξής μορφή:

$$x^{p+q-4}(x - \mu_1)(x + \mu_1)(x - \mu_2)(x + \mu_2) = x^{p+q-4}(x^4 - (\mu_1^2 + \mu_2^2)x^2 + \mu_1^2\mu_2^2).$$

Είναι γνωστό ότι, $\sum \mu_i^2 = 2m$ και έτσι $\mu_1^2 + \mu_2^2 = pq - 1$.

Είναι προφανές από τον παραπάνω πίνακα ότι το γράφημα $K_{t,t,\dots,t} - e$ έχει $r + 2$ ανεξάρτητες γραμμές. Αν εργαστούμε όπως στην απόδειξη της Πρότασης 3.34, βρίσκουμε ότι $-t$ είναι μία ιδιοτιμή του γραφήματος, με πολλαπλότητα $r - 3$. Έστω $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \mu_3 \geq \mu_4 \geq \mu_5$ οι υπόλοιπες μη-μηδενικές ιδιοτιμές. Τότε βρίσκουμε ότι:

$$\mu_2 = \frac{\sqrt{(t-1)^2 + 4(t-1)} - (t-1)}{2},$$

$$\mu_4 = -\frac{\sqrt{(t-1)^2 + 4(t-1)} + (t-1)}{2}.$$

Ακόμη, $|\mu_2| + |\mu_4| \leq |\mu_3| + |\mu_5|$, όπου οι μ_3, μ_5 και μ_1 ικανοποιούν το πολυώνυμο:

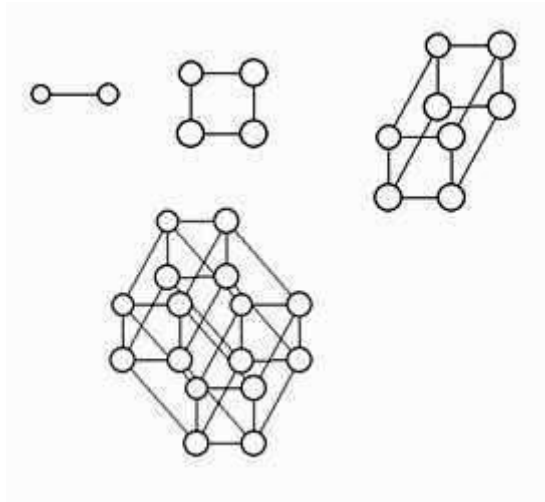
$$\mu^3 - ((r-2)t-1)\mu^2 - (m - \frac{(r-2)(r-1)}{2}t^2 + (r-2)t)\mu - (r-1)(t-1)t = 0,$$

και m είναι οι πλευρές του $K_{t,t,\dots,t} - e$, ($m = \frac{r(r-1)}{2}t^2 - 1$).

Αφού $\sqrt{(t-1)^2 + 4(t-1)} \geq t + \frac{1}{rt}$ και $\mu_1 \geq \frac{2m}{rt} = (r-1)t - \frac{2}{rt}$,

$$\begin{aligned} E(K_{t,t,\dots,t} - e) &= \sum_{i=1}^5 |\mu_i| + (r-3)|-t| \\ &\geq |\mu_1| + 2(|\mu_2| + |\mu_4|) + (r-3)t \\ &\geq (r-1)t - \frac{2}{rt} + 2(t + \frac{1}{rt}) + (r-3)t \\ &= 2(r-1)t \\ &= E(K_{t,t,\dots,t}). \quad \square \end{aligned}$$

Ο υπερκύβος Q_n είναι ένα κανονικό γράφημα που ορίζεται αναδρομικά μέσω του καρτεσιανού γινομένου δύο γραφήματων, από τις σχέσεις $Q_1 = K_2$ και $Q_{n+1} = Q_n \square K_2$. Το χαρακτηριστικό πολυώνυμο του υπερκύβου Q_n είναι $\varphi(Q_n) = \prod_{k=0}^n (x - n + 2k)^{\binom{n}{k}}$ [47].



ΣΧΗΜΑ 3.3: Οι υπερκύβοι Q_1, Q_2, Q_3, Q_4 .

Είναι εύκολο να διαπιστώσει κανείς ότι ο υπερκύβος Q_n είναι ιδιάζων αν και μόνο αν το πλήθος των κορυφών του n είναι άρτιος αριθμός. Ο πίνακας γειτνίασης του υπερκύβου μπορεί να γραφτεί στη μορφή:

$$A(Q_n) = \begin{bmatrix} A(Q_{n-1}) & I_{2^{n-1}} \\ I_{2^{n-1}} & A(Q_{n-1}) \end{bmatrix},$$

όπου με $I_{2^{n-1}}$ συμβολίζουμε τον μοναδιαίο πίνακα.

Λήμμα 3.36. [25] Για τον πίνακα

$$C = \begin{bmatrix} A & X \\ Y & B \end{bmatrix},$$

όπου A και B είναι τετράγωνοι πίνακες, έχουμε:

$$\sum_j s_j(A) + \sum_j s_j(B) \leq \sum_j s_j(C).$$

Απόδειξη. Από πολική παραγοντοποίηση, υπάρχουν ορθογώνιοι πίνακες U και V έτσι ώστε οι πίνακες $A' = UA$ και $B' = VB$ είναι θετικά ημιορισμένοι. Ας θεωρήσουμε τον πίνακα

$$C' = \begin{bmatrix} U & 0 \\ 0 & V \end{bmatrix} C = \begin{bmatrix} U & 0 \\ 0 & V \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & X \\ Y & B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} UA & UX \\ VY & VB \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A' & UX \\ VY & B' \end{bmatrix}.$$

Έχουμε,

$$\begin{aligned} \sum_j s_j(A) + \sum_j s_j(B) &= \sum_j s_j(A') + \sum_j s_j(B') \\ &= \operatorname{tr} A' + \operatorname{tr} B' \\ &= \operatorname{tr} C' \\ &\leq \sum_j s_j(C') \\ &= \sum_j s_j(C). \end{aligned} \quad \square$$

Θεώρημα 3.37. Έστω Q_{2k} ένας ιδιάζων υπερκύβος. Αν $Q_{2k} - e$ είναι το παραγόμενο υπογράφημα μετά την αφαίρεση της πλευράς e , τότε:

$$E(Q_{2k} - e) \geq E(Q_{2k}).$$

Απόδειξη. Έστω e πλευρά που αντιστοιχεί στον μοναδιαίο πίνακα $I_{2^{2k-1}}$. Ο πίνακας γειτνίασης του γραφήματος $Q_{2k} - e$, μετά την αφαίρεση της πλευράς e , είναι της

μορφής:

$$A(Q_{2k} - e) = \begin{bmatrix} A(Q_{2k-1}) & J_{2^{2k-1}} \\ J_{2^{2k-1}} & A(Q_{2k-1}) \end{bmatrix},$$

όπου ο πίνακας $J_{2^{2k-1}}$ σχηματίζεται από τον μοναδιαίο πίνακα με την αλλαγή μίας διαγώνιας εισόδου από την τιμή 1 στην τιμή 0.

Από Λήμμα 3.36,

$$E(Q_{2k} - e) \geq 2E(Q_{2k-1}).$$

Η ενέργεια του υπερκύβου Q_{2k} είναι:

$$\begin{aligned} E(Q_{2k}) &= \sum_{i=0}^{2k} \binom{2k}{i} |2k - 2i| \\ &= \sum_{i=0}^k \binom{2k}{i} (2k - 2i) - \sum_{i=k+1}^{2k} \binom{2k}{i} (2k - 2i) \\ &= \sum_{i=0}^k \binom{2k}{i} (2k - 2i) - \sum_{i=0}^{2k} \binom{2k}{i} (2k - 2i) + \sum_{i=0}^k \binom{2k}{i} (2k - 2i) \\ &= 2 \sum_{i=0}^k \binom{2k}{i} (2k - 2i) - \sum_{i=0}^{2k} \binom{2k}{i} (2k - 2i) \\ &= 4k \sum_{i=0}^k \binom{2k}{i} - 4 \sum_{i=0}^k i \binom{2k}{i} - \sum_{i=0}^{2k} 2k \binom{2k}{i} + \sum_{i=0}^{2k} 2i \binom{2k}{i} \\ &= 4k(2^{2k-1} + \frac{\binom{2k}{k}}{2}) - 4k2^{2k-1} - 2k2^{2k} + 2 \cdot 2k2^{2k-1} \\ &= 2k \binom{2k}{k}. \end{aligned}$$

Με ανάλογο τρόπο βρίσκουμε ότι

$$E(Q_{2k-1}) = 2k \binom{2k-1}{k}.$$

Αφού,

$$\begin{aligned} E(Q_{2k}) &= 2k \binom{2k}{k} \\ &= 2k \binom{2k-1}{k} \frac{2k}{2k-k} \\ &= 4k \binom{2k-1}{k} \\ &= 2E(Q_{2k-1}), \end{aligned}$$

η απόδειξη ολοκληρώθηκε. □

3.2.4 Μέγιστη και ελάχιστη ενέργεια ιδιαζόντων γραφημάτων

Σε αυτή την ενότητα μελετούμε την ενέργεια γραφημάτων με μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G) = n - k$, όπου $k = 0, \dots, 4$.

Λήμμα 3.38. Έστω G ένα γράφημα με n κορυφές και πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G) = n$. Τότε, $E(G) = 0$.

Απόδειξη. Είναι γνωστό ότι ένα γράφημα έχει πολλαπλότητα μηδενός n αν και μόνο αν είναι το κενό γράφημα. Έτσι, όλες οι n ιδιοτιμές του είναι μηδενικές και $E(G) = 0$. \square

Πρόταση 3.39. Έστω $G = (V, E)$ ένα γράφημα χωρίς μεμονωμένες κορυφές, με n κορυφές και πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G) = n - 2$. Το G πετυχαίνει μέγιστη ενέργεια, αν και μόνο αν, το G είναι ισόμορφο με ένα πλήρες διμερές γράφημα K_{n_1, n_2} , με $n_i = \lfloor n/2 \rfloor$, $i = 1, 2$.

Απόδειξη. Από το Θεώρημα 1.22 ισχύει $\eta(G) = n - 2$, αν και μόνο αν, το γράφημα G είναι ισόμορφο με ένα πλήρες διμερές γράφημα K_{n_1, n_2} . Οι ιδιοτιμές για το πλήρες διμερές γράφημα είναι γνωστές και ίσες με \sqrt{m} , $-\sqrt{m}$, και με το 0 (με πολλαπλότητα $n - 2$). Έτσι, η ενέργεια του πλήρους διμερούς γραφήματος είναι $E(G) = 2\sqrt{m}$, οπότε το πλήρες διμερές γράφημα πετυχαίνει την ισότητα στο Θεώρημα 3.4 και στην Πρόταση 3.32. Αφού, το πλήθος των πλευρών σε ένα διμερές γράφημα είναι μέγιστο όταν $n_i = \lfloor n/2 \rfloor$, $i = 1, 2$, η απόδειξη ολοκληρώθηκε. \square

Πρόταση 3.40. Έστω $G = (V, E)$ ένα γράφημα χωρίς μεμονωμένες κορυφές, με n κορυφές και πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G) = n - 3$. Το G πετυχαίνει μέγιστη ενέργεια, αν και μόνο αν, είναι ισόμορφο με ένα κανονικό πλήρες τριμερές γράφημα K_{n_1, n_2, n_3} .

Απόδειξη. Από Θεώρημα 1.23, το γράφημα G έχει πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G) = n - 3$, αν και μόνο αν, είναι ισόμορφο με ένα κανονικό πλήρες τριμερές γράφημα. Από την Πρόταση 3.32, αφού το γράφημα G έχει πολλαπλότητα μηδενός $n - 3$,

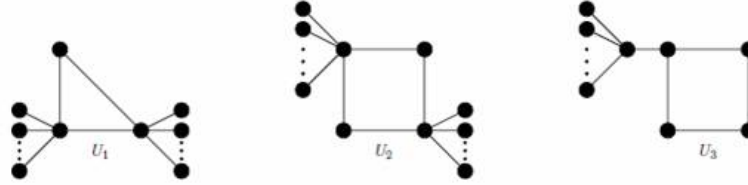
$$E(G) \leq 2\sqrt{\frac{2 \cdot 2 \cdot m}{3}}.$$

Αν $E(G) = 2\sqrt{\frac{4m}{3}}$, τότε $\frac{2m}{n} \leq \lambda_1 = \sqrt{\frac{4m}{3}}$, με ισότητα $m = n^2/3$, αν και μόνο αν, το G είναι ένα κανονικό πλήρες τριμερές γράφημα [10]. \square

Από τα παραπάνω είναι προφανές ότι γραφήματα με μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G) = n - k$, $k = 0, \dots, 3$ έχουν είτε μέγιστη είτε ελάχιστη ενέργεια. Ας εξετάσουμε τώρα γραφήματα με πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G) = n - 4$, και πιο συγκεκριμένα, ιδιάζοντα γραφήματα με τερματικές κορυφές. Όπως είδαμε στο Θεώρημα 1.27, τέτοια γραφήματα με πολλαπλότητα μηδενός $\eta(G) = n - 4$ απεικονίζονται στο Σχήμα 1.6. Θα αναφέρθουμε την περίπτωση των μονοκυκλικών γραφημάτων (unicyclic graphs), \mathcal{U}_n , δηλαδή συνεκτικών γραφημάτων που περιλαμβάνουν ακριβώς ένα κύκλο.

Λήμμα 3.41. [91] Έστω $U \in \mathcal{U}_n$ ($n \geq 5$). Τότε $\eta(U) = n - 4$, αν και μόνο αν, το U είναι ισόμορφο με κάποια από τα γραφήματα U_1, U_2, U_3 , του Σχήματος 3.4.

Θεώρημα 3.42. Έστω το σύνολο των μονοκυκλικών γραφημάτων με n κορυφές και p τερματικές κορυφές. Τότε, το γράφημα U_3 του Σχήματος 3.4 πετυχαίνει την ελάχιστη ενέργεια για $p = n - 5$ [57].



ΣΧΗΜΑ 3.4: Μονοκυκλικά γραφήματα με μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός

3.2.5 Δείκτης Estrada

Θα κλείσουμε την παρούσα διατριβή με κάποια συμπεράσματα για τον δείκτη Estrada του υπερτριγώνου και κάποιων καρτεσιανών γινομένων με μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός.

Ο δείκτης Estrada έχει αποκτήσει ιδιαίτερη σημασία τα τελευταία χρόνια εξαιτίας των πολλών εφαρμογών του, ιδιαίτερα στη Χημεία. Αν $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ είναι το φάσμα των ιδιοτιμών ενός γραφήματος, ο δείκτης Estrada (Estrada index) είναι $EE(G) = \sum_{i=1}^n e^{\lambda_i}$. Είναι γνωστό ότι η k -οστή φασματική στιγμή ενός γραφήματος είναι $M_k(G) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^k$, έτσι σε σχέση με την k -οστή φασματική στιγμή:

$$EE(G) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{M_k(G)}{k!}.$$

Λήμμα 3.43. [31] Έστω G ένα γράφημα με n κορυφές. Τότε,

$$EE(G) \geq n.$$

Η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν το G είναι το κενό γράφημα.

Απόδειξη. Αν εφαρμόσουμε την ανισότητα αριθμητικού-γεωμετρικού μέσου,

$$\frac{EE(G)}{n} \geq \sqrt[n]{\prod_{i=1}^n e^{\lambda_i}} = \sqrt[n]{e^{\sum_{i=1}^n \lambda_i}} = \sqrt[n]{e^0} = 1.$$

Η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν για κάθε $1 \leq i, j \leq n$, $e^{\lambda_i} = e^{\lambda_j}$, δηλαδή αν και μόνο αν $\lambda_i = \lambda_j$, που σημαίνει ότι $\lambda_i = 0$ για κάθε i . \square

Το Θεώρημα 3.44 δίνει ένα άνω και κάτω φράγμα για τον δείκτη Estrada, λαμβάνοντας υπόψη τις κορυφές και τις πλευρές του γραφήματος.

Θεώρημα 3.44. [73] Έστω ένα γράφημα G με n κορυφές και m πλευρές. Τότε,

$$\sqrt{n^2 + 4m} \leq EE(G) \leq n - 1 + e^{\sqrt{2m}}.$$

Η ισότητα και στα δύο μέλη ισχύει αν και μόνο αν $G \cong \overline{K}_n$.

Απόδειξη. Για το κάτω φράγμα έχουμε:

$$EE^2 = \sum_{i=1}^n e^{2\lambda_i} + 2 \sum_{i<j} e^{\lambda_i} e^{\lambda_j}.$$

Από την ανισότητα αριθμητικού-γεωμετρικού μέσου:

$$\begin{aligned} 2 \sum_{i<j} e^{\lambda_i} e^{\lambda_j} &\geq n(n-1) \left(\prod_{i<j} e^{\lambda_i} e^{\lambda_j} \right)^{2/(n(n-1))} \\ &= n(n-1) \left(\left(\prod_{i=1}^n e^{\lambda_i} \right)^{n-1} \right)^{2/(n(n-1))} \\ &= n(n-1) (e^{M_1})^{2/n} = n(n-1). \end{aligned}$$

Αν λάβουμε υπόψη ότι $M_0 = n$, $M_1 = 0$, $M_2 = 2m$, και αναπτύξουμε τη σειρά:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n e^{2\lambda_i} &= \sum_{i=1}^n \sum_{k \geq 0} \frac{(2\lambda_i)^k}{k!} = n + 4m + \sum_{i=1}^n \sum_{k \geq 3} \frac{(2\lambda_i)^k}{k!} \\ &\geq n + 4m + \gamma \sum_{i=1}^n \sum_{k \geq 3} \frac{(\lambda_i)^k}{k!} = n + 4m - \gamma n - \gamma m + \gamma \sum_{i=1}^n \sum_{k \geq 0} \frac{(\lambda_i)^k}{k!}, \end{aligned}$$

δηλαδή,

$$\sum_{i=1}^n e^{2\lambda_i} \geq (1 - \gamma)n + (4 - \gamma)m + \gamma EE.$$

Τελικά,

$$EE \geq \frac{\gamma}{2} + \sqrt{\left(n - \frac{\gamma}{2}\right)^2 + (4 - \gamma)m},$$

όπου $\gamma \in [0, 8]$ και η συνάρτηση $f(x) = \frac{x}{2} + \sqrt{\left(n - \frac{x}{2}\right)^2 + (4 - x)m}$ ελαττώνεται σε αυτό το διάστημα. Έτσι, για $\gamma = 0$ παίρνουμε το κάτω φράγμα στο θεώρημα.

Για το άνω φράγμα:

$$EE = n + \sum_{i=1}^n \sum_{k \geq 1} \frac{(\lambda_i)^k}{k!} \leq n + \sum_{i=1}^n \sum_{k \geq 1} \frac{|\lambda_i|^k}{k!}$$

$$\begin{aligned}
&= n + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} \sum_{i=1}^n ((\lambda_i)^2)^{k/2} \leq n + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} \left(\sum_{i=1}^n (\lambda_i)^2 \right)^{k/2} \\
&= n + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} (2m)^{k/2} = n - 1 + \sum_{k \geq 0} \frac{\sqrt{2m}^k}{k!},
\end{aligned}$$

οπότε παίρνουμε το άνω φράγμα. \square

Παρουσιάσαμε κάποια βασικά θεωρήματα για τον δείκτη Estrada. Αν λάβουμε υπόψη και την πολλαπλότητα μηδενός ενός γραφήματος, είναι γνωστά τα παρακάτω.

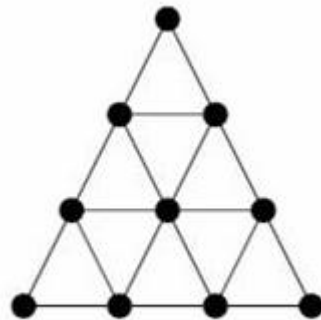
Θεώρημα 3.45. [39] Αν G είναι ένα (n, m) -γράφημα με τουλάχιστον μία πλευρά, και n_0 είναι η πολλαπλότητα μηδενός του, τότε

$$EE(G) \geq n_0 + (n - n_0) \cosh\left(\sqrt{\frac{2m}{n - n_0}}\right),$$

όπου με \cosh συμβολίζουμε το υπερβολικό συνημίτονο.

Η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν η ποσότητα $n - n_0$ είναι άρτιος αριθμός, και αν το γράφημα G αποτελείται από αντίγραφα από πλήρη διμερή γραφήματα K_{r_i, s_i} , $i = 1, 2, \dots, (n - n_0)/2$, έτσι ώστε τα γινόμενα $r_i \cdot s_i$ είναι αμοιβαίως ίσα.

Παρακάτω δίνουμε ένα παράδειγμα του Θεωρήματος 3.45 για το n -οστό υπερτρίγωνο.



ΣΧΗΜΑ 3.5: Το T_4 -υπερτρίγωνο.

Πόρισμα 3.46. Το n -οστό υπερτρίγωνο T_n είναι ένα τριγωνικό πλέγμα, με n κορυφές σε κάθε πλευρά, τάξης $\frac{1}{2}n(n+1)$ και μεγέθους $\frac{3}{2}n(n-1)$. Έχει πολλαπλότητα μηδενός n [1]. Επίσης,

$$EE(T_n) > n + \frac{1}{2}n(n-1) \cosh\left(\sqrt{\frac{2 \cdot \frac{3}{2}n(n-1)}{\frac{1}{2}n(n-1)}}\right) = n + \frac{1}{2}n(n-1) \cosh(6).$$

Παρατήρηση 3.47. [42] Αν G είναι ένα διμερές γράφημα με πολλαπλότητα μηδενός n_0 , τότε

$$EE(G) = n_0 + 2 \sum_{+} \cosh(\lambda_i),$$

όπου με \sum_{+} συμβολίζουμε το άθροισμα πάνω σε όλες τις θετικές ιδιοτιμές του γραφήματος.

Θεώρημα 3.48. [73] Έστω G ένα κανονικό διμερές γράφημα βαθμού r και τάξης n . Τότε,

$$2\cosh(r) + \sqrt{(n-2)^2 + 2nr - 4r^2} \leq EE(G) \leq n - 4 + 2\cosh(r) + 2\cosh(\sqrt{nr/2 - r^2}).$$

Θεώρημα 3.49. [42] Ανάμεσα σε όλα τα δέντρα με n κορυφές,

$$EE(P_n) < EE(T_n) < EE(S_n),$$

όπου με T_n συμβολίζουμε όλα τα δέντρα που είναι διαφορετικά από το μονοπάτι P_n και το star γράφημα S_n .

Θεώρημα 3.50. [73] Ανάμεσα σε όλα τα γραφήματα με n κορυφές, το μονοπάτι P_n έχει τον ελάχιστο δείκτη Estrada.

Στις εργασίες [31], [43] έχει υπολογισθεί ο δείκτης Estrada για κάποια ιδιάζοντα γραφήματα με γνωστό φάσμα, όπως το star γράφημα, ο κύκλος, ο υπερκύβος και ο τροχός. Χρησιμοποιώντας τα παρακάτω λήμματα, υπολογίζουμε τον δείκτη Estrada ορισμένων Καρτεσιανών γινομένων γραφημάτων με μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός.

Λήμμα 3.51. [31] Έστω $G \square H$ το Καρτεσιανό γινόμενο των G και H . Τότε,

$$EE(G \square H) = EE(G) \cdot EE(H).$$

Λήμμα 3.52. [1] Τα παρακάτω Καρτεσιανά γινόμενα έχουν μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός:

(i) $M(K_s \square P_t) = s.$

(ii) $M(P_s \square P_t) = \min \{s, t\}.$

(iii) $M(C_s \square P_t) = \min \{s, 2t\}.$

(iv) $M(K_s \square K_t) = st - s - t + 2.$

(v) $M(C_s \square K_t) = 2t.$

Λήμμα 3.53. [31], [43] Οι δείκτες Estrada των K_n , C_n και P_n είναι:

$$(i) EE(K_n) = e^{n-1} + (n-1)e^{-1}.$$

$$(ii) EE(C_n) \approx nI_0.$$

$$(iii) EE(P_n) \approx (n+1)I_0 - \cosh(2),$$

$$\text{όπου } I_0 = \frac{1}{\pi} \int_{\pi}^0 e^{2\cos x} dx = 2.27958530\dots$$

Πόρισμα 3.54. Οι δείκτες Estrada των Καρτεσιανών γινομένων με μέγιστη πολλαπλότητα μηδενός που αναφέρθηκαν στο Λήμμα 3.52 είναι:

$$(i) EE(K_s \square P_t) \approx (e^{s-1} + (s-1)e^{-1}) \cdot ((t+1)I_0 - \cosh(2)).$$

$$(ii) EE(P_s \square P_t) \approx (((s+1)I_0 - \cosh(2)) \cdot ((t+1)I_0 - \cosh(2))).$$

$$(iii) EE(C_s \square P_t) \approx sI_0 \cdot ((t+1)I_0 - \cosh(2)).$$

$$(iv) EE(K_s \square K_t) = (e^{s-1} + (s-1)e^{-1}) \cdot (e^{t-1} + (t-1)e^{-1}).$$

$$(v) EE(C_s \square K_t) \approx sI_0 \cdot (e^{t-1} + (t-1)e^{-1}).$$

Απόδειξη. Τα παραπάνω αποτελέσματα είναι άμεση συνέπεια των Λημμάτων 3.51 - 3.53. □

Δημοσιεύσεις

Κατά τη διάρκεια εκπόνησης της παρούσας διδακτορικής διατριβής έγιναν δεκτές προς δημοσίευση οι παρακάτω εργασίες:

[1] Irene Triantafyllou. On the energy of singular graphs. *El. J. Lin. Algebra*, 26:535—545, 2013.

[2] Irene Triantafyllou. On the energy of graphs. In: *Topics in Mathematical Analysis and Applications*, Springer. In print.

[3] Irene Triantafyllou and Niki Palla. Some results on the energy of singular graphs. *J. Nonlinear Sci. Appl.*. In print.

[4] Irene Triantafyllou. On the singularity of graphs: Zero forcing parameters. *Bull. Greek Math. Soc.*. In print.

[5] Irene Triantafyllou. Zero forcing number and vertex spread of certain types of singular graphs. *Int. J. Nonlinear Anal. Appl.*. In print.

Βιβλιογραφία

- [1] AIM Minimum Rank-Special Graphs Work Group. Zero forcing sets and the minimum rank of graphs. *Lin. Algebra Appl.*, 428 (7):1628–1648, 2008.
- [2] F. Ashraf and H. Bamdad. A note on graphs with zero nullity. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 60:15-19, 2008.
- [3] R. Balakrishnan. The energy of a graph. *Lin. Algebra Appl.*, 387:287–295, 2004.
- [4] F. Barioli, S.M. Fallat, and L. Hogben. Computation of minimal rank and path cover number for graphs. *Lin. Algebra Appl.*, 392:289-303, 2004.
- [5] R. B. Bapat and S. Pati. Energy of a graph is never an odd integer. *Bull. Kerala Math. Assoc.*, 1:129–132, 2004.
- [6] F. Barioli, W. Barrett, S. Fallat, H. T. Hall, L. Hogben, B. Shader, P. van der Driessche, and H. van der Holst. Zero forcing parameters and minimum rank problems. *Lin. Algebra Appl.*, 433:401–411, 2010.
- [7] W. Barret, H. van der Holst and R. Loewy. Graphs whose minimal rank is two. *El. J. Lin. Algebra*, 11: 258-280, 2004.
- [8] A. Berman, S. Friedland, L. Hogben, U. G. Rothblum, and B. Shader. An upper bound for the minimum rank of a graph. *Lin. Algebra Appl.*, 429 (7):1629–1638, 2008.
- [9] N. L. Biggs. *Algebraic Graph Theory*. Cambridge University Press, Cambridge, 1993.
- [10] J. Bondy and U. Murty. *Graph Theory with Applications*. Elsevier, New York, 1976.
- [11] B. Borovićanin and I. Gutman. Nullity of graphs, in: D. Cvetković, I. Gutman, Eds. *Applications of Graph Spectra*, Math. Inst., Belgrade, 2009.
- [12] R. A. Brualdi. Energy of a graph. Notes to AIM Workshop on spectra of families of matrices described by graphs, digraphs, and sign patterns, 2006.

- [13] R. A. Brualdi and H. J. Ryser. *Combinatorial Matrix Theory*. Cambridge University Press, Cambridge, 1991.
- [14] G. Caprossi, D. Cvetković, I. Gutman, and B. Hansen. Variable neighborhood graphs 2. Finding graphs with extreme energy, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 39:984-986, 1999.
- [15] A. Chen, A. Chang, and W. C. Shiu. Energy ordering of unicyclic graphs. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 55:95-102, 2006.
- [16] B. Cheng and B. Liu. On the nullity of graphs. *El. J. Lin. Algebra*, 16:60-67, 2007.
- [17] L. Collatz, U. Sinogowitz. *Spektren endlicher Grafen*. *Abh. Math. Sem. Univ. Hamburg*, 21: 63-77, 1957.
- [18] C. A. Coulson, B. O’Leary, and R. B. Mallion. *Hückel Theory for Organic Chemists*, Academic Press, London, 1978.
- [19] C. A. Coulson and G. S. Rushbrooke. Note on the method of molecular orbitals, *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, 36:193-200, 1940.
- [20] D. Cvetković, M. Doob, and H. Sachs. *Spectra of Graphs – Theory and Application*, Academic Press, New York, 1980.
- [21] D. Cvetković and I. Gutman. The algebraic multiplicity of the number zero in the spectrum of a bipartite graph, *Matematički Vesnik (Beograd)*, 9:141-150, 1972.
- [22] D. Cvetković, I. Gutman, and N. Trinajstić. Graph theory and molecular orbitals II, *Croat. Chem. Acta*, 44:365-374, 1972.
- [23] D. Cvetković, I. Gutman, and N. Trinajstić. Graphical studies on the relations between the structure and the reactivity of conjugated systems: The role of non-bonding molecular orbitals, *J. Mol. Struct.*, 28:289-303.
- [24] J. Day and Wasin So. Graph energy change due to edge deletion. *Lin. Algebra Appl.*, 428:2070-2078, 2007.
- [25] J. Day and Wasin So. Singular value inequality and graph energy change. *El. J. Lin. Algebra*, 16:291-299, 2007.
- [26] L. DeLoss, J. Grout, L. Hogben, T. McKay, J. Smith, and G. Tims. Techniques for determining the minimum rank of a small graph. *Lin. Algebra Appl.*, 432:2995-3001, 2010.

- [27] L. M. DeAlba, J. Grout, L. Hogben, R. Mikkelsen, and K. Rasmussen. Universally optimal matrices and field independence of the minimum rank of a graph. *El. J. Lin. Algebra*, 18:403-419, 2009.
- [28] C. J. Edholm, L. Hogben, M. Huynh, J. LaGrande, and D. D. Row. Vertex and edge spread of zero forcing number, maximum nullity, and minimum rank of a graph. *Linear Algebra Appl.*, 436:4352-4372, 2012.
- [29] M. Ellingham. Basic subgraphs and graph spectra. *Austral. J. Comb.*, 8:245–265, 1993.
- [30] Y. Z. Fan and K. S. Qian. On the nullity of bipartite graphs. *Lin. Algebra Appl.*, 430:2943–2949, 2009.
- [31] G. H. Fath-Tabar, A. R. Ashrafi, and I. Gutman. Note on Estrada and L-Estrada indices of graph. *Bull. T.C. XXXIX, Sci. Math.*, 34:1-16, 2009.
- [32] P. W. Fowler. Energies of graphs and molecules, in: *Computational Methods in Modern Science and Engineering*, Vol 2, parts A and B, Corfu, Greece, 2007.
- [33] E. Ghorbani, J. H. Koolen, and J. Y. Yang. Bounds for the Hückel energy of a graph. *El. J. Comb.* 16, 2009.
- [34] C. Godsil and G. Royle. *Algebraic Graph Theory*. Springer-Verlag, New York, 2001.
- [35] S. C. Gong, Y. Z. Fan, and Z. X. Yin. On the nullity of graphs with pendant trees. *Lin. Algebra Appl.*, 433:1374–1380, 2010.
- [36] I. Gutman. On graphs whose energy exceeds the number of vertices. *Lin. Algebra Appl.*, 429:2670–2677, 2008.
- [37] I. Gutman. The energy of a graph, 10. *Steiermärkisches Mathematisches Symposium (Stift Rein, Graz, 1978)*, *Ber. Math.-Statist. Sect. Forsch. Graz* 103.
- [38] I. Gutman. Bounds for total π -electron energy of conjugated hydrocarbons. *Z. Phys. Chem. (Leipzig)*, 266:59-64, 1985.
- [39] I. Gutman. Lower bounds for Estrada index. *Publ. Inst. Math. (Beograd)*, 83:1-7, 2008.
- [40] I. Gutman. The energy of a graph: old and new results, in *Algebraic Combinatorics and Applications*, A. Betten, A. Kohner, R. Laue, and A. Wassermann, eds., Springer, Berlin, 196-211, 2001.

- [41] I. Gutman and B. Borovićanin. Nullity of graphs: An updated survey, Selected Topics on Applications of Graph Spectra. Math. Inst., Belgrade, 137–154, 2011.
- [42] I. Gutman, H. Deng, and S. Radenković. The Estrada index: An updated survey, in the book: D. Cvetković, I. Gutman (Eds.), Selected Topics on Applications of Graph Spectra, Math. Inst., Belgrade, 2011.
- [43] I. Gutman and A. Graovac. Estrada index of cycles and paths. Chem. Phys. Letters, 436:294-296, 2007.
- [44] I. Gutman and Y. Hou. Bipartite unicyclic graphs with greatest energy. MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 43:17–28, 2001.
- [45] I. Gutman and M. Mateljević. Note on the Coulson integral formula. J. Math. Chem., 39:259–266, 2006.
- [46] I. Gutman and I. Sciriha. Graphs with maximum singularity. Graph Theory Notes of New York, 30:17–20, 1996.
- [47] F. Harary, J. Hayes, and H. Wu. A survey of the theory of hypercube graphs. Comput. Math. Applic., 15 (4): 277-289, 1988.
- [48] L. Hogben. Minimum rank problems. Lin. Algebra Appl., 432:1961–1974, 2010.
- [49] L. Hogben and B. Shader. Generic maximum nullity of a graph. Lin. Algebra Appl., 432:857–866, 2010.
- [50] H. van der Holst. Three-connected graphs whose maximum corank is at most three. Linear Algebra Appl., 429:625–632, 2007.
- [51] R.A. Horn, N.H. Rhee and W. So. Eigenvalue inequalities and equalities. Lin. Algebra Appl., 270:29-44, 1998.
- [52] Y. Hou. Bicyclic graphs with minimum energy. Lin. Multilin. Algebra, 49:347–354, 2002.
- [53] Y. Hou. Unicyclic graphs with minimal energy. J. Math. Chem., 29:163–168, 2001.
- [54] Y. Hou, I. Gutman, and C. W. Woo. Unicyclic graphs with maximal energy. Lin. Algebra Appl., 356:27–36, 2002.
- [55] Y. Hou and I. Gutman. Hyperenergetic line graphs. MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 43:29–39, 2001.
- [56] H. Hua. Bipartite unicyclic graphs with large energy. MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 58:57–83, 2007.

- [57] H. Hua and M. Wang. Unicyclic graphs with given number of pendent vertices and minimal energy. *Lin. Algebra Appl.*, 426:478-489, 2007.
- [58] C. R. Johnson and A. Leal Duarte. The maximum multiplicity of an eigenvalue in a matrix whose graph is a tree. *Lin. Multilin. Algebra*, 46: 139-144, 1999.
- [59] J. H. Koolen and V. Moulton. Maximal energy graphs. *Adv. Appl. Math.*, 26:47-52, 2001.
- [60] J. Koolen and V. Moulton. Maximal energy bipartite graphs. *Graph Combin.*, 19:131-135, 2003.
- [61] J. Li, A. Chang, and W.C. Shiu. On the nullity of bicyclic graphs. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 60:21-36, 2008.
- [62] S. Li. On the nullity of graphs with pendent vertices. *Lin. Algebra Appl.*, 429:1619-1628, 2008.
- [63] X. Li, J. Zhang, and B. Zhou. On unicyclic conjugated molecules with minimal energies. *J. Math. Chem.*, 42:729-740, 2007.
- [64] H. C. Longuet-Higgins. Resonance structures and MO in unsaturated hydrocarbons. *J. Chem. Phys.*, 18:265-274, 1950.
- [65] L. Lovász and M. Plummer. *Matching Theory*. Annals of Discrete Mathematics, Vol 29, North Holland, Amsterdam, 1986.
- [66] B. McClelland. Properties of the latent roots of a matrix: The estimation of π -electron energies. *J. Chem. Phys.*, 54:640-643, 1971.
- [67] D. A. Morales. Bounds for the total π -electron energy. *Int. J. Quantum Chem.*, 88:317-330, 2002.
- [68] V. Nikiforov. The energy of graphs and matrices. *J. Math. Anal. Appl.*, 326:1472-1475, 2007.
- [69] V. Nikiforov. Graphs and matrices with maximal energy. *J. Math. Anal. Appl.*, 327:735-738, 2007.
- [70] P.M. Nylén. Minimum-rank matrices with prescribed graph. *Lin. Algebra Appl.*, 248: 303-316, 1996.
- [71] Α. Χ. Παπαϊωάννου. *Διακριτά Μαθηματικά*, Αθήνα 2002.
- [72] Α. Χ. Παπαϊωάννου. *Θεωρία Γραφημάτων*, Αθήνα 2004.

- [73] J. A. de la Peña, I. Gutman, and J. Rada. Estimating the Estrada index. *Lin. Algebra Appl.*, 427:70-76, 2007.
- [74] S. Pirzada and I. Gutman. Energy of a graph is never the square root of an odd integer. *Appl. Anal. Discr. Math.*, 2:118–121, 2008.
- [75] J. Rada. The McClelland inequality for the energy of digraphs. *Lin. Algebra Appl.*, 430:800–804, 2009.
- [76] J. Rada. Lower bounds for the energy of digraphs. *Lin. Algebra Appl.*, 432:2174–2180, 2010.
- [77] H.S. Ramane, I. Gutman, H.B.Walikar, and S.B. Halkarni. Another class of equienergetic graphs. *Kragujevac J. Math.*, 26:15–18, 2004.
- [78] A. J. Schwenk. Computing the Characteristic Polynomial of a Graph, in: R. A. Bari and F. Harary, eds., *Graphs and Combinatorics 406*, Springer-Verlag, 1975.
- [79] A. J. Schwenk and R. J. Wilson. On the eigenvalues of a graph, in L.W. Beineke and R.J. Wilson(eds.), *Selected topics in Graph Theory*, Academic Press, London, 1978.
- [80] I. Sciriha. On the construction of graphs of nullity one. *Discrete Math.*, 181:193-211, 1998.
- [81] I. Sciriha. A characterization of singular graphs. *Electron. J. Linear Algebra*, 16:451-462, 2007.
- [82] I. Sciriha. Maximal core size in singular graphs. *Ars Mathematica Contemporanea* (2009), 217-229.
- [83] I. Sciriha. Maximal and extremal singular graphs. *Sovremennaya Matematika i ee Prilozheniya - Contemporary Mathematics and its Applications-Algebraic Techniques in Graph Theory and Optimization-Springer*, 71:1-9, 2011.
- [84] I. Sciriha. On the rank of graphs, In Y. Alavi et al eds., *The Eighth Quadrennial International Conference on Graph Theory, Combinatorics, Algorithms and Applications*, Springer-Verlag, vol. II, 769-778, 1998.
- [85] I. Sciriha. Coalesced and Embedded Nut Graphs in Singular Graphs. *Ars Mathematica Contemporanea* 1, 20-31, 2008.
- [86] I. Sciriha. On the Spectrum of Threshold Graphs. *ISRN Discrete Math.*, 2011.
- [87] I. Sciriha and P. W. Fowler. Nonbonding orbitals in fullerenes: Nuts and cores in singular polyhedral graphs. *J. Chem. Inf. Model. (JCIM)*, 47:1763-1775, 2007.

- [88] I. Sciriha and I. Gutman. Nut graphs: maximally extending cores. *Util. Math.*, 54:257-272, 1998.
- [89] I. Shparlinski. On the energy of some circulant graphs. *Linear Algebra Appl.*, 414:378-382, 2006.
- [90] J. H. Smith. Some properties of the spectrum of a graph, Gordon and Breach, Science Publ., Inc., New York-London-Paris, 403-406, 1970.
- [91] X. Tan and B. Liu. On the nullity of unicyclic graphs. *Lin. Algebra Appl.*, 408:212–220, 2005.
- [92] I. Triantafyllou. On the energy of singular graphs. *El. J. Lin. Algebra*, 26:535-545, 2013.
- [93] I. Triantafyllou. On the energy of graphs. In: *Topics in Mathematical Analysis and Applications*, Springer. In print.
- [94] I. Triantafyllou. Zero forcing number and vertex spread of certain types of singular graphs. *Int. J. Nonlinear Anal. Appl.*. In print.
- [95] I. Triantafyllou. On the singularity of graphs: Zero forcing parameters. *Bull. Greek Math. Soc.*. In print.
- [96] I. Triantafyllou and N. Palla. Some results on the energy of singular graphs. *J. Nonlinear Sci. Appl.*. In print.
- [97] H. B. Walikar, I. Gutman, P. R. Hampiholi, and H. S. Ramane. Non-hyperenergetic graphs, *Graph Theory Notes New York* 41, 14–16, 2001.
- [98] R. J. Wilson. Singular graphs. In V.R. Kulli, ed., *Recent studies in Graph Theory*, Vishwa International Publications, 228-236, 1989.
- [99] A. Yu, M. Lu, and F. Tian. On the spectral radius of graphs. *Linear Algebra Appl.*, 387:41–49, 2004.
- [100] A. Yu, M. Lu, and F. Tian. New upper bounds for the energy of graphs. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 53:441–448, 2005.
- [101] J. Zhang and B. Zhou. On bicyclic graphs with minimal energies. *J. Math. Chem.*, 37:423–431, 2005.
- [102] B. Zhou. Energy of a graph. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 51:111–118, 2004.
- [103] B. Zhou. On the energy of a graph. *Kragujevac J. Sci.*, 26:5–12, 2004.

-
- [104] B. Zhou, I. Gutman, J. A. de la Peña, J. Rada, and L. Mendoza. On spectral moments and energy of graphs. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 57:183–191, 2007.