

Univerzitet u Beogradu
Matematički fakultet

Irena M. Jovanović

SPEKTRALNO PREPOZNAVANJE GRAFOVA I MREŽA

Doktorska disertacija

Beograd, 2014.

University of Belgrade
Faculty of Mathematics

Irena M. Jovanović

SPECTRAL RECOGNITION OF GRAPHS AND NETWORKS

Doctoral dissertation

Belgrade, 2014.

Podaci o mentoru i članovima komisije

Mentor:

dr Zoran Stanić

docent

Univerzitet u Beogradu, Matematički fakultet

Članovi komisije:

dr Zoran Stanić

docent

Univerzitet u Beogradu, Matematički fakultet

dr Dragoš Cvetković

akademik

Matematički institut, SANU

dr Boško Jovanović

redovni profesor

Univerzitet u Beogradu, Matematički fakultet

Datum odbrane:

Za

Kaju

SPEKTRALNO PREPOZNAVANJE GRAFOVA I MREŽA

Rezime

Spektralna teorija grafova je matematička teorija koja grafove proučava pomoću sopstvenih vrednosti i sopstvenih vektora matrica koje su im pridružene. Posebno interesantni problemi ovog istraživačkog domena jesu problemi spektralnog prepoznavanja grafova. Tu ubrajamo: karakterizaciju grafa sa zadatim spektrom, tačno ili približno konstruisanje grafa sa zadatim spektrom, sličnost grafova i perturbacije grafova. U disertaciji se u prvom redu razmatraju problemi sličnosti grafova, gde se razlika pravi u zavisnosti od toga da li su ili ne poredbeni grafovi istog reda.

Sličnost grafova istog reda ustanovljava se izračunavanjem spektralnih rastojanja, dok se, kada je reč o grafovima različitog reda, izračunavaju i upoređuju mere sličnosti definisane za njihove čvorove. Mere sličnosti mogu i ne moraju da budu spektralno zasnovane, a poredbeni grafovi su u tom slučaju obično grafovi sa velikim brojem čvorova, pa se nazivaju mrežama. Disertacija sadrži izvesne rezultate koji se odnose na Menhetn spektralno rastojanje grafova bazirano na matrici susedstva, Laplasovoj matrici i nenegativnoj Laplasovoj matrici. Predložena je nova mera sličnosti za čvorove poredbenih mreža koja se zasniva na razlici funkcija generatrisa za brojeve zatvorenih šetnji u ovim čvorovima. Brojevi zatvorenih šetnji izračunavaju se, shodno novoj spektralnoj formuli, brojanjem razapinjućih zatvorenih šetnji u grafitima odgovarajućih grafova.

Započeta je analiza spektralno-strukturalnih karakteristika digrafova u odnosu na spektar matrica AA^T , odnosno $A^T A$, gde je A matrica susedstva razmatranog digrafa. Generalizovan je pojam kospektralnosti, pa su u tom smislu dati neki rezultati vezani za kospektralnost digrafova i multigrafova u odnosu na matricu AA^T i nenegativnu Laplasovu matricu, respektivno.

Ključne reči: graf, digraf, spektar, spektralno rastojanje, zatvorena šetnja, razapinjuća zatvorena šetnja, grafit, kospektralnost, funkcija generatrisa.

Naučna oblast: teorija grafova.

Uža naučna oblast: spektralna teorija grafova.

UDK broj: 519.177(043.3).

SPECTRAL RECOGNITION OF GRAPHS AND NETWORKS

Abstract

Spectral graph theory is a mathematical theory where graphs are considered by means of the eigenvalues and the corresponding eigenvectors of the matrices that are assigned to them. The spectral recognition problems are of particular interest. Between them we can distinguish: characterizations of graphs with a given spectrum, exact or approximate constructions of graphs with a given spectrum, similarity of graphs and perturbations of graphs. In this dissertation we are primarily interested for the similarity of graphs, where graphs with the same number of vertices and graphs of different orders are considered.

Similarity of graphs of equal orders can be established by computation of the spectral distances between them, while for graphs with different number of vertices the measures of similarity are introduced. In that case, graphs under study are usually very large and they are denoted as networks, while the measures of similarity can be spectrally based. Some mathematical results on the Manhattan spectral distance of graphs based on the adjacency matrix, Laplacian and signless Laplacian matrix are given in this dissertation. A new measure of similarity for the vertices of the networks under study is proposed. It is based on the difference of the generating functions for the numbers of closed walks in the vertices of networks. These closed walks are calculated according to the new spectral formula which enumerates the numbers of spanning closed walks in the graphlets of the corresponding graphs.

The problem of the characterization of a digraph with respect to the spectrum of AA^T , apropos $A^T A$, where A is the adjacency matrix of a digraph, is introduced. The notion of cospectrality is generalized, and so the cospectrality between some particular digraphs with respect to the matrix AA^T and multigraphs with respect to the signless Laplacian matrix is considered.

Key words: graph, digraph, spectrum, spectral distance, closed walk, spanning closed walk, graphlet, cospectrality, generating function.

Scientific field: graph theory.

Scientific subfield: spectral graph theory.

UDK number: 519.177(043.3).

Predgovor

Spektralna teorija grafova je matematička teorija u kojoj se osobine grafa izučavaju preko sopstvenih vrednosti i sopstvenih vektora matrica pridruženih grafu. Poslednjih decenija ova grana matematike beleži intenzivan i kontinuiran razvoj, a brojne su i njene primene, posebno u domenu računarstva.

Problemi spektralnog prepoznavanja (engl. *spectral recognition of graphs*) spadaju u grupu problema koji su među najinteresantnijim za istraživanje i proučavanje. Spomenuti problemi su od značaja u matematici, ali je posebno važna njihova primena u računarstvu. U tipične probleme prepoznavanja spadaju: karakterizacija grafa sa zadatim spektrom, tačno ili približno konstruisanje grafa sa zadatim spektrom, sličnost grafova i perturbacije grafova, odnosno promene spektra grafova uzrokovane malim promenama u njihovoj strukturi. U disertaciji prvenstveno razmatramo probleme sličnosti grafova, gde pravimo razliku u zavisnosti od toga da li su poredbeni grafovi istog ili različitog reda.

Disertacija je organizovana u četiri poglavlja.

Poglavljje 1 je uvodnog karaktera te sadrži definicije i osnovne rezultate spektralne teorije grafova na koje smo se pozivali u istraživanju. Ukratko je opisana motivacija za razmatranje problema sličnosti grafova, odnosno opštije, problema spektralnog prepoznavanja grafova.

U Poglavlju 2 je, u izvesnom kontekstu, razmatrana sličnost grafova istog reda. Sličnost ovakvih grafova ustanovljava se izračunavanjem spektralnih rastojanja grafova. Euklidovo, Menhetn ili neko drugo rastojanje između nizova sopstvenih vrednosti poredbenih grafova istog reda označavamo kao *spektralno rastojanje* (engl. *spectral distance*). Ukoliko su dva grafa na rastojanju jednakom nula, kažemo da su *kospektralni* (engl. *cospectral*). Grafove smatramo *sličnim* ako je njihovo spektralno rastojanje malo. Poglavlje je bazirano na matematičkim rezultatima sumiranim u radovima autora [57, 58, 59, 60] koji se tiču Menhetn spektralnog rastojanja grafova u odnosu na matricu susedstva, Laplasovu i nenegativnu Laplasovu matricu.

Deo rezultata je opšteg karaktera, i odnosi se na povezanost spektralnog rastojanja sa energijom grafa, zatim na neka gornja ograničenja spektralnog rastojanja dva proizvoljna grafa, moguće odnose spektralnih rastojanja u odnosu na različite matrice, kao i na nezavisnost spektralnog rastojanja od zajedničkih sopstvenih vrednosti poredbenih grafova. Druga grupa rezultata pokazuje kako se spektralno rastojanje menja pri određenim grafovskim operacijama, odnosno pri nekim grafovskim transformacijama, dok se trećom grupom rezultata opisuju spektralna rastojanja regularnih grafova. Izračunata su ekstremalna spektralna rastojanja u nekim skupovima grafova specijalno izabrane strukture i međusobnog odnosa, kao i spektralna rastojanja u odnosu na matricu susedstva grafova koji su najviše zastupljeni u literaturi. Razmotrene su neke od postavljenih hipoteza o spektralnog rastojanju grafova u odnosu na matricu susedstva. Za dalju analizu generisanih hipoteza predložena je modifikacija interaktivnog kompjuterskog programa *AutoGraphiX*.

Sličnost grafova sa različitim brojem čvorova razmatrana je u Poglavlju 3. U ovom slučaju poredbeni grafovi najčešće imaju veliki broj čvorova i nazivaju se *mrežama* (engl. *networks*). Sličnost mreža se ustanovljava izračunavanjem i upoređivanjem mera sličnosti između njihovih čvorova. Posebno su aktuelne komparativne analize bioloških mreža, koje su, međutim, računski neizvodljive jer podrazumevaju rešavanje problema izomorfizma podgrafova. Ovaj problem je NP-kompletno, pa se pristupa dizajniranju heurističkih strategija za njegovo približno rešavanje. Jedna od njih podrazumeva *poravnavanje mreža* (engl. *network alignment*). Uz kratak prikaz osnovnih karakteristika nekih od algoritama za globalno poravnavanje bioloških mreža, predlažemo novu meru sličnosti koja bi mogla da bude sastavni deo njihove implementacije. Mera sličnosti između fiksiranih čvorova poredbenih mreža bazirana je na razlici funkcija generatrisa za brojeve zatvorenih šetnji u ovim čvorovima. Broj zatvorenih šetnji određene dužine u izabranom čvoru grafa izračunava se, prema novopredloženoj spektralnoj formuli, brojanjem razapinjućih zatvorenih šetnji u graffletima određenog tipa. Pod graffletom podrazumevamo mali indukovani povezani koreni podgraf grafa. Poglavlje sadrži rezultate koji su dati u radovima autora [27, 54, 55].

Spektralno-strukturalne karakteristike digrafa u odnosu na matrice AA^T i $A^T A$, gde je A matrica susedstva digrafa, razmatrane su u Poglavlju 4. Navedene matrice su pozitivno semidefinitne, pa je odgovarajući spektar digrafa kome su ove matrice pridružene označen kao *nenegativan spektar digrafa* (engl. *nonnegative spectrum*). Motivacija za otvaranje istraživanja ove vrste (vidi rad autora [56]), koje bi

se moglo podvesti pod problem karakterizacije digrafa sa zadatim spektrom, nalazi se u primeni spektralne teorije u računarstvu. Naime, za potrebe rešavanja izvesnih računarskih problema digrafovi se razmatraju u kontekstu matrica AA^T i $A^T A$, koje se u zavisnosti od razmatranog problema u literaturi sreću pod različitim nazivima. Informacije koje mogu da se dobiju jedino iz spektra ovih matrica dovoljne su za istraživače iz domena računarskih nauka. Po ugledu na postojeće rezultate na kojima se temelji spektralna teorija grafova i digrafova, u disertaciji izlažemo nekoliko elementarnih rezultata koji opisuju nenegativan spektar digrafa u odnosu na neke digrafske operacije i transformacije. Posebna pažnja je posvećena generalizaciji pojma kospektralnosti. Preciznije, razmatrana je $(N - Q)$ -kospektralnost posebno određenih digrafova i multigrafova, gde je sa N označena digrafska matrica AA^T , odnosno $A^T A$, dok Q predstavlja nenegativnu Laplasovu matricu multigrafova.

U Dodatku A dat je kratak opis C++ programa *SDCalc* koji je namenjen izračunavanju spektralnih rastojanja grafova. U Dodatku B navedeni su računski rezultati koji se odnose na spektralna rastojanja grafova malog reda u odnosu na matricu susedstva, Laplasovu matricu i nenegativnu Laplasovu matricu, dobijeni uz pomoć programa *SDCalc*. Dodatak C sadrži formule koje se odnose na brojeve razapinjućih zatvorenih šetnji u grafitima malog reda.

Originalni doprinos autora predstavlja sledeći rezultati:

- Poglavlje 2: Tvrdjenja 2.3.4, 2.3.8, 2.3.9 i 2.3.10 koja karakterišu spektralno rastojanje grafova pri određenim grafovskim operacijama, Leme 2.3.1 i 2.3.2, Posledice 2.3.1 i 2.3.2, i Tvrdjenje 2.3.2 u kojima je opisana promena spektralnog rastojanja grafova pri nekim grafovskim transformacijama, Tvrdjenja 2.2.1 i 2.3.3, Lema 2.3.3, i Tvrdjenja 2.3.5, 2.3.6 i 2.3.7 gde su dati rezultati koji se odnose na spektralna rastojanja koja uključuju regularne grafove, Teorema 2.4.1, kao i prateće Tvrdjenje 2.4.1, Posledica 2.4.1 i Teorema 2.4.2. gde je pokazano da spektralno rastojanje grafova ne zavisi od njihovih zajedničkih sopstvenih vrednosti, primeri kojima je pobijena Hipoteza 2.6.1 o A -spektralnom rastojanju dva grafa, Tvrdjenje 2.6.1 kojim je pokazano da L -spektralno rastojanje između dva grafa iz skupa povezanih regularnih grafova čije A -sopstvene vrednosti nisu manje od -2 nije veće od L -spektralnog rastojanja konture i kompletnog grafa, Teoreme 2.7.1-2.7.6 i Tvrdjenja 2.7.1-2.7.3, u kojima su određeni karakteristični polinomi, raspored sopstvenih vrednosti u monotono uređenom spektru, izračunata spektralna rastojanja i ocenjeni parametri spektralnog rastojanja grafova iz specijalno konstruisanih skupova

grafova, među kojima posebno izdvajamo Teoremu 2.7.3 čiji je dokaz baziran na funkciji generatriisi za brojeve zatvorenih šetnji.

- Poglavlje 3: Teorema 3.2.1 i Tvrdenje 3.2.1 kojim su date formule za izračunavanje broja razapinjućih zatvorenih šetnji određene dužine u izabranom čvoru grafa (odnosno u korenom grafu), Teorema 3.2.2 kojom se određuje broj zatvorenih šetnji određene dužine u izabranom čvoru grafa pomoću broja razapinjućih zatvorenih šetnji iste dužine u neizomornim grafitima razmatranog grafa, Tvrdenje 3.2.2 za broj kontura određene dužine u izabranom čvoru grafa u zavisnosti od broja razapinjućih zatvorenih šetnji u grafitima određenog tipa, Teorema 3.3.1 kojom je uvedena nova mera sličnosti za čvorove poredbenih mreža bazirana na razlici funkcija generatriisa za brojeve razapinjućih zatvorenih šetnji u neizomornim grafitima, analiza kompleksnosti postojećih i novopredloženog algoritma za poravnavanje mreža;
- Poglavlje 4: Lema 4.2.3 kojom se određuje N -spektralni radijus regularnog digrafa, Tvrdjenja 4.2.2 i 4.2.3 kojim se karakterišu povezani digrafovi bez parova čvorova sa zajedničkim prednjim susedima, Tvrdenje 4.3.1 kojim je određen N -spektar komplementa regularnog digrafa, Teorema 4.3.1 kojom se opisuje preplitanje N -sopstvenih vrednosti digrafova, Teoreme 4.3.2 i 4.3.3 u kojima je dat N -karakteristični polinom digrafa koji je od datog digrafa dobijen dodavanjem viseće grane, Tvrdenje 4.3.2 kojim je dat N -spektar digrafa grana regularnog digrafa, Teoreme 4.4.1 - 4.4.5 koje daju neophodne i dovoljne uslove za egzistenciju multigrafa koji je $(Q - N)$ -kospektralan sa posebno određenim digrafom.
- Računski rezultati i formule u Dodacima A, B i C.

Rezultati sumirani u Poglavlju 2 rezultat su saradnje sa dr Zoranom Stanićem, a rezultati izloženi u Poglavlju 3 i Poglavlju 4 proistekli su iz zajedničkog rada sa akademikom Dragošem Cvetkovićem.

Autor se ovom prilikom zahvaljuje dr Zoranu Staniću na ukazanom poverenju prilikom preuzimanja mentorstva, akademiku Dragošu Cvetkoviću na konstantnoj i svesrdnoj pomoći pruženoj tokom izrade disertacije, Miodragu Đurišiću na pomoći pri konstrukciji C++ programa *SDCalc*, dr Bošku Jovanoviću, dr Milanu Merkleu i dr Tatjani Davidović na korisnim savetima i podršci koju su pružili u toku doktorskih

studija, upravi Računarskog fakulteta na ukazanom poverenju i razumevanju, i na posletku Gordani Jovanović bez čije apsolutne podrške ovaj poduhvat ne bi ni bio započet.

Sadržaj

1	Uvod	1
1.1	Spektar grafa	1
1.2	Spektralno prepoznavanje grafova	9
2	Spektralna rastojanja grafova	13
2.1	Pojam spektralnog rastojanja grafova	14
2.2	Neki opšti rezultati	15
2.3	Spektralna rastojanja pri nekim grafovskim operacijama i transformacijama	19
2.4	Spektralna rastojanja grafova sa zajedničkim sopstvenim vrednostima	33
2.5	A -spektralna rastojanja nekih posebnih grafova	37
2.6	Hipoteze o spektralnog rastojanju grafova	43
2.7	Spektralna rastojanja u specijalno konstruisanim skupovima grafova .	47
2.7.1	Skup KK_n^j grafova	47
2.7.2	Neki kompletni multipartitni grafovi	49
2.7.3	Grafovi koji su dobijeni transformisanjem kompletnih multipartitnih grafova	51
2.7.4	Grafovi koji su rezultat primene operacije kompletni proizvod	60
2.7.5	Skup grafova dobijenih primenom operacije NEPS	61
2.7.6	Primeri A -spektralnih rastojanja u nekim skupovima regularnih grafova	64
2.8	AutoGraphiX i problemi spektralnog rastojanja grafova	69
3	Zatvorene šetnje i poravnavanje mreža	74
3.1	Uglovi grafa i šetnje u grafu	74
3.2	Brojanje zatvorenih šetnji	78
3.2.1	Pojam grafleta	78
3.2.2	Brojanje zatvorenih šetnji u graflightima	79
3.3	Poravnavanje mreža	85

3.3.1	Osnovni pojmovi	85
3.3.2	Neki algoritmi za globalno poravnavanje mreža	87
3.3.3	Novi pristup poravnavanju mreža	93
3.3.4	Analiza kompleksnosti	95
3.3.5	Za kraj ovog odeljka	96
4	Nenegativan spektar digrafa	98
4.1	Pregled osnovnih digrafovskih pojmova	99
4.2	Elementarni rezultati	102
4.3	Nenegativan spektar digrafa u odnosu na neke digrafovske operacije i transformacije	107
4.4	Multigrafovi i $(X - Y)$ -kospektralnost	112
	Literatura	125
A	Program SDCalc	133
B	Spektralna rastojanja grafova malog reda	140
C	Brojevi razapinjućih zatvorenih šetnji	147
	Biografija	156

Pregled slika

2.1	Okoline implementirane u AGX-u iz [16]	72
3.1	Graf G_1 i odgovarajući korenski grafovi	78
3.2	Grafi tipa 26 i neki njegovi indukovani podgrafovi	81
3.3	Indukovani podgrafovi reda 3	81
3.4	Indukovani podgrafovi reda 2 i reda 1	81
3.5	Grafi do reda pet sa numerisanim korenima iz [64]	90
4.1	Primer digrafa	100
4.2	Primer multidigrafa	101
4.3	Uniciklični digrafovi čiji čvorovi nemaju zajedničke prednje susede	105
4.4	Digrafovi D i D_1 iz primera 4.3.1	109
4.5	Digraf iz Primera 4.4.1 i odgovarajući ulazni i izlazni multigraf, redom	113
4.6	$(N - Q)$ -kospaktralni par iz Primera 4.4.2	115
4.7	Digrafovi iz Teoreme 4.4.3	121
4.8	Digrafovi reda 2 koji ne mogu učestvovati u operaciji spajanja iz Teoreme 4.4.3	123

Pregled tabela

2.1	Neki posebni grafovi i njihovi A -spektri	39
2.2	A -spektralna rastojanja grafa K_n i nekih posebnih grafova	41
2.3	A -spektralna rastojanja grafa K_{n_1, n_2} i nekih posebnih grafova	42
2.4	A -spektralna rastojanja grafa $CP_{n/2}$ i nekih posebnih grafova	42
3.1	Neki algoritmi za globalno poravnavanje mreža	93
B.1	A -spektralna rastojanja svih grafova do reda 8	140
B.2	A -spektralna rastojanja povezanih regularnih grafova do reda 11	141
B.3	A -spektralna rastojanja povezanih bipartitnih grafova do reda 11	141
B.4	A -spektralna rastojanja stabala do reda 11	141
B.5	L - i Q -spektralna rastojanja grafova reda $3 \leq n \leq 8$	142
B.6	L (i Q)-spektralna rastojanja povezanih regularnih grafova do reda 11.	142
B.7	L (i Q)-spektralna rastojanja povezanih bipartitnih grafova do reda 11.	143
B.8	L (i Q)-spektralna rastojanja stabala do reda 11.	143
B.9	Q -energije i Q -spektralna rastojanja svih grafova do reda 8 i poveza- nih regularnih grafova do reda 11	144
B.10	Q -energije i Q -spektralna rastojanja povezanih bipartitnih grafova i stabala do reda 11	145
B.11	L -energije i L -spektralna rastojanja svih grafova do reda 8	146
B.12	L -energije i L -spektralna rastojanja povezanih regularnih grafova do reda 11	146
C.1	Broj razapinjućih zatvorenih šetnji u određenom čvoru izračunat pri- menom principa uključenja-isključenja.	147
C.2	Broj razapinjućih zatvorenih šetnji u određenom korenu.	150
C.3	Algebarski izrazi za brojeve razapinjućih zatvorenih šetnji dužine k u grafletima do reda četiri	153
C.4	Težine grafleta određenih tipova.	153

1 Uvod

Teorija grafova je relativno mlada nauka. Godina 1936, kada je Denes König objavio knjigu *Teorija konačnih i beskonačnih grafova* (nem. *Theorie der endlichen und unendlichen Graphen*) smatra se godinom zasnivanja teorije grafova kao posebne matematičke discipline. Tada počinju i prva veća istraživanja u ovoj grani matematike. Nekoliko decenija kasnije matematičari uviđaju prednost korišćenja aparata linearne algebre pri izučavanju problema sa grafovima. Tako je proučavanje grafova uz pomoć sopstvenih vrednosti i sopstvenih vektora matrica koje su im pridružene označilo nastanak *spektralne teorije grafova*, jedne od najekspanzivnijih i široko primenjivanih teorija.

No, bez obzira na konstantan razvoj, postojanje brojnih grafova koji nisu okarakterisani svojim spektrom ostavlja otvoreno pitanje o generalnoj efikasnosti spektralne teorije grafova. Prirodno se nameću i za istraživače postaju interesantni takozvani *problemi spektralnog prepoznavanja* i *problemi spektralne rekonstrukcije* grafova.

Uvodno poglavlje je sastavljeno iz dva odeljka. U Odeljku 1 navodimo osnovne definicije i rezultate spektralne teorije grafova na koje smo se pozivali u istraživanju, a koji se mogu naći u knjigama [12, 22, 26, 30]. U Odeljku 2 dajemo kratak osvrt na opšte karakteristike problema spektralnog prepoznavanja grafova.

1.1 Spektar grafa

Nije moguće utvrditi kada su tačno ljudi počeli da koriste dijagrame, koje danas nazivamo grafovima, za slikovit opis problema, ali su svakako intenzivna istraživanja koja uključuju grafove u prvoj polovini prošlog veka doprinela da graf od pomoćnog crteža postane jedan od osnovnih matematičkih pojmova. Danas u literaturi nailazimo na različite definicije ovog matematičkog pojma. *Graf* (engl. *graph*) G možemo da definišemo kao uređen par $G = (V, E)$, čija prva komponenta,

$V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, predstavlja neprazan, konačan skup elemenata v_i koje nazivamo *čvorovima* (engl. *vertices*) grafa G . Dvoelementni podskupovi skupa V , u oznaci $\{v_i, v_j\}$ ili $v_i v_j$, jesu elementi skupa E , a zovemo ih *granama* (engl. *edges*) grafa G ¹. Ukoliko je $|V| = n$ i $|E| = m$ ², kažemo da je graf G reda n i veličine m . U zavisnosti od konteksta, često ćemo m grana razmatranog grafa G označavati sa e_1, e_2, \dots, e_m . Graf sa višestrukim granama i petljama nazivamo *multigraf* (engl. *multigraph*).

Spektralna teorija grafova je nastala iz potrebe da se pronađe neka opšta metoda uz pomoć koje bi bilo moguće rešiti što širu klasu grafovskih problema. Možemo je označiti kao skup tehnika uz pomoć kojih rešavamo probleme sa grafovima na osnovu spektra, pre svega, matrica susedstva koje su im pridružene.

Kažemo da su čvorovi v_i i v_j grane e grafa G *incidentni* grani e koja ih spaja, i obratno (vidi [88]). Stoga se čvorovi incidentni nekoj grani smatraju *susednim*, odnosno kažemo da su čvorovi grafa G *susedni* ukoliko su povezani granom. Dva grafa su *izomorfna* (vidi [22]) ako postoji uzajamno jednoznačno preslikavanje skupa njihovih čvorova (iz jednog na drugi) koje održava osobinu susednosti čvorova. *Stepen* čvora v_i grafa G , u oznaci $\deg(v_i)$, d_{v_i} ili d_i , jeste broj svih čvorova koji su susedni sa čvorom v_i u grafu G . Čvor čiji je stepen 0 nazivamo *izolovanim čvorom* (engl. *isolated vertex*), a ako je stepen čvora u grafu jednak 1, kažemo da je čvor *viseći* (engl. *pending vertex*). Graf čiji su svi čvorovi stepena r naziva se *r-regularnim grafom* (engl. *regular graph*).

Jako regularan graf sa parametrima (n, r, e, f) (vidi, na primer, [30]) jeste r -regularan graf reda n gde svaka dva susedna čvora imaju tačno e zajedničkih suseda, a svaka dva nesusedna čvora imaju tačno f zajedničkih suseda. Može se proveriti da ukoliko je G jako regularan graf sa parametrima (n, r, e, f) , tada je njegov komplement \bar{G} takođe jako regularan graf sa parametrima $(\bar{n}, \bar{r}, \bar{e}, \bar{f})$, gde je $\bar{n} = n$, $\bar{r} = n - r - 1$, $\bar{e} = n - 2 - 2r + f$ i $\bar{f} = n - 2r + e$. Kažemo da je jako regularan graf *primitivan* ukoliko su i graf G i njegov komplement \bar{G} povezani grafovi.

Pod *šetnjom* (engl. *walk*) dužine k u grafu G podrazumevamo niz, ne obavezno različitih, čvorova $v_1, v_2, \dots, v_k, v_{k+1}$ grafa G tako da za svako $i = 1, 2, \dots, k$ postoji grana od čvora v_i do čvora v_{i+1} . Ako su grane u šetnji međusobno različite, onda se ona naziva *staza* (vidi [88]). Staza u kojoj su i čvorovi međusobno različiti naziva

¹Napominjemo da su u Poglavlju 3 navedene oznake neznatno modifikovane u skladu sa oznakama zastupljenim u literaturi referentnoj za tematiku koja je u ovom poglavlju obrađivana.

²Ovde, kao i u daljem tekstu, $|S|$ označava broj elemenata skupa S .

se *put*. *Rastojanje* čvorova v_i i v_j grafa G jeste dužina najkraćeg puta između ovih čvorova. Graf G je *povezan* ako postoji put između bilo koja dva različita čvora grafa G . Ako postoje čvorovi koji se ne mogu povezati putem, graf je *nepovezan*. Nepovezan graf se sastoji od dva ili više odvojenih delova koji se nazivaju *komponente povezanosti* grafa (vidi [22]).

Matrica susedstva (engl. *adjacency matrix*) $A = [a_{ij}]$ grafa G čiji je skup čvorova $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ jeste binarna, kvadratna matrica reda n takva da je:

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{ako } v_i v_j \in E \\ 0, & \text{ako } v_i v_j \notin E \end{cases}.$$

Karakteristični polinom $\det(xI - A)$ matrice susedstva A grafa G naziva se *karakteristični polinom* grafa G i označava se sa $P_G(x)$. Kako je A simetrična matrica, to su sopstvene vrednosti ove matrice realni brojevi i nazivamo ih *sopstvenim vrednostima* (engl. *eigenvalues*) grafa G . Skup svih sopstvenih vrednosti grafa G jeste *spektar* grafa G (engl. *spectrum*). Pretpostavljaćemo da su sopstvene vrednosti grafa G u odnosu na matricu susedstva A uređene monotonno nerastuće, i označavati ih sa: $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$. Vektor x za koga važi $Ax = \lambda x$ jeste *sopstveni vektor* (engl. *eigenvector*) matrice A , odnosno grafa G koji odgovara sopstvenoj vrednosti λ . Najveća sopstvena vrednost λ_1 grafa G naziva se *indeks* grafa G . Indeks povezanog grafa je prosta sopstvena vrednost kojoj odgovara pozitivan sopstveni vektor, i obratno (Teorema 3.34 iz [26]). Važi i sledeće (Tvrdjenje 1.1.1 iz [30]):

Tvrdjenje 1.1.1 *Ako je $\Delta(G)$ maksimalni stepen grafa G , onda za svaku sopstvenu vrednost λ grafa G važi: $|\lambda| \leq \Delta(G)$.*

U opštem slučaju, primena spektralne teorije podrazumeva analizu strukturnih osobina grafova na osnovu spektra matrica koje su im pridružene. To svakako zahteva poznavanje sopstvenih vrednosti grafova, odnosno, u slučaju da se ne koristi pomoć računara, razradu tehnika za njihovo nalaženje. U nastavku slede definicije i spektri, odnosno karakteristični polinomi, opštepoznatih grafova koji su u izvesnom kontekstu prisutni i u disertaciji.

Put P_n (engl. *path*) dužine $n - 1$, za $n \geq 2$ jeste graf sa skupom čvorova $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ i $n - 1$ granom oblika $v_i v_{i+1}$, za svako $i = 1, 2, \dots, n - 1$. Spektar ovog grafa čine brojevi $2 \cos \frac{\pi}{n+1} i$, $i = 1, 2, \dots, n$.

Kontura C_n (engl. *cycle*) jeste povezan 2-regularan graf reda n , i spektar ovog grafa se sastoji od brojeva $2 \cos \frac{2\pi}{n}i$, $i = 1, 2, \dots, n$. Zbog svojih strukturnih karakteristika, konture se u literaturi često označavaju imenima mnogouglova, pa tako za $n = 3$ govorimo o *trouglu*, za $n = 4$ o *četvorouglu*, za $n = 5$ o *petouglu*, i slično.

Kompletan graf K_n (engl. *complete graph*) je povezan $(n-1)$ -regularan graf sa n čvorova. Karakteristični polinom kompletnog grafa je: $P(x) = (x-n+1)(x+1)^{n-1}$, odnosno spektar kompletnog grafa se sastoji od broja $n-1$ i $n-1$ brojeva jednakih -1 .

Povezan graf sa $n(\geq 1)$ čvorova i $n-1$ grana naziva se *stablo* (engl. *tree*). *Zvezda* (engl. *star*) predstavlja specijalan slučaj stabla. Ukoliko se radi o zvezdi reda n , koristimo oznaku $S_{1,n-1}$, i podrazumevamo da u takvom grafu postoji jedinstven čvor stepena $n-1$, koji se naziva *centar zvezde*, kao i da je stepen preostalih $n-1$ čvorova jednak 1.

Bipartitni graf (engl. *bipartite graph*) definišemo kao graf G čiji skup čvorova V može da se podeli na dva disjunktna podskupa V_1 i V_2 tako da grane grafa G povezuju jedino čvorove iz ovih disjunktних podskupova. Ako je svaki čvor iz skupa V_1 susedan sa svakim čvorom iz skupa V_2 , kažemo da je G *kompletan bipartitni graf* (engl. *complete bipartite graph*). Kompletan bipartitni graf najčešće označavamo sa K_{n_1,n_2} , gde su n_1 i n_2 brojevi elemenata skupova V_1 i V_2 , respektivno, a njegov spektar sadrži brojeve $\sqrt{n_1n_2}$, $-\sqrt{n_1n_2}$ i n_1+n_2-2 brojeva jednakih 0.

Spektar bipartitnog grafa okarakterisan je sledećom teoremom (Teorema 3.11 iz [26]) kojom se prikazuje povezanost spektralnih i strukturalnih osobina grafa.

Teorema 1.1.1 *Graf koji sadrži najmanje jednu granu jeste bipartitni ako i samo ako je njegov spektar, predstavljen kao skup tačaka na realnoj osi, simetričan u odnosu na nulu.*

Kompletan k-partitni graf (engl. *complete k-partite graph*) sa $n_1+n_2+\dots+n_k$ čvorova, u oznaci K_{n_1,n_2,\dots,n_k} definišemo kao povezan graf čiji skup čvorova može da se podeli na $1 \leq i \leq k$ međusobno disjunktних podskupova V_i od kojih svaki sadrži n_i čvorova, tako da svaka grana u grafu povezuje jedino čvorove iz različitih skupova V_i . Karakteristični polinom ovog grafa je:

$$P_{K_{n_1,n_2,\dots,n_k}}(x) = x^{n-k} \left(1 - \sum_{i=1}^k \frac{n_i}{x+n_i} \right) \prod_{j=1}^k (x+n_j).$$

Ukoliko je $n_1 = n_2 = \dots = n_k = \frac{n}{k}$, kompletan k -partitni graf se naziva *kompletan*

regularan multipartitni graf. Karakteristični polinom u ovom slučaju je:

$$P_{K_{\frac{n}{k}, \dots, \frac{n}{k}}}(x) = x^{n-k} \left(x + \frac{n}{k} - n\right) \left(x + \frac{n}{k}\right)^{k-1}.$$

Izvesni rezultati koji se odnose na spektar (bes)konačnih kompletnih multipartitnih grafova dati su u članku [78].

Kao što možemo da primetimo, spektar je poznat jedino za neke jednostavnije grafove, odnosno neke uske klase grafova. Stoga se pri primeni spektralne teorije u rešavanju grafovskih problema pribegava raznim kompozicijama grafova, kao što su, na primer, zbir ili unija grafova, koje nam omogućuju da spektar složenog grafa odredimo pomoću poznatog spektra nekih jednostavnijih grafova. Slede definicije najčešće korišćenih binarnih i unarnih grafovskih operacija.

Neka su $G_1 = (V, E_1)$ i $G_2 = (V, E_2)$ grafovi sa istim skupom čvorova $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, i sa mogućim dopustivim petljama. Jasno, smatramo da je $E_1 \neq E_2$. *Unija* (engl. *union*) $G_1 \cup G_2$ grafova G_1 i G_2 jeste graf $G = (V, E)$ takav da važi $E = E_1 \cup E_2$. Za matrice susedstva A_1, A_2 i A grafova G_1, G_2 i G , respektivno, važi $A = A_1 + A_2$. Međutim, spektar grafa $G = G_1 \cup G_2$ u opštem slučaju, nije određen spektrima grafova G_1 i G_2 , jer $G_1 \cup G_2$ zavisi ne samo od G_1 i G_2 , već i od načina na koji su čvorovi grafova G_1 i G_2 označeni. Sledeća teorema obezbeđuje izvesne informacije o spektru unije grafova, i više puta je korišćena pri izvođenju nekih dokaza u disertaciji, a može se naći, na primer, u [30], str. 19.

Teorema 1.1.2 (Courant-Weyl-ove nejednakosti) *Neka su A i B kvadratne Hermitske matrice reda n . Tada važi:*

$$\lambda_i(A + B) \leq \lambda_j(A) + \lambda_{i-j+1}(B), \quad (n \geq i \geq j \geq 1),$$

$$\lambda_i(A + B) \geq \lambda_j(A) + \lambda_{i-j+n}(B), \quad (1 \leq i \leq j \leq n).$$

Direktna suma (engl. *direct sum*) $G_1 \dot{+} G_2$ grafova $G_1 = (V_1, E_1)$ i $G_2 = (V_2, E_2)$, takvih da je $V_1 \cap V_2 = \emptyset$ jeste graf $G = (V, E)$ za čije skupove čvorova i grana važi $V = V_1 \cup V_2$ i $E = E_1 \cup E_2$. Ukoliko sa A_1, A_2 i A označimo matrice susedstva grafova G_1, G_2 i $G_1 \dot{+} G_2$, respektivno, razmatranjem njihovih determinanti lako dokazujemo da važi (Teorema 2.4 iz [26]):

Teorema 1.1.3 *Karakteristični polinom direktne sume grafova G_1 i G_2 je:*

$$P_{G_1 \dot{+} G_2}(x) = P_{G_1}(x)P_{G_2}(x).$$

Kompletan proizvod (engl. *complete product*) $G_1 \nabla G_2$ grafova G_1 i G_2 jeste graf dobijen iz $G_1 \dot{+} G_2$ spajanjem svakog čvora grafa G_1 granom sa svakim čvorom grafa G_2 . Karakteristični polinom grafa $G_1 \nabla G_2$ dat je sledećom relacijom (Teorema 2.7 iz [26]):

$$P_{G_1 \nabla G_2}(x) = (-1)^{n_2} P_{G_1}(x) P_{\overline{G_2}}(-x-1) + (-1)^{n_1} P_{G_2}(x) P_{\overline{G_1}}(-x-1) \\ - (-1)^{n_1+n_2} P_{\overline{G_1}}(-x-1) P_{\overline{G_2}}(-x-1),$$

gde su n_1 i n_2 brojevi čvorova grafova G_1 i G_2 , respektivno.

Pri konstrukciji izvesnih familija složenih grafova, čije smo spektre analizirali u disertaciji, prethodno spomenute binarne grafovske operacije kombinovani smo sa sledećim unarnim grafovskim operacijama.

Komplement (engl. *complement*) \overline{G} grafa G jeste graf sa istim skupom čvorova kao i graf G , pri čemu su dva čvora susedna u \overline{G} ako i samo ako nisu susedni u G .

Prethodno opisane grafovske operacije direktna suma, kompletan proizvod i komplement povezane su sledećom relacijom: $\overline{G_1 \nabla G_2} = \overline{G_1} \dot{+} \overline{G_2}$.

Graf grana $L(G)$ (engl. *line graph*) grafa G jeste graf čiji skup čvorova odgovara skupu grana grafa G , pri čemu su dva čvora grafa $L(G)$ susedna ako su odgovarajuće grane grafa G susedne u grafu G . Karakteristični polinom grafa grana $L(G)$ r -regularnog grafa G sa n čvorova i m grana je (Teorema 2.4.1 iz [30]):

$$P_{L(G)}(x) = (x+2)^{m-n} P_G(x-r+2).$$

Definiciju grafovske operacije NEPS (engl. *non-complete extended p-sum*), u odnosu na koju smo razmatrali spektralna rastojanja grafova u Poglavlju 2, navodimo kako je to učinjeno u [30], strana 44:

Neka je \mathcal{B} skup ne-nula binarnih n -torki, tj. $\mathcal{B} \subseteq \{0, 1\}^n \setminus \{(0, \dots, 0)\}$. NEPS grafova G_1, \dots, G_n sa bazom \mathcal{B} jeste graf sa skupom čvorova $V(G_1) \times \dots \times V(G_n)$, u kome su dva čvora (x_1, \dots, x_n) i (y_1, \dots, y_n) susedna ako i samo ako postoji n -torka $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_n) \in \mathcal{B}$ takva da je $x_i = y_i$ kada je $\beta_i = 0$, i x_i je susedan y_i (u G_i) za $\beta_i = 1$.

Manje promene u strukturi polaznog grafa, kao što su, na primer, uklanjanje ili dodavanje čvorova ili grana, u disertaciji su označene kao grafovske transformacije i analizirane su u kontekstu Menhetn spektralnog rastojanja u Poglavlju 2. Jasno je da su podgrafovi rezultat primene grafovskih transformacija na konkretan graf.

Kažemo da je graf $G_1 = (V_1, E_1)$ *podgraf* (engl. *subgraph*) grafa $G = (V, E)$ ako važi $V_1 \subset V$ i $E_1 \subset E$. Kada je $V_1 = V$ podgraf G_1 naziva se *razapinjući*

podgraf (engl. *spanning subgraph*) grafa G . G_1 je *indukovani podgraf* (engl. *induced subgraph*) grafa G ako u skupu E_1 postoje sve grane skupa E koje povezuju čvorove iz skupa V_1 .

Graf subdivizije $S(G)$ (engl. *subdivision graph*) grafa G nastaje zamenom svake grane grafa G putem dužine 2, odnosno umetanjem novog čvora na svaku od grana grafa G . Ako je G r -regularan graf sa n čvorova i m grana, karakteristični polinom grafa subdivizije $S(G)$ je (Teorema 2.17 iz [26]):

$$P_{S(G)}(x) = x^{m-n} P_G(x^2 - r).$$

O promenama u spektru grafa koje grafovske transformacije uzrokuju čitalac može pročitati u knjigama [30, 31], a u nastavku navodimo dva opštepoznata tvrđenja kojima se opisuju promene indeksa pri transformaciji uklanjanja čvora, odnosno grane grafa (Tvrđenja 1.3.9 i 1.3.10 iz [30]):

Tvrđenje 1.1.2 *Za proizvoljan čvor v_i povezanog grafa G važi: $\lambda_1(G - v_i) < \lambda_1(G)^3$.*

Tvrđenje 1.1.3 *Ako je graf $G - v_i v_j$ dobijen uklanjanjem grane $v_i v_j$ povezanog grafa G , onda je $\lambda_1(G - v_i v_j) < \lambda_1(G)^4$.*

Tvrđenje 1.1.2 predstavlja zapravo specijalan slučaj naredne teoreme koja može da se pronade, na primer, u [30], str. 17:

Teorema 1.1.4 *Neka je Q realna $n \times m$ matrica takva da važi: $Q^T Q = I$, i neka je A realna simetrična kvadratna matrica reda n čije su sopstvene vrednosti $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$. Ako su $\nu_1 \geq \dots \geq \nu_m$ sopstvene vrednosti matrice $Q^T A Q$, onda je:*

$$\lambda_{n-m+i} \leq \nu_i \leq \lambda_i, \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (1.1)$$

U slučaju kada nejednakosti (1.1) važe, kažemo da sopstvene vrednosti μ_i *prepliću* (engl. *interlace*) sopstvene vrednosti λ_j .

Sledeća posledica prethodne teoreme poznata je pod nazivom *Teorema o preplitanju* (engl. *Interlacing Theorem*), i često se kao spektralna tehnika primenjuje ne

³Za čvor $v_i \in V$, $G - v_i$ označava graf dobijen od $G = (V, E)$ uklanjanjem čvora v_i kao i svih grana koje su ovom čvoru incidentne.

⁴Ako je $v_i v_j$ grana grafa G , tada $G - v_i v_j$ označava graf dobijen od G uklanjanjem grane $v_i v_j$. Opštije, za skup grana E grafa G , graf koji je nastao iz G uklanjanjem grana skupa E označavamo sa $G - E$.

samo u ovoj disertaciji, već i u teoriji grafova uopšte. Teorema o preplitanju predstavlja i pomoćno sredstvo pri sprovođenju pretrage u grafovskoj bazi podataka. Naime, u nekim bazama podataka podaci su predstavljeni pomoću grafova (primere, kako sugeriše [18], čitalac može potražiti u [79, 83, 95]). Upit za jednu takvu bazu podataka takođe je u formi grafa. Kako bi se pronašao traženi podatak u bazi, neophodno je porediti podgrafove u grafu koji predstavlja upit sa podgrafovima grafova koji su kao podaci sačuvani u bazi. U toj situaciji Teorema o preplitanju predstavlja dobru alternativu problemu izomorfizma podgrafova, jer dok je problem kojim bi se poredili podgrafovi NP-kompletan, poređenje spektra ovih podgrafova može da se obavi u polinomijalnom vremenu.

Posledica 1.1.1 *Neka je G graf sa n čvorova i sopstvenim vrednostima ⁵ $\lambda_1(G) \geq \lambda_2(G) \geq \dots \geq \lambda_n(G)$, i neka je H indukovani podgraf grafa G reda m . Ako su $\lambda_1(H) \geq \lambda_2(H) \geq \dots \geq \lambda_m(H)$ sopstvene vrednosti grafa H , onda je:*

$$\lambda_{n-m+i}(G) \leq \lambda_i(H) \leq \lambda_i(G), \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

Prethodno navedene nejednakosti poznate su pod nazivom *Košijeve nejednakosti* (engl. *Cauchy's inequalities*).

Usled brojnih primena spektra grafova, posebno u računarskim naukama, prirodno se nameće mogućnost izbora matrica koje se grafovima mogu pridružiti i u odnosu na koje mogu da se analiziraju njihove spektralno-strukturalne karakteristike. Tako se u zavisnosti od razmatranog problema grafovi mogu posmatrati u kontekstu Laplasove matrice, nenegativne Laplasove matrice, normalizovane Laplasove matrice ili pak Zajdelove matrice. Ako sa D označimo dijagonalnu matricu $\text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n)$, gde je d_i stepen čvora v_i , $i = 1, 2, \dots, n$ grafa G , onda je *Laplasova matrica* (engl. *Laplacian matrix*) grafa G matrica $L = D - A$, gde je A matrica susedstva grafa G . *Nenegativna Laplasova matrica* (engl. *signless Laplacian matrix*) jeste matrica $Q = D + A$, *normalizovana Laplasova matrica* (engl. *normalized Laplacian*) je $\hat{L} = D^{-1/2}LD^{-1/2}$, dok je *Zajdelova matrica* (engl. *Seidel matrix*) $S = J - I - 2A$, gde je J kvadratna matrica reda n čiji su svi elementi jednaki 1. O spektralnim osobinama Laplasove matrice i nenegativne Laplasove matrice, čitalac može pročitati u, na primer [30, 32, 33, 34].

Matrice L i Q su pozitivno semidefinitne što znači da su im sopstvene vrednosti nenegativne, tj. $\mu_1 \geq \dots \geq \mu_n \geq 0$ i $\kappa_1 \geq \dots \geq \kappa_n \geq 0$, respektivno. Uz to, multiplicitet sopstvene vrednosti koja je jednaka 0 matrice L pridružene grafu G ukazuje

⁵Sopstvene vrednosti matrice susedstva grafa G .

na broj komponenata grafa (Teorema 7.1.2 iz [30]), odnosno broj komponenata koje su bipartitne ili trivijalne, u slučaju da se radi o sopstvenoj vrednosti matrice Q (Posledica 7.8.2 iz [30]).

Kada je reč o preplitanju sopstvenih vrednosti grafa G u odnosu na matricu L , i slično matricu Q , može da se pokaže da važi analogon Teoreme o preplitanju ali u odnosu na grane grafa (Teorema 7.1.5 iz [30]):

Teorema 1.1.5 *Ako je e proizvoljna grana grafa G i $G' = G - e$, onda je:*

$$0 = \mu_n(G') = \mu_n(G) \leq \mu_{n-1}(G') \leq \mu_{n-1}(G) \leq \dots \leq \mu_2(G) \leq \mu_1(G') \leq \mu_1(G).$$

Naravno, za graf H koji je nastao uklanjanjem k ($k < n$) grana grafa G uzastopna primena gore navedene teoreme k puta rezultira osobinom preplitanja u sledećem obliku, tj. $\mu_{i+k}(G) \leq \mu_i(H) \leq \mu_i(G)$, za $i = 1, 2, \dots, n - k$.

Grafovi čiji je spektar isti u odnosu na proizvoljnu matricu M koja im je pridružena nazivaju se *M -kospektralni* grafovi (engl. *M -cospectral graphs*). Graf H koji je *M -kospektralan* sa grafom G ali ne i izomorfan grafu G naziva se *M -kospektralni parnjak* (engl. *M -cospectral mate*) grafa G .

1.2 Spektralno prepoznavanje grafova

Problemi spektralnog prepoznavanja grafova na naučno-istraživačku scenu stupaju kao posledica razvoja i sve veće primene spektralne teorije grafova.

Sa jedne strane, grafove susrećemo u raznim naučnim disciplinama, poput hemije, fizike, biologije, sociologije, računarstva, i slično. *Glavni razlog za ovako širok spektar primena leži, u prvom redu, u jasnoj geometrijskoj poruci koju graf sadrži a koja je bliska intuitivnoj predstavi koju čovek ima o osobinama i ponašanju objekta koji se predstavlja grafom* (D. Cvetković, [21]). Ovo je svakako tačno kada se radi o grafovima sa malim brojem čvorova. Međutim, kada uz pomoć grafova pokušamo da predstavimo velike strukture, odnosno strukture čiji su modeli grafovi sa velikim brojem čvorova, kao što su društvene mreže ili Internet, kao rezultat dobijamo nepregledne i nesugestivne crteže iz kojih nije moguće dobiti neke korisne informacije. U takvim situacijama potrebno je razviti strategije i tehnike za rešavanje problema prepoznavanja grafova, i dizajnirati računске programe koji bi potpomogli razmatranje problema ove vrste.

Sa druge strane, pronalaženjem brojnih primera kospektralnih grafova pobija se hipoteza o karakterizaciji grafa pomoću spektra, postavljena u začetku razvoja spektralne teorije grafova. Ustanovljeno je da većina grafova iz pojedinih klasa grafova ne može da se prepozna na osnovu spektra. Tako je, na primer, dokazano da skoro svako stablo nije okarakterisano svojim spektrom. Za rešavanje su se prirodno nametnuli problemi *spektralnog prepoznavanja grafova*, koji podrazumevaju prepoznavanje čitavih grafova ili nekih njihovih delova bilo na tačan ili približan način. Zapravo, možemo reći [18] da je čitava spektralna teorija grafova u izvesnom smislu povezana sa prepoznavanjem grafova jer spektralni parametri grafa nose dosta informacija o strukturi grafa, kako lokalnoj tako i globalnoj. U preglednom članku [18] ukazano je na nekoliko problema spektralnog prepoznavanja grafova:

- karakterizacija grafova sa datim spektrom,
- tačna ili približna konstrukcija grafova sa zadatim spektrom,
- sličnost grafova,
- grafovske perturbacije.

Kada razmatramo sličnost grafova naglasimo da je ne treba dovoditi u vezu sa sličnošću matrica koje su pridružene grafovima. Drugim rečima, dva grafa mogu da budu slična bez obzira da li su u takvoj relaciji i njima pridružene matrice. Sličnost grafova se ustanovljava razmatranjem spektralnih rastojanja između grafova, kada se radi o poredbenim grafovima sa jednakim brojem čvorova, odnosno izračunavanjem mera sličnosti, koje mogu i ne moraju da budu spektralno zasnovane, u slučaju da su poredbeni grafovi različitog reda. U drugom slučaju poredbeni grafovi najčešće imaju veliki broj čvorova, i nazivaju se *mrežama*, dok se ustanovljavanje sličnosti između njih označava kao *poravnavanje mreža*. U tom kontekstu možemo da govorimo o *spektralnog prepoznavanju mreža*. Osnovni zadatak se sastoji u pronalaženju zajedničkih ili sličnih podgrafova u poredbenim mrežama. Kako je problem izomorfizma podgrafova NP-kompletan, rešavanje ovog zadatka izvodi se uz pomoć heurističkih algoritama. U Poglavlju 3 ove disertacije dat je kratak pregled nekih od postojećih algoritama za globalno poravnavanje mreža, i definisana nova mera sličnosti za njihove čvorove. Mera je zasnovana na razlici funkcija generatrisa za brojeve razapinjućih zatvorenih šetnji u neizomorfnim grafovima mreža koje se porede. Broj razapinjućih zatvorenih šetnji u grafovima računat je prema novopredloženoj formuli u čijoj se osnovi nalazi princip uključenja-isključenja.

Spektralno rastojanje između grafova istog reda jeste Euklidovo, Menhetn ili neko drugo rastojanje između nizova njihovih sopstvenih vrednosti (u odnosu na matricu koja je grafovima pridružena)⁶. Ukoliko su dva grafa na rastojanju jednakom nula, to neophodno ne znači da su grafovi jednaki, tj. izomorfni, već za takva dva grafa kažemo da su kospektralni. U tom smislu, na spektralno rastojanje grafova možemo da gledamo kao na meru sličnosti između grafova sa jednakim brojem čvorova, pa grafove smatramo *sličnim* ukoliko je njihovo spektralno rastojanje malo. Na taj način, kospektralni grafovi su slični. U Poglavlju 2 disertacije bavimo se Menhetn spektralnim rastojanjem grafova u odnosu na matricu susedstva, Laplasovu matricu i nenegativnu Laplasovu matricu. U preglednom članku [18] predloženo je uvođenje pozitivnog rastojanja između kospektralnih grafova. Naime, za svako spektralno rastojanje moglo bi da se definiše odgovarajuće *kospektralno rastojanje grafova* (engl. *cospectral graph distance*). Tada bi se umesto razlike odgovarajućih sopstvenih vrednosti grafova razmatrale razlike odgovarajućih elemenata matrice uglova (engl. *angle matrix*)⁷. Stoga bi *Menhetn kospektralno rastojanje grafova* (engl. *Manhattan cospectral graph distance*) bilo definisano kao suma apsolutnih vrednosti razlika odgovarajućih elemenata matrica uglova poredbenih grafova.

Pojam spektralnog rastojanja predstavlja dobru polaznu osnovu za dizajniranje različitih algoritama heurističkog tipa pomoću kojih je moguće konstruisanje grafova sa datim spektrom, što je deo takozvanih problema *spektralne rekonstrukcije grafova*. Neke idejne smernice za razmatranje problema ove vrste takođe su date u [18], dok je u Poglavlju 2 ove disertacije opisano kako bi jedan od najpopularnijih interaktivnih kompjuterskih programa, *AutoGraphiX*, mogao da se upotrebi za rešavanje problema koji se tiču spektralnog rastojanja grafova.

Na slične grafove možemo da gledamo i kao na grafove koji su nastali jedni iz drugih nekim malim perturbacijama. *Perturbacija* grafa podrazumeva malu promenu u strukturi ili spektru grafa. U disertaciji su promene u strukturi grafa, kao što su, na primer, uklanjanje ili dodavanje čvorova ili grana grafu, označene kao grafovske transformacije, i analizirane su u kontekstu Menhetn spektralnog rastojanja u Poglavlju 2.

Kao što smo već istakli, postojanje kospektralnih grafova baca senku sumnje na efikasnost spektralne teorije grafova. D. Cvetković u pristupnom predavanju SANU

⁶Ovde podrazumevamo da su sopstvene vrednosti poredbenih grafova uređene monotono nerastuće.

⁷O uglovima grafa kao i o matrici uglova grafa biće više reči u Poglavlju 3.

[23] napominje da bi uz poznavanje spektra, poznavanje uglova grafa povećalo opseg problema u teoriji grafova koji bi mogli da se proučavaju i analiziraju. Međutim, ističe, da sopstvene vrednosti i uglovi ipak ne sadrže dovoljno informacija za potpunu karakterizaciju grafova, pa opet ostajemo uskraćeni za tretiranje izvesnih grafovskih problema. Međutim, ono što svakako ide u prilog efikasnosti spektralne teorije grafova jeste njena velika popularnost u primenama u računarstvu [2, 18, 20]. Tu se postojanje kospektralnih grafova ne smatra nedostatkom, jer je količina informacija koja može da se dobije iz spektra dovoljna za analizu i rešavanje računarskih problema. Pokazalo se da se spektri pojavljuju u raznim delovima računarstva, pa su tako u preglednom članku [2] precizirane i grane računarskih nauka (engl. *Computer Science*) u kojima se primenjuju spektralne tehnike: ekspanderi i kombinatorna optimizacija, složene mreže i topologija interneta, *data mining*, analiza slika i prepoznavanje oblika, pretraga Interneta, multiprocesori, antivirusna zaštita, razvojne mreže, statističke baze podataka i socijalne mreže, kvantno računarstvo, bioinformatika, teorija kodiranja i teorija sistema. Glavni razlog upotrebe spektra grafova u računarstvu proističe iz činjenice da se sopstvene vrednosti i sopstveni vektori matrica pridruženih grafu brzo izračunavaju - računaska kompleksnost iznosi $O(n^3)$, gde je n broj čvorova grafa.

Neka novija numerička istraživanja impliciraju pozitivne zaključke u pogledu karakterizacije grafova pomoću spektra. Naime, statistički podaci pokazuju da se za povezane grafove sa n čvorova proporcija onih koji se ne mogu okarakterisati spektrom smanjuje za $n > 10$. Stoga se u [35] postavlja hipoteza da su skoro svi grafovi sa n čvorova okarakterisani svojim spektrom za $n \rightarrow \infty$. Svakako bi dokaz ove hipoteze opravdao zastupljeno mišljenje o efikasnosti spektralne teorije grafova.

Na pitanje da li su spektralne tehnike dovoljno jake da postanu kohezioni faktor za celu teoriju grafova danas se sa velikom sigurnošću može odgovoriti potvrdno. Možda bi trebalo detaljnije videti statistiku objavljenih radova ali spomenute spontane primene u računarstvu predstavljaju jak pokazatelj da su spektralne tehnike prepoznate kao zajedničke tehnike cele teorije grafova. (D. Cvetković, [20])

2 Spektralna rastojanja grafova

Problemi u vezi sa spektralnim rastojanjem grafova razmatrani su i ranije. Richard Brualdi na problemskoj sekciji matematičke radionice o spektrima grafova koja je održana 2006. godine u Averiju, Portugalija (vidi [85]) posebno izlaže neke od ovih problema, od kada oni ponovo postaju interesantni za istraživače.

Sadržaj ovog poglavlja baziran je na rezultatima izloženim u radovima autora [58], [57], [59] i [60].

Poglavljje je organizovano na sledeći način. U Odeljku 1 dajemo pregled osnovnih definicija koje se odnose na spektralno rastojanje i parametre spektralnih rastojanja. Odeljak 2 sadrži neke opšte relacije vezane prvenstveno za A -spektralna rastojanja grafova, a značajne zbog povezanosti spektralnog rastojanja sa energijom grafa. U Odeljku 3 razmatramo kako grafovске transformacije poput uklanjanja čvorova ili grana grafa utiču na promenu spektralnog rastojanja. Izračunavamo spektralna rastojanja grafova dobijenih određenim grafovskim operacijama, kao što su komplement, graf grana ili NEPS, a izlažemo i relacije za odnos spektralnih rastojanja nekih grafova u odnosu na spektre različitih matrica. U Odeljku 4 razmatramo spektralna rastojanja grafova sa zajedničkim sopstvenim vrednostima. A -spektralna rastojanja između grafova koji su najzastupljeniji u literaturi sumiramo u Odeljku 5. U Odeljku 6 komentarišemo hipoteze izložene u [59] koje se tiču A -spektralnog rastojanja grafova. U Odeljku 7 konstruišemo familije grafova sa jednakim brojem čvorova i izračunavamo parametre spektralnih rastojanja, odnosno ekstremalna spektralna rastojanja u ovim familijama. Poglavlje zaključujemo idejnim smernicama za modifikaciju kompjuterskog programa *AutoGraphiX* za koji verujemo da bi mogao da potpomogne istraživanje i ovog problema spektralne teorije grafova. Računski rezultati koji se odnose na spektralna rastojanja grafova u nekim skupovima grafova do reda 11 dobijeni uz pomoć $C++$ programa **SDCalc**, posebno kreiranog za ove potrebe, kao i kratak opis ovog programa, izloženi su u Dodatku A i Dodatku B.

2.1 Pojam spektralnog rastojanja grafova

Neka su G_1 i G_2 neizomorfni grafovi reda n . Sem kada to nije posebno naglašeno, razmatraćemo grafove bez petlji i višestrukih grana. Neka su spektri ovih grafova u odnosu na matricu M : $m_1(G_1) \geq m_2(G_1) \geq \dots \geq m_n(G_1)$ i $m_1(G_2) \geq m_2(G_2) \geq \dots \geq m_n(G_2)$, respektivno. M -spektralno rastojanje, odnosno rastojanje između spektara ovih grafova u odnosu na matricu M , definišemo kao (vidi [85]):

$$\sigma_M(G_1, G_2) = \sum_{i=1}^n |m_i(G_1) - m_i(G_2)|.$$

Stoga, za grafove G_1 i G_2 kažemo da su ϵ_M -kospektralni ukoliko je $\sigma_M(G_1, G_2) \leq \epsilon$, gde je ϵ proizvoljan nenegativan broj. Jasno, grafovi G_1 i G_2 jesu 0_M -kospektralni ako i samo ako su M -kospektralni.

Na ovaj način definisano spektralno rastojanje grafova razmatrali smo u odnosu na matricu susedstva A , Laplasovu matricu $L = D - A$ i nenegativnu Laplasovu matricu $Q = D + A$, gde je D dijagonalna matrica stepeni čvorova razmatranog grafa G . Sopstvene vrednosti grafa G reda n u odnosu na navedene matrice, redom, označavali smo sa: $\lambda_i(G)$, $\mu_i(G)$ i $\kappa_i(G)$, za $i = 1, 2, \dots, n$.

Od posebnog interesa je, međutim, izračunavanje ili ocenjivanje vrednosti *parametara spektralnih rastojanja* grafova u nekim specijalno izabranim klasama grafova istog reda. Često ćemo ove parametre, s obzirom na njihovu definiciju, zvati *ekstremalna spektralna rastojanja*. Neka je \mathcal{G} proizvoljan skup grafova reda n . M -kospektralnost (engl. *M-cospectrality*) grafa $G \in \mathcal{G}$ definišemo kao (vidi [85]):

$$cs_{\mathcal{G}}^M(G) = \min\{\sigma_M(G, H) : H \in \mathcal{G}, H \neq G\}.$$

Stoga je $cs_{\mathcal{G}}^M(G) = 0$ ako i samo ako graf G ima M -kospektralnog parnjaka. M -mera kospektralnosti (engl. *M-cospectrality measure*) na skupu \mathcal{G} je:

$$cs^M(\mathcal{G}) = \max\{cs_{\mathcal{G}}^M(G) : G \in \mathcal{G}\}.$$

Ovom funkcijom se procenjuje koliko spektar, u odnosu na matricu M , nekog grafa iz skupa \mathcal{G} može da bude udaljen od spektra bilo kog drugog grafa iz istog skupa. U radu [59] definisani su još i: M -spektralni ekscentricitet (engl. *M-spectral eccentricity*) grafa G iz skupa \mathcal{G} :

$$secc_{\mathcal{G}}^M(G) = \max\{\sigma_M(G, H) : H \in \mathcal{G}\},$$

kao i M -spektralni dijаметar (engl. M -spectral diameter) na skupu \mathcal{G} :

$$\text{sdiam}^M(\mathcal{G}) = \max\{\text{secc}_G^M(G) : G \in \mathcal{G}\}.$$

Funkcija spektralni dijаметar na skupu \mathcal{G} pokazuje koliko velika može biti spektralna udaljenost grafova iz datog skupa.

U narednim odeljcima primetićemo da je spektralno rastojanje na izvestan način povezano sa energijom grafa. *Energija* (engl. *energy*) grafa G reda n definisana je od strane Gutmana (vidi [42]) 1978. godine kao suma apsolutnih vrednosti sopstvenih vrednosti grafa G u odnosu na matricu susedstva A , odnosno

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

Energija grafa nije glatka funkcija što probleme u kojima se ona razmatra na diskretnim strukturama, kao što su grafovi, čini teškim, ali istovremeno i izazovnim za istraživače iz raznih oblasti. Tako su u knjizi [92] izložena dva teška i još uvek u potpunosti nerešena problema koja se tiču energije grafa. Jedan od njih, u knjizi označen kao *Grand Open Problem*, podrazumeva opisivanje grafova reda n koji imaju maksimalnu energiju. Rešenje je poznato za $n = 4k^2$, gde je k ceo broj, dok su traženi ekstremalni grafovi jako regularni grafovi. Kako da se ustanovi da dva grafa imaju istu energiju, zadatak je drugog teškog i nerešenog problema. O još nekim osobinama energije grafa može se pročitati u, na primer, [44] i [52]. *Laplasova energija* grafa G reda n definisana je na sledeći način (vidi [45]):

$$LE(G) = \sum_{i=1}^n \left| \mu_i(G) - \frac{2m}{n} \right|,$$

gde je m broj grana grafa G . Po analogiji sa $LE(G)$, *nenegativnu Laplasovu energiju grafa* definišemo:

$$QE(G) = \sum_{i=1}^n \left| \kappa_i(G) - \frac{2m}{n} \right|.$$

2.2 Neki opšti rezultati

U ovom odeljku izlažemo nekoliko opštih rezultata koji se tiču A -spektralnog rastojanja grafova. Prvi među njima značajni su zbog povezanosti A -spektralnog rastojanja i energije grafa. Štaviše, u sledećim odeljcima primetićemo da su vrednosti parametara spektralnih rastojanja u određenim specijalno konstruisanim skupovima

grafova jednaki energiji nekih posebnih grafova. Odeljak zaključujemo određivanjem jednog gornjeg ograničenja za A -spektralno rastojanje dva proizvoljna grafa reda n .

Lema 2.2.1 *Neka su $n^-(G_1)$ i $n^-(G_2)$ brojevi negativnih sopstvenih vrednosti grafova G_1 i G_2 reda n , respektivno. Označimo sa $k = \max\{n^-(G_1), n^-(G_2)\}$ i $l = |n^-(G_1) - n^-(G_2)|$ i pretpostavimo da $|\lambda_i(G_1)| \geq |\lambda_i(G_2)|$ važi, za svako $i \leq n - k$ i $i > n - k + l$. Tada je:*

$$\sigma_A(G_1, G_2) = E(G_1) - E(G_2) + 2 \sum_{n-k < i \leq n-k+l} |\lambda_i(G_2)|.$$

Dokaz. Za vrednosti $i \leq n - k$ i $i > n - k + l$ imamo da je $|\lambda_i(G_1) - \lambda_i(G_2)| = |\lambda_i(G_1)| - |\lambda_i(G_2)|$, dok je u ostalim slučajevima $|\lambda_i(G_1) - \lambda_i(G_2)| = |\lambda_i(G_1)| + |\lambda_i(G_2)|$. Stoga je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G_1, G_2) &= \sum_{i=1}^{n-k} (|\lambda_i(G_1)| - |\lambda_i(G_2)|) + \sum_{n-k < i \leq n-k+l} (|\lambda_i(G_1)| + |\lambda_i(G_2)|) \\ &+ \sum_{i=n-k+l+1}^n (|\lambda_i(G_1)| - |\lambda_i(G_2)|) = E(G_1) - E(G_2) + 2 \sum_{n-k < i \leq n-k+l} |\lambda_i(G_2)|. \end{aligned}$$

■

Posledica 2.2.1 *Ako su G_1 i G_2 bipartitni grafovi reda n , i ako važi $\lambda_i(G_1) \geq \lambda_i(G_2)$, $i = 1, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$, onda je:*

$$\sigma_A(G_1, G_2) = E(G_1) - E(G_2).$$

Dokaz. Kako su oba grafa bipartitni grafovi, biće:

$$\sigma_A(G_1, G_2) = 2 \sum_{i=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} |\lambda_i(G_1) - \lambda_i(G_2)|$$

(primetimo da ako je n neparan broj, važi: $\lambda_{\lfloor n/2 \rfloor + 1}(G_1) = \lambda_{\lfloor n/2 \rfloor + 1}(G_2) = 0$). Dalje je $|\lambda_i(G_1) - \lambda_i(G_2)| = \lambda_i(G_1) - \lambda_i(G_2)$ ($i = 1, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$), odakle sledi dokaz. ■

Tvrđenje 2.2.1 *Neka su stepeni regularnosti grafova G_1 i G_2 sa n čvorova redom jednaki r_1 i r_2 . Ako je $r_1 \leq r_2$, onda važe sledeće nejednakosti:*

$$(i) \quad \sigma_Q(G_1, G_2) \leq \sigma_A(G_1, G_2) + n(r_2 - r_1),$$

$$(ii) \sigma_L(G_1, G_2) \leq \sigma_A(G_1, G_2) + n(r_2 - r_1).$$

Dokaz. Kako se karakteristični polinomi matrice susedstva i Laplasove matrice regularnih grafova mogu izraziti preko karakterističnog polinoma nenegativne Laplasove matrice (vidi, na primer, [19]), to je Q -spektar r -regularnog grafa G reda n : $\lambda_1(G) + r \geq \lambda_2(G) + r \geq \dots \geq \lambda_n(G) + r$, dok je njegov L -spektar sastavljen od: $r - \lambda_n(G) \geq r - \lambda_{n-1}(G) \geq \dots \geq r - \lambda_1(G)$. Kao što je već naglašeno, $\lambda_i(G)$, $1 \leq i \leq n$ jesu sopstvene vrednosti razmatranog grafa u odnosu na matricu susedstva.

Sada za (i) nalazimo da je:

$$\begin{aligned} \sigma_Q(G_1, G_2) &= \sum_{i=1}^n |\kappa_i(G_1) - \kappa_i(G_2)| = \sum_{i=1}^n |(\lambda_i(G_1) + r_1) - (\lambda_i(G_2) + r_2)| \leq \\ &= \sum_{i=1}^n |\lambda_i(G_1) - \lambda_i(G_2)| + \sum_{i=1}^n |r_1 - r_2| = \sigma_A(G_1, G_2) + n(r_2 - r_1). \end{aligned}$$

Tvrđenje (ii) se dokazuje na sličan način. ■

Napomena 2.2.1 *Ako su G_1 i G_2 regularni grafovi istog stepena regularnosti, tada je:*

$$\sigma_A(G_1, G_2) = \sigma_Q(G_1, G_2) = \sigma_L(G_1, G_2). \quad (2.1)$$

Teorema 2.2.1 *Pretpostavimo da nejednakost*

$$\min\{\lambda_i(G_1), \lambda_i(G_2)\} < \max\{\lambda_{i+1}(G_1), \lambda_{i+1}(G_2)\} \quad (2.2)$$

važi za tačno t različitih vrednosti indeksa i , $1 \leq i \leq n-1$. Označimo ove vrednosti sa k_1, \dots, k_t . Tada je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G_1, G_2) &\leq \max\{\lambda_1(G_1), \lambda_1(G_2)\} - \min\{\lambda_{k_1}(G_1), \lambda_{k_1}(G_2)\} + \\ &+ \max\{\lambda_{k_1+1}(G_1), \lambda_{k_1+1}(G_2)\} - \min\{\lambda_{k_2}(G_1), \lambda_{k_2}(G_2)\} + \dots + \\ &+ \max\{\lambda_{k_t+1}(G_1), \lambda_{k_t+1}(G_2)\} - \min\{\lambda_n(G_1), \lambda_n(G_2)\}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Pored toga, ako je: $\max\{\lambda_1(G_1), \lambda_1(G_2)\} - \min\{\lambda_{k_1}(G_1), \lambda_{k_1}(G_2)\}$, $\max\{\lambda_{k_1+1}(G_1), \lambda_{k_1+1}(G_2)\} - \min\{\lambda_{k_2}(G_1), \lambda_{k_2}(G_2)\}, \dots, \max\{\lambda_{k_t+1}(G_1), \lambda_{k_t+1}(G_2)\} - \min\{\lambda_n(G_1), \lambda_n(G_2)\} \leq s$, biće:

$$\sigma_A(G_1, G_2) \leq s(t+1).$$

Dokaz. Kako važi da je $\min\{\lambda_i(G_1), \lambda_i(G_2)\} \geq \max\{\lambda_{i+1}(G_1), \lambda_{i+1}(G_2)\}$, za $i = 1, \dots, k_1 - 1$, imamo:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{k_1} |\lambda_i(G_1) - \lambda_i(G_2)| &= \max\{\lambda_1(G_1), \lambda_1(G_2)\} - \min\{\lambda_1(G_1), \lambda_1(G_2)\} \\ &\quad + \max\{\lambda_2(G_1), \lambda_2(G_2)\} - \min\{\lambda_2(G_1), \lambda_2(G_2)\} + \dots + \\ &\quad + \max\{\lambda_{k_1}(G_1), \lambda_{k_1}(G_2)\} - \min\{\lambda_{k_1}(G_1), \lambda_{k_1}(G_2)\} \\ &\leq \max\{\lambda_1(G_1), \lambda_1(G_2)\} - \min\{\lambda_1(G_1), \lambda_1(G_2)\} \\ &\quad + \min\{\lambda_1(G_1), \lambda_1(G_2)\} - \min\{\lambda_2(G_1), \lambda_2(G_2)\} + \dots + \\ &\quad + \min\{\lambda_{k_1-1}(G_1), \lambda_{k_1-1}(G_2)\} - \min\{\lambda_{k_1}(G_1), \lambda_{k_1}(G_2)\} \\ &= \max\{\lambda_1(G_1), \lambda_1(G_2)\} - \min\{\lambda_{k_1}(G_1), \lambda_{k_1}(G_2)\}, \end{aligned}$$

i analogno za $k_i + 1 \leq i \leq k_{i+1}$, $i = 1, \dots, t - 1$ i $k_t + 1 \leq i \leq n$. Stoga je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G_1, G_2) &= \sum_{i=1}^{k_1} |\lambda_i(G_1) - \lambda_i(G_2)| + \sum_{i=k_1+1}^{k_2} |\lambda_i(G_1) - \lambda_i(G_2)| + \dots \\ &\quad + \sum_{i=k_t+1}^n |\lambda_i(G_1) - \lambda_i(G_2)| \leq \\ &\quad \max\{\lambda_1(G_1), \lambda_1(G_2)\} - \min\{\lambda_{k_1}(G_1), \lambda_{k_1}(G_2)\} + \\ &\quad + \max\{\lambda_{k_1+1}(G_1), \lambda_{k_1+1}(G_2)\} - \min\{\lambda_{k_2}(G_1), \lambda_{k_2}(G_2)\} + \dots + \\ &\quad + \max\{\lambda_{k_t+1}(G_1), \lambda_{k_t+1}(G_2)\} - \min\{\lambda_n(G_1), \lambda_n(G_2)\} \leq s(t+1). \end{aligned}$$

■

Posledica 2.2.2 *Pod pretpostavkom da važe oznake kao u prethodnoj teoremi, ako parametri s i t ne zavise od n , onda ni $\sigma_A(G_1, G_2)$ ne zavisi od n .*

Primer 2.2.1 (dostizanje granice u (2.3)) *Jednostavno može da se proveri da se jednakost u relaciji (2.3) dostiže za $G_2 = nK_1$ ¹. Nadalje, razmotrimo dobro poznat Petersenov graf P , koji je 3-regularan graf reda 10, i čiji je A -spektar: $3, [1]^5$ i $[-2]^4$, i graf $5K_2$. Korišćenjem oznaka iz prethodne teoreme, imamo $t = 3$ i $k_1 = 7, k_2 = 8, k_3 = 9$, pa je:*

$$8 = \sigma_A(P, 5K_2) \leq \lambda_1(P) - \lambda_7(P) + \sum_{i=8}^{10} (\lambda_i(5K_2) - \lambda_i(P)) = 8.$$

¹Ako graf G predstavlja disjunktну uniju n kopija grafa H , koristimo oznaku $G = nH$.

Primer 2.2.2 ($\sigma_A(G_1, G_2)$ ne zavisi od n) Razmotrimo grafove P_n i $P_{n-1} + K_1$. Pošto se sopstvene vrednosti grafa P_{n-1} prepliću sa sopstvenim vrednostima grafa P_n , a graf K_1 ima samo jednu sopstvenu vrednost koja je jednaka nuli, imamo da je $t = 0$. Ako, na primer, uzmemo da je $s = 4$, dobijamo:

$$\sigma_A(P_n, P_{n-1} + K_1) < 4, \quad \text{za svako } n \geq 2.$$

Oдавде zaključujemo da se vrednost A -spektralnog rastojanja $\sigma_A(G_1, G_2)$ ne povećava sa porastom vrednosti broja čvorova n .

Primer 2.2.3 ($\sigma_A(G_1, G_2)$ zavisi od n) Razmotrimo grafove P_n i nK_1 . Ukoliko je n paran broj, biće $t = n - 2$ (nejednakost (2.2) važi kad god je $i \neq n/2$). Ukoliko je, sa druge strane, n neparan broj, imamo $t = n - 3$ (nejednakost (2.2) važi za $\lfloor n/2 \rfloor \neq \lceil n/2 \rceil$). Ako, na primer, uzmemo da je $s = 2$, dobijamo: $\sigma_A(P_n, nK_1) \leq 2(n-1)$, ako je n paran broj, odnosno $\sigma_A(P_n, nK_1) \leq 2(n-2)$, ako je n neparan broj. Zaista, $\sigma_A(P_n, nK_1) = E(P_n) \rightarrow \infty$ kada $n \rightarrow \infty$.

Za K_{2n} i $2K_n$ imamo $t = 0$ i $s = 2n$, pa je $\sigma_A(K_{2n}, 2K_n) = 2n \rightarrow \infty$ kada $n \rightarrow \infty$.

Primer 2.2.4 (ocena (2.3) je u izvesnim slučajevima gruba) Za grafove $K_{1,n}$ i $K_{1,n-1} + K_1$, iz Teoreme 2.2.1 imamo $t = 0$ i $s = 2\sqrt{n}$, pa je $\sigma_A(K_{1,n}, K_{1,n-1} + K_1) \leq 2\sqrt{n}$. Sa druge strane, direktnim izračunavanjem dobijamo

$$\sigma_A(K_{1,n}, K_{1,n-1} + K_1) = 2(\sqrt{n} - \sqrt{n-1}) \rightarrow 0$$

kada $n \rightarrow \infty$.

2.3 Spektralna rastojanja pri nekim grafovskim operacijama i transformacijama

Ovaj odeljak započinjemo tvrdnjama u kojima razmatramo promenu spektralnog rastojanja grafova pri nekim grafovskim transformacijama. Kao što smo naglasili u uvodnom poglavlju, pod *grafovskim transformacijama* ovde podrazumevamo uklanjanje izvesnog broja čvorova ili grana grafa, zatim zamenu postojećih grana nekim novim, koje prethodno u razmatranom grafu nisu postojale ili, na primer, dodavanje petlji.

Sledeća lema daje gornje ograničenje za A -spektralno rastojanje indukovanih podgrafova istog reda datog grafa.

Lema 2.3.1 *Neka su G_1 i G_2 indukovani podgrafovi reda m grafa G . Tada je:*

$$\sigma_A(G_1, G_2) \leq \sum_{i=1}^{\min\{m, n-m\}} (\lambda_i(G) - \lambda_{n-\min\{m, n-m\}+i}(G)).$$

U specijalnom slučaju, ako je svaki od grafova G_1 i G_2 dobijen uklanjanjem jednog čvora grafa G , važi: $\sigma_A(G_1, G_2) \leq \lambda_1(G) - \lambda_n(G)$.

Dokaz. Iz Teoreme o preplitanju (vidi Posledicu 1.1.1 u uvodnom poglavlju ili Teoremu 0.10 iz [26]) imamo da je: $\lambda_i(G) \geq \lambda_i(G_1)$, $\lambda_i(G_2) \geq \lambda_{n-m+i}(G)$, za $i = 1, \dots, m$. Stoga je:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m |\lambda_i(G_1) - \lambda_i(G_2)| &\leq \sum_{i=1}^m (\lambda_i(G) - \lambda_{n-m+i}(G)) = \\ &\sum_{i=1}^{\min\{m, n-m\}} (\lambda_i(G) - \lambda_{n-\min\{m, n-m\}+i}(G)). \end{aligned}$$

Za $m = n - 1$, poslednja suma se svodi na $\lambda_1(G) - \lambda_n(G)$, čime je lema dokazana.

■

Lemom u nastavku izračunavamo L - i Q - spektralno rastojanje grafa i podgraфа koji je od datog grafa nastao uklanjanjem određenog broja grana.

Lema 2.3.2 *Neka je G graf reda n . Neka je graf H dobijen uklanjanjem k grana grafa G . Tada važi:*

$$\sigma_L(G, H) = \sigma_Q(G, H) = 2k.$$

Dokaz. Pretpostavimo da graf G ima m grana. Tada je $k \leq m$. Označimo sa H' graf koji je dobijen uklanjanjem jedne grane grafa G . Prema Teoremi 7.1.5. iz [30] imamo: $\mu_i(G) \geq \mu_i(H')$ ($i = 1, 2, \dots, n$). Slično, shodno Teoremi 7.8.13. iz [30], biće: $\kappa_i(G) \geq \kappa_i(H')$ ($i = 1, 2, \dots, n$).

Kako je graf H nastao uklanjanjem k grana grafa G , sukcesivnom primenom gore navedenih nejednakosti, dobijamo da je: $\mu_i(G) \geq \mu_i(H)$ ($i = 1, 2, \dots, n$), i $\kappa_i(G) \geq \kappa_i(H)$ ($i = 1, 2, \dots, n$). Stoga je:

$$\sigma_L(G, H) = \sum_{i=1}^n |\mu_i(G) - \mu_i(H)| = \sum_{i=1}^n (\mu_i(G) - \mu_i(H)) = 2m - 2(m - k) = 2k,$$

i analogno: $\sigma_Q(G, H) = 2k$. ■

Posledica 2.3.1 *Neka su G_1, G_2, G^+ i G^- grafovi reda n sa m_1, m_2, m^+ i m^- grana, respektivno. Ako je G^+ , odnosno G^- zajednički nadgraf, odnosno podgraf grafova G_1 i G_2 , onda važe sledeće nejednakosti:*

$$\max\{\sigma_L(G_1, G_2), \sigma_Q(G_1, G_2)\} \leq 2(2m^+ - m_1 - m_2), \quad i$$

$$\max\{\sigma_L(G_1, G_2), \sigma_Q(G_1, G_2)\} \leq 2(m_1 + m_2 - 2m^-).$$

Dokaz. Kako je:

$$\sigma_L(G_1, G_2) \leq \min\{\sigma_L(G_1, G^+) + \sigma_L(G^+, G_2), \sigma_L(G_1, G^-) + \sigma_L(G^-, G_2)\},$$

i analogno za $\sigma_Q(G_1, G_2)$, dokaz sledi iz Leme 2.3.2. ■

Posledica 2.3.2 *Neka je $X = \{G_0, G_1, \dots, G_{\binom{n}{2}}\}$ skup grafova reda n , gde je svaki od grafova G_i nastao uklanjanjem grane grafa G_{i+1} , $i = 0, 1, \dots, \binom{n}{2} - 1$. Tada je:*

$$(i) \quad cs_X^L(G_i) = 2, \quad 0 \leq i \leq \binom{n}{2},$$

$$(ii) \quad cs^L(X) = 2,$$

$$(iii) \quad secc_X^L(G_i) = \max\{2i, n(n-1) - 2i\},$$

$$(iv) \quad sdiam^L(X) = n(n-1).$$

Dokaz. Za $i < j$ prema Lemi 2.3.2 imamo da je $\sigma_L(G_i, G_j) = 2(j-i)$, odakle sledi dokaz. ■

Napomena 2.3.1 *Analogno tvrđenje važi i za spektralna rastojanja u odnosu na nenegativnu Laplasovu matricu.*

Tvrđenje 2.3.1 *Pretpostavimo da je graf H dobijen od grafa G reda n uklanjanjem grana uw_1, \dots, uw_k i dodavanjem novih grana vw_1, \dots, vw_k koje prethodno nisu postojale u grafu G . Ako označimo sa $\Lambda = \max\{\lambda_1(G), \lambda_1(H)\}$, odnosno sa $\lambda = \min\{\lambda_n(G), \lambda_n(H)\}$, onda je:*

$$\sigma_A(G, H) \leq \Lambda + \lambda_1(G) - \lambda_n(G) - \lambda.$$

Dokaz. Važi (vidi [90]):

$$\lambda_{i-1}(G) \geq \lambda_i(H) \geq \lambda_{i+1}(G), \text{ za } i = 2, 3, \dots, n-1.$$

Korišćenjem gore navedenih nejednakosti, kao i zbog preplitanja sopstvenih vrednosti (vidi, na primer, Posledicu 1.1.1 u uvodnom poglavlju), imamo:

$$|\lambda_i(G) - \lambda_i(H)| \leq \lambda_{i-1}(G) - \lambda_{i+1}(G), \text{ za } i = 2, 3, \dots, n-1,$$

kao i

$$|\lambda_1(G) - \lambda_1(H)| \leq \Lambda - \lambda_2(G), \text{ i } |\lambda_n(G) - \lambda_n(H)| \leq \lambda_{n-1}(G) - \lambda_n(G).$$

Na kraju je:

$$\sigma_A(G, H) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i(G) - \lambda_i(H)| \leq \Lambda + \lambda_1(G) - \lambda_n(G) - \lambda_n(G),$$

čime je tvrđenje dokazano. ■

Tvrđenje 2.3.2 *Neka su G_1 i G_2 dva proizvoljna grafa reda n . Neka su G'_1 i G'_2 grafovi dobijeni redom od grafova G_1 i G_2 dodavanjem petlje kod svakog čvora. Tada važi: $\sigma_A(G'_1, G'_2) = \sigma_A(G_1, G_2)$.*

Dokaz. Označimo sa G' graf koji je dobijen dodavanjem petlje kod svakog čvora grafa G reda n . Tada za matricu susedstva A' ovog grafa važi $A' = A + I$, gde je A matrica susedstva grafa G , dok je I jedinična matrica. Primenom Courant-Weylovih nejednakosti (vidi Teoremu 1.1.2 u uvodnom poglavlju ili Teoremu 1.3.15. iz [30]) dobijamo da za odgovarajuće sopstvene vrednosti ovih grafova važi: $\lambda_i(G') \leq \lambda_j(G) + 1$, za $1 \leq j \leq i \leq n$ i $\lambda_i(G') \geq \lambda_j(G) + 1$, za $1 \leq i \leq j \leq n$. To znači da je $\lambda_i(G') = \lambda_i(G) + 1$, za $i = 1, 2, \dots, n$, što dokazuje tvrđenje. ■

Prelazimo na razmatranje operacija nad grafovima. Ako je $r = \lambda_1(G) \geq \lambda_2(G) \geq \dots \geq \lambda_n(G)$ spektar r -regularnog grafa G , onda je spektar njegovog komplementa \overline{G} (vidi [26]): $n - 1 - r \geq -1 - \lambda_n(G) \geq \dots \geq -1 - \lambda_2(G)$, pa je A -spektralno rastojanje između ova dva grafa jednako:

$$\sigma_A(G, \overline{G}) = |n - 2r - 1| + \sum_{i=2}^n |\lambda_i(G) + \lambda_{n-i+2}(G) + 1|.$$

Odavde možemo da primetimo da je teško izračunati tačnu vrednost A -spektralnog rastojanja između regularnog grafa G i njegovog komplementa \overline{G} u opštem slučaju, pa u nastavku razmatramo neke specijalne slučajeve.

Tvrđenje 2.3.3 *Neka je G regularan bipartitan graf reda n , takav da njegov stepen regularnosti r nije veći od stepena regularnosti njegovog komplementa \overline{G} . Ako je $|\lambda_i(G) - \lambda_{i+1}(G)| \leq 1$, $i = 1, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$, onda $\sigma_A(G, \overline{G}) = 2(n - 2r - 1)$.*

Dokaz. Nalazimo da je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G, \overline{G}) &= \sum_{i=1}^n |\lambda_i(G) - \lambda_i(\overline{G})| = (n - 2r - 1) + \sum_{i=2}^n |\lambda_i(G) + \lambda_{n-i+2}(G) + 1| = \\ &= (n - 2r - 1) + 2 \sum_{i=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} |\lambda_i(G) - \lambda_{i+1}(G) - 1|. \end{aligned}$$

Ako je n neparan broj, kako je $\lambda_{\frac{n+1}{2}}(G) = 0$, to je

$$2 \sum_{i=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} |\lambda_i(G) - \lambda_{i+1}(G) - 1| = (n - 1) - 2 \left(\lambda_1(G) - \lambda_{\frac{n+1}{2}}(G) \right) = n - 2r - 1.$$

Ukoliko je, pak, n paran broj, biće:

$$2 \sum_{i=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} |\lambda_i(G) - \lambda_{i+1}(G) - 1| = (n - 2) - 2 \left(\lambda_1(G) - \lambda_{n/2}(G) \right) + 1 - 2\lambda_{n/2}(G) = n - 2r - 1.$$

Na taj način u oba slučaja imamo da je $\sigma_A(G, \overline{G}) = 2(n - 2r - 1)$. ■

Lema 2.3.3 *Neka je G primitivan jako regularan graf sa parametrima (n, r, e, f) . Tada je:*

$$\begin{aligned} \sigma_A(G, \overline{G}) &= |n - 2r - 1| + (n - 1) |e + 1 - f| + \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\Delta}} |e - f + 1| \right) \cdot \\ &\quad \cdot |2r + (n - 1)(e - f)|, \end{aligned}$$

gde je $\Delta = (e - f)^2 + 4(r - f)$.

Dokaz. Prema Teoremi 3.6.5 iz [30] spektar grafa G se sastoji od: $[r]$, $[s]^k$ i $[t]^l$, gde je $s, t = \frac{1}{2}((e - f) \pm \sqrt{\Delta})$ i $k, l = \frac{1}{2} \left(n - 1 \mp \frac{2r + (n-1)(e-f)}{\sqrt{\Delta}} \right)$. Iz Teoreme 2.1.2 iz [30] sledi da spektar grafa \overline{G} čine: $[n - r - 1]$, $[-t - 1]^l$ i $[-s - 1]^k$. Stoga je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G, \overline{G}) &= \sum_{i=1}^n |\lambda_i(G) - \lambda_i(\overline{G})| = |n - 2r - 1| + \sum_{i=2}^{\min\{k, l\} + 1} |s + t + 1| + \\ &+ \sum_{i=\min\{k, l\} + 2}^{\max\{k, l\} + 1} |\lambda_i(G) - \lambda_i(\overline{G})| + \sum_{i=\max\{k, l\} + 2}^n |s + t + 1| = |n - 2r - 1| + \\ &+ (\min\{k, l\} - \max\{k, l\} + n - 1) |s + t + 1| + \sum_{i=\min\{k, l\} + 2}^{\max\{k, l\} + 1} |\lambda_i(G) - \lambda_i(\overline{G})|. \end{aligned}$$

U zavisnosti od međusobnog odnosa multipliciteta k i l , poslednji sabirak u gornjoj jednakosti je:

$$\sum_{i=\min\{k,l\}+2}^{\max\{k,l\}+1} |2s+1| = \sum_{i=\min\{k,l\}+2}^{\max\{k,l\}+1} \left| \sqrt{\Delta} - (f-e-1) \right|,$$

za $k > l$, odnosno

$$\sum_{i=\min\{k,l\}+2}^{\max\{k,l\}+1} |2t+1| = \sum_{i=\min\{k,l\}+2}^{\max\{k,l\}+1} \left| \sqrt{\Delta} + (f-e-1) \right|,$$

za $k < l$. Kako za $k > l$ važi da je $r < \frac{n-1}{2}(f-e)$, tj. $f > e$, odnosno za $k < l$ važi da je $f \leq e+1$ (jer ako bi bilo $f > e+1$, npr. $f = e+2$, imali bismo da je $2r + (n-1)(e-f) = 2r - 2(n-1) \leq 0$, jer je $r \leq n-1$, što je kontradikcija sa pretpostavkom), imamo da je:

$$\sum_{i=\min\{k,l\}+2}^{\max\{k,l\}+1} |\lambda_i(G) - \lambda_i(\overline{G})| = (\max\{k,l\} - \min\{k,l\}) \left| \sqrt{\Delta} - |f-e-1| \right|.$$

Pošto je: $|f-e-1|^2 = (f-e-1)^2 = (f-e)^2 + 2(e-f) + 1 \leq (f-e)^2 + 2(r-f) + 1 \leq \Delta$, to s obzirom na jednakosti kojima su određeni multipliciteti k i l , imamo da je:

$$\sum_{i=\min\{k,l\}+2}^{\max\{k,l\}+1} |\lambda_i(G) - \lambda_i(\overline{G})| = \frac{1}{\sqrt{\Delta}} |2r + (n-1)(e-f)| \left(\sqrt{\Delta} - |f-e-1| \right),$$

odnosno

$$\sigma_A(G, \overline{G}) = |n-2r-1| + (n-1)|e-f+1| + \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\Delta}} |e-f+1| \right) |2r+(n-1)(e-f)|.$$

U slučaju kada je $k = l$, odnosno $2r + (n-1)(e-f) = 0$, grafovi G i \overline{G} imaju iste parametre (vidi, na primer, [77]): $(n, r, e, f) = (4t+1, 2t, t-1, t)$, za neko $t \geq 1$. Njihovi spektri su u tom slučaju: $\left[\frac{n-1}{2} \right]$, $\left[\frac{-1+\sqrt{n}}{2} \right]^{\frac{n-1}{2}}$ i $\left[\frac{-1-\sqrt{n}}{2} \right]^{\frac{n-1}{2}}$, pa je A -spektralno rastojanje:

$$\sigma_A(G, \overline{G}) = |n-2r-1| + (n-1)(f-e-1) = 0.$$

Time je lema dokazana. ■

Za regularne grafove važi i sledeće tvrđenje.

Tvrđenje 2.3.4 *Neka $O(G)$ označava primenu grafovskih operacija graf grana i komplement na regularan graf G proizvoljan broj puta i u proizvoljnom poretku. Neka su G_1 i G_2 r -regularni grafovi reda n . Tada važi:*

$$\begin{aligned} \sigma_A(O(G_1), O(G_2)) &= \sigma_A(G_1, G_2) = \sigma_L(O(G_1), O(G_2)) = \sigma_L(G_1, G_2) = \\ \sigma_Q(O(G_1), O(G_2)) &= \sigma_Q(G_1, G_2). \end{aligned}$$

Dokaz. Jednakosti iz formulacije tvrđenja se dobijaju razmatranjem odnosa između sopstvenih vrednosti regularnih grafova pri navedenim operacijama i u odnosu na navedene matrice (vidi, na primer, [30] i [19]) i iz jednakosti (2.1). ■

Tvrđenje 2.3.5 *Neka je G regularan graf reda n , takav da njegov stepen regularnosti r nije veći od stepena regularnosti njegovog komplementa \overline{G} . Važi:*

$$\sigma_L(G, \overline{G}) \leq \sigma_A(G, \overline{G}) + (n-2)(n-2r-1).$$

Dokaz. Prema pretpostavci tvrđenja važi $n-2r-1 \geq 0$. Slično kao u dokazu Tvrđenja 2.2.1, na osnovu rezultata sumiranih u [19] nalazimo da je L -spektar grafa G : $\mu_1(G) = r - \lambda_n(G) \geq \mu_2(G) = r - \lambda_{n-1}(G) \geq \dots \geq \mu_n(G) = r - \lambda_1(G) = 0$, odnosno da je L -spektar komplementa ovog grafa: $\mu_i(\overline{G}) = n - r + \lambda_{i+1}(G)$, za $1 \leq i < n$ i $\mu_n(\overline{G}) = 0$, gde su, kao i obično, $\lambda_i(G)$, $1 \leq i \leq n$ sopstvene vrednosti matrice susedstva razmatranog grafa. Stoga je:

$$\begin{aligned} \sigma_L(G, \overline{G}) &= \sum_{i=1}^{n-1} |\mu_i(G) - \mu_i(\overline{G})| = \sum_{i=1}^{n-1} |(r - \lambda_{n-i+1}(G)) - (n - r + \lambda_{i+1}(G))| = \\ &= \sum_{i=2}^n |\lambda_i(G) + \lambda_{n-i+2}(G) + n - 2r| \leq \sum_{i=2}^n |\lambda_i(G) + \lambda_{n-i+2}(G) + 1| + \\ &+ \sum_{i=2}^n |n - 2r - 1| = \sum_{i=2}^n |\lambda_i(G) - (-1 - \lambda_{n-i+2}(G))| + |\lambda_1(G) - (n - 1 - r)| + \\ &+ (n-2)(n-2r-1) = \sum_{i=2}^n |\lambda_i(G) - \lambda_i(\overline{G})| + |\lambda_1(G) - \lambda_1(\overline{G})| + \\ &+ (n-2)(n-2r-1) = \sigma_A(G, \overline{G}) + (n-2)(n-2r-1), \end{aligned}$$

što dokazuje tvrđenje. ■

Napomena 2.3.2 *Može se naći dosta primera grafova za koje se dostiže jednakost u relaciji iz prethodnog tvrđenja. Među njima je i jako regularan Petersenov graf, u kom slučaju će vrednosti izraza sa obe strane znaka nejednakosti iznositi 30. Štaviše, pokazaćemo da jednakost važi i za sve primitivne jako regularne grafove sa parametrima (n, r, e, f) , takvim da je $r \leq \frac{n-1}{2}$ i $f = e + 1$. Nasuprot tome, za kompletan bipartitan graf reda n , $K_{\frac{n}{2}, \frac{n}{2}}^-$, kome su uklonjene grane koje čine savršeno sparivanje (za definiciju vidi, na primer, [88]), jednakost se dostiže jedino za $n = 2$. Pored toga, za $n \geq 8$ biće:*

$$\begin{aligned} 3n - 16 &= \sigma_L \left(K_{\frac{n}{2}, \frac{n}{2}}^-, \overline{K_{\frac{n}{2}, \frac{n}{2}}^-} \right) < \sigma_A \left(K_{\frac{n}{2}, \frac{n}{2}}^-, \overline{K_{\frac{n}{2}, \frac{n}{2}}^-} \right) + (n-2) \left(n - 2 \left(\frac{n}{2} - 1 \right) - 1 \right) \\ &= 3n - 10. \end{aligned}$$

Tvrđenje 2.3.6 *Neka je G primitivan jako regularan graf čiji su parametrima (n, r, e, f) takvim da je $r \leq \frac{n-1}{2}$ i $f = e + 1$. Tada je:*

$$\sigma_L(G, \overline{G}) = \sigma_A(G, \overline{G}) + (n-2)(n-2r-1).$$

Dokaz. Slično kao u dokazu Tvrđenja 2.2.1, nalazimo da je L -spektar grafa G : $[r-t]^l$, $[r-s]^k$ i $[0]$, dok je L -spektar njegovog komplementa čine: $[n-r+s]^k$, $[n-r+t]^l$ i $[0]$, gde je $s, t = \frac{1}{2} \left(-1 \pm \sqrt{\Delta} \right)$ i $\Delta = 1 + 4(r-e-1)$.

Kako je $2r + (n-1)(e-f) = 2r - (n-1) \leq 2\frac{n-1}{2} - (n-1) = 0$, to je $k \geq l$. Neka je $k > l$. Tada je L -spektralno rastojanje:

$$\begin{aligned} \sigma_L(G, \overline{G}) &= \sum_{i=1}^l |r-t-n+r-s| + \sum_{i=l+1}^k |n-r+s-r+s| + \\ &+ \sum_{i=k+1}^{n-1} |r-s-n+r-t| = 2l|n-2r-1| + (k-l) \left| n-2r-1 + \sqrt{\Delta} \right| = \\ &2l(n-2r-1) + (k-l)(n-2r-1 + \sqrt{\Delta}) = \\ &(n-2r-1)(l+k) + \sqrt{\Delta} \left(-\frac{2r+(n-1)(-1)}{\sqrt{\Delta}} \right) = n(n-2r-1). \end{aligned}$$

U slučaju kada je $k = l$, grafovi G i \overline{G} imaju iste parametre, pa je $\sigma_L(G, \overline{G}) = 0$.

Iz Leme 2.3.3 sledi da je A -spektralno rastojanje grafa $G(n, r, e, e+1)$ i njegovog komplementa: $\sigma_A(G, \overline{G}) = 2(n-2r-1)$, za $k > l$, odnosno $\sigma_A(G, \overline{G}) = 0$, za $k = l$. Stoga imamo da je:

$$\sigma_A(G, \overline{G}) + (n-2)(n-2r-1) = n(n-2r-1) = \sigma_L(G, \overline{G}),$$

čime je tvrđenje dokazano. ■

Tvrđenje 2.3.7 *Neka je G primitivan jako regularan graf sa parametrima (n, r, e, f) . Tada važi:*

1. *Ako je $f = e$ i $r = \frac{n-1}{2}$, tada je $\sigma_L(G, \overline{G}) = \sigma_A(G, \overline{G}) + (n-2)(n-2r-1)$;*
2. *Ako je $f = e + a$, $a > 1$ i $r \leq \frac{n-a}{2}$, tada ne postoji ni jedan jako regularan graf sa navedenim parametrima za koga važi da je $\sigma_L(G, \overline{G}) = \sigma_A(G, \overline{G}) + (n-2)(n-2r-1)$;*
3. *Neka je $e = f + b$, $b \geq 1$ i $r \leq \frac{n-b}{2}$. Ako je $n-2r+1 < \sqrt{\Delta}$, tada je $\sigma_L(G, \overline{G}) = \sigma_A(G, \overline{G}) + (n-2)(n-2r-1)$ za $r = \frac{n-1}{2}$. Pored toga, ne postoji ni jedan drugi jako regularan graf sa navedenim parametrima takav da A - i L -spektralna rastojanja između njega i njegovog komplementa zadovoljavaju navedenu jednakost.*

Dokaz.

1. U ovom slučaju važi da je $2r + (n - 1)(e - f) = 2r = n - 1 \geq 0$, što znači da je $k \leq l$. Neka je $k < l$. Tada je L -spektralno rastojanje:

$$\begin{aligned} \sigma_L(G, \overline{G}) &= \sum_{i=1}^k |n + s - r - r + t| + \sum_{i=k+1}^l |r - t - n - t + r| + \\ &+ \sum_{i=l+1}^{n-1} |r - s - n - t + r| = 2k |n - 2r| + (l - k) |n - 2r - \sqrt{\Delta}| = \\ &2k + (l - k)(\sqrt{\Delta} - 1) = n - 1 - \frac{2r + (n - 1)(e - f)}{\sqrt{\Delta}} + 2r - \frac{2r}{\sqrt{\Delta}} = \\ &2(n - 1) \left(1 - \frac{1}{\sqrt{\Delta}} \right). \end{aligned}$$

Iz Leme 2.3.3 dobijamo da je A -spektralno rastojanje:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G, \overline{G}) &= 2(n - 1) \left(1 - \frac{1}{\sqrt{\Delta}} \right), \text{ pa je} \\ \sigma_L(G, \overline{G}) &= \sigma_A(G, \overline{G}) + (n - 2)(n - 2r - 1). \end{aligned}$$

Ukoliko je $k = l$, biće $\sigma_L(G, \overline{G}) = \sigma_A(G, \overline{G}) = 0$, pa tvrdjenje očigledno važi.

2. U ovom slučaju imamo da je: $2r + (n - 1)(e - f) = 2r - a(n - 1) \leq 2\frac{n-a}{2} - a(n - 1) = n(1 - a) < 0$, što znači da je $k > l$, pa je:

$$\begin{aligned} \sigma_L(G, \overline{G}) &= \sum_{i=1}^l |r - t - n + r - s| + \sum_{i=l+1}^k |n - r + s - r + s| + \\ &+ \sum_{i=k+1}^{n-1} |n - r + t - r + s| = 2l |n - 2r - a| + (k - l) |n - 2r - a + \sqrt{\Delta}| = \\ &2l(n - 2r - a) + (k - l)(n - 2r - a + \sqrt{\Delta}) = \\ &(n - 1)(n - 2r - a) - \sqrt{\Delta} \frac{2r + (n - 1)(-a)}{\sqrt{\Delta}} = \\ &n(n - 2r - 1). \end{aligned}$$

Iz Leme 2.3.3 sledi da je A -spektralno rastojanje:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G, \overline{G}) &= \\ &(n - 2r - 1) + (n - 1)(a - 1) + \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\Delta}}(a - 1) \right) |2r - an + a| = \\ &(n - 2r - 1) + (n - 1)(a - 1) + \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\Delta}}(a - 1) \right) (an - 2r - a) = \\ &2(an - 2r - a) \left(1 - \frac{1}{\sqrt{\Delta}}(a - 1) \right). \end{aligned}$$

Ukoliko bi postojao graf čija spektralna rastojanja $\sigma_L(G, \overline{G})$ i $\sigma_A(G, \overline{G})$ zadovoljavaju jednakost iz formulacije tvrđenja, to bi značilo da je:

$$\begin{aligned}\sigma_L(G, \overline{G}) - (n-2)(n-2r-1) &= \sigma_A(G, \overline{G}), \\ n-2r-1 &= (an-2r-a) \left(1 - \frac{1}{\sqrt{\Delta}}(a-1)\right), \\ \frac{1}{\sqrt{\Delta}}(n-2r-1) &= (n-1) \left(1 - \frac{1}{\sqrt{\Delta}}(a-1)\right), \\ (n-1)(\sqrt{\Delta}-a) + 2r &= 0, \\ a &= \sqrt{\Delta} + \frac{2r}{n-1}.\end{aligned}$$

Kako je $k > l$, to graf G nije konferencijski graf (engl. *conference graph*) (za definiciju i osobine vidi [30]), pa je $\sqrt{\Delta}$ ceo broj. Pošto je $2r \leq n-a < n-1$, to $\frac{2r}{n-1}$ nije ceo broj, što je u kontradikciji sa pretpostavkom da je a ceo broj veći od jedan.

3. Kako je $2r + (n-1)(e-f) \leq 2\frac{n-b}{2} + (n-1)(f+b-f) = b(n-2) + n > 0$, to je $k < l$, pa imamo da je:

$$\begin{aligned}\sigma_L(G, \overline{G}) &= \sum_{i=1}^k |n-r+s-r+t| + \sum_{i=k+1}^l |r-t-n+r-t| + \\ &+ \sum_{i=l+1}^{n-1} |r-s-n+r-t| = 2k(n-2r+b) + (l-k) \left|n-2r+b-\sqrt{\Delta}\right|.\end{aligned}$$

Zamenom odgovarajućih vrednosti za k i l , dobijamo da je:

$$\sigma_L(G, \overline{G}) = n(n-2r-1),$$

ukoliko je $n-2r+b \geq \sqrt{\Delta}$, odnosno

$$\sigma_L(G, \overline{G}) = n(n-2r-1) + 2(2r+b(n-1)) \left(1 - \frac{1}{\sqrt{\Delta}}(n-2r+b)\right),$$

ukoliko je $n-2r+b < \sqrt{\Delta}$. Iz Leme 2.3.3 sprovođenjem elementarnih računskih operacija dobijamo da je:

$$\sigma_A(G, \overline{G}) = (n-2r-1) + (n-1)(b+1) + \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\Delta}}(b+1)\right) (2r+b(n-1)).$$

S obzirom na prethodno, ako bi važio da je

$$\sigma_L(G, \overline{G}) = \sigma_A(G, \overline{G}) + (n-2)(n-2r-1),$$

za $n - 2r + b < \sqrt{\Delta}$ i $b \geq 1$, to bi značilo da je $(2r + b(n - 1))(n - 2r - 1) = 0$, odakle je $b = -\frac{2r}{n-1}$ ili $r = \frac{n-1}{2}$, što znači da se jednakost dostiže jedino za $b = 1$. Sa druge strane, ukoliko bi važiolo da je $\sigma_L(G, \overline{G}) = \sigma_A(G, \overline{G}) + (n - 2)(n - 2r - 1)$, pod pretpostavkom da je $n - 2r + b \geq \sqrt{\Delta}$, to bi, zamenom izračunatih spektralnih rastojanja značilo da je $b = 2(r - f) - \frac{1}{2}$, što je kontradikcija sa činjenicom da b mora biti ceo broj.

■

Definicijom grafovske operacije NEPS, navedenom u Odeljku 1.1, ne dopušta se postojanje baze koja sadrži n -torku čije su sve koordinate jednake nuli. Ukoliko dopustimo postojanje ovakve n -torke, kao posledicu dobijamo graf sa petljom kod svakog čvora. Sledeće tvrđenje predstavlja zapravo specijalan slučaj Tvrđenja 2.3.2.

Tvrđenje 2.3.8 *Neka je $G = \text{NEPS}(G_1, G_2, \dots, G_n; \mathcal{B}_1)$ i $H = \text{NEPS}(H_1, H_2, \dots, H_n; \mathcal{B}_2)$, gde su G_i i H_i , $i = 1, 2, \dots, n$ proizvoljni grafovi. Ako je $\mathcal{B}'_1 = \mathcal{B}_1 \cup \{(0, 0, \dots, 0)\}$ i $\mathcal{B}'_2 = \mathcal{B}_2 \cup \{(0, 0, \dots, 0)\}$, i $G' = \text{NEPS}(G_1, G_2, \dots, G_n; \mathcal{B}'_1)$ i $H' = \text{NEPS}(H_1, H_2, \dots, H_n; \mathcal{B}'_2)$, onda je: $\sigma_A(G', H') = \sigma_A(G, H)$.*

Dokaz. Prema Teoremi 2.5.4 iz [30] spektar grafa G' (odnosno H') sastoji se od svih mogućih vrednosti $\Lambda_{i_1, \dots, i_n}$ takvih da je: $\Lambda_{i_1, \dots, i_n}(G') = \sum_{\beta \in \mathcal{B}'_1} \lambda_{1_{i_1}}^{\beta_1} \dots \lambda_{n_{i_n}}^{\beta_n}$, za $i_h = 1, \dots, k_h$ i $h = 1, \dots, n$, gde su $\lambda_{i_1}, \dots, \lambda_{i_{k_i}}$ sopstvene vrednosti grafa G_i , $i = 1, 2, \dots, n$, respektivno. Stoga, imamo: $\Lambda_{i_1, \dots, i_n}(G') = \sum_{\beta \in \mathcal{B}_1} \lambda_{1_{i_1}}^{\beta_1} \dots \lambda_{n_{i_n}}^{\beta_n} + \lambda_{1_{i_1}}^0 \dots \lambda_{n_{i_n}}^0 = \Lambda_{i_1, \dots, i_n}(G) + 1$. A-spektralno rastojanje je:

$$\sigma_A(G', H') = \sum_{i=1}^{2^n} |\lambda_i(G) + 1 - \lambda_i(H) - 1| = \sigma_A(G, H),$$

što dokazuje tvrđenje. ■

Tvrđenje 2.3.9 *Neka je $G = \text{NEPS}(K_2, K_2, \dots, K_2; \mathcal{B})$, i neka su*

$$\Lambda^k(G) = \Lambda_{i_1, \dots, i_n}^k(G) = \sum_{\beta \in \mathcal{B}} \lambda_{1_{i_1}}^{\beta_1} \dots \lambda_{n_{i_n}}^{\beta_n}, \quad i_h = 1, \dots, k_h, \quad h = 1, \dots, n$$

različite sopstvene vrednosti grafa G , takve da je k sopstvenih vrednosti, $0 \leq k \leq n$, među sopstvenim vrednostima $\lambda_{1_{i_1}} \dots \lambda_{n_{i_n}}$ grafova K_2 jednako -1 . Pretpostavimo da je baza \mathcal{B} takva da je $\Lambda^k(G) \geq \Lambda^{k+1}(G) + 2$, za svako $0 \leq k \leq n$. Neka je $G' = \text{NEPS}(K_2, K_2, \dots, K_2; \mathcal{B}')$, gde je $\mathcal{B}' = \mathcal{B} \cup \{(1, 1, \dots, 1)\}$. Tada važi $\sigma_A(G, G') = 2^n$.

Dokaz. Kao u dokazu prethodnog tvrđenja (Teorema 2.5.4 iz [30]) nalazimo da se spektar grafa G' sastoji od svih mogućih sopstvenih vrednosti $\Lambda(G')$ takvih da je:

$$\Lambda(G') = \sum_{\beta \in \mathcal{B}'} \lambda_{1_{i_1}}^{\beta_1} \cdots \lambda_{n_{i_n}}^{\beta_n} = \sum_{\beta \in \mathcal{B}} \lambda_{1_{i_1}}^{\beta_1} \cdots \lambda_{n_{i_n}}^{\beta_n} + \lambda_{1_{i_1}} \cdots \lambda_{n_{i_n}} = \Lambda(G) + \lambda_{1_{i_1}} \cdots \lambda_{n_{i_n}},$$

za $i_h = 1, \dots, k_h$, $h = 1, \dots, n$. Ako je među sopstvenim vrednostima $\lambda_{1_{i_1}} \cdots \lambda_{n_{i_n}}$ grafova K_2 njih k jednako -1, to je:

$$\Lambda^k(G') = \Lambda^k(G) + (-1)^k,$$

gde je $0 \leq k \leq n$. Multiplicitet sopstvene vrednosti $\Lambda^k(G)$, odnosno $\Lambda^k(G')$, odgovara broju načina na koje je moguće izabrati k sopstvenih vrednosti koje su jednake -1, odnosno $\binom{n}{k}$. S obzirom na pretpostavku u formulaciji tvrđenja, imamo da je:

$$\Lambda^k(G') = \Lambda^k(G) + (-1)^k \geq \Lambda^{k+1}(G) + (-1)^{k+1} = \Lambda^{k+1}(G'),$$

za svako $0 \leq k \leq n$, pa je A -spektralno rastojanje:

$$\sigma_A(G, G') = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} |\Lambda^k(G) + (-1)^k - \Lambda^k(G)| = 2^n.$$

Ovim je tvrđenje dokazano. ■

Primer 2.3.1 Neka je $G = \text{NEPS}(K_2, K_2, \dots, K_2; \mathcal{B})$, gde se baza \mathcal{B} sastoji od binarnih n -torki od kojih svaka ima tačno jednu komponentu jednaku jedinici, tj. $\mathcal{B} = \{(1, 0, 0, \dots, 0), (0, 1, 0, \dots, 0), \dots, (0, 0, 0, \dots, 1)\}$. Graf G je zapravo n -kub čiji je spektar $[n - 2i] \binom{n}{i}$, $0 \leq i \leq n$.

Označimo sa $G' = \text{NEPS}(K_2, K_2, \dots, K_2; \mathcal{B}')$, gde je $\mathcal{B}' = \mathcal{B} \cup \{(1, 1, \dots, 1)\}$.

Kako za različite sopstvene vrednosti grafa G važi da je:

$$\Lambda^i(G) = n - 2i \geq n - 2(i + 1) + 2 = \Lambda^{i+1}(G) + 2,$$

za svaki izbor i sopstvenih vrednosti grafova K_2 koje su jednake -1, $0 \leq i \leq n$, to važi i:

$$\Lambda^i(G') = \Lambda^i(G) + (-1)^i = n - 2i + (-1)^i \geq n - 2(i + 1) + (-1)^{i+1} = \Lambda^{i+1}(G'),$$

pa je A -spektralno rastojanje ovih grafova jednako:

$$\sigma_A(G, G') = \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} |n - 2i + (-1)^i - (n - 2i)| = 2^n.$$

U radu [51] definisane su dve nove grafovske operacije označene kao S_{vertex} spajanje (engl. S_{vertex} join) i S_{edge} spajanje (engl. S_{edge} join) grafova $G_1 = (V_1, E_1)$ i $G_2 = (V_2, E_2)$, takvih da je $|V_1| = n_1$ i $|V_2| = n_2$. Naime, S_{vertex} spajanje grafova G_1 i G_2 , u oznaci $G_1 \dot{\vee} G_2$, jeste graf koji nastaje od grafova $S(G_1)$ i G_2 spajanjem svakog čvora iz skupa V_1 sa svakim čvorom iz skupa V_2 . Ovde, $S(G)$ označava graf dobijen subdivizijom grafa G (za detalje vidi uvodno poglavlje ili [26, 30]). S_{edge} spajanje grafova G_1 i G_2 , u oznaci $G_1 \underline{\vee} G_2$, jeste graf koji se dobija od grafova $S(G_1)$ i G_2 spajanjem svakog čvora iz skupa $V_{S(G_1)} \setminus V_1$, gde $V_{S(G_1)}$ označava skup čvorova grafa $S(G_1)$, sa svakim čvorom iz skupa V_2 . U radu [51] dati su A -spektri ovih grafova za slučaj kada su G_i r_i -regularni grafovi, $i = 1, 2$.

Tvrđenje 2.3.10 *Neka su G_i povezani r_i -regularni grafovi reda n_i , $i = 1, 2$. Neka su spektri ovih grafova u odnosu na matricu susedstva: $r_i = \lambda_1(G_i) \geq \lambda_2(G_i) \geq \dots \geq \lambda_{n_i}(G_i)$, $i = 1, 2$, takvi da važi: $\lambda_{n_2}(G_2) \geq -\sqrt{\lambda_1(G_1) + r_1}$. Tada je:*

$$\sigma_A(G_1 \dot{\vee} G_2, G_1 \underline{\vee} G_2) =$$

$$\sum_{i \in \{1, n_1 + m_1 + n_2\}} |\lambda_i(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_i(G_1 \underline{\vee} G_2)| + |\lambda(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda'(G_1 \underline{\vee} G_2)|,$$

gde je m_1 broj grana grafa G_1 , dok su $\lambda(G_1 \dot{\vee} G_2)$ i $\lambda'(G_1 \underline{\vee} G_2)$ nule polinoma $h_1(x) = x^3 - r_2x^2 - (n_1n_2 + 2r_1)x + 2r_1r_2$ i $h_2(x) = x^3 - r_2x^2 - (m_1n_2 + 2r_1)x + 2r_1r_2$, respektivno, koje su različite od $\lambda_1(G_1 \dot{\vee} G_2)$ i $\lambda_{n_1+m_1+n_2}(G_1 \dot{\vee} G_2)$, odnosno $\lambda_1(G_1 \underline{\vee} G_2)$ i $\lambda_{n_1+m_1+n_2}(G_1 \underline{\vee} G_2)$.

Dokaz. Shodno Teoremama 1.1 i 1.2 iz [51] spektri grafova $G_1 \dot{\vee} G_2$ i $G_1 \underline{\vee} G_2$ razlikuju se u vrednosti jedino tri sopstvene vrednosti. Ostalih $n_1 + m_1 + n_2 - 3$ sopstvenih vrednosti su $\pm\sqrt{\lambda_i(G_1) + r_1}$, za $i = 2, 3, \dots, n_1$, $\lambda_i(G_2)$, za $i = 2, 3, \dots, n_2$ i nula multipliciteta $m_1 - n_1$. Razmotrimo preostale tri sopstvene vrednosti ovih grafova.

Kako je $S(G_1)$ indukovani podgraf grafa $G_1 \dot{\vee} G_2$ (odnosno $G_1 \underline{\vee} G_2$) iz Teoreme o preplitanju (vidi Posledicu 1.1.1 u uvodnom poglavlju) imamo da je:

$$\lambda_1(G_1 \dot{\vee} G_2) \geq \lambda_1(S(G_1)) = \sqrt{\lambda_1(G_1) + r_1} \geq \sqrt{\lambda_2(G_1) + r_1}.$$

Sa druge strane, kako je G_2 indukovani podgraf grafa $G_1 \dot{\vee} G_2$ (odnosno $G_1 \underline{\vee} G_2$), primenom Teoreme o preplitanju dobijamo da važi:

$$\lambda_1(G_1 \dot{\vee} G_2) \geq \lambda_1(G_2) \geq \lambda_2(G_2).$$

Iz datih nejednakosti možemo da zaključimo da je jedan od korena polinoma $h_1(x)$ (odnosno $h_2(x)$) upravo indeks grafa $G_1 \dot{\vee} G_2$ (odnosno $G_1 \underline{\vee} G_2$). Na sličan

način, nalazimo da je:

$$\lambda_{n_1+m_1+n_2}(G_1 \dot{\vee} G_2) \leq \lambda_{n_1+m_1}(S(G_1)) = -\sqrt{\lambda_1(G_1) + r_1},$$

$$\lambda_{n_1+m_1+n_2}(G_1 \dot{\vee} G_2) \leq \lambda_{n_2}(G_2),$$

odnosno

$$\begin{aligned} \lambda_{n_1+m_1+n_2}(G_1 \dot{\vee} G_2) &\leq \min\{\lambda_{n_2}(G_2), -\sqrt{\lambda_1(G_1) + r_1}\} = \\ &-\sqrt{\lambda_1(G_1) + r_1} \leq -\sqrt{\lambda_2(G_1) + r_1}, \end{aligned}$$

odakle možemo da zaključimo da je jedan od preostala dva korena polinoma $h_1(x)$ ($h_2(x)$) sopstvena vrednost $\lambda_{n_1+m_1+n_2}(G_1 \dot{\vee} G_2)$ ($\lambda_{n_1+m_1+n_2}(G_1 \underline{\vee} G_2)$).

Preostali, treći koren polinoma $h_1(x)$ i $h_2(x)$, koji je različit od nule, označimo sa λ i λ' , respektivno. Bez smanjenja opštosti, pretpostavimo da je sopstvena vrednost λ u spektru grafa $G_1 \dot{\vee} G_2$ na poziciji x , dok je sopstvena vrednost λ' u spektru grafa $G_1 \underline{\vee} G_2$ na poziciji y , tako da je $x \leq y$. Tada A -spektralno rastojanje ovih grafova postaje:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G_1 \dot{\vee} G_2, G_1 \underline{\vee} G_2) &= |\lambda_1(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_1(G_1 \underline{\vee} G_2)| + \\ &+ \sum_{i=2}^{x-1} |\lambda_i(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_i(G_1 \underline{\vee} G_2)| + |\lambda_x(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_x(G_1 \underline{\vee} G_2)| + \\ &+ \sum_{i=x+1}^{y-1} |\lambda_i(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_i(G_1 \underline{\vee} G_2)| + |\lambda_y(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_y(G_1 \underline{\vee} G_2)| + \\ &+ \sum_{i=y+1}^{n_1+m_1+n_2-1} |\lambda_i(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_i(G_1 \underline{\vee} G_2)| + \\ &+ |\lambda_{n_1+m_1+n_2}(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_{n_1+m_1+n_2}(G_1 \underline{\vee} G_2)| = |\lambda_1(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_1(G_1 \underline{\vee} G_2)| + \\ &+ (\lambda - \lambda_x(G_1 \underline{\vee} G_2)) + \sum_{i=x+1}^{y-1} |\lambda_i(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_{i+1}(G_1 \dot{\vee} G_2)| + (\lambda_y(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda') + \\ &+ |\lambda_{n_1+m_1+n_2}(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_{n_1+m_1+n_2}(G_1 \underline{\vee} G_2)| = |\lambda_1(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_1(G_1 \underline{\vee} G_2)| + \\ &+ (\lambda - \lambda_x(G_1 \underline{\vee} G_2)) + \lambda_{x+1}(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_y(G_1 \dot{\vee} G_2) + \lambda_y(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda' + \\ &+ |\lambda_{n_1+m_1+n_2}(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_{n_1+m_1+n_2}(G_1 \underline{\vee} G_2)| = |\lambda_1(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_1(G_1 \underline{\vee} G_2)| + \\ &+ (\lambda - \lambda') + |\lambda_{n_1+m_1+n_2}(G_1 \dot{\vee} G_2) - \lambda_{n_1+m_1+n_2}(G_1 \underline{\vee} G_2)|. \end{aligned}$$

Ovim je tvrđenje dokazano. ■

2.4 Spektralna rastojanja grafova sa zajedničkim sopstvenim vrednostima

Tvrđenjem 2.3.10 iz prethodnog odeljka pokazali smo da ako se A -spektri dva grafa istog reda razlikuju po vrednosti tačno tri sopstvene vrednosti, onda A -spektralno rastojanje između njih zavisi jedino od ovih šest različitih sopstvenih vrednosti (po tri iz A -spektra svakog od grafova). U ovom odeljku izlažemo nešto opštiji rezultat (vidi [58]).

Neka su G_1 i G_2 dva grafa reda n , čiji su spektri u odnosu na matricu M redom jednaki $x_1 \geq x_2 \geq \dots \geq x_n$, odnosno $y_1 \geq y_2 \geq \dots \geq y_n$. Označimo sa $z_1 > z_2 > \dots > z_{n_1}$ i $t_1 > t_2 > \dots > t_{n_2}$ različite sopstvene vrednosti ovih grafova, respektivno.

Definicija 2.4.1 *Neka je λ zajednička sopstvena vrednost grafova G_1 i G_2 takva da je $\lambda = z_{l_1}$, za neko $l_1 \in \{1, 2, \dots, n_1\}$ i $\lambda = t_{l_2}$, za neko $l_2 \in \{1, 2, \dots, n_2\}$. Neka su $i_1, i_2 \in \{1, 2, \dots, n\}$ najmanji indeksi takvi da je $x_{i_1} = \lambda$ i $y_{i_2} = \lambda$, i slično, neka su $j_1, j_2 \in \{1, 2, \dots, n\}$ najveći indeksi takvi da važi $x_{j_1} = \lambda$ i $y_{j_2} = \lambda$. M -parcijalno spektralno rastojanje $P_{M,\lambda}(G_1, G_2)$ grafova G_1 i G_2 koje odgovara zajedničkoj sopstvenoj vrednosti λ je:*

$$P_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=\min\{i_1, i_2\}}^{\max\{j_1, j_2\}} |x_k - y_k|. \quad (2.4)$$

Očigledno važi $i_1 \leq j_1$ i $i_2 \leq j_2$. Pored toga, ukoliko za svaku zajedničku sopstvenu vrednost λ grafova G_1 i G_2 sa I_λ označimo skup indeksa sopstvenih vrednosti ovih grafova koje pripadaju intervalu $[\min\{i_1, i_2\}, \max\{j_1, j_2\}]$, nalazimo da je:

$$\sigma_M(G_1, G_2) = \sum_{\lambda} P_{M,\lambda}(G_1, G_2) + \sum_{k \in \{1, 2, \dots, n\} \setminus \bigcup_{\lambda} I_{\lambda}} |x_k - y_k| = \sum_1 + \sum_2, \quad (2.5)$$

gde se prvo sumiranje vrši po svim zajedničkim sopstvenim vrednostima λ grafova G_1 i G_2 . Ukoliko grafovi G_1 i G_2 nemaju zajedničkih sopstvenih vrednosti, jednostavno imamo da je $\sigma_M(G_1, G_2) = \sum_2$.

Definicija 2.4.2 *Parcijalna realizacija $RP_{M,\lambda}(G_1, G_2)$ parcijalnog spektralnog rastojanja $P_{M,\lambda}(G_1, G_2)$ grafova G_1 i G_2 koje odgovara zajedničkoj sopstvenoj vrednosti λ ovih grafova jeste aritmetički izraz nastao iz sume (2.4) tako što je svaki sabirak $|x_k - y_k|$ zamenjen sa $x_k + (-y_k)$, ako je $x_k \geq y_k$, odnosno sa $-x_k + y_k$ ako je $x_k < y_k$, za svako $k = \min\{i_1, i_2\}, \dots, \max\{j_1, j_2\}$.*

Definicija 2.4.3 *Redukovana parcijalna realizacija $RRP_{M,\lambda}(G_1, G_2)$ parcijalnog spektralnog rastojanja $P_{M,\lambda}(G_1, G_2)$ grafova G_1 i G_2 jeste aritmetički izraz dobijen od $RP_{M,\lambda}(G_1, G_2)$ brisanjem svih parova sabiraka suprotnog znaka, tj. članova oblika $a, -a$.*

Jasno važi: $P_{M,\lambda}(G_1, G_2) = RP_{M,\lambda}(G_1, G_2) = RRP_{M,\lambda}(G_1, G_2)$.

Tvrđenje 2.4.1 *Neka su G_1 i G_2 grafovi reda n sa datim spektrima u odnosu na matricu M . Ako je λ zajednička sopstvena vrednost ovih grafova sa multiplicitetima m_1 i m_2 , respektivno, onda redukovana parcijalna realizacija $RRP_{M,\lambda}(G_1, G_2)$ parcijalnog spektralnog rastojanja $P_{M,\lambda}(G_1, G_2)$ sadrži najviše $|m_1 - m_2|$ sabiraka, odnosno članova koji su jednaki λ ili $-\lambda$. U specijalnom slučaju, ako je multiplicitet sopstvene vrednosti λ u spektrima grafova G_1 i G_2 jednak, onda redukovana parcijalna realizacija $RRP_{M,\lambda}(G_1, G_2)$ ne sadrži članove koji su jednaki λ i $-\lambda$.*

Dokaz. Bez smanjenja opštosti, u dokazu ćemo razmotriti slučaj kada je $m_1 > m_2 > 1$. Svi ostali slučajevi analiziraju se na analogan način. Pod navedenom pretpostavkom razlikovaćemo nekoliko mogućih odnosa pozicija i_1, i_2, j_1 i j_2 zajedničkih sopstvenih vrednosti λ u spektrima grafova G_1 i G_2 (naravno, koristimo prethodno uvedenu notaciju).

Ako je $i_1 = i_2 < j_2 < j_1$, onda je parcijalno spektralno rastojanje jednako:

$$P_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_1}^{j_1} |x_k - y_k|.$$

Parcijalna realizacija je:

$$RP_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_1}^{j_2} (\lambda - \lambda) + \sum_{k=j_2+1}^{j_1} (\lambda - y_k),$$

pa redukovana parcijalna realizacija postaje:

$$RRP_{M,\lambda}(G_1, G_2) = (m_1 - m_2)\lambda - \sum_{k=j_2+1}^{j_1} y_k.$$

Neka je: $i_1 < i_2 < j_2 = j_1$. Tada je:

$$P_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_1}^{j_1} |x_k - y_k|,$$

pa je parcijalna realizacija:

$$RP_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_1}^{i_2-1} (y_k - \lambda) + \sum_{k=i_2}^{j_2} (\lambda - \lambda).$$

Naposletku imamo:

$$RRP_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_1}^{i_2-1} y_k + (m_1 - m_2)(-\lambda).$$

Ako je $i_1 < i_2 < j_1 < j_2$, onda važi:

$$P_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_1}^{j_2} |x_k - y_k|,$$

pa je:

$$RP_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_1}^{i_2-1} (y_k - \lambda) + \sum_{k=i_2}^{j_1} (\lambda - \lambda) + \sum_{k=j_1+1}^{j_2} (\lambda - x_k).$$

Stoga imamo:

$$RRP_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_1}^{i_2-1} y_k - \sum_{k=j_1+1}^{j_2} x_k + (m_1 - m_2)(-\lambda).$$

Slučaj kada je $i_1 < i_2 = j_1 < j_2$ analizira se na sličan način kao prethodni.

Neka sada $i_2 < i_1 < j_2 < j_1$ važi. Tada je:

$$P_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_2}^{j_1} |x_k - y_k|,$$

pa parcijalna realizacija postaje:

$$RP_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_2}^{i_1-1} (x_k - \lambda) + \sum_{k=i_1}^{j_2} (\lambda - \lambda) + \sum_{k=j_2+1}^{j_1} (\lambda - y_k).$$

Redukovana parcijalna realizacija je:

$$RRP_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_2}^{i_1-1} x_k - \sum_{k=j_2+1}^{j_1} y_k + (m_1 - m_2)\lambda.$$

Slučaj $i_2 < i_1 = j_2 < j_1$ razmatra se na način analogan prethodnom.

Ako je $i_1 < j_1 < i_2 < j_2$, tada je:

$$P_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_1}^{j_2} |x_k - y_k|,$$

pa imamo da je:

$$RP_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_1}^{j_1} (y_k - \lambda) + \sum_{k=j_1+1}^{i_2-1} (y_k - x_k) + \sum_{k=i_2}^{j_2} (\lambda - x_k).$$

Redukovana parcijalna realizacija je:

$$RRP_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_1}^{i_2-1} y_k - \sum_{k=j_1+1}^{j_2} x_k + (m_1 - m_2)(-\lambda).$$

Neka je $i_2 < j_2 < i_1 < j_1$. Parcijalno rastojanje je:

$$P_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_2}^{j_1} |x_k - y_k|,$$

pa imamo:

$$RP_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_2}^{j_2} (x_k - \lambda) + \sum_{k=j_2+1}^{i_1-1} (x_k - y_k) + \sum_{k=i_1}^{j_1} (\lambda - y_k).$$

Redukovana parcijalna realizacija je:

$$RRP_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_2}^{i_1-1} x_k - \sum_{k=j_2+1}^{j_1} y_k + (m_1 - m_2)\lambda.$$

Ako važi $i_1 < i_2 < j_2 < j_1$, onda je:

$$P_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_1}^{j_1} |x_k - y_k|,$$

pa je:

$$RP_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_1}^{i_2-1} (y_k - \lambda) + \sum_{k=i_2}^{j_2} (\lambda - \lambda) + \sum_{k=j_2+1}^{j_1} (\lambda - y_k).$$

Sada imamo: $RRP_{M,\lambda}(G_1, G_2) = \sum_{k=i_1}^{i_2-1} y_k - \sum_{k=j_2+1}^{j_1} y_k - (j_2 - j_1 + i_2 - i_1)\lambda$. ■

Iz Tvrdjenja 2.4.1 vidimo da ukoliko su multipliciteti zajedničke sopstvene vrednosti λ u M -spektrima grafova G_1 i G_2 , čije M -spektralno rastojanje izračunavamo, isti, onda redukovana parcijalna realizacija ne sadrži članove, odnosno sabirke λ i $-\lambda$. U slučaju kada su spomenuti multipliciteti različiti, shodno ranije uvedenim oznakama, imamo:

Posledica 2.4.1 *Ako M -spektri grafova G_1 i G_2 sadrže sopstvenu vrednost λ sa višestrukostima $m_1 \neq m_2$, respektivno, tako da važi:*

$$i_2 - i_1 = j_1 - j_2, \text{ za } i_1 < i_2 \leq j_2 < j_1 \text{ i } m_1 > m_2, \quad (2.6)$$

ili

$$i_1 - i_2 = j_2 - j_1, \text{ za } i_2 < i_1 \leq j_1 < j_2 \text{ i } m_1 < m_2, \quad (2.7)$$

onda redukovana parcijalna realizacija $RRP_{M,\lambda}(G_1, G_2)$ parcijalnog spektralnog rastojanja $P_{M,\lambda}(G_1, G_2)$ ne sadrži član λ kao ni član $-\lambda$.

Dokaz. Sledi direktno iz poslednjeg slučaja razmotrenog u dokazu Tvrdjenja 2.4.1.

■

Kako su sopstvene vrednosti koje čine sabirke u sumi \sum_2 iz formule (2.5) međusobno različite, iz formule (2.5) i Tvrdjenja 2.4.1 direktno sledi sledeća:

Teorema 2.4.1 *M -spektralno rastojanje grafova istog reda ne zavisi od njihovih zajedničkih sopstvenih vrednosti do na multiplicitet.*

Takođe, iz prethodno izloženog sledi da važi i sledeća:

Teorema 2.4.2 *Neka M -spektri grafova G_1 i G_2 sa n čvorova sadrže sopstvene vrednosti $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_m$ sa multiplicitetima redom $m_{11}, m_{12}, \dots, m_{1m}$ i $m_{21}, m_{22}, \dots, m_{2m}$, tako da $m_{1l} \neq m_{2l}$ važi za svako $l \in \{1, 2, \dots, m\}$. Ako parovi m_{1l}, m_{2l} , u skladu sa definicijom 2.4.1, zadovoljavaju relaciju (2.6) ili (2.7), onda M -spektralno rastojanje između grafova G_1 i G_2 ne zavisi od zajedničkih sopstvenih vrednosti ovih grafova.*

2.5 A -spektralna rastojanja nekih posebnih grafova

Kako je [59] jedan od prvih radova u kojima se razmatra problem spektralnih rastojanja izložen na matematičkoj radionici u Averi u 2006. godine (vidi [85]), tu su izračunata A -spektralna rastojanja između nekih grafova koji su opštepoznati i sveprisutni u literaturi. Spektri nekih od grafova čija ćemo spektralna rastojanja izračunati u ovom odeljku navedeni su u uvodnom poglavlju, a spektri ostalih se

mogu naći u, na primer, [26] ili [30], a izlistani su u Tabeli 2.1. Napominjemo da je koktel-parti graf CP_n , koji je komplement grafa nK_2 , graf sa $2n$ čvorova.

Odeljak započinjemo interesantnim rezultatom koji se odnosi na spektralno rastojanje konture C_n i puta P_n , i koje je, pokazuje se, jednako u odnosu na spektre sve tri matrice - i matrice susedstva, i Laplasove matrice i nenegativne Laplasove matrice.

Teorema 2.5.1 *Važi: $\sigma_A(P_n, C_n) = 2$, $n \geq 3$.*

Dokaz. Pretpostavimo da je n neparan broj. Razmatranjem spektara grafova P_n i C_n (vidi Tabelu 2.1), dobijamo:

$$\lambda_1(C_n) > \lambda_i(C_n) = \lambda_{i+1}(C_n) > \lambda_{i+2}(C_n) = \lambda_{i+3}(C_n), \quad i = 2, 4, 6, \dots, n-3,$$

kao i

$$\lambda_i(C_n) > \lambda_i(P_n) > \lambda_{i+1}(P_n) > \lambda_{i+1}(C_n), \quad i = 1, 3, 5, \dots, n-2, \quad \lambda_n(C_n) > \lambda_n(P_n).$$

Korišćenjem gore navedenih jednakosti, imamo:

$$\begin{aligned} \sigma_A(P_n, C_n) &= \lambda_1(C_n) - \lambda_1(P_n) + \sum_{i=2}^n |\lambda_i(P_n) - \lambda_i(C_n)| \\ &= \lambda_1(C_n) - \lambda_1(P_n) + \sum_{\substack{i \text{ paran, } i=2 \\ i=2}}^{n-1} (\lambda_i(P_n) - \lambda_i(C_n) + \lambda_i(C_n) - \lambda_{i+1}(P_n)) \\ &= 2 + \sum_{i=1}^n (-1)^n \lambda_i(P_n) = 2, \end{aligned}$$

gde poslednja jednakost sledi iz činjenice da je P_n bipartitan graf, a n neparan broj.

Pretpostavimo sada da je n paran broj. Kako važi:

$$\lambda_1(C_n) > \lambda_i(C_n) = \lambda_{i+1}(C_n) > \lambda_{i+2}(C_n) = \lambda_{i+3}(C_n) > \lambda_n(C_n), \quad i = 2, 4, 6, \dots, n-4,$$

i

$$\lambda_i(C_n) > \lambda_i(P_n) > \lambda_{i+1}(P_n) > \lambda_{i+1}(C_n), \quad i = 1, 3, \dots, n-1,$$

to je:

$$\sigma_A(P_n, C_n) = 2\lambda_1(C_n) + \sum_{i=1}^n (-1)^i \lambda_i(P_n) = 4 - 2 \sum_{i=1}^n (-1)^i \cos \frac{i\pi}{n+1} = 2.$$

Poslednja jednakost u gornjoj relaciji sledi iz činjenice da je P_n bipartitan graf, kao i iz trigonometrijskog identiteta: $\sum_{i=1}^{n/2} (-1)^i \cos \frac{i\pi}{n+1} = 1/2$. ■

Napomena 2.5.1 *Shodno Lemi 2.3.2, važi i da je: $\sigma_L(P_n, C_n) = \sigma_Q(P_n, C_n) = 2$.*

Tabela 2.1: Neki posebni grafovi i njihovi A -spektri

Graf	Spektar grafa
P_n	$2 \cos \frac{i\pi}{n+1}, i = 1, \dots, n$
C_n	$2 \cos \frac{2i\pi}{n}, i = 1, \dots, n$
Z_n	0 i $2 \cos \frac{(2i-1)\pi}{2n-2}, i = 1, \dots, n-1$
W_n	$2, [0]^2, -2$ i $2 \cos \frac{i\pi}{n-3}, i = 1, \dots, n-4$
K_n	$n-1$ i $[-1]^{n-1}$
K_{n_1, n_2}	$\sqrt{n_1 n_2}, [0]^{n_1+n_2-2}$ i $-\sqrt{n_1 n_2}$
CP_n	$2n-2, [0]^n$ i $[-2]^{n-1}$

Teorema 2.5.2 *Važi: $\sigma_A(Z_{2n-1}, C_{2n-1}) = 2, n \geq 2$.*

Dokaz. Kako sopstvene vrednosti grafova iz formulacije tvrđenja zadovoljavaju iste jednakosti, odnosno nejednakosti, kao i sopstvene vrednosti grafova P_n i C_n za slučaj kada je n neparan broj (vidi prvi deo dokaza Teoreme 2.5.1), to je:

$$\sigma_A(Z_{2n-1}, C_{2n-1}) = 2 + \sum_{i=1}^n (-1)^n \lambda_i(Z_{2n-1}) = 2.$$

Ovim je teorema dokazana. ■

Teorema 2.5.3 *Za A -spektralna rastojanja grafova P_n, C_n, Z_n i W_n važi sledeće:*

- (i) $\sigma_A(P_n, Z_n) < 1$ za svaki neparan broj n i paran broj n takav da je $n \geq 30$.
- (ii) Neka je $n \geq 5$. Tada je $\sigma_A(P_n, W_n) < 2$ za svaki neparan broj n takav da je $n \geq 11$, i svaki paran broj n .
- (iii) $\sigma_A(C_n, Z_n) < 3$ kada je n paran broj i $n \geq 4$.
- (iv) Neka je $n \geq 5$. Tada je $\sigma_A(C_n, W_n) < 3$ za svaki neparan broj n takav da je $n \geq 7$, i svaki paran broj n .
- (v) Neka je $n \geq 5$. Tada je $\sigma_A(Z_n, W_n) < 1$ za svaki neparan broj n takav da je $n \geq 31$, i svaki paran broj n .

Dokaz. Razmatranjem apsolutnih vrednosti razlika $|\lambda_i(P_n) - \lambda_i(Z_n)|$, za $i = 1, \dots, n$, može da se proveri da $\sigma_A(P_{2k}, Z_{2k}), \sigma_A(P_{2k-1}, Z_{2k-1}) < \sigma_A(P_{2k-2}, Z_{2k-2})$ važi za svako $k \geq 2$. Pored toga, neposrednim izračunavanjem dobijamo:

$$\sigma_A(P_{30}, Z_{30}) < 1 \text{ i } \sigma_A(P_{2k-1}, Z_{2k-1}) < 1, \quad k \leq 15.$$

Otuda sledi (i). Ostali slučajevi se dokazuju analognim rezonovanjem. ■

Teorema 2.5.4 *Neka je G proizvoljan graf, i neka $n^* = n^*(G)$ označava broj sopstvenih vrednosti grafa G koje su veće ili jednake -1. Tada je:*

$$(i) \quad \sigma_A(K_n, G) = 2(n^* - 1 + \sum_{i=2}^{n^*} \lambda_i(G)).$$

$$(ii) \quad \sigma_A(K_{n_1, n_2}, G) = \begin{cases} E(G) - 2\sqrt{n_1 n_2}, & \sqrt{n_1 n_2} < -\lambda_n(G) \\ E(G) + 2\lambda_n(G), & \sqrt{n_1 n_2} \in [-\lambda_n(G), \lambda_1(G)) \\ E(G) + 2(\sqrt{n_1 n_2} - \lambda_1(G) + \lambda_n(G)), & \sqrt{n_1 n_2} \geq \lambda_1(G). \end{cases}$$

Dokaz. (i) Imamo da je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(K_n, G) &= n - 1 - \lambda_1(G) + \sum_{i=2}^n |\lambda_i(G) + 1| = n - 1 - \lambda_1(G) + \\ &\sum_{i=2}^{n^*} (\lambda_i(G) + 1) - \sum_{i=n^*+1}^n (\lambda_i(G) + 1) = \\ &n - 1 - \lambda_1(G) + n^* - 1 + \sum_{i=2}^{n^*} \lambda_i(G) - n + n^* - \sum_{i=n^*+1}^n \lambda_i(G) = \\ &2(n^* - 1) - \lambda_1(G) + \sum_{i=2}^{n^*} \lambda_i(G) - \sum_{i=n^*+1}^n \lambda_i(G) = 2(n^* - 1 + \sum_{i=2}^{n^*} \lambda_i(G)), \end{aligned}$$

gde poslednja jednakost sledi iz $\sum_{i=1}^n \lambda_i(G) = 0$.

(ii) U ovom slučaju je:

$$\sigma_A(K_{n_1, n_2}, G) = E(G) - \lambda_1(G) + \lambda_n(G) + |\lambda_1(G) - \sqrt{n_1 n_2}| + |\lambda_n(G) + \sqrt{n_1 n_2}|,$$

odakle se razmatranjem mogućih vrednosti $\sqrt{n_1 n_2}$ dobijaju jednakosti iz formulacije tvrđenja. ■

Tabela 2.2: A -spektralna rastojanja grafa K_n i nekih posebnih grafova

G	$\sigma_A(K_n, G)$	ograničenje
P_n	$2\left(\left\lfloor\frac{2(n+1)}{3}\right\rfloor - 1 + \sum_{i=2}^{n-\lfloor\frac{2(n+1)}{3}\rfloor} \lambda_i(P_n)\right)$	$n \geq 6$
C_n	$2\left(2\left\lfloor\frac{n}{3}\right\rfloor + \sum_{i=2}^{2\lfloor\frac{n}{3}\rfloor+1} \lambda_i(C_n)\right)$	$n \geq 4$
Z_n	$2\left(\left\lfloor\frac{2(n+1)}{3}\right\rfloor - 1 + \sum_{i=2}^{n-\lfloor\frac{2(n+1)}{3}\rfloor} \lambda_i(Z_n)\right)$	$n \geq 6$
W_n	$2\left(\left\lfloor\frac{2n}{3}\right\rfloor + \sum_{i=2}^{n-\lfloor\frac{2n}{3}\rfloor-1} \lambda_i(W_n)\right)$	$n \geq 7$
K_n	0	
K_{n_1, n_2}	$2(n-2)$	$2 \leq n = n_1 + n_2$
CP_n	n	n je paran broj

U Tabelama 2.2, 2.3 i 2.4 izložena su još neka A -spektralna rastojanja grafova iz Tabele 2.1. Pri izračunavanju ovih A -spektralnih rastojanja pozivali smo se na bipartitnost određenih grafova, spektre grafova izložene u Tabeli 2.1, kao i na Teoremu 2.5.4. Analiziranjem dobijenih rezultata vidimo da je, na primer, $\sigma_A(CP_{n/2}, W_n) = \sigma_A(CP_{n/2}, K_{n_1, n_2})$, kao i da je ovim A -spektralnim rastojanjima jednako A -spektralno rastojanje između grafova $CP_{n/2}$ i C_n za $n \equiv_4 0$.

U nekim slučajevima, spektralna rastojanja između ovih posebnih grafova u odnosu na Laplasovu i nenegativnu Laplasovu matricu izračunavaju se veoma jednostavno. Na primer, kako je svaki graf G sa n čvorova podgraf po granama kompletnog grafa K_n , to je prema Lemi 2.3.2:

$$\sigma_L(K_n, G) = \sigma_Q(K_n, G) = n(n-1) - 2e(G),$$

gde je $e(G)$ broj grana grafa G . Tako je:

$$\sigma_L(K_n, C_n) = n(n-3),$$

$$\sigma_L(K_n, P_n) = (n-1)(n-2),$$

$$\sigma_L(K_n, Z_n) = (n-1)(n-2),$$

Tabela 2.3: A -spektralna rastojanja grafa K_{n_1, n_2} i nekih posebnih grafova

G	$\sigma_A(K_{n_1, n_2}, G)$	ograničenje
P_n	$2(\sqrt{n_1 n_2} - 2\lambda_1(P_n)) + E(P_n)$	$n_1 + n_2 = n \geq 5$
C_n	$2(\sqrt{n_1 n_2} - 2 + \lambda_n(C_n)) + E(C_n)$	$n_1 + n_2 = n \geq 5$
Z_n	$2(\sqrt{n_1 n_2} - 2\lambda_1(Z_n)) + E(Z_n)$	$n_1 + n_2 = n \geq 5$
W_n	$2(\sqrt{n_1 n_2} - 4) + E(W_n)$	$n_1 + n_2 = n \geq 5$
K_n	$2(n - 2)$	$n_1 + n_2 = n \geq 2$
K_{n_1, n_2}	0	
CP_n	$2(n - 4)$	$n_1 + n_2 = n \geq 6$, n je paran broj

 Tabela 2.4: A -spektralna rastojanja grafa $CP_{n/2}$ i nekih posebnih grafova

G	$\sigma_A(CP_{n/2}, G)$, n paran	ograničenje
P_n	$2(n - \lambda_1(P_n) + \lambda_{n/2}(P_n) - 2)$	$n \geq 6$
C_n	$2(n + \lambda_{n/2}(C_n) - 4)$	$n \geq 6$
Z_n	$2(n - \lambda_1(Z_n) - 2)$	$n \geq 6$
W_n	$2(n - 4)$	$n \geq 6$
K_n	n	
K_{n_1, n_2}	$2(n - 4)$	$n_1 + n_2 = n \geq 6$
CP_n	0	

$$\sigma_L(K_n, W_n) = (n - 1)(n - 2),$$

$$\sigma_L(K_n, CP_{n/2}) = n, \text{ za } n \text{ paran,}$$

$$\sigma_L(K_n, K_{n_1, n_2}) = n(n - 1) - \frac{1}{2}n_1 n_2, \quad n_1 + n_2 = n.$$

Slično važi i za koktel-parti graf $CP_{n/2}$, gde je n paran broj:

$$\sigma_L(CP_{n/2}, C_n) = n(n - 4),$$

$$\sigma_L(CP_{n/2}, P_n) = n^2 - 4n + 2,$$

$$\sigma_L(CP_{n/2}, Z_n) = n^2 - 4n + 2, \quad \frac{n}{2} > 3,$$

$$\sigma_L(CP_{n/2}, W_n) = n^2 - 4n + 2, \quad \frac{n}{2} \geq 4.$$

Rezultati navedeni u prethodnim teoremama i tabelama predstavljaju primere beskonačnih familija grafova čije je A -spektralno rastojanje relativno malo, odnosno u konkretnom slučaju manje ili jednako 1,2 ili 3. Preciznije, ukoliko važi $\sigma_A(G_1, G_2) \leq \epsilon$, gde je ϵ nenegativan i dovoljno mali broj, kažemo da su grafovi G_1 i G_2 *skoro kospektralni*. U tom smislu sledećim tvrđenjem dat je još jedan par grafova koji nisu kospektralni, odnosno koji nemaju jednake spektre, a čije je A -spektralno rastojanje proizvoljno malo.

Tvrđenje 2.5.1 *Važi: $\sigma_A(K_{n_1, n_2}, K_{n_1-l, n_2} + lK_1) \leq \epsilon$, za svako $n_1 \geq \frac{(\epsilon^2 + 4ln_2)^2}{16\epsilon^2 n_2}$.*

Dokaz. Rešavanjem nejednakosti:

$$\sigma_A(K_{n_1, n_2}, K_{n_1-l, n_2} + lK_1) = 2 \left(\sqrt{n_1 n_2} - \sqrt{(n_1 - l)n_2} \right) \leq \epsilon.$$

dolazimo do rezultata. ■

2.6 Hipoteze o spektralnom rastojanju grafova

U ovom odeljku najpre navodimo hipoteze postavljene u [59] koje se odnose na A -spektralno rastojanje grafova, a nastale su kao rezultat izračunavanja sprovedenih u $C++$ programu **SDCalc** specijalno kreiranom za ove potrebe (vidi Dodatak A i Dodatak B).

Hipoteza 2.6.1 *A -spektralno rastojanje između dva grafa reda n nije veće od*

$$E_n^{\max} = \max\{E(G), G \text{ je graf reda } n\}.$$

Računski rezultati (videti Dodatak B) potvrđuju ovu pretpostavku za $n \leq 8$. Ukoliko sa \mathcal{G}_n označimo skup svih grafova reda n , Hipoteza 2.6.1 može da se formuliše na sledeći način: $\text{sdiam}^A(\mathcal{G}_n) = E_n^{\max}$?

Hipoteza 2.6.2 *Neka su R_1 i R_2 grafovi čije je A -spektralno rastojanje u skupu svih povezanih regularnih grafova reda n maksimalno. Tada je jedan od njih K_n .*

Računski rezultati potvrđuju ovu pretpostavku za $n \leq 11$. Takođe, na osnovu dobijenih rezultata može se zaključiti da ne postoji pravilnost vezana za strukturu drugog grafa, pa je to nekad kontura, a za $n = 10$ Petersenov graf. Štaviše, u nekim slučajevima postoji i više od jednog grafa kandidata za drugi graf. Ukoliko sa \mathcal{R}_n označimo skup svih regularnih grafova reda n , onda se Hipoteza 2.6.2 može kraće formulisati kao: $\text{sdiam}^A(\mathcal{R}_n) = \text{secc}_{\mathcal{R}_n}^A(K_n)$?

Hipoteza 2.6.3 *Neka su B_1 i B_2 grafovi čije je A -spektralno rastojanje u skupu svih povezanih bipartitnih grafova reda n maksimalno. Tada je jedan od njih $K_{\lfloor n/2 \rfloor, \lfloor n/2 \rfloor}$.*

Računski rezultati potvrđuju ovu pretpostavku za $n \leq 11$. Slično, kao i u prethodnom slučaju, jasno pravilo u pogledu strukturnih osobina drugog grafa ne postoji. Ukoliko sa \mathcal{B}_n označimo skup svih bipartitnih grafova reda n , Hipotezu 2.6.3 kraće formulišemo kao: $\text{sdiam}^A(\mathcal{B}_n) = \text{secc}_{\mathcal{B}_n}^A(K_{\lfloor n/2 \rfloor, \lfloor n/2 \rfloor})$?

Hipoteza 2.6.4 *A -spektralno rastojanje između dva stabla reda n nije veće od A -spektralnog rastojanja $\sigma_A(P_n, K_{n-1,1})$.*

Računski rezultati potvrđuju ovu pretpostavku za $n \leq 16$. Ukoliko sa \mathcal{T}_n označimo skup svih stabala reda n , tada Hipotezu 2.6.4 kraće možemo da formulišemo kao: $\text{sdiam}^A(\mathcal{T}_n) = \sigma_A(P_n, K_{n-1,1})$?

Takođe, važi i:

Lema 2.6.1 *Ukoliko je T_n proizvoljno stablo reda n , tada je:*

$$\sigma_A(T_n, K_{n-1,n}) \leq \sigma_A(P_n, K_{n-1,1}).$$

Dokaz. Kako je za svako n : $\lambda_1(P_n) \leq \lambda_1(T_n) \leq \lambda_1(K_{n-1,1})$ i $E(P_n) \geq E(T_n)$ (vidi [43]), to je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(T_n, K_{n-1,1}) &= 2(\sqrt{n-1} - 2\lambda_1(T_n)) + E(T_n) \leq \\ &2(\sqrt{n-1} - 2\lambda_1(P_n)) + E(P_n) = \sigma_A(P_n, K_{n-1,1}). \end{aligned}$$

Ovim je lema dokazana. ■

Naredna hipoteza predstavlja zapravo dopunu rezultata koji su dati u Tabelama 2.2, 2.3 i 2.4.

Hipoteza 2.6.5

$$\begin{aligned} 0.945 \approx \lim_{n \rightarrow \infty} \sigma_A(P_n, Z_n) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sigma_A(W_n, Z_n) = \frac{1}{2} \lim_{n \rightarrow \infty} \sigma_A(P_n, W_n); \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \sigma_A(C_{2n}, Z_{2n}) &= 2 (= \sigma_A(C_{2n-1}, Z_{2n-1})). \end{aligned}$$

Hipoteza 2.6.6 *Postoje grafovi G_1 i G_2 bez zajedničkih sopstvenih vrednosti tako da je: $\sigma_A(G_1, G_2) < \epsilon$, gde je $\epsilon > 0$ proizvoljan mali broj.*

Par grafova iz Tvrdjenja 2.5.1 predstavlja primer grafova čije je A -spektralno rastojanje proizvoljno malo. Uz to, računski rezultati pokazuju da se sa povećanjem reda grafa, minimalno A -spektralno rastojanje smanjuje, što opravdava postavku ovakve hipoteze.

Lema 2.3.3 nas je inspirisala (vidi [58]) da pokušamo da pronađemo par grafova čije je A -spektralno rastojanje veće od maksimalne energije E_n^{max} na skupu svih grafova reda n . Kako za energiju grafa G reda n važi sledeća nejednakost (vidi [63]): $E(G) \leq \frac{n}{2}(1 + \sqrt{n})$, gde se jednakost dostiže ako i samo ako je G jako regularan graf sa parametrima $(n, (n + \sqrt{n})/2, (n + \sqrt{n})/4, (n + \sqrt{n})/4)$, zaključili smo da za jako regularan graf G sa parametrima (n, r, e, f) takvim da je $f \approx \sqrt{n}$ i e mali pozitivan broj, važi da je: $\sigma_A(G, \overline{G}) = O(n^{3/2})$. Preciznije, razmotrimo sledeće primere.

Primer 2.6.1 *Generalisani četvorougao (engl. generalized quadrangle) $Q_1 = GQ(2, 4)$ (nešto više o ovom tipu grafova čitalac može naći, na primer, u [39], str. 81) je jako regularan graf sa parametrima $(27, 10, 1, 5)$. A -spektar ovog grafa čine: $10, [1]^{20}, [-5]^6$, pa se lako izračunava $\sigma_A(Q_1, \overline{Q_1}) = 84$. Kako je $E_n^{max} \leq \frac{n}{2}(1 + \sqrt{n}) \approx 83.648$, ovim primerom smo opovrgli Hipotezu 2.6.1.*

Primer 2.6.2 *Generalisani četvorougao $Q_2 = GQ(3, 9)$ je jako regularan graf sa parametrima $(112, 30, 2, 10)$. Kako je A -spektar ovog grafa sastavljen od: $30, [2]^{90}, [-10]^{21}$, nalazimo da je $\sigma_A(Q_2, \overline{Q_2}) = 690 > 648, 648 = \frac{n}{2}(1 + \sqrt{n}) \geq E_n^{max}$, odnosno nalazimo još jedan primer parova grafova kojim pobijamo Hipotezu 2.6.1. Pored toga, energije grafova Q_2 i $\overline{Q_2}$ takođe su manje od vrednosti A -spektralnog rastojanja između njih, i iznose: $E(G_2) = 420$ i $E(\overline{G_2}) = 540$.*

U nastavku razmatramo Hipotezu 2.6.2 ali na jednom posebno odabranom podskupu svih povezanih regularnih grafova reda n , i u odnosu na Laplasove matrice odgovarajućih grafova.

Tvrdjenje 2.6.1 *Neka je \mathcal{R} skup povezanih regularnih grafova reda n čiji je spektar u odnosu na matricu susedstva $\lambda_1(R) \geq \lambda_2(R) \geq \dots \geq \lambda_n(R) \geq -2$, za proizvoljan graf R iz skupa \mathcal{R} . Tada važi da je:*

$$\sigma_L(R_1, R_2) \leq \sigma_L(C_n, K_n),$$

gde su R_1 i R_2 dva r_i -regularna grafa, $i = 1, 2$ iz skupa \mathcal{R} takva da je $r_i \geq 2$, $i = 1, 2$ i $r_1 + r_2 \leq n - 3$.

Dokaz. Shodno Lemi 2.3.2, nalazimo da je:

$$\sigma_L(C_n, K_n) = 2 \left(\frac{n(n-1)}{2} - n \right) = n(n-3),$$

kao i:

$$\sigma_L(R, K_n) = 2 \left(\frac{n(n-1)}{2} - \frac{nr}{2} \right) = n(n-1-r),$$

za neki r -regularan graf R iz skupa \mathcal{R} .

Kako je L -spektar proizvoljnog r -regularnog grafa R iz skupa \mathcal{R} sledećeg oblika: $\mu_1(R) = r - \lambda_n(R) \geq \mu_2(R) = r - \lambda_{n-1}(R) \geq \dots \geq \mu_n(R) = r - \lambda_1(R) = 0$, imamo da je:

$$\begin{aligned} \sigma_L(R_1, R_2) &= \sum_{i=1}^n |\mu_i(R_1) - \mu_i(R_2)| = \\ &= \sum_{i=1}^n |(r_1 - \lambda_i(R_1)) - (r_2 - \lambda_i(R_2))| \leq \sum_{i=1}^n (\max\{r_1, r_2\} + 2) \leq \\ &= n(n-3 - \min\{r_1, r_2\} + 2) = \sigma_L(R_{\min\{r_1, r_2\}}, K_n) \leq n(n-1-2) = \sigma_L(C_n, K_n), \end{aligned}$$

čime je tvrđenje dokazano. ■

Izračunavanja koja su sprovedena za stabla reda $5 \leq n \leq 11$ (vidi Dodatak B) pokazuju da su stabla sa maksimalnom L -energijom zvezde $K_{1,n-1}$, kao i da ne postoje parovi stabala reda n čije je L -spektralno rastojanje veće od L -energije zvezde $K_{1,n-1}$, tj. $E^L(K_{1,n-1})$. Stoga je opravdano da postavimo sledeću [58]:

Hipoteza 2.6.7 *Neka su T_1 i T_2 proizvoljna stabla reda n . Tada je:*

$$\sigma_L(T_1, T_2) \leq E^L(K_{1,n-1}).$$

Uz dodatne pretpostavke možemo da dokažemo sledeće:

Tvrđenje 2.6.2 *Neka su T_1 i T_2 stabla reda $n \geq 5$ za čije sopstvene vrednosti u odnosu na Laplasovu matricu važi: $|\mu_1(T_1) - \mu_1(T_2)| \leq \min\{\mu_1(T_1), \mu_1(T_2)\} - 2$ i $|\mu_i(T_1) - \mu_i(T_2)| \leq \min\{\mu_i(T_1), \mu_i(T_2)\}$, za $i = 2, 3, \dots, n$. Tada je: $\sigma_L(T_1, T_2) \leq E^L(K_{1,n-1})$.*

Dokaz. S obzirom na pretpostavke biće:

$$\sigma_L(T_1, T_2) \leq (\mu_1(T_1) - 2) + \sum_{i=2}^n \mu_i(T_1) = 2(n-1) - 2 < 2n - 4 + \frac{4}{n} = E^L(K_{1,n-1}),$$

čime je tvrđenje dokazano. ■

Napomena 2.6.1 *Analogni rezultati važe i za Q -spektralna rastojanja stabala.*

2.7 Spektralna rastojanja u specijalno konstruisanim skupovima grafova

Jedan od istraživačkih zadataka u vezi sa spektralnim rastojanjem grafova tiče se ispitivanja kospektralnosti grafa iz neke specijalno odabrane klase grafova [85]. Stoga u ovom odeljku konstruišemo sedam familija grafova specijalno određene strukture i međusobnog odnosa, i izračunavamo spektralna rastojanja i parametre spektralnih rastojanja u njima. Odeljak zaključujemo izračunavanjem spektralnih rastojanja u nekim skupovima regularnih grafova.

2.7.1 Skup KK_n^j grafova

Graf KK_n^j definisan je u [38] kao graf koji nastaje od dve kopije kompletnog grafa K_n tako što jedan čvor jedne od kopija grafa K_n povezujemo pomoću j grana sa j čvorova druge kopije grafa K_n , gde je $1 \leq j \leq n$. A -karakteristični polinom grafa KK_n^j za $n \geq 3$ i $1 \leq j \leq n$ izložen je u radu [38]: $P_{KK_n^j}(x) = (x+1)^{(2n-4)}h(x)$, gde je $h(x)$ polinom četvrtog stepena. U nastavku ćemo pokazati da su nule polinoma $h(x)$ upravo prva, druga, treća i $2n$ -ta sopstvena vrednost grafa KK_n^j .

Za matricu susedstva A^j grafa KK_n^j važi da je: $A^j = A^0 + M_j$, gde je A^0 matrica susedstva grafa $2K_n$, dok je M_j matrica sledećeg oblika:

$$M_j = \begin{pmatrix} O & X_j \\ X_j^T & O \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 & \cdots & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix},$$

gde je O nula matrica reda n , dok je X_j matrica reda n koja jedino u jednoj vrsti (koja odgovara izabranom čvoru u jednoj od kopija grafa K_n) ima j jedinica, i sve ostale elemente jednake nuli.

Kako se primenom elementarnih transformacija vrsta matrica M_j svodi na matricu čije su sve sem dve nula-vrste, to u spektru matrice M_j postoje $2n-2$ sopstvene

vrednosti koje su jednake nuli. Preostale dve su zbog bipartitnosti pripadajućeg grafa simetrične u odnosu na nulu, i neposrednom proverom se pokazuje da su jednake $\pm\sqrt{j}$, za $1 \leq j \leq n$.

Odredimo sada raspored sopstvenih vrednosti $\lambda_i(KK_n^j)$, $i = 1, 2, \dots, 2n$ u spektru grafa KK_n^j . Iz Courant-Weyl-ovih nejednakosti (Teorema 1.1.2 u uvodnom poglavlju) primenjenih na matrice A^0 i M_j dobijamo da važi:

$$\lambda_l(KK_n^j) \geq \lambda_{l+1}(2K_n) + \lambda_{2n-1}(M_j) = \lambda_{l+1}(2K_n) = -1, l = 4, 5, \dots, 2n-1;$$

$$\lambda_l(KK_n^j) \leq \lambda_{l-1}(2K_n) + \lambda_2(M_j) = \lambda_{l-1}(2K_n) = -1, l = 4, 5, \dots, 2n-1;$$

$$\lambda_{2n}(KK_n^j) \leq \lambda_{2n-1}(2K_n) + \lambda_2(M_j) = \lambda_{2n-1}(2K_n) = -1;$$

$$\lambda_3(KK_n^j) \geq \lambda_4(2K_n) + \lambda_{2n-1}(M_j) = \lambda_4(2K_n) = -1,$$

jer se spektar grafa $2K_n$ sastoji od: $[n-1]^2$ i $[-1]^{2n-2}$, pa zaključujemo da su nule polinoma $h(x)$ upravo sopstvene vrednosti $\lambda_1(KK_n^j)$, $\lambda_2(KK_n^j)$, $\lambda_3(KK_n^j)$ i $\lambda_{2n}(KK_n^j)$.

Teorema 2.7.1 *Neka je $\mathcal{G}_1 = \{G_0, G_1, \dots, G_n\}$ skup grafova takvih da je $G_0 = 2K_n$ i $G_i = KK_n^i$, za $1 \leq i \leq n$. Za A-spektralno rastojanje grafova iz skupa \mathcal{G}_1 važi da je:*

$$\sigma_A(G_i, G_j) \leq \lambda_1(G_j) - \lambda_1(G_i) + 3\sqrt{j-i},$$

za $0 \leq i < j \leq n$ i $n \geq 3$.

Dokaz. A-spektralno rastojanje grafova $G_i = KK_n^i$ i $G_j = KK_n^j$ za $0 \leq i < j \leq n$ je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G_i, G_j) &= \sum_{l=1}^{2n} |\lambda_l(G_i) - \lambda_l(G_j)| = \\ &|\lambda_1(G_i) - \lambda_1(G_j)| + |\lambda_2(G_i) - \lambda_2(G_j)| + |\lambda_3(G_i) - \lambda_3(G_j)| + |\lambda_{2n}(G_i) - \lambda_{2n}(G_j)|, \end{aligned}$$

odnosno, kako indeks grafa ne opada dodavanjem novih elemenata (Teorema 0.7 iz [26]) biće:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G_i, G_j) &= \lambda_1(G_j) - \lambda_1(G_i) + |\lambda_2(G_i) - \lambda_2(G_j)| + \\ &|\lambda_3(G_i) - \lambda_3(G_j)| + |\lambda_{2n}(G_i) - \lambda_{2n}(G_j)|. \end{aligned}$$

Kako za matrice susedstva A^i i A^j grafova KK_n^i i KK_n^j , respektivno, važi da je $A^j = A^i + M_{j-i}$, gde je M_{j-i} , kao i ranije, matrica reda $2n$ sa $(j-i+1)$ -nom ne-nula vrstom, primenom Courant-Weyl-ovih nejednakosti dobijamo:

$$\lambda_l(KK_n^j) \leq \lambda_l(KK_n^i) + \lambda_1(M_{j-i}) = \lambda_l(KK_n^i) + \sqrt{j-i}, l = 2, 3, 2n,$$

$$\lambda_l(KK_n^j) \geq \lambda_l(KK_n^i) + \lambda_{2n}(M_{j-i}) = \lambda_l(KK_n^i) - \sqrt{j-i}, l = 2, 3, 2n,$$

što znači da je: $|\lambda_l(G_i) - \lambda_l(G_j)| \leq \sqrt{j-i}$, za $l = 2, 3, 2n$. Stoga je:

$$\sigma_A(G_i, G_j) \leq \lambda_1(G_j) - \lambda_1(G_i) + 3\sqrt{j-i}.$$

Ovim je teorema dokazana. ■

Napomena 2.7.1 *Kako odgovarajuće prve, druge, treće, odnosno $2n$ -te sopstvene vrednosti grafova iz skupa \mathcal{G}_1 nisu monotono uređene, nije moguće tačno izračunati, odnosno oceniti parametre A -spektralnih rastojanja u datom skupu, u opštem slučaju. Tako je, na primer, u skupu \mathcal{G}_1 za $G_0 = 2K_7$, $\text{cs}(\mathcal{G}_1) = \sigma_A(G_0, G_1) = 2$, dok je $\text{sdiam}(\mathcal{G}_1) = \sigma_A(G_0, G_5) = 3.68$, što se razlikuje od vrednosti A -spektralnog dijametra u nekim skupovima grafova specijalne strukture i međusobnog odnosa koje ćemo razmotriti u nastavku. Naime, videćemo da će spektralni dijametar u tim skupovima grafova odgovarati A -spektralnom rastojanju između ekstremalnih grafova datog skupa, tj. grafova sa najmanjim, odnosno najvećim brojem grana.*

Napomena 2.7.2 *S obzirom da je graf G_i iz skupa \mathcal{G}_1 podgraf po granama grafa G_j , za $0 \leq i < j \leq n$, i da se ovi grafovi razlikuju za tačno $j-i$ grana, shodno Lemi 2.3.2, L -, odnosno Q -spektralno rastojanje ovih grafova je: $\sigma_L(G_i, G_j) = \sigma_Q(G_i, G_j) = 2(j-i)$. U ovom slučaju parametre spektralnih rastojanja moguće je tačno izračunati. Tako imamo da je:*

- $\text{cs}_{\mathcal{G}_1}^L(G_i) = \min\{\sigma_L(G_i, G_j) : G_j \in \mathcal{G}_1, j \neq i\} = 2$;
- $\text{cs}^L(\mathcal{G}_1) = 2$;
- $\text{secc}_{\mathcal{G}_1}^L(G_i) = \max\{\sigma_L(G_i, G_j) : G_j \in \mathcal{G}_1, j \neq i\} = \max\{2i, 2(n-i)\}$;
- $\text{sdiam}^L(\mathcal{G}_1) = 2n$.

Analogno će važiti i za odgovarajuće grafovske invarijante u odnosu na Q -spektre ovih grafova.

2.7.2 Neki kompletni multipartitni grafovi

Neka je $\mathcal{G}_2 = \{G_1, G_2, \dots, G_p\}$ skup kompletnih multipartitnih grafova $G_i = K_{k_i \times m_i}$ reda n , gde je $1 \leq i \leq p$. Ovde p predstavlja broj faktora odnosno različitih

delilaca broja n . Svaki od grafova G_i iz skupa \mathcal{G}_2 se sastoji od k_i delova (gde je k_i jedan od delilaca broja n), a svaki od ovih delova ima jednak broj čvorova $m_i = k_{p-i+1}$, za $1 \leq i \leq p$. Takođe, pretpostavićemo da su grafovi iz skupa \mathcal{G}_2 na izvestan način uređeni, odnosno da za grafove G_i i G_j takve da je $i < j$, važi $k_i < k_j$. Na taj način, graf G_1 je graf koji se sastoji od izolovanih čvorova ($k_1 = 1$ i $m_1 = k_p = n$), graf $G_2 = K_{2 \times m_2} = K_{2 \times k_{p-1}}$ je kompletan bipartitan graf, dok je G_p kompletan graf ($k_p = n$ i $m_p = k_1 = 1$). Spektar grafa $G_i = K_{k_i \times m_i}$ sastoji se od (vidi [26], strana 73): $[(k_i - 1)m_i]$, $[0]^{k_i(m_i-1)}$ i $[-m_i]^{k_i-1}$, no kako za svako i važi da je $k_i \cdot m_i = n$, biće: $[n - m_i]$, $[0]^{n-k_i}$ i $[-m_i]^{k_i-1}$.

Teorema 2.7.2 *Neka je \mathcal{G}_2 prethodno definisan skup grafova. Tada je:*

$$(i) \text{cs}_{\mathcal{G}_2}^A(G_i) = \min\{2(n - k_i m_{i+1}), 2(n - k_{i-1} m_i)\}, \text{ for } 2 \leq i \leq n - 1;$$

$$(ii) \text{cs}^A(\mathcal{G}_2) = 2(n - m_2) = 2(n - k_{p-1});$$

$$(iii) \text{secc}_{\mathcal{G}_2}^A(G_i) = \max\{2(n - k_i), 2(n - m_i)\}, \text{ for } 1 \leq i \leq n;$$

$$(iv) \text{sdiam}^A(\mathcal{G}_2) = E(K_n) = 2(n - 1).$$

Dokaz. Odredimo A -spektralno rastojanje između grafova $G_i = K_{k_i \times m_i}$ i $G_j = K_{k_j \times m_j}$ iz skupa \mathcal{G}_2 , takvih da je $1 \leq i < j \leq p$, što znači da je $k_i < k_j$ i $m_i > m_j$. Kako je: $\lambda_1(G_i) < \lambda_1(G_j)$ i $|\lambda_n(G_i)| > |\lambda_n(G_j)|$, imamo da je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G_i, G_j) &= |\lambda_1(G_i) - \lambda_1(G_j)| + \sum_{k=2}^{n-k_j+1} |\lambda_k(G_i) - \lambda_k(G_j)| + \\ &\quad \sum_{k=n-k_j+2}^{n-k_i+1} |\lambda_k(G_i) - \lambda_k(G_j)| + \sum_{k=n-k_i+2}^n |\lambda_k(G_i) - \lambda_k(G_j)| = \\ &= |(n - m_i) - (n - m_j)| + \sum_{k=n-k_j+2}^{n-k_i+1} |-m_j| + \sum_{k=n-k_i+2}^n |-m_i + m_j| = \\ &= k_i m_i + (k_j - 2k_i)m_j = 2(n - k_i m_j). \end{aligned}$$

Sada možemo da odredimo parametre A -spektralnih rastojanja na skupu \mathcal{G}_2 .

Prema definiciji, kospektralnost na skupu \mathcal{G}_2 jednaka je:

$$\text{cs}_{\mathcal{G}_2}^A(G_i) = \min\{\sigma_A(G_i, G_j) : G_j \in \mathcal{G}_2, j \neq i\} = \min\{2(n - k_i m_{i+1}), 2(n - k_{i-1} m_i)\},$$

za $2 \leq i \leq p - 1$. Drugim rečima, grafovi koji su najbliži grafu G_i u skupu \mathcal{G}_2 jesu njegovi susedi G_j . To znači da je i razlika brojeva delova k_i i k_j minimalna.

Kako u skupu \mathcal{G}_2 postoje grafovi koji se sastoje samo iz jednog dela, odnosno grafovi čiji su svi delovi kardinalnosti jedan, možemo da zaključimo da je:

$$cs^A(\mathcal{G}_2) = \max\{2(n - 1 \cdot m_2), 2(n - k_{p-1} \cdot 1)\} = 2(n - m_2),$$

jer je $m_2 = k_{p-1}$.

Maksimalno A -spektralno rastojanje postiže se sa praznim ili kompletnim grafom, odnosno

$$secc_{\mathcal{G}_2}^A(G_i) = \max\{\sigma_A(G_i, G_j) : G_j \in X, j \neq i\} = \max\{2(n - k_i \cdot 1), 2(n - 1 \cdot m_i)\}.$$

Stoga je spektralni dijametar:

$$sdiam^A(\mathcal{G}_2) = \sigma_A(G_1, G_p) = E(K_n) = 2(n - 1).$$

Ovim je teorema dokazana. ■

Primer 2.7.1 Za $n = 12$, skup \mathcal{G}_2 sastojće se iz sledećih šest grafova: $G_1 = 12K_1$, $G_2 = K_{2 \times 6}$, $G_3 = K_{3 \times 4}$, $G_4 = K_{4 \times 3}$, $G_5 = K_{6 \times 2}$ i $G_6 = K_{12}$.

A -kospektralnosti grafova iz skupa \mathcal{G}_2 redom su jednake: $cs^A(G_1) = \sigma_A(G_1, G_2) = 12$, $cs^A(G_2) = \sigma_A(G_2, G_3) = 8$, $cs^A(G_3) = \sigma_A(G_3, G_4) = 6$, $cs^A(G_4) = \sigma_A(G_3, G_4) = 6$, $cs^A(G_5) = \sigma_A(G_4, G_5) = 8$ i $cs^A(G_6) = \sigma_A(G_5, G_6) = 12$, pa je mera kospektralnosti: $cs^A(\mathcal{G}_2) = \sigma_A(G_1, G_2) = \sigma_A(G_5, G_6) = 12$.

Spektralni ekscentriciteti redom su jednaki: $secc^A(G_1) = \sigma_A(G_1, G_6) = 22$, $secc^A(G_2) = \sigma_A(G_2, G_6) = 20$, $secc^A(G_3) = \sigma_A(G_3, G_6) = 18$, $secc^A(G_4) = \sigma_A(G_4, G_1) = 18$, $secc^A(G_5) = \sigma_A(G_5, G_1) = 20$ i $secc^A(G_6) = \sigma_A(G_1, G_6) = 22$, pa je spektralni dijametar na skupu \mathcal{G}_2 : $sdiam^A(\mathcal{G}_2) = E(G_6) = 22$.

2.7.3 Grafovi koji su dobijeni transformisanjem kompletnih multipartitnih grafova

U ovom pododeljku analiziramo tri nove klase grafova koje su, u opštem slučaju, dobijene dodavanjem novih grana kompletnom multipartitnom grafu.

Dokaz naredne teoreme zasnovan je na funkcijama generatrisama (engl. *walk generating function*) $\mathcal{H}_j(t) = \sum_{k=0}^{\infty} N_k(j)t^k$ za brojeve $N_k(j)$ zatvorenih šetnji dužine k u izabranom čvoru j razmatranog grafa. Nešto više o šetnjama u grafu, uglovima grafa i funkcijama generatrisama biće rečeno u Odeljku 3.1, Poglavlje 3.

Neka je $\mathcal{G}_3 = \{G_0, G_1, \dots, G_k\}$ skup grafova reda n , gde je $G_0 = K_{n_1, n_2, \dots, n_k}$ kompletan k -partitan graf, takav da važi: $n_1 + n_2 + \dots + n_k = n$ i $n_i > 3$, za svako $1 \leq i \leq k$. Graf G_i nastaje dodavanjem n_i grana grafu G_{i-1} tako da je $G_i = C_{n_1} \nabla C_{n_2} \nabla \dots \nabla C_{n_i} \nabla K_{n_{i+1}, n_{i+2}, \dots, n_k}$, $1 \leq i \leq k$.

Teorema 2.7.3 *Neka je \mathcal{G}_3 prethodno opisan skup grafova reda n . Tada su parametri koji se odnose na A -spektralno rastojanje ovih grafova:*

$$(i) \text{cs}_{\mathcal{G}_3}^A(G_i) = \min\{E(C_{n_i}), E(C_{n_{i+1}})\}, \quad 1 \leq i \leq k-1,$$

$$(ii) \text{cs}^A(\mathcal{G}_3) \leq E(C_{n_{\hat{i}}}), \text{ where } n_{\hat{i}} = \max\{n_i, 1 \leq i \leq k\},$$

$$(iii) \text{secc}_{\mathcal{G}_3}^A(G_i) = \max\{\sum_{p=1}^i E(C_{n_p}), \sum_{p=i+1}^k E(C_{n_p})\}, \quad 1 \leq i \leq k-1,$$

$$(iv) \text{sdiam}^A(\mathcal{G}_3) = \sum_{p=1}^k E(C_{n_p}).$$

Dokaz. Označimo sa $G_i = H_1 \nabla H_2$, za $1 \leq i \leq k$, gde je $H_1 = C_{n_1} \nabla C_{n_2} \nabla \dots \nabla C_{n_i}$ graf reda $m_1 = \sum_{p=1}^i n_p$, i $H_2 = K_{n_{i+1}, \dots, n_k}$ graf reda $m_2 = \sum_{q=i+1}^k n_q$. Da bismo odredili karakteristični polinom grafa G_i , korišćićemo sledeću formulu (vidi Teoremu 2.7 iz [26]):

$$\begin{aligned} P_{H_1 \nabla H_2}(x) = & (-1)^{m_2} P_{H_1}(x) P_{\overline{H_2}}(-x-1) + (-1)^{m_1} P_{H_2}(x) P_{\overline{H_1}}(-x-1) - \\ & (-1)^{m_1+m_2} P_{\overline{H_1}}(-x-1) P_{\overline{H_2}}(-x-1). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Karakteristični polinom grafa H_1 odredićemo korišćenjem funkcija generatrisa (vidi Teoremu 1.11 iz [26]):

$$H_{H_1}(x) = \frac{1}{x} \left((-1)^{m_1} \frac{P_{\overline{H_1}}(-\frac{x+1}{x})}{P_{H_1}(\frac{1}{x})} - 1 \right), \quad (2.9)$$

odnosno

$$P_{H_1}(x) = \frac{(-1)^{m_1} P_{\overline{H_1}}(-x-1)}{\frac{1}{x} H_{H_1}(\frac{1}{x}) + 1}. \quad (2.10)$$

Kako je $\overline{H_1} = \overline{C_{n_1} \nabla C_{n_2} \nabla \dots \nabla C_{n_i}} = \overline{C_{n_1}} \dot{+} \overline{C_{n_2}} \dot{+} \dots \dot{+} \overline{C_{n_i}}$, prema Teoremi 2.4 iz [26], dobijamo:

$$P_{\overline{H_1}}(x) = \prod_{p=1}^i P_{\overline{C_{n_p}}}(x). \quad (2.11)$$

Kako je C_n 2-regularan graf, primenom Teoreme 2.6 iz [26] nalazimo da je A -karakteristični polinom komplementa ovog grafa:

$$P_{\overline{C_n}}(x) = (-1)^n \frac{x-n+3}{x+3} P_{C_n}(-x-1),$$

pa relacija (2.11) postaje:

$$P_{\overline{H_1}}(x) = \prod_{p=1}^i \left((-1)^{n_p} \frac{x - n_p + 3}{x + 3} \left(-2 + \sum_{k=0}^{\lfloor n_p/2 \rfloor} (-1)^{n_p-k} \frac{n_p}{n_p - k} \binom{n_p - k}{k} (x + 1)^{n_p - 2k} \right) \right). \quad (2.12)$$

Kako je $H_1 = C_{n_1} \nabla C_{n_2} \nabla \dots \nabla C_{n_i} = \overline{C_{n_1} \dot{+} C_{n_2} \dot{+} \dots \dot{+} C_{n_i}}$, primenom Teoreme 7.20 (relacije 7.10 i 7.11, iz [26]), nalazimo funkciju generatrisu grafa H_1 :

$$H_{H_1}(x) = \frac{\sum_{p=1}^i H_{C_{n_p}} \left(-\frac{x}{x+1} \right)}{x + 1 - x \sum_{p=1}^i H_{C_{n_p}} \left(-\frac{x}{x+1} \right)}, \quad (2.13)$$

kao i funkciju generatrisu grafa $\overline{C_{n_p}}$:

$$H_{\overline{C_{n_p}}}(x) = \frac{H_{C_{n_p}} \left(-\frac{x}{x+1} \right)}{x + 1 - x \cdot H_{C_{n_p}} \left(-\frac{x}{x+1} \right)} = \frac{n_p}{1 - x(n_p - 3)},$$

gde je $H_{C_{n_p}}(x) = \frac{n_p}{1-2x}$ funkcija generatrisa 2-regularnog grafa sa n_p čvorova. S obzirom na to, relacija (2.13) postaje:

$$H_{H_1}(x) = \frac{\sum_{p=1}^i \frac{n_p}{x(n_p-2)+1}}{1 - x \cdot \sum_{p=1}^i \frac{n_p}{x(n_p-2)+1}}. \quad (2.14)$$

Uvrštavanjem (2.12) i (2.14) u (2.10), dolazimo do relacije za karakteristični polinom grafa H_1 :

$$P_{H_1}(x) = \frac{1}{(2-x)^i} \prod_{p=1}^i (2-x-n_p) \left(1 - \sum_{p=1}^i \frac{n_p}{n_p+x-2} \right) \cdot \prod_{p=1}^i \left(-2 + \sum_{k=0}^{\lfloor n_p/2 \rfloor} (-1)^k \frac{n_p}{n_p-k} \binom{n_p-k}{k} x^{n_p-2k} \right). \quad (2.15)$$

Karakteristični polinom grafa H_2 je (vidi relaciju (2.50) iz [26]):

$$P_{H_2}(x) = x^{m_2-(k-i)} \left(1 - \sum_{q=i+1}^k \frac{n_q}{x+n_q} \right) \prod_{q=i+1}^k (x+n_q), \quad (2.16)$$

dok je karakteristični polinom njegovog komplementa:

$$P_{\overline{H_2}}(x) = (x+1)^{m_2-(k-i)} \prod_{q=i+1}^k (x-n_q+1). \quad (2.17)$$

Zamenom (2.12), (2.15), (2.16) i (2.17) u (2.8) dobijamo karakteristični polinom grafa G_i :

$$P_{G_i}(x) = x^{m_2-(k-i)} \frac{1}{(2-x)^i} \prod_{p=1}^i \left(-2 + \sum_{k=0}^{\lfloor n_p/2 \rfloor} (-1)^k \frac{n_p}{n_p-k} \binom{n_p-k}{k} x^{n_p-2k} \right) \cdot \prod_{p=1}^i (2-x-n_p) \prod_{q=i+1}^k (x+n_q) \left(1 - \sum_{p=1}^i \frac{n_p}{n_p+x-2} - \sum_{q=i+1}^k \frac{n_q}{x+n_q} \right).$$

Sada možemo da izvedemo zaključke vezane za spektrar grafa G_i . Prvi faktor, odnosno činilac, u relaciji za karakteristični polinom ovog grafa daje sopstvene vrednosti $[0]^{m_2-(k-i)}$. Potom, proizvod sledeća dva faktora daje sopstvene vrednosti kontura $C_{n_1}, C_{n_2}, \dots, C_{n_i}$ bez sopstvene vrednosti koja je jednaka 2, respektivno. Proizvod poslednja tri činioaca daje preostalih k sopstvenih vrednosti, i to $\lambda_1(G_i)$, i $\lambda_{n-k+2}(G_i), \dots, \lambda_n(G_i)$, za $1 \leq i \leq k$. Pozicije sopstvenih vrednosti u monotono nerastuće uređenom spektru grafa G_i odredili smo primenom Teoreme o preplitanju na indukovan podgraf $K_{2,2,\dots,2} = K_{k \times 2}$ grafa G_i . Uz to, važi da je:

$$\lambda_1(G_i) + \lambda_{n-k+2}(G_i) + \dots + \lambda_n(G_i) = 2i$$

jer je suma sopstvenih vrednosti kontura C_{n_p} ($1 \leq p \leq i$) koje su u spektru grafa G_i jednaka -2.

Da bismo izračunali A -spektralno rastojanje između dva grafa G_i i G_j , $0 \leq i < j \leq k$ iz skupa \mathcal{G}_3 , koristićemo sledeće osobine njihovih spektara:

1. $\lambda_1(G_j) > \lambda_1(G_i)$ (sledi direktnim razmatranjem proizvoda poslednja tri faktora u relaciji za A -karakteristični polinom grafa G_i i poređenjem odgovarajućih polinomskih funkcija),
2. $\lambda_l(G_j) \geq \lambda_l(G_i)$, $l = n - k + 2, \dots, n$ (indukcijski argument),
3. $|\lambda_l(G_j)| \geq |\lambda_l(G_i)|$, $l = 2, \dots, n - k + 1$ (sledi iz toga što se u svakoj iteraciji broj kontura povećava).

A -spektralno rastojanje grafova G_i i G_j , $0 \leq i < j \leq k$ je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G_i, G_j) &= |\lambda_1(G_i) - \lambda_1(G_j)| + \sum_{l=2}^{n-k+1} |\lambda_l(G_i) - \lambda_l(G_j)| + \sum_{l=n-k+2}^n |\lambda_l(G_i) - \lambda_l(G_j)| = \\ &= \lambda_1(G_j) - \lambda_1(G_i) + \sum_{l=2}^{n-k+1} (|\lambda_l(G_j)| - |\lambda_l(G_i)|) + \sum_{l=n-k+2}^n (\lambda_l(G_j) - \lambda_l(G_i)) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \lambda_1(G_j) - \lambda_1(G_i) + \sum_{l=n-k+2}^n (\lambda_l(G_j) - \lambda_l(G_i)) + \sum_{p=1}^j E(C_{n_p}) - 2j - \sum_{p=1}^i E(C_{n_p}) + 2i = \\
 & \sum_{p=i+1}^j E(C_{n_p}) - 2(j-i) + \lambda_1(G_j) + \sum_{l=n-k+2}^n \lambda_l(G_j) - \lambda_1(G_i) - \sum_{l=n-k+2}^n \lambda_l(G_i) = \\
 & \sum_{p=i+1}^j E(C_{n_p}) - 2(j-i) + 2j - 2i = \\
 & \sum_{p=i+1}^j E(C_{n_p}).
 \end{aligned}$$

Sada se parametri (i)–(iv) koji se odnose na A -spektralna rastojanja izračunavaju prema definiciji. ■

Napomena 2.7.3 L - i Q -spektralna rastojanja između grafova iz skupa \mathcal{G}_3 izračunavaju se na jednostavan način. Naime, svaki od grafova G_i jeste podgraf po granama grafa G_j , za $0 \leq i < j \leq k$, pa primenom Leme 2.3.2, dobijamo:

$$\sigma_L(G_i, G_j) = \sigma_Q(G_i, G_j) = 2 \sum_{p=i+1}^j n_p.$$

Shodno definiciji, dalje je:

- (i) $\text{cs}_{\mathcal{G}_3}^L(G_i) = \text{cs}_{\mathcal{G}_3}^Q(G_i) = \min\{2n_i, 2n_{i+1}\}$, $0 \leq i < j \leq k$;
- (ii) $\text{cs}^L(\mathcal{G}_3) = \text{cs}^Q(\mathcal{G}_3) \leq 2 \max\{n_p, 1 \leq p \leq k\}$;
- (iii) $\text{secc}_{\mathcal{G}_3}^L(G_i) = \text{secc}_{\mathcal{G}_3}^Q(G_i) = \max\{2 \sum_{p=1}^i n_p, 2 \sum_{p=i+1}^k n_p\}$, $0 \leq i < j \leq k$;
- (iv) $\text{sdiam}^L(\mathcal{G}_3) = \text{sdiam}^Q(\mathcal{G}_3) = 2 \sum_{p=1}^k n_p = 2n$.

U nastavku razmatramo skup grafova $\mathcal{G}_4 = \{G_0, G_1, \dots, G_k\}$, takav da je $G_0 = K_{n_1, n_2, \dots, n_k}$ kompletan k -partitan graf, takav da je $n_1 + n_2 + \dots + n_k = n$. Graf G_i , $1 \leq i \leq k$ nastaje dodavanjem $\frac{n_i(n_i-1)}{2}$ grana grafu G_{i-1} , tako da važi: $G_i = K_{n_1+n_2+\dots+n_i} \nabla K_{n_{i+1}, n_{i+2}, \dots, n_k}$.

Teorema 2.7.4 Neka je \mathcal{G}_4 prethodno opisana familija grafova. Tada je:

- (i) $\text{cs}_{\mathcal{G}_4}^A(G_i) = \min\{2(n_i - 1), 2(n_{i+1} - 1)\}$, $1 \leq i \leq k - 1$,
- (ii) $\text{cs}^A(\mathcal{G}_4) = \max\{2(n_i - 1), 1 \leq i \leq k\}$,
- (iii) $\text{secc}_{\mathcal{G}_4}^A(G_i) = \max\{2 \sum_{p=1}^i n_p - 2i, 2 \sum_{p=i+1}^k n_p - 2(k - i)\}$, $1 \leq i \leq k - 1$,

(iv) $\text{sdiam}^A(\mathcal{G}_4) = \sigma(G_0, G_k) = 2(n - k)$.

Dokaz. Neka je $H_1 = K_{n_1+n_2+\dots+n_i}$ i $H_2 = K_{n_{i+1}, n_{i+2}, \dots, n_k}$. Da bismo odredili A -karakteristični polinom grafa G_i , kao i u dokazu prethodne teoreme, koristimo Teoremu 2.7 iz [26]:

$$\begin{aligned} P_{H_1 \nabla H_2}(x) = & (-1)^{m_2} P_{H_1}(x) P_{\overline{H_2}}(-x - 1) + (-1)^{m_1} P_{H_2}(x) P_{\overline{H_1}}(-x - 1) - \\ & (-1)^{m_1+m_2} P_{\overline{H_1}}(-x - 1) P_{\overline{H_2}}(-x - 1), \end{aligned} \quad (2.18)$$

gde su m_1 i m_2 brojevi čvorova grafova H_1 i H_2 , respektivno. Kako je:

$$\begin{aligned} P_{H_1}(x) &= \left(x - \sum_{p=1}^i n_p + 1 \right) (x + 1)^{\sum_{p=1}^i n_p - 1}, \\ P_{\overline{H_1}}(x) &= x^{\sum_{p=1}^i n_p}, \\ P_{H_2}(x) &= x^{\sum_{q=i+1}^k n_q - (k-i)} \left(1 - \sum_{l=i+1}^k \frac{n_l}{n_l + x} \right) \prod_{s=i+1}^k (x + n_s), \\ P_{\overline{H_2}}(x) &= (x + 1)^{\sum_{q=i+1}^k n_q - (k-i)} \prod_{s=i+1}^k (x - n_s + 1), \end{aligned}$$

to je A -karakteristični polinom grafa G_i :

$$\begin{aligned} P_{G_i}(x) &= x^{\sum_{q=i+1}^k n_q - (k-i)} (x + 1)^{\sum_{p=1}^i n_p - 1} \prod_{s=i+1}^k (x + n_s) \cdot \\ &\cdot \left((x + 1) \left(1 - \sum_{l=i+1}^k \frac{n_l}{n_l + x} \right) - \sum_{p=1}^i n_p \right). \end{aligned}$$

Sada možemo da odredimo spektar grafa G_i . Prvi činilac u prethodnoj relaciji daje sopstvene vrednosti grafa G_i koje su jednake nuli, tj. $[0]^{\sum_{q=i+1}^k n_q - (k-i)}$, a drugi $[-1]^{\sum_{p=1}^i n_p - 1}$. Kako je kompletan graf K_k podgraf grafa G_i , to iz Teoreme o preplitanju zaključujemo da preostala dva činioca iz formule za karakteristični polinom grafa G_i daju sopstvenu vrednost $\lambda_1(G_i)$ i $(k - i)$ sopstvenih vrednosti $\lambda_{n-(k-i)+1}, \dots, \lambda_n$, za $1 \leq i < k$.

Za izračunavanje A -spektralnog rastojanja između grafova G_i i G_j iz skupa \mathcal{G}_4 za $0 \leq i < j \leq k$ korišćićemo sledeće osobine njihovih spektara:

1. $\lambda_1(G_j) > \lambda_1(G_i)$ (jer prema Teoremi 0.7 iz [26] indeks grafa ne opada dodavanjem novih elemenata),
2. $\lambda_l(G_j) \geq \lambda_l(G_i)$, $l = n - (k - j) + p$, $p = 1, \dots, n$ (indukcijski argument).

Stoga je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G_i, G_j) &= \lambda_1(G_j) - \lambda_1(G_i) + \sum_{p=i+1}^k n_p - \sum_{q=j+1}^k n_q + 2(i-j) + \\ &\sum_{l=n-(k-j)+1}^n (\lambda_l(G_j) - \lambda_l(G_i)) = \lambda_1(G_j) - \lambda_1(G_i) + \sum_{p=i+1}^k n_p - \sum_{q=j+1}^k n_q + 2(i-j) - \\ &\left(\sum_{p=1}^i n_p - 1 \right) + \lambda_1(G_i) + \left(\sum_{q=1}^j n_q - 1 \right) - \lambda_1(G_j) = 2 \sum_{l=i+1}^j n_l - 2(j-i). \end{aligned}$$

Vrednosti parametara A -spektralnih rastojanja (i)–(iv) izračunavamo prema definiciji. ■

Napomena 2.7.4 *Kako je graf G_i podgraf po granama grafa G_j , za $0 \leq i < j \leq k$, to primenom Leme 2.3.2 nalazimo L - (i analogno Q -) spektralno rastojanje ovih grafova:*

$$\sigma_L(G_i, G_j) = \sum_{p=i+1}^j n_p(n_p - 1).$$

Stoga su parametri spektralnog rastojanja:

- (i) $\text{cs}_{\mathcal{G}_4}^L(G_i) = \min\{n_i(n_i - 1), n_{i+1}(n_{i+1} - 1)\}$, $1 \leq i \leq k - 1$,
- (ii) $\text{cs}^L(\mathcal{G}_4) = \max \min_{1 \leq i \leq k-1} \{n_i(n_i - 1), n_{i+1}(n_{i+1} - 1)\}$,
- (iii) $\text{secc}_{\mathcal{G}_4}^L(G_i) = \max\{\sum_{p=1}^i n_p(n_p - 1), \sum_{p=i+1}^k n_p(n_p - 1)\}$, $1 \leq i \leq k - 1$,
- (iv) $\text{sdiam}^L(\mathcal{G}_4) = \sigma(G_0, G_k) = \sum_{p=1}^k n_p(n_p - 1)$.

Neka je sada $\mathcal{G}_5 = \{G_0, G_1, \dots, G_k\}$ skup grafova reda n , gde je $G_0 = K_{k \times m}$ kompletan k -partitan graf sa m čvorova u svakom delu i $k \cdot m = n$. Graf G_i , $1 \leq i \leq k$ ovog skupa nastaje dodavanjem $\frac{p}{2}(2m - p - 1)$ grana grafu G_{i-1} tako da je $G_i = (K_{ip} \nabla K_{i \times (m-p)}) \nabla K_{(k-i) \times m}$ i $0 < p < m$.

Teorema 2.7.5 *Neka je \mathcal{G}_5 prethodno opisana familija grafova. Tada je:*

- (i) $\text{cs}_{\mathcal{G}_5}^A(G_i) = \min\{\sigma_A(G_0, G_i), \sigma_A(G_i, G_{i+1})\}$, $1 \leq i \leq k - 1$,
- (ii) $\text{cs}^A(\mathcal{G}_5) = \max \min\{\sigma_A(G_0, G_i), \sigma_A(G_i, G_{i+1})\}$, $1 \leq i \leq k - 1$,
- (iii) $\text{secc}_{\mathcal{G}_5}^A(G_i) = \max\{\sigma_A(G_0, G_i), \sigma_A(G_i, G_k)\}$, $1 \leq i \leq k - 1$,
- (iv) $\text{sdiam}^A(\mathcal{G}_5) = \sigma_A(G_0, G_k)$.

Dokaz. Ako označimo sa: $H_1 = K_{ip} \nabla K_{i \times (m-p)}$ i $H_2 = K_{(k-i) \times m}$, onda je $G_i = H_1 \nabla H_2$.

Korišćenjem formule za karakteristični polinom kompletnog proizvoda dva regularna grafa (vidi Teoremu 2.8 iz [26]), možemo da odredimo karakteristični polinom grafa H_1 :

$$\begin{aligned} P_{H_1(x)} &= (x+1)^{ip-1} x^{i(m-p-1)} (x+m-p)^{i-1} \\ &\quad \cdot ((x-ip+1)(x-(i-1)(m-p)) - i^2 p(m-p)) = \\ &= (x+1)^{ip-1} x^{i(m-p-1)} (x+m-p)^{i-1} \times F'. \end{aligned}$$

Kako je:

$$\begin{aligned} P_{H_1}(x) &= x^{ip} \cdot (x - (m-p) + 1)^i \cdot (x+1)^{(m-p-1)i}, \\ P_{H_2}(x) &= x^{(k-i)(m-1)} \cdot (x - m(k-i-1)) \cdot (x+m)^{k-i-1}, \\ P_{H_2}(x) &= (x-m+1)^{k-i} \cdot (x+1)^{(m-1)(k-i)}, \end{aligned}$$

to korišćenjem formule (2.8) izračunavamo karakteristični polinom grafa G_i :

$$P_{G_i}(x) = P_{H_1 \nabla H_2}(x) = x^{k(m-1)-ip} (x+1)^{ip-1} (x+m-p)^{i-1} (x+m)^{k-i-1} \cdot F,$$

gde je $F = (x+m)F' + (x+1)(x+m-p)(x-m(k-i-1)) - (x+1)(x+m-p)(x+m)$.

Iz poslednje relacije možemo da zaključimo da se spektar grafa G_i sastoji od: $[0]^{k(m-1)-ip}$, $[-1]^{ip-1}$, $[-m+p]^{i-1}$ i $[-m]^{k-i-1}$. Činilac F daje preostale tri sopstvene vrednosti, i to $\lambda_1(G_i)$ (G_i je povezan kompletan multipartitan graf, pa mora da postoji jedinstvena pozitivna sopstvena vrednost), i $\lambda_{n-k+1}(G_i)$ i $\lambda_{n-k+1+i}(G_i)$, $1 \leq i \leq k-1$. O pozicijama ovih sopstvenih vrednosti u monotono nerastuće uređenom spektru grafa G_i zaključili smo primenom Teoreme o preplitanju na indukovani podgraf H_1 grafa G_i . Uz to, važi i da je: $\lambda_1(G_i) + \lambda_{n-k+1}(G_i) + \lambda_{n-k+1+i}(G_i) = m(k-2) + p - 1$.

Sada možemo da pristupimo izračunavanju A -spektralnog rastojanja. Za grafove G_i i G_j iz skupa \mathcal{G}_5 takve da je $1 \leq i < j \leq k$, imamo da je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G_i, G_j) &= \sum_{l=1}^n |\lambda_l(G_i) - \lambda_l(G_j)| = \\ &= |\lambda_1(G_i) - \lambda_1(G_j)| + |\lambda_{n-k+1}(G_i) - \lambda_{n-k+1}(G_j)| + \\ &= |\lambda_{n-k+1+i}(G_i) - (p-m)| + |-m - \lambda_{n-k+1+j}(G_j)| + \\ &= \sum_{l=k(m-1)-jp+2}^{k(m-1)-ip+1} |\lambda_l(G_i) - \lambda_l(G_j)| + \sum_{l=n-k+i+2}^{n-k+j} |\lambda_l(G_i) - \lambda_l(G_j)|. \end{aligned}$$

Odavde, kako važi $\lambda_1(G_j) > \lambda_1(G_i)$, $\lambda_{n-k+1}(G_j) < \lambda_{n-k+1}(G_i)$, i $\lambda_{n-k+1+i}(G_i) \leq p - m$ i $\lambda_{n-k+1+j}(G_j) \geq -m$, dobijamo da je:

$$\sigma_A(G_i, G_j) = 2\left(p(j - i) + (\lambda_{n-k+1}(G_i) - \lambda_{n-k+1}(G_j))\right).$$

Kako je A -spektar grafa G_0 : $[(k - 1)m]$, $[0]^{k(m-1)}$ i $[-m]^{k-1}$, to za $1 \leq i \leq k$ nalazimo da je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G_0, G_i) &= \sum_{l=1}^n |\lambda_l(G_0) - \lambda_l(G_i)| = \\ &= \lambda_1(G_i) - \lambda_1(G_0) + \sum_{l=2}^{n-k+1} |\lambda_l(G_i)| + \sum_{l=n-k+2}^n |-m - \lambda_l(G_i)| = \\ &= \lambda_1(G_i) - km + m + ip - 1 - \lambda_{n-k+1}(G_i) + ip - p + \lambda_{n-k+1+i}(G_i) + m = \\ &= 2ip - 2\lambda_{n-k+1}(G_i) - 2. \end{aligned}$$

Dakle, iz prethodnih rezultata možemo da zaključimo da je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G_0, G_i) &= 2(ip - \lambda_{n-k+1}(G_i) - 1), \quad 1 \leq i \leq k, \\ \sigma_A(G_i, G_j) &= 2\left(p(j - i) + (\lambda_{n-k+1}(G_i) - \lambda_{n-k+1}(G_j))\right), \quad 1 \leq i < j \leq k. \end{aligned}$$

Konačno, parametre spektralnih rastojanja (i)–(iv) izračunavamo direktno prema definiciji. ■

Napomena 2.7.5 *Kako je graf G_i podgraf po granama grafa G_j , za $0 \leq i < j \leq k$, to će prema Lemi 2.3.2 L - (i analogno Q -) spektralno rastojanje ovih grafova biti:*

$$\sigma_L(G_i, G_j) = p(2m - p - 1)(j - i).$$

Stoga su parametri spektralnog rastojanja:

- (i) $\text{cs}_{\mathcal{G}_5}^L(G_i) = p(2m - p - 1)$, $0 \leq i \leq k$,
- (ii) $\text{cs}^L(\mathcal{G}_5) = p(2m - p - 1)$,
- (iii) $\text{secc}_{\mathcal{G}_5}^L(G_i) = \max\{ip(2m - p - 1), (k - i)p(2m - p - 1)\}$, $1 \leq i \leq k - 1$,
- (iv) $\text{sdiam}^L(\mathcal{G}_5) = kp(2m - p - 1)$.

2.7.4 Grafovi koji su rezultat primene operacije kompletni proizvod

Neka je $\mathcal{G}_6 = \{G_0, \dots, G_n\}$ skup grafova reda $2n$, gde je $G_0 = CP_n$. Graf G_i , za $i = 1, \dots, n$, nastaje umetanjem i grana grafu G_0 , tako da važi $G_i = K_{2i} \nabla CP_{n-i}$ i $G_n = K_{2n}$.

Teorema 2.7.6 *Neka je \mathcal{G}_6 prethodno opisan skup grafova. Tada je:*

$$(i) \text{cs}_{\mathcal{G}_6}^A(G_i) = 2, \quad 1 \leq i \leq n,$$

$$(ii) \text{cs}^A(\mathcal{G}_6) = 2,$$

$$(iii) \text{secc}_{\mathcal{G}_6}^A(G_i) = \max\{2i, 2(n-i)\}, \quad 1 \leq i \leq n,$$

$$(iv) \text{sdiam}^A(\mathcal{G}_6) = 2n.$$

Dokaz. Za određivanje A -karakterističnog polinoma grafa G_i , slično dokazima teorema iz prethodnog pododeljka, koristimo formulu za kompletni proizvod grafova (vidi Teoremu 2.7 iz [26]), i nakon kraćeg računa dobijamo:

$$\begin{aligned} P_{G_i}(x) &= (x - 2i + 1)(x + 1)^{2i-1} (x(x + 2))^{n-i} + \\ & (x - 2(n-i) + 2)x^{n-i}(x + 2)^{n-i-1}(x + 1)^{2i} - (x + 1)^{2i} (x(x + 2))^{n-i} = \\ & (x + 2)^{n-i-1}(x + 1)^{2i-1} x^{n-i} (x^2 + (3 - 2n)x + 2(1 - n - i)). \end{aligned}$$

Iz gornje relacije vidimo da spektar grafa G_i sačinjavaju: $[-2]^{n-i-1}$, $[-1]^{2i-1}$ i $[0]^{n-i}$. Preostale dve sopstvene vrednosti su nule polinoma drugog stepena koji je poslednji činilac u formuli za karakteristični polinom grafa G_i : λ_1 i λ_{n+i+1} . Kako je $\lambda_1(G_i) + \lambda_{n+i+1}(G_i) = \lambda_1(G_j) + \lambda_{n+j+1}(G_j) = 2n - 3$, kad god je $j \leq n$, dobijamo da je A -spektralno rastojanje grafova G_i i G_j , takvih da je $0 \leq i < j \leq n$ jednako:

$$\sigma_A(G_i, G_j) = 2(j - i).$$

Parametri spektralnog rastojanja sada se jednostavno izračunavaju. ■

2.7.5 Skup grafova dobijenih primenom operacije NEPS

Definiciju grafovske operacije NEPS naveli smo u Odeljku 1.1. Neka je sada $G_k = \text{NEPS}(\underbrace{K_2, K_2, \dots, K_2}_n; \mathcal{B}_k)$, gde se baza \mathcal{B}_k sastoji od $k \leq n$ binarnih n -torki sa tačno jednom koordinatom jednakom 1. Tako je, na primer, $\mathcal{B}_1 = \{(1, 0, \dots, 0)\}$, $\mathcal{B}_2 = \{(1, 0, \dots, 0), (0, 1, \dots, 0)\}$, $\mathcal{B}_3 = \{(1, 0, \dots, 0), (0, 1, \dots, 0), (0, 0, 1, \dots, 0)\}$, i tako redom. Prema Teoremi 6.1.1 iz [86], graf G_k je regularan i integralan, dok je na osnovu Teoreme 1.3.2 iz [86] graf G_k bipartitan. Kako rang matrice B_k , koja je sačinjena od vektora baze \mathcal{B}_k u polju GF_2 , iznosi k , to prema Teoremi 1.2.1 iz [86] graf G_k ima 2^{n-k} komponenti povezanosti. Shodno Teoremi 6.2.2 iz [86] sve komponente grafa G_k međusobno su izomorfne, a svaka od njih je izomorfna grafu $G'_k = \text{NEPS}(\underbrace{K_2, K_2, \dots, K_2}_k; \mathcal{B}'_k)$, za neku bazu \mathcal{B}'_k takvu da je $\mathcal{B}'_k = P(\mathcal{B}_k)$. Ovde je P izomorfizam linearnog podprostora $\mathcal{L}(\mathcal{B}_k)$ generisanog bazom \mathcal{B}_k i vektorskog prostora GF_2^k . Ukoliko izomorfizam P definišemo sa: $(x_1, \dots, x_{k-1}, x_k, 0, \dots, 0) \xrightarrow{P} (x_1, \dots, x_{k-1}, x_k)$, gde je $x_i \in \{0, 1\}$, za svako $i = 1, 2, \dots, k$, graf G'_k biće upravo k -kub, čiji je spektar $[k-2i]^{\binom{k}{i}}$, za $0 \leq i \leq k$. Stoga je spektar grafa G_k : $[k-2i]^{2^{n-k}\binom{k}{i}}$, za $0 \leq i \leq k$ i $1 \leq k \leq n$.

Na taj način možemo da razmatramo spektralno rastojanje i parametre spektralnih rastojanja u familiji grafova $\mathcal{G}_7 = \{G_1, G_2, \dots, G_n\}$, gde je svaki od grafova G_k , za $1 \leq k \leq n$ jedan od prethodno opisanih grafova.

Tvrđenje 2.7.1 *A-spektralno rastojanje između susednih grafova G_k i G_{k+1} , za $1 \leq k \leq n-1$ iz familije \mathcal{G}_7 je:*

$$\sigma_A(G_k, G_{k+1}) = 2^n.$$

Dokaz. Najpre ćemo dokazati nejednakosti koje se odnose na multiplicitete različitih sopstvenih vrednosti grafova G_k i G_{k+1} .

Nije teško proveriti da je: $2^{n-k}\binom{k}{i} \leq 2^{n-k-1}(\binom{k+1}{i} + \binom{k+1}{i+1})$, za $0 \leq i \leq k$. Naime, važi da je: $\binom{k+1}{i+1} \geq \binom{k}{i}$ i $\binom{k+1}{i} \geq \binom{k}{i}$ za svako $0 \leq i \leq k$.

Takođe je: $2^{n-k}\binom{k}{i} > 2^{n-k-1}\binom{k+1}{i}$, za svako $0 \leq i \leq \lfloor k/2 \rfloor$. Za dokaz ove nejednakosti dovoljno je pokazati da je $2(k+1-i) > k+1$, što važi za svako $i \leq \lfloor k/2 \rfloor$.

S obzirom na prethodno dokazane nejednakosti, kao i na bipartitnost grafova G_k i G_{k+1} , možemo da zaključimo da će svaka od različitih sopstvenih vrednosti grafa G_k , do na multiplicitet, vrednosti spektralnog rastojanja $\sigma_A(G_k, G_{k+1})$ doprinostiti modulom razlike sa dve različite sopstvene vrednosti grafa G_{k+1} , tj.

$|(k-2i) - (k+1-2i)| = 1$ i $|(k-2i) - (k+1-2(i+1))| = 1$. Stoga je A -spektralno rastojanje:

$$\sigma_A(G_k, G_{k+1}) = \sum_{i=0}^k 2^{n-k} \binom{k}{i} \cdot 1 = 2^n.$$

Ovim je tvrđenje dokazano. ■

Tvrđenje 2.7.2 *A-spektralno rastojanje između grafova G_k i G_{k+2} iz familije \mathcal{G}_7 za $1 \leq k \leq n$ i k -neparan je:*

$$\sigma_A(G_k, G_{k+2}) = 2^{n-k+2} \left(\sum_{j=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} 2^{-2} \sum_{i=0}^j \binom{k+2}{i} - \sum_{j=1}^{\lfloor k/2 \rfloor} \sum_{i=0}^{j-1} \binom{k}{i} \right).$$

Dokaz. Dokazaćemo najpre izvesne nejednakosti za multiplicitete sopstvenih vrednosti grafova G_k i G_{k+2} , gde je k neparan broj.

Važi da je:

$$2^{n-k} \binom{k}{i} > 2^{n-k-2} \binom{k+2}{i}, \quad (2.19)$$

za $0 \leq i \leq \lfloor k/2 \rfloor$. Da bismo dokazali ovu nejednakost, dovoljno je pokazati da je $4 > \frac{(k+2)(k+1)}{(k+2-i)(k+1-i)}$. Kako je $i \leq \lfloor k/2 \rfloor$ imamo da je: $\frac{(k+2)(k+1)}{(k+2-i)(k+1-i)} < \frac{(k+2)(k+1)}{(k+2-\frac{k-1}{2})(k+1-\frac{k-1}{2})} = 4 \frac{(k+2)(k+1)}{(k+5)(k+3)} < 4$, čime je nejednakost dokazana.

Dokažimo dalje da je: $2^{n-k} \binom{k}{i} \leq 2^{n-k-2} (\binom{k+2}{i} + \binom{k+2}{i+1})$, odnosno da je:

$$4 \binom{k}{i} - \binom{k+2}{i} - \binom{k+2}{i+1} \leq 0, \quad (2.20)$$

za $0 \leq i \leq \lfloor k/2 \rfloor$ i $1 \leq k \leq n$.

Neposredno se proverava da je nejednakost (2.20) zadovoljena za $i = 0$ i $1 \leq k \leq n$. Pokažimo da (2.20) važi i za $i \geq 1$. Primenom elementarnih računskih operacija (2.20) postaje:

$$\frac{k!}{i!(k-i)!} \cdot \left(4 - \frac{(k+1)(k+2)(k+3)}{(i+1)(k-i+1)(k-i+2)} \right) \leq 0,$$

a kako je $\frac{k!}{i!(k-i)!} > 0$, to (2.20) važi ako je:

$$\frac{(k+1)(k+2)(k+3)}{(i+1)(k-i+1)(k-i+2)} \geq 4.$$

Neposredno se proverava da je $(k+2)(k+3) \geq 4(i+1)(k-i+1)$, pa gornja relacija za $i \geq 1$ postaje:

$$\frac{(k+1)(k+2)(k+3)}{(i+1)(k-i+1)(k-i+2)} \geq \frac{(k+1)4(i+1)(k-i+1)}{(i+1)(k-i+1)(k-i+2)} \geq 4 \cdot 1 = 4.$$

Sada je A -spektralno rastojanje:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G_k, G_{k+2}) = & 2 \cdot \left\{ \sum_{i=1}^{2^{n-(k+2)}} |k - (k+2)| + \sum_{i=2^{n-(k+2)+1}}^{2^{n-k}} |k - k| \right\} + \\ & + 2 \cdot \left\{ \sum_{i=2^{n-k+1}}^{2^{n-(k+2)} \cdot (1+(k+2))} |(k-2) - k| + \sum_{i=2^{n-(k+2)} \cdot (1+(k+2))+1}^{2^{n-k} \cdot (1+k)} |(k-2) - (k-2)| \right\} + \\ & + \dots + 2 \cdot \sum_{2^{n-(k+2)} \left(\binom{k+2}{0} + \binom{k+2}{1} + \dots + \binom{k+2}{\lfloor k/2 \rfloor} \right) + 1}^{2^{n-1}} |1 - 1|. \end{aligned}$$

Dalje imamo da je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G_k, G_{k+2}) = & 2^{n-(k+2)+2} + 2^{n-(k+2)+2} \left(1 + \binom{k+2}{1} \right) - 2^{n-k+2} + \\ & 2^{n-(k+2)+2} \left(1 + \binom{k+2}{1} + \binom{k+2}{2} \right) - 2^{n-k+2} \left(1 + \binom{k}{1} \right) + \\ & 2^{n-(k+2)+2} \left(1 + \binom{k+2}{1} + \binom{k+2}{2} + \binom{k+2}{3} \right) \\ & - 2^{n-k+2} \left(1 + \binom{k}{1} + \binom{k}{2} \right) + \dots + \\ & + 2^{n-(k+2)+2} \left(1 + \binom{k+2}{1} + \binom{k+2}{2} + \dots + \binom{k+2}{\lfloor k/2 \rfloor} \right) - \\ & - 2^{n-k+2} \left(1 + \binom{k}{1} + \binom{k}{2} + \dots + \binom{k}{\lfloor k/2 \rfloor - 1} \right). \end{aligned}$$

Odavde grupisanjem odgovarajućih sabiraka dolazimo do relacije u postavci tvrdjenja. ■

Analogno bismo mogli da odredimo A -spektralno rastojanje grafova G_k i G_{k+2} , kada je k paran broj.

Napomena 2.7.6 *Možemo zapaziti da se izračunavanje A -spektralnog rastojanja usložnjava sa povećanjem modula razlike između kardinalnosti baza grafova iz skupa \mathcal{G}_7 čije A -spektralno rastojanje izračunavamo. Na taj način, nije jednostavno izračunati i oceniti parametre A -spektralnog rastojanja na ovakvom skupu grafova.*

Sa druge strane, L - ili Q - parametri spektralnih rastojanja na skupu \mathcal{G}_7 mogu tačno da se izračunaju s obzirom da je svaki od grafova G_k podgraf po granama grafa G_{k+1} , za $1 \leq k \leq n-1$.

Tvrđenje 2.7.3 *Neka je \mathcal{G}_7 prethodno opisana familija grafova. Tada važi da je:*

1. $cs_{\mathcal{G}_7}^L(G_k) = 2^n, \quad 1 \leq k \leq n;$
2. $cs^L(\mathcal{G}_7) = 2^n;$
3. $secc_{\mathcal{G}_7}^L(G_k) = \max\{2^n(k-1), 2^n(n-k)\}, \quad 1 \leq k \leq n;$
4. $sdiam^L(\mathcal{G}_7) = 2^n(n-1).$

Dokaz. Svaka od različitih binarnih n -torki sa tačno jednom koordinatom jednakom jedinici odgovara postojanju 2^{n-1} grana u odgovarajućem grafu. Kako je svaka od baza \mathcal{B}_l nastala dopunjavanjem baze \mathcal{B}_k , za $k \leq l$, nekim binarnim n -torkama sa tačno jednom koordinatom jednakom jedinici, svaki od grafova G_k jeste podgraf po granama grafa G_l . Stoga je L -spektralno rastojanje proizvoljnih grafova G_k i G_l , $1 \leq k < l \leq n$ iz skupa \mathcal{G}_7 shodno Lemi 2.3.2 jednako:

$$\sigma_L(G_k, G_l) = 2(2^{n-1}l - 2^{n-1}k) = 2^n(l - k).$$

Vrednosti parametara spektralnih rastojanja dobijaju se neposrednom procenom shodno definiciji. ■

2.7.6 Primeri A -spektralnih rastojanja u nekim skupovima regularnih grafova

U nastojanju da odredimo parametre A -spektralnog rastojanja na što širem skupu grafova iz klase regularnih grafova, u nastavku ćemo razmotriti nekoliko familija regularnih grafova specijalno određene strukture i međusobnog odnosa. Naime, najpre ćemo parametre A -spektralnih rastojanja izračunati za neke kompletne multipartitne grafove, među kojima su kompletan graf i tzv. *prazan graf*, odnosno graf koji se sastoji od izolovanih čvorova. Potom ćemo ovaj skup grafova proširiti sa dva nova regularna grafa, od kojih jedan predstavlja uniju disjunktih puteva dužine 1, a drugi je *proizvod*² kompletnog grafa i puta dužine 1. Naposljetku, analiziramo parametre A -spektralnih rastojanja na skupu grafova koji nastaje od prethodnog dodavanjem 2-regularnog povezanog grafa, odnosno konture.

²*Proizvod* $G_1 \times G_2$ grafova G_1 i G_2 je specijalan slučaj operacije NEPS, čija je definicija data u Odeljku 1.1, za $n = 2$ i bazu $\mathcal{B} = \{(1, 1)\}$.

Primer 2.7.2 Razmatramo skup regularnih grafova $\mathcal{R}_1 = \{G_0, G_1, \dots, G_p\}$ sa $n = 2^p$, $p \in \mathbb{Z}^+ \setminus \{0\}$ čvorova, takav da je $G_0 = K_n = K_{2^p}$ kompletan graf. Graf $G_i = K_{k_i \times n_i} = K_{2^{p-i} \times 2^i}$, za $1 \leq i \leq p$ nastaje oduzimanjem 2^{p+i-2} grana grafu G_{i-1} , odnosno $\sum_{q=1}^i 2^{p+q-2} = 2^{p+i-1} - 2^{p-1} = 2^{p-2}(2^{i+1} - 2)$ grana grafu G_0 , tako da je svaki od grafova G_i kompletan multipartitan graf sa jednakobrojnim delovima. Sledstveno, graf $G_p = nK_1 = 2^p K_1$ jeste graf koji se sastoji od izolovanih čvorova. Primetimo da su grafovi iz skupa \mathcal{R}_1 tačno $2^i(2^{p-i} - 1)$ -regularni, za $1 \leq i \leq p$.

Odredimo A -spektralno rastojanje između grafova G_i i G_j , $0 \leq i < j \leq p$ iz skupa \mathcal{R}_1 . Korišćenjem osobina spektara ovih grafova, tj. $\lambda_1(G_j) < \lambda_1(G_i)$, $\lambda_n(G_j) < \lambda_n(G_i)$ i $k_i(m_i - 1) < k_j(m_j - 1)$, nalazimo da je:

$$\begin{aligned} \sigma_A(G_i, G_j) &= |\lambda_1(G_i) - \lambda_1(G_j)| + \sum_{q=2}^{n-k_i+1} |0 - 0| + \sum_{q=n-k_j+1}^{n-k_j+1} |-2^i - 0| + \\ &\quad \sum_{q=n-k_j+2}^n |-2^i - (-2^j)| = 2^{p+i-j+1}(2^{j-i} - 1). \end{aligned}$$

Oдавде sledi da je:

1. $\text{cs}_{\mathcal{R}_1}^A(G_i) = \min\{\sigma_A(G_i, G_{i+1}), \sigma_A(G_{i-1}, G_i)\} = n$;
2. $\text{cs}^A(\mathcal{R}_1) = n$;
3. $\text{secc}_{\mathcal{R}_1}^A(G_i) = \max\{2^{p-i+1}(2^i - 1), 2^{i+1}(2^{p-i} - 1)\}$;
4. $\text{sdiam}^A(\mathcal{R}_1) = 2(n - 1)$.

Primer 2.7.3 Razmatramo skup regularnih grafova $\mathcal{R}_2 = \{G_0, G_1, \dots, G_{p-1}, G^*, H^*, G_p\}$ sa $n = 2^p$, $p \in \mathbb{Z}^+ \setminus \{0, 1, 2\}$ čvorova. Za grafove G_0, G_1, \dots, G_{p-1} važe iste pretpostavke kao i u prethodnom primeru. Graf G^* nastaje oduzimanjem 2^{p-1} grana grafu G_{p-1} , odnosno $\frac{n^2}{4}$ grana grafu G_0 , tako da je $G^* = K_{\frac{n}{2}} \times K_2$. Primetimo da je graf G^* $(2^{p-1} - 1)$ -regularan graf. Graf H^* nastaje oduzimanjem $\frac{n}{4}(n - 4)$ grana od grafa G^* , odnosno oduzimanjem $\frac{n}{2}(n - 2)$ grana od grafa G_0 , tako da je $H^* = \frac{n}{2}K_2$. Ovaj graf je 1-regularan. I konačno, graf $G_p = nK_1$ nastaje oduzimanjem $\frac{n}{2}$ grana od grafa H^* , odnosno $\frac{n}{2}(n - 1)$ grana od grafa G_0 .

Pokazaćemo da važi: $\text{cs}(\mathcal{R}_2) = n$ i $\text{sdiam}(\mathcal{R}_2) = \max\{2(n - 1), 3n - 4\sqrt{n}\}$.

Najpre ćemo odrediti A -spektralna rastojanja između grafova iz skupa \mathcal{R}_2 .

Iz prethodnog primera imamo da je $\sigma_A(G_i, G_j) = 2^{p+i-j+1}(2^{j-i} - 1)$, za $0 \leq i < j \leq p - 1$.

Spektar grafa $G^* = K_{\frac{n}{2}} \times K_2$ čine: $\frac{n}{2} - 1, [1]^{\frac{n}{2}-1}, [-1]^{\frac{n}{2}-1}, -\frac{n}{2} + 1$, pa su A -spektralna rastojanja ovog grafa do grafova prethodnika iz skupa \mathcal{R}_2 jednaka:

$$\begin{aligned}\sigma_A(G^*, G_0) &= 2(n - 2), \\ \sigma_A(G^*, G_{p-1}) &= n, \\ \sigma_A(G^*, G_i) &= 3n - 2^{i+2} - 2^{1-i}n + 2, i = 1, 2, \dots, p - 2.\end{aligned}$$

A -spektralna rastojanja grafa H^* do grafova prethodnika iz skupa \mathcal{R}_2 su:

$$\begin{aligned}\sigma_A(H^*, G_0) &= 2(n - 2), \\ \sigma_A(H^*, G_{p-1}) &= 2(n - 2), \\ \sigma_A(H^*, G_i) &= 3n - 2^{i+1} - 2^{1-i}n, i = 1, 2, \dots, p - 2, \\ \sigma_A(H^*, G^*) &= n - 4.\end{aligned}$$

A -spektralna rastojanja grafa G_p do ostalih grafova iz skupa \mathcal{R}_2 su:

$$\begin{aligned}\sigma_A(G_p, G_0) &= 2(n - 1), \\ \sigma_A(G_p, G_{p-1}) &= n, \\ \sigma_A(G_p, G_i) &= 2(n - 2^i), i = 1, 2, \dots, p - 2, \\ \sigma_A(G_p, G^*) &= 2(n - 2), \\ \sigma_A(G_p, H^*) &= n.\end{aligned}$$

Odredimo sada kospektralnost svakog od grafova iz skupa \mathcal{R}_2 . Imamo da je:

$$\begin{aligned}\text{cs}_{\mathcal{R}_2}^A(G_0) &= \min\{n, 2(n - 2), 2(n - 1)\} = n, \\ \text{cs}_{\mathcal{R}_2}^A(G_{p-1}) &= \min\{n, 2(n - 2)\} = n, \\ \text{cs}_{\mathcal{R}_2}^A(G_i) &= \min\{n, 3n - 2^{i+2} - 2^{1-i}n + 2, 3n - 2^{i+1} - 2^{1-i}n, 2(n - 2^i)\} = n, \\ \text{cs}_{\mathcal{R}_2}^A(G^*) &= \min\{2(n - 2), n, 3n - 2^{i+2} - 2^{1-i}n + 2, n - 4\} = n - 4, \\ \text{cs}_{\mathcal{R}_2}^A(H^*) &= \min\{2(n - 2), 3n - 2^{i+1} - 2^{1-i}n, n - 4, n\} = n - 4, \\ \text{cs}_{\mathcal{R}_2}^A(G_p) &= \min\{2(n - 1), n, 2(n - 2^i), 2(n - 2)\} = n.\end{aligned}$$

Oдавде sledi da je mera kospektralnosti na skupu \mathcal{R}_2 jednaka: $\text{cs}^A(\mathcal{R}_2) = n$.

Izračunajmo spektralne ekscentricitete grafova iz skupa \mathcal{R}_2 . Imamo da je:

$$\begin{aligned}\text{secc}_{\mathcal{R}_2}^A(G_0) &= \max\{2(n - 1), 2(n - 2)\} = 2(n - 1), \\ \text{secc}_{\mathcal{R}_2}^A(G_{p-1}) &= \max\{2(n - 2), n\} = 2(n - 2),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{secc}_{\mathcal{R}_2}^A(G_i) &= \max\left\{\max_{1 \leq i \leq p-2} \{2^{p-i+1}(2^i - 1), 2^{i+1}(2^{p-i} - 1)\}, 3n - 2^{i+2} - 2^{1-i}n + 2, \right. \\
 & \left. 3n - 2^{i+1} - 2^{1-i}n\right\} = 3n - 2^{i+1} - 2^{1-i}n, \\
 \text{secc}_{\mathcal{R}_2}^A(G^*) &= \max\{2(n-2), n, 3n - 2^{i+2} - 2^{1-i}n + 2, n-4\} = \\
 & \max\{2(n-2), \max_{1 \leq i \leq p-2} \{3n - 2^{i+2} - 2^{1-i}n + 2\}\}, \\
 \text{secc}_{\mathcal{R}_2}^A(H^*) &= \max\{2(n-2), 3n - 2^{i+1} - 2^{1-i}n, n-4, n\} = \\
 & \max_{1 \leq i \leq p-2} \{3n - 2^{i+1} - 2^{1-i}n\}, \\
 \text{secc}_{\mathcal{R}_2}^A(G_p) &= \max\{2(n-1), n, 2(n-2^i), 2(n-2)\} = 2(n-1).
 \end{aligned}$$

Odredimo nadalje graf G_i sa kojim se postiže $\max_{1 \leq i \leq p-2} \sigma_A(H^*, G_i)$. Posmatrajmo funkciju $f(i) = 3n - 2^{i+1} - 2^{1-i}n$, za $i \in [1, p-2]$ i $n = 2^p$. Prvi izvod ove funkcije je: $f'(i) = -2^{i+1} \ln 2 + 2^{1-i}n \ln 2 = \ln 2 \{2^{1-i}n - 2^{1+i}\}$, dok je stacionarna tačka $i = \frac{1}{2} \log_2 n = \frac{p}{2}$, za $i \in [1, p-2]$. Kako je $f(1) = 2^{p+1} - 4 \leq f(p-2) = 5 \cdot 2^{p-1} - 8 \leq f(\frac{p}{2}) = 3 \cdot 2^p - 2^{\frac{p}{2}+2}$, možemo da zaključimo da se maksimum na intervalu $[1, p-2]$ postiže u tački $\frac{1}{2} \log_2 n = \frac{p}{2}$. Stoga imamo da je: $\text{secc}_{\mathcal{R}_2}^A(H^*) = \sigma_A(H^*, G_{[\frac{1}{2} \log_2 n]}) = \sigma_A(H^*, G_{[\frac{p}{2}]}) \approx 3n - 4\sqrt{n}$.

Sada možemo da odredimo spektralni dijametar na skupu \mathcal{R}_2 . Imamo da je: $\text{sdiam}^A(\mathcal{R}_2) = \max\{2(n-1), 2(n-2), \max_{1 \leq i \leq p-2} \{3n - 2^{i+1} - 2^{1-i}n\}, \max_{1 \leq i \leq p-2} \{3n - 2^{i+2} - 2^{1-i}n + 2\}, 3n - 4\sqrt{n}\}$, odnosno $\text{sdiam}^A(\mathcal{R}_2) = \max\{2(n-1), 3n - 4\sqrt{n}\}$. Odavde dobijamo da je $\text{sdiam}^A(\mathcal{R}_2) = 2(n-1)$, za $p = 3$ i $\text{sdiam}^A(\mathcal{R}_2) = \sigma_A(H^*, G_{[\frac{p}{2}]}) \approx 3n - 4\sqrt{n}$, za $p \geq 4$.

Primer 2.7.4 Sada ćemo skup \mathcal{R}_2 dopuniti povezanim 2-regularnim grafom, tj. konturom C_n tako što ćemo oduzeti $\frac{n}{2} (\frac{n}{2} - 3)$ grana od grafa G^* , odnosno $\frac{n}{2} (n - 3)$ grana od grafa G_0 . Može se pokazati da je mera kospektralnosti tako dobijenog skupa $\mathcal{R}_3 = \{G_0, G_1, \dots, G_{p-1}, G^*, C_n, H^*, G_p\}$ jednaka n .

Spektar grafa C_n , za n -parno, je simetričan u odnosu na nulu, i važi da je $\lambda_1(C_n) = -\lambda_n(C_n) = 2$. Uz to, ukoliko sa x^* označimo broj sopstvenih vrednosti, bez $\lambda_1(C_n)$, koje su veće ili jednake od 1, razmatranjem spektra ovog grafa možemo da zaključimo da važi: $x^* = \frac{1}{3}(n-4)$, ukoliko je p paran broj, odnosno $x^* = \frac{1}{3}(n-2)$, ukoliko je p neparan broj.

A -spektralna rastojanja grafa C_n do ostalih grafova iz skupa \mathcal{R}_3 su:

$$\sigma_A(C_n, G_0) = 2n - 4 - 2x^* + 2 \sum_{i=2}^{x^*+1} \lambda_i(C_n),$$

$$\begin{aligned}\sigma_A(C_n, G_{p-1}) &= n - 4 + 2 \sum_{i=2}^{n/2} \lambda_i(C_n), \\ \sigma_A(C_n, G_i) &= 2n - 2^{i+1} - 4 + 2 \sum_{j=k_i}^{n/2} \lambda_j(C_n), i = 1, 2, \dots, p-2, \\ \sigma_A(C_n, G^*) &= 2n - 8 - 4x^* + 2 \cdot \left\{ \sum_{i=2}^{x^*+1} \lambda_i(C_n) - \sum_{i=x^*+2}^{n/2} \lambda_i(C_n) \right\}, \\ \sigma_A(C_n, H^*) &= n - 4x^* + 2 \cdot \left\{ \sum_{i=2}^{x^*+1} \lambda_i(C_n) - \sum_{i=x^*+2}^{n/2} \lambda_i(C_n) \right\}, \\ \sigma_A(C_n, G_p) &= 4 + 2 \sum_{i=2}^{x^*+1} \lambda_i(C_n) + 2 \sum_{i=x^*+2}^{n/2} \lambda_i(C_n).\end{aligned}$$

S obzirom na ova, kao i A-spektralna rastojanja izračunata u prethodnom primjeru, sprovođenjem odgovarajućih ocena, dobijamo sledeće vrednosti za kospektralnost svakog od grafova iz skupa \mathcal{R}_3 :

$$\begin{aligned}\text{cs}_{\mathcal{R}_3}^A(G_0) &= n, \\ \text{cs}_{\mathcal{R}_3}^A(G_{p-1}) &= n, \\ \text{cs}_{\mathcal{R}_3}^A(G_i) &= n, i = 1, 2, \dots, p-2, \\ \text{cs}_{\mathcal{R}_3}^A(G^*) &= n - 4, \\ \text{cs}_{\mathcal{R}_3}^A(C_n) &= \sigma(C_n, H^*) = n - 4x^* + 2 \cdot \left\{ \sum_{i=2}^{x^*+1} \lambda_i(C_n) - \sum_{i=x^*+2}^{n/2} \lambda_i(C_n) \right\}, \\ \text{cs}_{\mathcal{R}_3}^A(H^*) &= \sigma(C_n, H^*) = n - 4x^* + 2 \cdot \left\{ \sum_{i=2}^{x^*+1} \lambda_i(C_n) - \sum_{i=x^*+2}^{n/2} \lambda_i(C_n) \right\}, \\ \text{cs}_{\mathcal{R}_3}^A(G_p) &= \min \left\{ n, 4 + 2 \sum_{i=2}^{n/2} \lambda_i(C_n) \right\}.\end{aligned}$$

Stoga je, shodno definiciji, mera kospektralnosti $\text{cs}^A(\mathcal{R}_3)$ na skupu \mathcal{R}_3 :

$$\text{cs}^A(\mathcal{R}_3) = \max \left\{ n, \min \left\{ n, 4 + 2 \sum_{i=2}^{n/2} \lambda_i(C_n) \right\} \right\} = n,$$

jer važi:

$$n - 4x^* + 2 \cdot \sum_{i=2}^{x^*+1} \lambda_i(C_n) - 2 \cdot \sum_{i=x^*+2}^{n/2} \lambda_i(C_n) \leq$$

$$n - 2 \cdot \sum_{i=x^*+2}^{n/2} \lambda_i(C_n) \leq n.$$

2.8 AutoGraphiX i problemi spektralnog rastojanja grafova

Inspirisani nerešenim hipotezama u vezi sa Menhetn spektralnim rastojanjem grafova istog reda, kao i problemom određivanja dobrih gornjih ograničenja za ekstremalna spektralna rastojanja na generalnim skupovima grafova reda n , kao što su, na primer, regularni ili bipartitni grafovi, predlažemo modifikaciju interaktivnog kompjuterskog sistema AutoGraphiX. Verujemo da se istraživanje vezano za spektralna rastojanja grafova može poboljšati i olakšati uz pomoć sistema AutoGraphiX. Uz to, postojeći računski rezultati mogli bi da se prošire novim rezultatima za spektralna rastojanja grafova višeg reda (uz pomoć AGX-a do reda 12).

Ekstremalnim nazivamo one grafove koji minimizuju ili maksimizuju neku grafovsku invarijantu ili funkciju grafovskih invarijanti. *Grafovska invarijanta* jeste funkcija grafa koja je nezavisna od načina na koji obeležavamo čvorove i grane grafa. Tako su *indeks grafa*, *minimalni* δ i *maksimalni* Δ stepen čvora u grafu, *hromatski broj* i *dijametar grafa* primeri grafovskih invarijanti (definicije navedenih pojmova čitalac može naći u [22], [26] ili [30]).

Većinu problema ekstremalne teorije grafova, koja podrazumeva nalaženje ekstremalnih grafova, možemo da razmatramo kao probleme kombinatorne optimizacije. Neka je G konačan graf bez petlji i $f(G)$ neka formula, odnosno funkcija, koja zavisi od jedne ili više invarijanti grafa G . Neka su \mathcal{G}_n i $\mathcal{G}_{n,m}$ skupovi svih konačnih grafova bez petlji sa n čvorova, odnosno n čvorova i m grana, respektivno. Razmatraćemo probleme sledećeg oblika:

$$\min_{G \in \mathcal{G}_n} f(G). \quad (2.21)$$

Naravno, moguće su i modifikacije problema (2.21) u smislu maksimizacije ili optimizacije na skupu grafova sa datim brojem i čvorova i grana. Svi problemi oblika (2.21) mogu se približno rešiti pomoću generišućih heuristika.

Potreba za rešavanjem problema oblika (2.21) u teoriji grafova imala je za posledicu nastanak mnogih sistema za automatsko generisanje hipoteza. Među njima je sistem za automatsko odnosno semi-automatsko dokazivanje teorema *Theorem prover*, koji je deo opštijeg sistema *Graf* (engl. *Graph*), oba razvijena od strane Cvetkovića i saradnika (vidi [16] i reference tamo). Jedan od sistema za automatsko odnosno interaktivno generisanje, analizu ili opisivanje grafova jeste sistem *Ingrid*, razvijen od strane Brigham-a i Dutton-a, dok se uspešnim za automatsko generisanje, proveru i izbor hipoteza pokazao i sistem *Graffiti*, razvijen od strane Fajtlowicz-a (videti [16] ili [17]). Program *Nauty* razvijen od strane McKay-a (vidi reference u [17]) veoma brzo izlistava sve grafove iz zadate klase grafova. Međutim, slobodno možemo reći, najpopularniji među automatizovanim sistemima u teoriji grafova, uz pomoć koga je generisano na stotine hipoteza i objavljena čitava serija radova jeste *AutoGraphiX system*, kraće AGX. Ovaj interaktivni kompjuterski program, čiji su autori Gilles Caporossi i Pierre Hansen, razvijan je od 1997. godine u GERAD-u, Montreal. Sistem koristi optimizacioni modul koji je heurističkog tipa i zasnovan je na VNS-u, te tako predstavlja i jednu od njegovih prvih primena.

Metodu promenljivih okolina (engl. *Variable neighborhood search*), kraće VNS, možemo neformalno definisati (vidi [47]) kao metaheuristiku za građenje heuristika koja je zasnovana na sistematskim promenama okolina kako u fazi spusta, odnosno fazi rasta za nalaženje lokalnog optimuma, tako i u perturbacijskoj fazi za napuštanje odgovarajuće 'doline', odnosno 'brda' (mesta dostizanja lokalnih optimuma). Prvi put je predložena 1997. godine (vidi [75]), od kada beleži neprestani razvoj, kako na polju modifikacija, tako i na polju primena. VNS se u teoriji grafova može iskoristiti u sledećem smislu (vidi [46]): pronalaženje grafa koji zadovoljava data ograničenja, pronalaženje optimalnih ili približno optimalnih vrednosti neke invarijante u odnosu na ograničenja, pobijanje hipoteze, sugerisanje hipoteze ili sugerisanje dokaza.

Sistem AGX se, u opštem slučaju, sastoji iz tri ključne celine (za detalje vidi [16]):

1. inicijalizacija;
2. VNS;
3. analiza grafa.

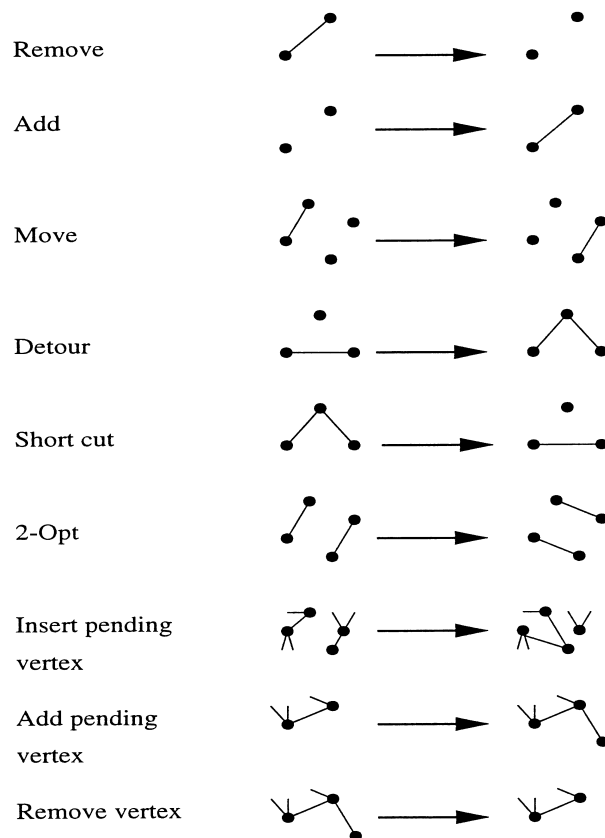
Inicijalizacija podrazumeva postavku problema koga treba rešiti, odnosno formulisanje funkcije cilja u zavisnosti od jedne ili više grafovskih invarijanti.

Optimizaciona rutina VNS-a koja je u okviru AGX-a primenjena na različitim okolinama naziva se *Metoda promenljivog spusta* (engl. *Variable Neighborhood Descent*), kraće VND. Ona podrazumeva sistematsko eksploatisanje sve veće okoline tekućeg grafa, dok se pomeranje (engl. *move*) vrši jedino kada se dobiju bolja rešenja. Okoline o kojima govorimo odgovaraju sledećim grafovskim transformacijama:

- *brisanje* grane (engl. *remove*);
- *dodavanje* grane (engl. *add*) između nesusednih čvorova;
- *pomeranje* grane (engl. *move*) tj. brisanje grane za kojim sledi dodavanje grane ali ne između istog para čvorova;
- *obilazak* (engl. *detour*) - uklanjanje jedne grane i dodavanje grana koje spajaju krajeve uklonjene grane sa čvorom koji nije susedan ni jednom krajnjem čvoru uklonjene grane;
- *prečica* (engl. *short cut*) - transformacija suprotna od obilaska;
- *2 opt* - uklanjanje dve nesusedne grane i dodavanje dve nove nesusedne grane koje spajaju krajeve uklonjenih grana;
- *umetanje visećeg čvora* (engl. *insert pending vertex*) - uklanjanje grane incidentne visećem čvoru i dodavanje dve nove grane koje ovaj viseći čvor povezuju sa dva nova susedna čvora, pri čemu je između ovih čvorova uklonjena grana;
- *dodavanje visećeg čvora* (engl. *add pending vertex*) - dodavanje grane koja je incidentna jednom čvoru grafa i drugom novom (visećem) čvoru;
- *uklanjanje čvora* (engl. *remove vertex*) ograničenog stepena, kao i grana koje su mu incidentne;
- *povezivanje* - uklanjanje dve nesusedne grane i dodavanje dve susedne.

Opisane transformacije su ilustrovane na Slici 2.1, a na korisniku je da naznači da li će primeniti sve opisane transformacije ili odabrati podskup okolina koje će koristiti u sistemu.

U okviru treće celine sistema AGX sprovode se testiranja u cilju ustanovljavanja pripadnosti dobijenog grafa nekoj od poznatih klasa grafova, kao što su, na



Slika 2.1: Okoline implementirane u AGX-u iz [16]

primer, bipartitni, regularni, kompletni, i slično. Takođe se izračunavaju parametri i sprovodi vizuelizacija dobijenih rezultata.

Ono što može predstavljati nedostatak pri radu sa sistemom AGX jeste to što dobar deo performansi ovog sistema zavisi upravo od korisnikovog znanja i izbora adekvatnih transformacija. Stoga su Gilles Caporossi i Pierre Hansen predložili izvesne modifikacije ovog sistema, označene kao AGX 2 i LD (skraćeno od engl. *Learning Descent Algorithm*). Opis ovih novih verzija sistema kao i prvih eksperimenata sprovedenih u AGX-u (vidi [15]), zatim različite forme rezultata koje mogu da se dobiju uz pomoć AGX-a, neke jako teške kao i još uvek nerešene hipoteze sumirani su u [57].

U dosadašnjoj implementaciji sistema AGX, kao što smo videli, rešavali su se optimizacioni problemi čija je funkcija cilja predstavljala funkciju jedne ili više invarijanti jednog grafa G , na, u opštem slučaju, skupu svih grafova reda n . Međutim, kako računanje i ispitivanje spektralnog rastojanja podrazumeva baratanje sa spektrima dva grafa, predlažemo sledeću modifikaciju sistema AGX.

Razmatramo optimizacijski problem sledećeg oblika:

$$\max_{G_1, G_2 \in \mathcal{G}_n} f(G_1, G_2),$$

gde je f funkcija invarijanti dva grafa, G_1 i G_2 . Specijalno, u našem slučaju je:

$$\max_{G_1, G_2 \in \mathcal{G}_n} d(G_1, G_2) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i(G_1) - \lambda_i(G_2)|,$$

gde je $d(G_1, G_2)$ Menhetn spektralno rastojanje grafova G_1 i G_2 . Naravno, istraživanja mogu da se sprovedu i za neko drugo, npr. Euklidovo rastojanje, pa da se uporede dobijeni rezultati, kao i da se razmotre spektri matrice susedstva, Laplasove i nenegativne Laplasove matrice datih grafova.

Modifikovana verzija AGX-a mogla bi da barata opet sa matricom, na primer, susedstva jednog grafa G reda $2n$ koji će, međutim, biti nepovezan graf a činiće ga dve komponente povezanosti - grafovi G_1 i G_2 čije spektralno rastojanje računamo. Stoga će matrica susedstva ovog grafa imati sledeći oblik:

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & O \\ O & A_1 \end{pmatrix},$$

gde su A_1 i A_2 matrice susedstva grafova G_1 i G_2 , respektivno. Optimizacija bi se sprovodila na matricama A_1 i A_2 , ali nezavisno. To bi značilo da bi se promene okolina, odnosno njima odgovarajuće grafovске transformacije, primenjivale nezavisno samo na odgovarajućim komponentama povezanosti grafa G , ali ne i između njih. Preciznije, postojala bi izvesna restrikcija grafovskih transformacija na skupu svih čvorova grafa G . Pa tako, ukoliko čvorove grafa uredimo tako da čvorovi $V_1 = \{1, 2, \dots, n\}$ predstavljaju čvorove jedne komponente povezanosti G_1 , a $V_2 = \{n + 1, n + 2, \dots, 2n\}$ čvorove druge komponente povezanosti G_2 , grafovska transformacija kao što je, na primer, *dodavanje grane* ne bi smela da se izvrši između čvorova iz skupova V_1 i V_2 . Preciznije, restrikovane bi bile sledeće grafovске transformacije: *dodavanje grane*, *pomeranje grane*, *obilazak*, *2-opt*, *umetanje visećeg čvora*, *dodavanje visećeg čvora*, *uklanjanje čvora* i *povezivanje*. S obzirom da računamo spektralno rastojanje između komponenata povezanosti grafa G , njegov spektar ne bi trebalo da bude monotono uređen u celosti, već parcijalno. To znači da bi trebalo sortirati samo njegove odgovarajuće polovine, koje odgovaraju prethodnom uređenju skupa čvorova grafa G .

3 Zatvorene šetnje i poravnavanje mreža

Poravnavanje mreža je tipičan zadatak prepoznavanja grafova. U radu autora [27] ovaj problem je tretiran uz pomoć zatvorenih šetnji koje su u uskoj vezi sa spektralnim invarijantama grafova. Broj razapinjućih zatvorenih šetnji određene dužine u korenskom grafu izračunat je korišćenjem principa uključenja-isključenja. Izračunavanja su sprovedena za male povezane indukovane korenske podgrafove, koji su označeni kao grafiti. Grafiti učestvuju u definiciji mere sličnosti između čvorova mreža koje se porede i tretiraju nekim od algoritama za poravnavanje mreža [64]. Formule izvedene za brojeve razapinjućih zatvorenih šetnji upotrebljene su prilikom komparacije nekih postojećih i novopredloženog metoda za globalno poravnavanje mreža.

Sadržaj ovog poglavlja baziran je na rezultatima izloženim u radovima autora [27], [54] i [55].

Poglavljje je organizovano na sledeći način. U Odeljku 1 navodimo neke osnovne definicije spektralne teorije grafova na koje smo se pozivali u istraživanju. U Odeljku 2 izlažemo nove formule za izračunavanje broja razapinjućih zatvorenih šetnji u indukovanim korenskim podgrafovima. U Odeljku 3 dajemo kratak pregled nekih postojećih algoritama za globalno poravnavanje mreža i definišemo novu meru sličnosti za čvorove poredbenih mreža. Sa teorijskog aspekta poredimo postojeće i novopredloženi pristup u poravnavanju mreža. Formule koje se odnose na brojeve razapinjućih zatvorenih šetnji i podaci vezani za neke mere sličnosti sumirani su u Dodatku C.

3.1 Uglovi grafa i šetnje u grafu

Neka je G graf sa skupom čvorova $V = \{1, 2, \dots, n\}$. Osim ako nije posebno naglašeno, pretpostavljaćemo da je G graf bez petlji i višestrukih grana. Kao što

smo naveli u uvodnom poglavlju, pod *šetnjom* dužine k u grafu G podrazumevamo niz, ne obavezno različitih, čvorova $j_1, j_2, \dots, j_k, j_{k+1} \in \{1, 2, \dots, n\}$ tako da za svako $i = 1, 2, \dots, k$ postoji grana od čvora j_i do čvora j_{i+1} . Šetnja koja počinje i završava se u čvoru $j \in \{1, 2, \dots, n\}$ naziva se *zatvorena šetnja* (engl. *closed walk*). U radu [27] upotrebljavali smo termin *povratna šetnja* (engl. *self-returning walk*) shodno literaturi iz domena hemije i primena. Zatvorena šetnja u grafu je *razapinjuća zatvorena šetnja* (engl. *spanning closed walk*) ako prolazi kroz svaki čvor grafa.

Ako *korenski graf* (engl. *rooted graph*) definišemo kao graf u kome je jedan čvor označen na način na koji ga možemo razlikovati od ostalih čvorova u grafu, i ako taj specijalno označen čvor nazovemo *koren grafa* (engl. *root*), smatraćemo da je zatvorena šetnja u korenskom grafu zatvorena šetnja u čvoru koji je koren tog grafa.

Za izračunavanje odnosno brojanje šetnji, i isto tako zatvorenih šetnji, bilo u grafu ili u korenskom grafu, možemo da koristimo tehnike koje su u vezi sa spektrom grafa. Kao što smo već istakli u Pododeljku 2.7.3, $N_k(j)$ označava broj zatvorenih šetnji dužine k u čvoru j grafa G (i analogno, broj zatvorenih šetnji dužine k grafa G koji je korenski graf sa korenom u čvoru j).

Jedan od dobro poznatih spektralno zasnovanih rezultata koji je u vezi sa izračunavanjem šetnji u grafu (ili digrafu) iskazan je u vidu sledeće teoreme (vidi Teoremu 2.2.1 iz [31] ili [26] str.44):

Teorema 3.1.1 *Ako je A matrica susedstva grafa, onda je element $a_{ij}^{(k)}$ u preseku i -te vrste i j -te kolone matrice A^k jednak broju šetnji dužine k koje počinju u čvoru i i završavaju se u čvoru j .*

Stoga je broj zatvorenih šetnji dužine k u čvoru j grafa G jednak j -tom dijagonalnom elementu k -tog stepena matrice susedstva grafa G , tj. $N_k(j) = a_{jj}^{(k)}$.

Spektar grafa G u odnosu na matricu susedstva $A = (a_{ij})$ označavali smo sa $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$, dok različite sopstvene vrednosti ovog grafa, odnosno matrice A , možemo da označimo sa $\nu_1 > \nu_2 > \dots > \nu_m$. Skup sopstvenih vektora $\epsilon(\lambda) = \{x \in R^n : Ax = \lambda x\}$ koji odgovaraju sopstvenoj vrednosti λ matrice A zovemo *sopstveni potprostor* (engl. *eigenspace*) generisan sopstvenom vrednošću λ .

Normalizovan pozitivan sopstveni vektor koji odgovara najvećoj sopstvenoj vrednosti povezanog grafa G u odnosu na matricu susedstva naziva se *glavni sopstveni vektor* (engl. *principal eigenvector*). Koordinate glavnog sopstvenog vektora u vezi

su sa susedstvom čvora grafa zato što su asimptotski proporcionalne broju šetnji dužine k koje počinju u nekom određenom čvoru, tzv. *izlazne šetnje* (engl. *outgoing walks*). Sledeća relevantna teorema T.H. Wei-a [89] razmotrena je u [31], str. 26:

Teorema 3.1.2 *Neka je $N_k(i)$ broj šetnji dužine k koje počinju u čvoru i ne-bipartitnog povezanog grafa G čiji su čvorovi $1, 2, \dots, n$. Neka je $s_k(i) = N_k(i) \cdot \left(\sum_{j=1}^n N_k(j)\right)^{-1}$. Tada, za $k \rightarrow \infty$, vektor $(s_k(1), s_k(2), \dots, s_k(n))^T$ teži glavnom sopstvenom vektoru grafa G .*

Pod pretpostavkom da matrica susedstva A grafa G ima *spektralnu dekompoziciju* (engl. *spectral decomposition*) (nešto više o osnovim pojmovima čitalac može naći u, na primer, [87]) $A = \nu_1 P_1 + \nu_2 P_2 + \dots + \nu_m P_m$, nalazimo da važi:

$$A^k = \sum_{i=1}^m \nu_i^k P_i. \quad (3.1)$$

Ovde je $P_i = U E_i U^T$, $i = 1, 2, \dots, m$, gde je U ortogonalna matrica čije su kolone sopstveni vektori koji formiraju ortonormiranu bazu prostora R^n , dok svaka matrica E_i , $i = 1, 2, \dots, m$ ima blok dijagonalnu formu $\text{diag}(O, \dots, O, I, O, \dots, O)$ (za detalje vidi, na primer, [31] ili [30]).

Broj zatvorenih šetnji u određenom čvoru grafa može da se izračuna uz pomoć uglova grafa.

Neka su $S_1 = \epsilon(\nu_1), \dots, S_m = \epsilon(\nu_m)$, sopstveni potprostori koji odgovaraju različitim sopstvenim vrednostima matrice susedstva A grafa G . Neka je $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ standardna ortonormirana baza prostora R^n . Matrice P_i predstavljaju zapravo ortogonalnu projekciju prostora R^n na $\epsilon(\nu_i)$ u odnosu na standardnu ortonormiranu bazu $\{e_1, \dots, e_n\}$ prostora R^n . Brojevi $\alpha_{ij} = \cos \beta_{ij}$ ($i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, n$), gde je β_{ij} (oštar) ugao između S_i i e_j , nazivaju se *uglovi grafa* (engl. *graph angles*). Niz α_{ij} ($j = 1, 2, \dots, n$) nazivamo *niz uglova sopstvene vrednosti ν_i* ($i = 1, 2, \dots, m$) (engl. *eigenvalue angle sequence*). Takođe, možemo da definišemo *matricu uglova* grafa G (engl. *angle matrix*) kao matricu formata $m \times n$ (gde je m broj različitih sopstvenih vrednosti grafa G , a n red grafa G) čiji su elementi (α_{ij}) . Spomenuta matrica je grafovska invarijanta ako su joj kolone leksikografski uređene. Vrste matrice uglova nazivamo *standardnim nizovima uglova sopstvenih vrednosti* (engl. *standard eigenvalue angle sequences*). Kako P_i predstavljaju ortogonalnu projekciju R^n na $\epsilon(\nu_i)$, imamo da je $\alpha_{ij} = \|P_i e_j\|$, odnosno $\alpha_{ij}^2 = \|P_i e_j\|^2 = e_j^T (P_i^T P_i) e_j$. Uzimajući u obzir definiciju matrice P_i lako se pokazuje da je $P_i^T P_i = P_i$, odakle

sledi $\alpha_{ij}^2 = e_j^T P_i e_j$, pa možemo da zaključimo da se brojevi α_{ij}^2 , $j = 1, 2, \dots, n$ pojavljuju kao dijagonalni elementi matrice P_i . Na taj način, iz (3.1) dobijamo:

$$N_k(j) = a_{jj}^{(k)} = \sum_{i=1}^m \nu_i^k \alpha_{ij}^2. \quad (3.2)$$

U Dodatku u [31] izračunate su sopstvene vrednosti i uglovi povezanih grafova do pet čvorova, pa iz (3.2) možemo da dobijemo numeričke rezultate za brojeve zatvorenih šetnji dužine k u određenom čvoru razmatranog grafa G .

Da se podsetimo, u Pododeljku 2.7.3 funkciju generatrisu $\sum_{k=0}^{\infty} N_k(j)t^k$ za brojeve $N_k(j)$ zatvorenih šetnji dužine k u izabranom čvoru j razmatranog grafa označili smo sa $\mathcal{H}_j(t)$. Iz formule (3.2) dobijamo da važe i sledeće relacije ([31], str. 82):

$$\mathcal{H}_j(t) = \sum_{k=0}^{\infty} N_k(j)t^k = \sum_{k=0}^{\infty} t^k \sum_{i=1}^m \alpha_{ij}^2 \nu_i^k = \sum_{i=1}^m \frac{\alpha_{ij}^2}{1 - \nu_i t}.$$

Ako je $P_G(x) = \det(xI - A)$ karakteristični polinom grafa G , onda funkcija generatrisa može da se odredi pomoću formule:

$$\mathcal{H}_j^G(t) = P_{G-j}\left(\frac{1}{t}\right) / t P_G\left(\frac{1}{t}\right),$$

jer

$$P_{G-j}(x) = P_G(x) \sum_{i=1}^m \frac{\alpha_{ij}^2}{x - \nu_i}$$

važi za karakteristični polinom podgrafova koji je nastao od grafa G uklanjanjem čvora j .

Sa druge strane, za neki ceo broj $k \geq 0$, k -ti spektralni momenat (engl. *spectral moment*) grafa G definišemo kao sumu k -tih stepeni sopstvenih vrednosti grafa G , tj. $s_k = \sum_{i=1}^n \lambda_i^k$. Broj svih zatvorenih šetnji dužine k u grafu G jednak je k -tom spektralnom momentu (vidi Teoremu 3.1.1 iz [30]):

$$s_k = \text{tr}(A^k) = \sum_{j=1}^n a_{jj}^k = \sum_{j=1}^n N_k(j).$$

U literaturi se javljaju brojne formule u kojima su spektralni momenti izraženi preko broja određenih podgrafova razmatranog grafa (vidi, na primer, [29] ili [74]). Na taj način, imamo da je $s_2 = 2e$, gde je e broj grana grafa G , $s_3 = 6t$, gde je t broj trouglova grafa G , dok je 4-ti spektralni momenat $s_4 = 2e + 4p + 8q$, gde p označava broj puteva dužine 2, dok je q broj četvorouglova grafa G . U ovom poglavlju slične formule se javljaju za brojeve zatvorenih šetnji u određenom čvoru.

3.2 Brojanje zatvorenih šetnji

3.2.1 Pojam grafleta

Naznačili smo da je korenski graf graf u kome je jedan čvor označen na način na koji ga možemo razlikovati od ostalih čvorova u grafu. Taj specijalno označen čvor naziva se koren grafa, dok se za graf kaže da ima koren u čvoru j . *Graflet* (engl. *graphlet*) u grafu definišemo kao (mali¹), indukovani, povezani, korenski podgraf grafa. Mogući koreni grafleta su topološki različiti čvorovi u grafu, i odgovaraju orbitama² grupe automorfizama grafa (uporediti sa definicijom koja je data u [64] gde se termin *orbita* upotrebljava u drugačijem smislu). Na taj način nalazimo da dva povezana korenska grafa sa tri čvora i dve grane odgovaraju grafu koji je u [64] označen kao *graflet* G_1 koji ima, u smislu tamo korišćene terminologije, dve orbite čiji su predstavnici numerisani sa 1 i 2 (vidi Sliku 3.1). Dakle, grafletu G_1 iz [64], ovde odgovaraju, u smislu prethodno uvedene definicije, dva grafleta³.

Graflet G_1 iz [64]

Dva korenska grafa

Slika 3.1: Graf G_1 i odgovarajući korenski grafovi

Razmatraćemo graflete do reda pet. Postoji 30 povezanih grafova sa dva do pet čvorova, među kojima razlikujemo 73 korena. Drugim rečima, postoji 73 različitih korenskih grafova, odnosno grafleta, sa dva do pet čvorova (vidi Sliku 3.5). Sumiranjem odgovarajućih koeficijenata u funkciji generatrisi za izračunavanje broja

¹Ovde se misli da je podgraf malog reda, odnosno sa relativno malim brojem čvorova.

²*Automorfizam* grafa (vidi [22]) je izomorfizam grafa na samog sebe, odnosno to je permutacija skupa čvorova grafa koja čuva relaciju susedstva čvorova. Može se dokazati (Teorema 1, str. 132 u [22]) da skup svih automorfizama nekog grafa obrazuje grupu u odnosu na kompoziciju preslikavanja. Tako određena permutaciona grupa naziva se *grupa automorfizama grafa*. Neka je $\Gamma(G)$ grupa automorfizama grafa G . Za dva čvora v_i i v_j grafa G kažemo da su *slična* ako postoji automorfizam $\gamma \in \Gamma(G)$ tako da važi $\gamma(v_i) = v_j$. Ovako definisana relacija jeste relacija ekvivalencije u skupu čvorova grafa, a njene klase ekvivalencije nazivaju se *orbitama grupe automorfizama grafa*.

³U nastavku, sem kada to nije posebno naglašeno, pod grafletom ćemo podrazumevati indukovani, povezani korenski podgraf grafa.

grafova sa šest čvorova (vidi, na primer, [48]), nalazimo da postoji 156 takvih grafova. U opštem slučaju, funkcija generatrisa za izračunavanje broja svih grafova reda n dobija se primenom specijalizacije Polya-ine teoreme (engl. *Pólya's Theorem*) na graf koji je označen kao *konfiguracija* (engl. *configuration*) čije su *figure* (engl. *figures*) parovi tačaka (vidi [48]). Tabela svih 112 povezanih grafova reda šest izložena je u [28]. U knjizi [82] takođe postoji katalog grafova malog reda.

Dalja primena Polya-ine teoreme rezultira funkcijom generatrisom za izračunavanje broja korenskih grafova reda n . Spomenuta funkcija generatrisa je sledećeg oblika:

$$G_n(x) = Z_2(S_1 \times S_{n-1}, 1 + x).$$

Ovde $Z(G, f(x))$ označava funkciju dobijenu iz ciklusnog indeksa $Z(G)$ konfiguracione grupe G zamenom svake nepoznate f_k sa $f(x^k)$; $\phi(x) = 1 + x$ predstavlja funkciju generatrisu za izračunavanje figura (jer je korenski graf takođe konfiguracija u kojoj su figure parovi tačaka), dok je S_n simetrična grupa od n tačaka kojoj je permutacijska grupa R_n izomorfna i za koju važi $Z(R_n) = Z_2(S_n)$ (vidi [48] za detalje). Analiziranjem koeficijenata u funkciji generatrisi za izračunavanje broja korenskih grafova reda šest, zaključujemo da postoji 544 takvih grafova, među kojima je 137 nepovezanih korenskih grafova i 407 povezanih korenskih grafova.

Svih 853 različitih povezanih grafova reda 7 izloženo je u Dodatku u [25].

3.2.2 Brojanje zatvorenih šetnji u graflima

Princip uključenja-isključenja (vidi, na primer, [13]) spada u najstarije računске metode i primenjuje se u raznim naučnim i istraživačkim domenima već više od tri stotine godina. Jedna od prvih primena principa uključenja-isključenja bila je kod proučavanja dearanžmana (vidi, na primer, [36]). Ovaj princip upotrebljen je i za izračunavanje broja antilanaca $A(n, k)$ dužine k u partitivnom skupu $P(x)$ datog skupa X čija je kardinalnost n (vidi [24]). Princip uključenja-isključenja nalazi se u osnovi istoimene tehnike koja se primenjuje pri dizajniranju brzih algoritama čija je vremenska složenost eksponencijalna, tzv. algoritama uključenja-isključenja (vidi, na primer, [37]). Zbog svojih dobrih osobina (prostorna složenost nije eksponencijalna) slično dinamičkom programiranju, algoritmi uključenja-isključenja mogu često da se iskoriste ne samo za rešavanje NP-teških problema, već i za rešavanje nekih težih računskih problema. U radu [8] izloženi su neki algoritmi zasnovani na principu uključenja-isključenja namenjeni rešavanju nekih dobro poznatih i intenzi-

vno proučavanih problema podele (engl. *partition problems*), kao što su problemi koji su u vezi sa hromatskim brojem, hromatskim polinomom, bojenjem liste, i dr. Algoritmi za bojenje grafa [7] uz pomoć tehnike uključenja-isključenja analizirani su u [37]. Ovde princip uključenja-isključenja koristimo za izračunavanje broja razapinjućih zatvorenih šetnji određene dužine u korenskom grafu.

Neka je G korenski graf sa korenom u čvoru j . Razmatraćemo graflete grafa G koji sadrže čvor j i koji takođe imaju koren u čvoru j . Broj ovakvih grafleta je konačan. Pretpostavimo da je među grafletima njih g neizomorfno kao i da su neizomorfni grafleti indeksirani sa $0, 1, \dots, g - 1$ na proizvoljan način. Za graflet sa indeksom i kažemo da je *graflet tipa i* . Ako, na primer, razmatramo indukovane povezane podgrafove do reda pet, indeks i odgovara jednom od 73 korena koji su numerisani brojevima $0, 1, \dots, 72$ (vidi Sliku 3.5). Označimo sa u_i broj grafleta tipa i . Neka su, dalje, a_i^k i n_i^k oznake za broj zatvorenih šetnji i broj razapinjućih zatvorenih šetnji dužine k u grafletu tipa i , respektivno.

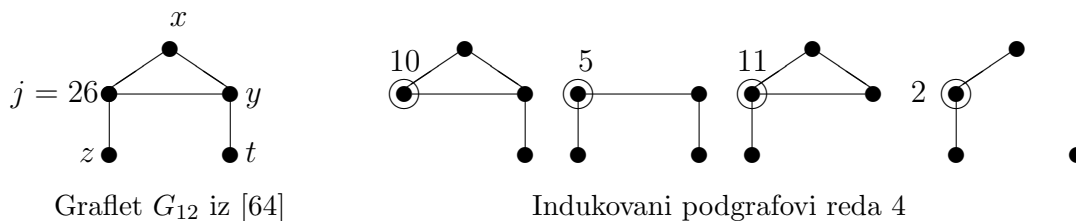
Teorema 3.2.1 *Neka je G korenski graf sa korenom u čvoru j čiji je skup čvorova $V = \{1, 2, \dots, n\}$. Neka je S podskup skupa $V - j$ i neka je G_S povezana komponenta koja sadrži čvor j indukovano podgrafova grafa G koji je dobijen uklanjanjem čvorova iz skupa S . Za svaki pozitivan broj k važi:*

$$n^k(G) = a^k(G) + \sum_S (-1)^{|S|} a^k(G_S), \quad (3.3)$$

gde se sumiranje vrši po svim nepraznim podskupovima S skupa $V - j$, dok $a^k(G)$ i $n^k(G)$ označavaju broj zatvorenih šetnji i broj razapinjućih zatvorenih šetnji dužine k u čvoru j grafa G (i analogno grafa G_S).

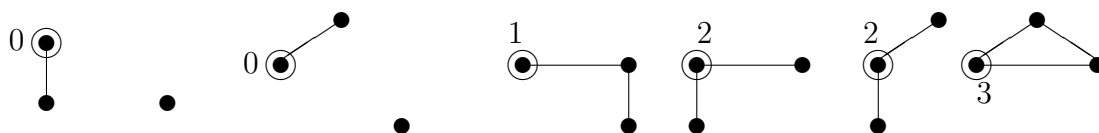
Dokaz. Broj razapinjućih zatvorenih šetnji $n^k(G)$ dobijamo ako od broja zatvorenih šetnji oduzmemo broj onih zatvorenih šetnji grafa G koje ne sadrže barem jedan čvor iz skupa $V - j$. Broj ovih šetnji jednak je broju zatvorenih šetnji u uniji skupova zatvorenih šetnji svih grafova $G_{\{i\}}$, $i \in V - j$. Primenom principa uključenja-isključenja dokazujemo tvrđenje teoreme. ■

Primer 3.2.1 *Teoremu 3.2.1 ilustrovaćemo na primeru grafleta tipa 26, čiji smo skup čvorova označili sa $V = \{x, y, j, z, t\}$ (leva strana Slike 3.2). Indukovane podgrafove grafleta tipa 26 dobijene uklanjanjem jednog čvora različitog od j možemo da označimo sa $G_{\{z\}}$, $G_{\{x\}}$, $G_{\{t\}}$ i $G_{\{y\}}$. Ovi podgrafovi su prikazani sa Slici 3.2.*



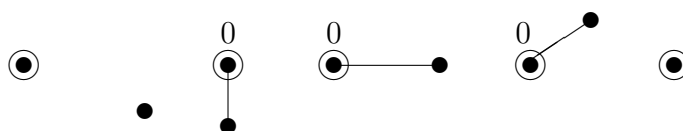
Slika 3.2: Graflet tipa 26 i neki njegovi indukovani podgrafovi

Na sličan način, podgrafove razmatranog grafleta koji su dobijeni uklanjanjem dva čvora različita od čvora j možemo da označimo: $G_{\{x,y\}}$, $G_{\{y,z\}}$, $G_{\{x,z\}}$, $G_{\{x,t\}}$, $G_{\{y,t\}}$ i $G_{\{z,t\}}$ (Slika 3.3).



Slika 3.3: Indukovani podgrafovi reda 3

Svi indukovani podgrafovi razmatranog grafleta sa dva čvora od kojih je jedan j označeni su sa $G_{\{x,y,z\}}$, $G_{\{x,y,t\}}$, $G_{\{x,z,t\}}$, $G_{\{y,z,t\}}$, dok je indukovani podgraf dobijen uklanjanjem četiri čvora od kojih ni jedan nije j označen sa $G_{\{x,y,z,t\}}$. Ovi podgrafovi prikazani su na Slici 3.4.



Slika 3.4: Indukovani podgrafovi reda 2 i reda 1

Prema formuli (3.3), odnosno prema principu uključenja-isključenja, nalazimo da je broj svih razapinjućih zatvorenih šetnji za koren 26 jednak:

$$n_{26}^k = a_{26}^k - (a_{10}^k + a_5^k + a_{11}^k + a_2^k) + (a_0^k + a_0^k + a_1^k + a_2^k + a_2^k + a_3^k) - (a_0^k + a_0^k + a_0^k),$$

odnosno

$$n_{26}^k = a_{26}^k - a_{11}^k - a_{10}^k - a_5^k + a_3^k + a_2^k + a_1^k - a_0^k.$$

Napomena 3.2.1 Brojevi razapinjućih zatvorenih šetnji za sve ostale graflete do pet čvorova izračunati pomoću principa uključenja-isključenja, odnosno Teoreme 3.2.1, dati su u Dodatku C.

Posledica 3.2.1 Za prazan skup \emptyset imamo da je $G_\emptyset = G$, pa važi sledeća formula:

$$n^k(G) = \sum_S (-1)^{|S|} a^k(G_S),$$

gde se sumiranje vrši po svim podskupovima S skupa $V - j$. ■

Pod pretpostavkama iz Teoreme 3.2.1, imamo:

Tvrđenje 3.2.1 Za svaki pozitivan ceo broj k važi:

$$n^k(G) = a^k(G) - \sum_S n^k(G_S), \quad (3.4)$$

gde se sumiranje vrši po svim nepraznim podskupovima S skupa $V - j$.

Dokaz. Broj razapinjućih zatvorenih šetnji $n^k(G)$ u korenu j grafa G dobijamo ako od broja svih zatvorenih šetnji $a^k(G)$ u čvoru j oduzmemo broj zatvorenih šetnji koje nisu razapinjuće. Ove šetnje su upravo razapinjuće zatvorene šetnje u graflima grafa G . ■

Napomena 3.2.2 Brojevi razapinjućih zatvorenih šetnji za grafile 0-72 (Slika 3.5) izračunati na prethodno opisan način dati su u Dodatku C.

Napomena 3.2.3 Takođe, možemo da odredimo i algebarske izraze za brojeve razapinjućih zatvorenih šetnji u određenom korenu grafa izračunavanjem k -tog stepena odgovarajuće matrice susedstva i primenom Tvrđenja 3.2.1. Na primer, k -ti stepen matrice susedstva A_0 grafleta G_0 iz [64] je:

$$A_0^k = \frac{1}{2} (1 - (-1)^k) A + \frac{1}{2} (1 + (-1)^k) I,$$

gde je I jedinična matrica. Broj svih zatvorenih šetnji dužine k u korenu 0 je: $a_0^k = \frac{1}{2} (1 + (-1)^k)$, $k = 1, 2, \dots$, pa je broj svih razapinjućih zatvorenih šetnji dužine k u korenu 0: $n_0^k = 1$, za $k = 2l$ i $l = 1, 2, \dots$, odnosno $n_0^k = 0$, ako je $k = 2l + 1$ i $l = 1, 2, \dots$

Na sličan način nalazimo da je k -ti stepen matrice susedstva A_1 grafleta G_1 iz [64] sledećeg oblika:

$$A_1^k = \frac{(\sqrt{2})^k}{4} (1 + (-1)^k) A^2 + \frac{(\sqrt{2})^{k-1}}{2} (1 - (-1)^k) A,$$

pa je broj svih zatvorenih šetnji dužine k u čvorovima 1 i 2 jednak:

$$a_1^k = \frac{(\sqrt{2})^k}{4} (1 + (-1)^k)$$

i

$$a_2^k = \frac{(\sqrt{2})^k}{2} (1 + (-1)^k),$$

respektivno. Prema Tvrdjenju 3.2.1, imamo da je: $n_1^{2k} = a_1^{2k} - n_0^{2k} = 2^{k-1} - 1$ i $n_1^{2k+1} = a_1^{2k+1} - n_0^{2k+1} = 0$, za $k = 2, 3, \dots$, i takođe $n_2^{2k} = a_2^{2k} - 2n_0^{2k} = 2^k - 2$ i $n_2^{2k+1} = a_2^{2k+1} - 2n_0^{2k+1} = 0$, za $k = 2, 3, \dots$

Ako nastavimo izračunavanje na prethodno opisan način, nalazimo, na primer, da je:

$$n_{17}^k = \frac{1}{30}(1 + (-1)^k)(15 \cdot 2^{k/2} + 10 \cdot 3^{k/2} + 3(\frac{1}{2}(3 - \sqrt{5}))^{k/2}(\sqrt{5} - 5) - 3(\frac{1}{2}(3 + \sqrt{5}))^{k/2}(\sqrt{5} + 5)), \quad k = 8, 9, 10, \dots,$$

$$n_{22}^k = \frac{1}{2}(1 + (-1)^k)(2^{k-2} - (\sqrt{3})^k + \frac{3}{2}(\sqrt{2})^k - 1), \quad k = 8, 9, 10, \dots,$$

$$n_{50}^{2k} = \frac{1}{2}(2^k - 2)(3 - 3 \cdot 2^k + 3^k), \quad k = 3, 4, 5, \dots, \text{ odnosno } n_{50}^{2k+1} = 0, \quad k = 3, 4, 5, \dots$$

Analogni rezultati za sve povezane korenske grafove sa dva do četiri čvora dati su u Dodatku C.

Sada se broj zatvorenih šetnji dužine k u čvoru j grafa G može izračunati na sledeći način:

Teorema 3.2.2 *Za svaki pozitivan ceo broj k i svaki čvor j grafa G imamo:*

$$N_k(j) = \sum_{i=0}^{g-1} n_i^k u_i. \quad (3.5)$$

Dokaz. Svaka zatvorena šetnja w grafa G jeste razapinjuća zatvorena šetnja u jedinstvenom grafletu grafa G koji je indukovano čvorovima šetnje w , i, naravno, svaka razapinjuća zatvorena šetnja u proizvoljnom grafletu grafa G jeste zatvorena šetnja grafa G . ■

Korišćenjem odgovarajućih dijagonalnih elemenata k -tog stepena matrica susjedstva 30 grafova do reda pet, kao i formule (3.5), izračunali smo brojeve zatvorenih šetnji dužine k u čvoru j proizvoljnog grafa G za nekoliko vrednosti parametra k :

$$N_1(j) = 0;$$

$$N_2(j) = u_0;$$

$$N_3(j) = 2u_3;$$

$$N_4(j) = u_0 + (u_1 + 2u_2) + 4u_3 + 2u_8 + (2u_{12} + 3u_{13}) + 6u_{14};$$

$$N_5(j) = 10u_3 + (2u_9 + 2u_{10} + 4u_{11}) + (8u_{12} + 12u_{13}) + 30u_{14} + 2u_{34} + (2u_{51} + 2u_{52} + 2u_{53}) + (2u_{59} + 2u_{60} + 2u_{61}) + (4u_{62} + 4u_{63} + 4u_{64}) + (4u_{65} + 4u_{66} + 4u_{67}) + (8u_{68} + 8u_{69}) + (12u_{70} + 22u_{71}) + 24u_{72};$$

$$N_6(j) = u_0 + (3u_1 + 6u_2) + 20u_3 + (u_4 + 2u_5) + (2u_6 + 6u_7) + 18u_8 + (4u_9 + 5u_{10} + 10u_{11}) + (30u_{12} + 42u_{13}) + 120u_{14} + (2u_{35} + 2u_{36} + 2u_{37} + 4u_{38}) + (2u_{39} + 2u_{40} + 2u_{41} + 4u_{42}) + (4u_{43} + 8u_{44}) + (2u_{45} + 2u_{46} + 4u_{47} + 2u_{48}) + (12u_{49} + 18u_{50}) + (4u_{51} + 4u_{52} + 6u_{53}) + (12u_{54} + 18u_{55}) + (6u_{56} + 6u_{57} + 12u_{58}) + (12u_{59} + 14u_{60} + 20u_{61}) + (16u_{62} + 22u_{63} + 18u_{64}) + (32u_{65} + 34u_{66} + 46u_{67}) + (46u_{68} + 56u_{69}) + (90u_{70} + 108u_{71}) + 216u_{72} + 2h_j.$$

Primetimo da su u zgradama grupisani brojevi razapinjućih zatvorenih šetnji u čvoru j za korene koji pripadaju istom grafu. U poslednjoj jednakosti h_j označava broj šestouglova koji sadrže čvor j .

Napomena 3.2.4 *Kako u bipartitnom grafu ne postoje konture neparne dužine, formule za brojeve zatvorenih šetnji dužine $k = 1, 2, \dots, 6$ u čvoru j imaju nešto jednostavniju formu:*

$$N_1(j) = 0;$$

$$N_2(j) = u_0;$$

$$N_3(j) = 0;$$

$$N_4(j) = u_0 + u_1 + 2u_2 + 2u_8;$$

$$N_5(j) = 0;$$

$$N_6(j) = u_0 + 3u_1 + 6u_2 + u_4 + 2u_5 + 2u_6 + 6u_7 + 18u_8 + 2u_{35} + 2u_{36} + 2u_{37} + 4u_{38} + 12u_{49} + 18u_{50} + 2h_j.$$

Tvrđenje 3.2.2 *Neka je Γ_k skup indeksa grafleta reda k . Za svaki čvor j grafa G imamo:*

$$\sum_{i \in \Gamma_k} n_i^k u_i = 2c_k(j),$$

gde se sumiranje vrši po svim grafletima tipa $i \in \Gamma_k$ sa k čvorova, i gde je $c_k(j)$ broj kontura sa k čvorova koje sadrže čvor j .

Dokaz. U zavisnosti od orijentacije, dve zatvorene šetnje dužine k u čvoru j obilaze konturu reda k koja sadrži čvor j . Na taj način, postoji $2c_k(j)$ takvih šetnji. Svaka od ovih zatvorenih šetnji postoji kao razapinjuća zatvorena šetnja u jedinstvenom grafletu grafa G (koji je indukovano čvorovima date šetnje). U odgovarajućim grafletima ne postoje druge razapinjuće zatvorene šetnje dužine k . Stoga je ukupan broj razapinjućih zatvorenih šetnji dužine k u čvoru j za sve graflete reda k jednak $2c_k(j)$.

■

S obzirom na ovu činjenicu, prethodne formule za brojeve zatvorenih šetnji mogu da se pojednostave:

$$N_3(j) = 2t_j;$$

$$N_4(j) = u_0 + u_1 + 2u_2 + 4u_3 + 2q_j;$$

$$N_5(j) = 10u_3 + 2u_9 + 2u_{10} + 4u_{11} + 8u_{12} + 12u_{13} + 30u_{14} + 2p_j;$$

$$N_6(j) = u_0 + 3u_1 + 6u_2 + 20u_3 + u_4 + 2u_5 + 2u_6 + 6u_7 + 18u_8 + 4u_9 + 5u_{10} + 10u_{11} + 30u_{12} + 42u_{13} + 120u_{14} + 2u_{35} + 2u_{36} + 2u_{37} + 4u_{38} + 2u_{39} + 2u_{40} + 2u_{41} + 4u_{42} + 4u_{43} + 8u_{44} + 2u_{45} + 2u_{46} + 4u_{47} + 2u_{48} + 12u_{49} + 18u_{50} + 4u_{51} + 4u_{52} + 6u_{53} + 12u_{54} + 18u_{55} + 6u_{56} + 6u_{57} + 12u_{58} + 12u_{59} + 14u_{60} + 20u_{61} + 16u_{62} + 22u_{63} + 18u_{64} + 32u_{65} + 34u_{66} + 46u_{67} + 46u_{68} + 56u_{69} + 90u_{70} + 108u_{71} + 216u_{72} + 2h_j,$$

gde $t_j = c_3(j)$, $q_j = c_4(j)$, $p_j = c_5(j)$ i $h_j = c_6(j)$ označava broj trouglova koji sadrže čvor j , broj četvorouglova koji sadrže čvor j , broj petouglova koji sadrže čvor j i broj šestouglova koji sadrže čvor j , respektivno. Tako, na primer, vidimo da u grafetima tipa 8, 12, 13 i 14 zatvorene šetnje dužine 4 obilaze konturu sa četiri čvora. Ove šetnje su razapinjuće zatvorene šetnje. U zavisnosti od orijentacije, postoji $2q_j$ takvih šetnji, i u navedenim grafetima nema drugih razapinjućih zatvorenih šetnji dužine 4. U ostalim grafetima reda 4, odnosno grafetima tipa 4, 5, 6, 7, 9, 10 i 11 ne postoje razapinjuće zatvorene šetnje dužine 4.

3.3 Poravnavanje mreža

3.3.1 Osnovni pojmovi

Mreže se obično definišu kao grafovi sa velikim brojem čvorova i služe kao modeli za najrazličitije relacije, procese i fenomene iz raznih istraživačkih domena, kao što su računarske nauke, lingvistika, hemija i fizika, sociologija i biologija. U računarskim naukama, na primer, grafovima se predstavljaju komunikacijske mreže ili načini organizacije podataka. Graf je prirodan model molekula, gde su atomi predstavljeni čvorovima grafa a veze između njih granama grafa. Kao posledica upotrebe grafova u sociološkim naukama, nastali su razni tipovi *grafova socijalnih grupa* (engl. *social network graphs*). Tako *grafovi prijateljstva* (engl. *friendship graphs*) reprezentuju da li se ljudi iz date grupe ljudi poznaju, dok se *grafovima saradnje* (engl. *collaboration graphs*) modeluje međusobna kooperacija ljudi.

Analizom bioloških mreža može se steći bolji uvid u evoluciju, proteinsku i ćelijsku funkciju, kao i proteinske interakcije, što za posledicu ima predviđanje toka bolesti, sintezu novih medikamenata, kao i sveukupno bolje razumevanje biologije i evolucije uopšte. Brojna biološka teorijska i praktična istraživanja rezultirala su različitim tipovima bioloških mreža, kao što su *mreže za kontrolu gena* (engl. *gene regulatory networks*), *metaboličke mreže* (engl. *metabolic networks*), *neuronske mreže* (engl. *neuronal networks*), i druge. Najintenzivnije proučavane jesu *mreže proteinskih interakcija* (engl. *protein-protein interaction (PPI) networks*), koje se modeluju neorijentisanim netežinskim grafom, čiji skup čvorova reprezentuje skup proteina, dok skup grana grafa predstavlja njihove međusobne reakcije. U nastavku teksta ćemo ove mreže kraće zvati PPI mreže.

Komparativne analize, posebno bioloških, mreža predstavljaju jedan od najvećih izazova za današnje naučnike i istraživače. Međutim, poređenje velikih grafova je računski neizvodljivo zato što zahteva rešavanje *problema izomorfizma podgrafova* (engl. *subgraph isomorphism problem*): da li jedan graf postoji kao tačan podgraf u drugom grafu? Kako je ovakav problem NP-kompletan, potrebno je razviti strategije heurističkog tipa za njegovo približno rešavanje. *Poravnavanje mreža* je jedna od njih.

Glavni zadatak pri poravnavanju mreža jeste definisanje jednog ili više mogućih preslikavanja, ili mapiranja, između čvorova poredbenih mreža. Ovakva preslikavanja ne moraju obavezno da budu definisana za sve čvorove u mreži. Na taj način, poravnavanjem mreža pokušavamo da odredimo što je moguće veći zajednički podgraf za dve poredbene mreže. Grane ovog podgrafova odgovaraju tzv. očuvanim granama, odnosno granama koje su ostale nepromenjene u odnosu na definisana preslikavanja. Razlikujemo dva tipa algoritama za poravnavanje mreža, u zavisnosti od prirode preslikavanja - lokalni i globalni algoritmi za poravnavanje mreža. *Lokalnim poravnavanjem* otkrivaju se lokalne regije sličnosti poredbenih mreža. Sa druge strane, uz pomoć *algoritama za globalno poravnavanje mreža* svaki čvor iz jedne od mreža uparuje se sa nekim čvorom iz druge mreže, ili se pak označava kao "usamljen" čvor (engl. *gap node*), odnosno čvor bez parnjaka u drugoj mreži (vidi, na primer, [84]). Algoritmi globalnog poravnavanja mreža, dakle, podrazumevaju postojanje jedinstvenog preslikavanja za sve delove razmatrane mreže. Na taj način, globalno poravnavanje dve mreže $G = (V_G, E_G)$ i $H = (V_H, E_H)$, takve da je $|V_G| < |V_H|$, jeste skup uređenih parova (i, j) , gde je $i \in V_G$ i $j \in V_H$, takvih da ni jedna dva uređena para nemaju zajednički čvor. Svaki takav uređen par nazivamo *poravnati par* (engl.

aligned pair, vidi, na primer, [70] ili [71]).

Poslednjih godina razvijeni su brojni algoritmi za globalno poravnavanje mreža, i većina je implementirana na poravnavanje PPI mreža. Prvi među njima bio je *IsoRank* (vidi [84]), čijim je novijim verzijama moguće lokalno i globalno poravnati mnogostruke mreže (vidi [68]). Zatim slede PATH i GA algoritmi (vidi [93]), potom algoritmi koji mogu da poravnaju bilo koji tip mreža ne samo biološke, kao što su GRAAL (engl. *GRAph ALigner*, vidi [64]) i H-GRAAL (engl. *Hungarian-algorithm-based GRAAL*, vidi [71]), i naposletku njihove unapređene verzije MI-GRAAL (engl. *Matching-based Integrative GRAph ALigner*, vidi [65]), koji upotrebljava bilo koji broj i tip mera sličnosti između čvorova i C-GRAAL (engl. *Common-neighbors based GRAph ALigner*, vidi [70]), kod koga mere sličnosti zavise jedino od topologije razmatrane mreže, itd. U opštem slučaju, svi ovi algoritmi se realizuju u dve faze. U prvoj fazi se izračunava mera sličnosti između čvorova mreže G i čvorova mreže H . Potom se u drugoj fazi, shodno određenoj meri sličnosti, definišu preslikavanja između čvorova mreža, odnosno konstruišu se tzv. poravnati parovi čvorova. Primećimo da se pri definisanju mere sličnosti između čvorova uvek uzima u obzir susedstvo odgovarajućih čvorova, kao i da mere sličnosti mahom nisu spektralno zasnovane, izuzev, na primer, u slučaju *IsoRank* algoritma.

U [18] i [55] predložena je nova mera sličnosti za čvorove poredbenih mreža. Naime, mera sličnosti između čvora i mreže G i čvora j mreže H trebalo bi da bude zasnovana na razlici $\mathcal{H}_i^G(t) - \mathcal{H}_j^H(t)$ funkcija generatrisa za brojeve zatvorenih šetnji u datim čvorovima. Na taj način, predložena mera sličnosti bila bi spektralno okarakterisana i, naravno, uzimala bi u obzir susedstvo čvorova koje bi u ovom slučaju bilo prošireno na čitav graf, za razliku od nekih mera sličnosti gde je susedstvo ograničeno, kao na primer u [64]. Stoga ćemo u ovom odeljku, između ostalog, ukazati na neke prednosti ovakvog pristupa poravnavanju mreža, i sa teorijskog aspekta ga uporediti sa postojećim algoritmima za globalno poravnavanje mreža.

3.3.2 Neki algoritmi za globalno poravnavanje mreža

Kao što smo videli u uvodnom delu ovog odeljka, poravnavanjem mreža, u opštem slučaju, pokušavamo da ustanovimo da li između datih mreža postoji neka sličnost. U opštem slučaju, algoritmi za globalno poravnavanje mreža realizuju se u dve faze.

U okviru prve faze se za čvorove datih grafova $G = (V_G, E_G)$ i $H = (V_H, E_H)$

definiše mera sličnosti, s tim da se uvek uzima u obzir susedstvo odgovarajućih čvorova. Tako se, na primer, čvorovi istog stepena smatraju sličnijim od čvorova čiji se stepeni razlikuju. Označimo sa $R_{i,j}$ meru sličnosti između čvora i grafa G i čvora j grafa H . Neka je B težinski bipartitni graf, čiji je skup čvorova $V_B = V_G \cup V_H$ i čije grane imaju težinu $R_{i,j}$. U okviru druge faze optimalnog poravnavanja mreža uz pomoć postojećih algoritama kombinatorne optimizacije (vidi, na primer, [76]) za problem pridruživanja, među kojima je Mađarski algoritam (engl. *Hungarian algorithm*) jedan od najčešće korišćenih, u bipartitnom grafu B određuje se maksimalno sparivanje. Ovim sparivanjem određeni su podgrafovi grafova G i H koji se smatraju sličnim shodno definisanoj meri sličnosti između čvorova. Neki od algoritama za globalno poravnavanje mreža zasnovani su na drugačijem, tzv. pohlepnom (engl. *seed-and-extend*) pristupu u drugoj fazi.

Prvi algoritam za globalno poravnavanje mreža bio je *IsoRank*. Optimalno globalno poravnavanje dveju mreža zasnovano je na heuristici po kojoj čvorovi i i j treba da budu upareni jedino ukoliko se njihovi susedi mogu dobro upariti (vidi [84]). Mera sličnosti realizovana u ovom algoritmu za svaki par čvorova (i, j) jednaka je sumi prosečnih vrednostih mera sličnosti svih parova čvorova (u, v) , gde je u sused čvora i a v sused čvora j . Drugim rečima, važi sledeća formula:

$$R_{i,j} = \sum_{u \in N(i)} \sum_{v \in N(j)} \frac{1}{|N(u)||N(v)|} R_{u,v},$$

za $i \in V_G$ i $j \in V_H$, i gde je sa $N(a)$ označen skup suseda čvora a .

Ovaj algoritam koristi sopstvene vektore, i sličan je algoritmu *PageRank* koji se koristi u internet pretrazi (vidi [10]). Mera sličnosti $R_{i,j}$ je spektralno okarakterisana, zato što je vektor sačinjen od svih $R_{i,j}$, za $i \in V_G$ i $j \in V_H$ glavni sopstveni vektor matrice A reda $|V_G||V_H| \times |V_G||V_H|$, koja je definisana na sledeći način: $A[i, j][u, v] = \frac{1}{|N(u)||N(v)|}$, ako je $\{i, u\} \in E_G$ i $\{j, v\} \in E_H$, i $A[i, j][u, v] = 0$, inače. Glavni sopstveni vektor grafa sa matricom susedstva velikih dimenzija može se efikasno odrediti uz pomoć iterativnog algoritma *Stepena metoda* (engl. *Power method*, vidi, na primer [40]). Po izračunavanju glavnog sopstvenog vektora, pristupa se određivanju poravnatih parova čvorova rešavanjem *problema maksimalnog sparivanja* (engl. *maximum-weight matching problem*) u bipartitnom grafu, kao što je prethodno naznačeno.

Sličan koncept pri definisanju mere sličnosti za čvorove dva digrafa predložen je u [9] i upotrebljen za identifikovanje sinonima u rečniku. Ukoliko bismo predloženim

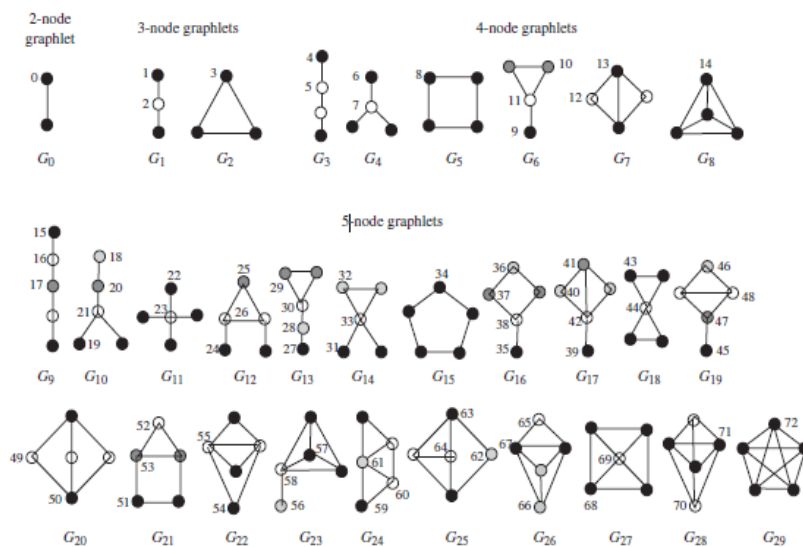
postupkom razmatrali neorijentisane grafove, dobili bismo upravo metod izložen u okviru *IsoRank*-a.

Strategija slična onoj koja je u okviru druge faze *IsoRank* algoritma korišćena za određivanje poravnatih parova čvorova rešavanjem problema maksimalnog sparivanja u bipartitnom težinskom grafu pomoću algoritama za optimalno sparivanje, kao što je Mađarski algoritam, implementirana je i u algoritmu H-GRAAL (vidi [71]), a poslužila je i za rešavanje *problema uparivanja čvorova mreža* (engl. *node matching problem*) (vidi [91]).

Problem uparivanja čvorova suštinski je isti kao i problem poravnavanja mreža. Glavni zadatak je određivanje parova uparenih čvorova poredbenih mreža, odnosno parova poravnatih čvorova. Međutim, dok se kod poravnavanja mreža za to pozivamo samo na strukturalne ili topološke osobine razmatranih mreža, kod problema uparivanja čvorova koristimo i tzv. *otkrivene uparene čvorove* (engl. *revealed matched nodes*), odnosno parove čvorova koji su prethodno određeni za sparivanje. Skup čvorova koji su već određeni za sparivanje sastoji se od parova čvorova čija prva komponenta odgovara čvoru sa većim stepenom u referentnoj mreži, dok druga komponenta odgovara čvoru izabranom u drugoj mreži nekom metodom koja je u skladu sa prirodom razmatrane mreže. Mera sličnosti svakog od parova čvorova koji nisu parovi prethodno uparenih čvorova izračunava se u zavisnosti od broja otkrivenih uparenih čvorova koji postoje u okolini datog para. U [91] je za takvo izračunavanje primenjen Jaccard-ov indeks (vidi [53]).

U drugoj fazi H-GRAAL algoritma upotrebljava se Mađarski algoritam kako bi se odredilo maksimalno sparivanje u bipartitnom težinskom grafu shodno uvedenoj meri sličnosti za čvorove poredbenih mreža. Težinska funkcija (engl. *cost function*) ovde je zasnovana na *sličnosti potpisa* (engl. *signature similarity*) između čvorova poredbenih mreža. To znači da je svaki čvor mreže okarakterisan 73-dimenzionalnim vektorom *stepena grafljeta* (engl. *graphlet degrees*), koji opisuje topologiju susedstva datog čvora. Ramotrimo nešto detaljnije novouvedene pojmove.

U prethodnom odeljku graffet smo definisali kao povezani indukovani korenski podgraf razmatranog grafa. Takođe, pod pretpostavkom da među graffletima postoji njih g međusobno neizomorfni, kao i da su neizomorfni graffleti na proizvoljan način indeksirani sa $0, 1, \dots, g - 1$, graffet sa indeksom k označili smo kao graffet tipa k . Algoritam H-GRAAL (vidi [71]), kao i GRAAL (vidi [64]), u implementaciji koriste grafflete do reda pet. Kako među trideset povezanih grafova sa dva do pet čvorova postoje 73 različita korena, to se u prethodno spomenutim algoritmima pravi razlika



Slika 3.5: Grafljeti do reda pet sa numerisanim korenima iz [64]

između 73 tipa grafljeta. Na taj način, indeks k odgovara jednom od 73 korena koji su numerisani brojevima $0, 1, \dots, 72$ i prikazani su na Slici 3.5. Kao i ranije, sa u_k^i označimo broj grafljeta tipa k kod čvora i . Tada k -ta koordinata u_k^i pomenutog 73-dimenzionalnog vektora predstavlja broj grafljeta tipa k (odnosno stepen grafljeta prema terminologiji uvedenoj u [71] i [64]) u čijem korenu je uočeni čvor i . Ovaj vektor se naziva *potpis* (engl. *signature*) čvora i .

Težina koja je pridružena grani $\{i, j\}$, za svaki par čvorova $i \in V_G$ i $j \in V_H$ bipartitnog grafa u kome se u okviru druge faze H-GRAAL algoritma određuje sparivanje minimalne težine, predstavljena je sledećom težinskom funkcijom:

$$C(i, j) = 2 - ((1 - \alpha)T(i, j) + \alpha S(i, j)).$$

U navedenoj formuli je:

$$T(i, j) = \frac{d_i + d_j}{\max_{i \in V_G} d_i + \max_{j \in V_H} d_j},$$

gde d_i označava stepen čvora i , dok je $\max_{i \in V_G} d_i$ maksimalni stepen čvora u grafu G (i analogno, grafu H); $S(i, j)$ predstavlja sličnost potpisa čvorova i i j , dok se parametrom $\alpha \in [0, 1]$ kontroliše doprinos sličnosti potpisa čvorova i i j . U ovom, kao i u sledećem pododeljku, pretpostavljaćemo da su skupovi čvorova V_G i V_H grafova G i H disjunktni, tako da su sve veličine indeksirane sa i i j u vezi sa grafovima G i H , respektivno.

Sličnost potpisa $S(i, j)$ čvorova i i j izračunava se na sledeći način: $S(i, j) =$

$1 - D(i, j)$. Ovde je $D(i, j)$ *totalno rastojanje* (engl. *total distance*) između čvorova i i j , i dato je sledećom formulom:

$$D(i, j) = \frac{\sum_{k=0}^{72} D_k(i, j)}{\sum_{k=0}^{72} w_k}.$$

Veličina w_k jeste *težina grafleta tipa k* (engl. *the weight of the graphlet of type k*), i definisana je sa (vidi [72]):

$$w_k = 1 - \frac{\log(o_k)}{\log(73)}.$$

Celobrojna vrednost o_k označava broj povezanih indukovanih korenskih podgrafova grafleta tipa k koji imaju koren u istom čvoru kao i graflet tipa k , uključujući i sam graflet. Tako je, na primer, $o_{16} = 6$, jer su grafleti tipa 0, 1, 2, 4, 5 i 16 povezani indukovani korenski podgrafovi grafleta tipa 16 sa korenom u istom čvoru. Računski rezultati (vidi Dodatak C) pokazuju da vrednosti w_k pripadaju intervalu $[0.488, 0.838]$, izuzev za $w_0 = 1$. Tako imamo da je $w_{53} = w_{60} = 0.488$ i $w_1 = w_2 = w_3 = 0.838$. Ukoliko uvedemo oznaku $w = \sum_{k=0}^{72} w_k$, iz računskih rezultata nalazimo da je $w \approx 45.135$.

Rastojanje $D_k(i, j)$ između k -tih koordinata 73-dimenzionalnih vektora stepena grafleta koji su pridruženi čvorovima i i j dato je sledećom formulom:

$$D_k(i, j) = w_k \frac{|\log(u_k^i + 1) - \log(u_k^j + 1)|}{\log(\max(u_k^i, u_k^j) + 2)}.$$

Uvođenjem funkcije $LD(x, y) = \frac{|\log(x+1) - \log(y+1)|}{\log(\max(x, y) + 2)}$, formula za totalno rastojanje postaje:

$$\begin{aligned} D(i, j) &= \frac{1}{w} \sum_{k=0}^{72} D_k(i, j) = 0.022 \sum_{k=0}^{72} D_k(i, j) = \\ &0.022 \times (w_0 LD(u_0^i, u_0^j) + w_1 LD(u_1^i, u_1^j) + w_2 LD(u_2^i, u_2^j) + \dots) = \\ &0.022 \times (LD(d_i, d_j) + 0.838 LD(u_1^i, u_1^j) + 0.838 LD\left(\binom{d_i}{2} - t_i, \binom{d_j}{2} - t_j\right) \\ &+ 0.838 LD(t_i, t_j) + 0.744 LD(u_4^i, u_4^j) + \dots) = \\ &0.022 LD(d_i, d_j) + 0.018 LD(u_1^i, u_1^j) + 0.018 LD\left(\binom{d_i}{2} - t_i, \binom{d_j}{2} - t_j\right) \\ &+ 0.018 LD(t_i, t_j) + 0.016 LD(u_4^i, u_4^j) + \dots, \end{aligned}$$

gde d_l i t_l označavaju stepen čvora l i broj trouglova koji sadrže čvor l , respektivno. Numeričke vrednosti navedene u prethodnoj formuli zaokružene su na tri decimale.

Stiče se utisak da je formula za $D(i, j)$ pomalo veštački konstruisana. Naime, nije sasvim jasno kada je $D(i, j) = 1$, iako vrednosti totalnog rastojanja pripadaju intervalu $[0, 1]$. Takođe, može se desiti da za sve parove čvorova i, j vrednost totalnog rastojanja bude znatno manja od 1. Pored toga, težine w_k su u relativno suženom intervalu, što znači da učestalosti pojedinih graffleta nisu dobro balansirane.

U radu [71] se, između ostalog, u okviru prve faze predlaže primena dinamičke verzije Mađarskog algoritma. Perturbacija neznatnog broja težina grana u grafu polaznog problema, za koje je poznato optimalno sparivanje, imala bi kao posledicu novu verziju algoritma koji podseća na problem uparivanja čvorova i koji može da se izvrši brzinom $O(n^2)$. Nadalje, u radu [64] kao još jedno od rešenja predlaže se dodavanje proteinske sekvence kao nove komponente vrednosnoj funkciji, što bi rezultiralo eventualno boljim poravnavanjem PPI mreža. Međutim, jedna od glavnih prednosti algoritma GRAAL jeste upravo ta što ne postoji potreba za implementiranjem ovakve vrste podataka, tako da se ovim algoritmom mogu poravnati bilo koje dve mreže, ne nužno biološke.

Dok se praktično podudaraju u prvoj fazi, druga faza algoritama H-GRAAL i GRAAL je potpuno različita. Naime, algoritmom H-GRAAL se dobija optimalno poravnavanje mreža, dok algoritam GRAAL predstavlja pohlepni pristup problemu poravnavanja mreža (vidi [64]). To znači da se na početku druge faze iz razmatranih mreža bira par čvorova sa velikom sličnošću stepena graffleta. Dati par se smatra inicijalnim semenom. Potom se pohlepno poravnava što je moguće veći deo mreže oko semena.

Algoritam GRAAL je unapređen, pa tako govorimo o novim i poboljšanim algoritmima za globalno poravnavanje mreža koji su svi jednaki u drugoj fazi, odnosno imaju tzv. pohlepni pristup. Jedan od takvih je i algoritam MI-GRAAL koji je nastao poboljšanjem prve faze algoritma GRAAL, pa tako postoji mogućnost integracije proizvoljnog broja i tipova mera sličnosti čvorova poredbenih mreža. Kao rezultat dobijamo *postojana poravnanja* (engl. *stable alignments*), odnosno poravnavanja koja su veoma slična za sva pokretanja algoritma. Algoritmom C-GRAAL se pri izboru semena koristi mera označena kao *kombinovana koncentracija susedstva* (engl. *combined neighbour density*) i isključivo je zasnovana na topologiji razmatrane mreže. Veća kombinovana koncentracija susedstva između dva čvora ekvivalentna je većoj topološkoj sličnosti njihovih proširenih susedstava do rastojanja 2, za razliku od strategije sa graffletima gde je spomenuto rastojanje 4.

Prethodno opisani algoritmi sumirani su u Tabeli 3.1 shodno sličnostima u jednoj

od dve faze realizacije.

Tabela 3.1: Neki algoritmi za globalno poravnavanje mreža

faza 1	faza 2	
	optimalno sparivanje	pohlepno sparivanje
H-GRAAL	<i>IsoRank</i>	GRAAL
	H-GRAAL	MI-GRAAL
	<i>Optimal node matching algorithm</i>	C-GRAAL
GRAAL		

3.3.3 Novi pristup poravnavanju mreža

U nastavku odeljka izložićemo jedan novi pristup poravnavanju mreža. Ideja prezentovana na teorijskom nivou odnosi se na prvu fazu postojećih algoritama za globalno poravnavanje mreža.

Za razliku od, na primer, algoritma H-GRAAL u čijoj je prvoj fazi svaki čvor mreže okarakterisan 73-dimenzionalnim vektorom stepena graffleta, u [27] i [55] predloženo je da u problemima poravnavanja čvorovi mreža budu okarakterisani funkcijama generatrisama $\mathcal{H}_j(t)$ za brojeve zatvorenih šetnji. Ove funkcije zavise od susedstva čvorova kojima su pridružene, a koja su za razliku od metoda sa graffletima iz GRAAL-a i H-GRAAL-a proširena na ceo graf. Smatramo da bi definicija mere sličnosti između čvorova i i j mogla da se zasniva na razlici $\mathcal{H}_i^G(t) - \mathcal{H}_j^H(t)$ funkcija generatrisa za brojeve zatvorenih šetnji u čvoru i grafa G odnosno čvoru j grafa H , koje tretiramo algoritmima za poravnavanje. Preciznije, za dovoljno malu pozitivnu vrednost t_0 predlažemo sledeću formulu:

$$d(i, j) = A |\mathcal{H}_i^G(t_0) - \mathcal{H}_j^H(t_0)|. \quad (3.6)$$

Ovde je A izabrano tako da je maksimalna vrednost $d(i, j)$ po svim parovima čvorova (i, j) jednaka 1. Primetimo da izbor vrednosti A zavisi od vrednosti t_0 . Na taj način rastojanje uvek može da dostigne vrednost 1, što ne mora da bude slučaj kod metoda sa graffletima.

Vrednost t_0 može da se izabere u intervalu $(0, R)$, gde je R radijus konvergencije sledećeg stepenog reda:

$$\mathcal{H}_i^G(t) - \mathcal{H}_j^H(t) = \sum_{k=0}^{+\infty} (N_k^G(i) - N_k^H(j)) t^k = \sum_{k=0}^{+\infty} \left(\sum_{p=1}^{m_G} (\nu_p^G)^k (\alpha_{pi}^G)^2 - \sum_{q=1}^{m_H} (\nu_q^H)^k (\alpha_{qj}^H)^2 \right).$$

U gornjoj formuli, $N_k^G(s)$ ($N_k^H(s)$) označava broj zatvorenih šetnji dužine k u čvoru s grafa G (H), m_G i m_H su brojevi različitih sopstvenih vrednosti grafova G i H , respektivno, dok ν_p^G i α_{pi}^G , za $p = 1, 2, \dots, m_G$ i $i = 1, 2, \dots, |V(G)|$, predstavljaju različite sopstvene vrednosti i uglove grafa G (i analogno za graf H). Lako se može zaključiti da ukoliko je $\nu_1^G > \nu_1^H$, onda je $R = \frac{1}{\nu_1^G}$, i analogno, ako je $\nu_1^G < \nu_1^H$, radijus konvergencije će biti $R = \frac{1}{\nu_1^H}$. U slučaju kada je $\nu_1^G = \nu_1^H$, radijus konvergencije je $R = \frac{1}{\nu_1^G}$ ako važi $\alpha_{1i}^G \neq \alpha_{1j}^H$, dok će u suprotnom vrednost radijusa konvergencije zavisiti od odnosa drugih najvećih različitih sopstvenih vrednosti grafova G i H , slično kao u prethodnoj situaciji. Na taj način, možemo da pretpostavimo da vrednost t_0 pripada intervalu $\left(0, \frac{1}{\max\{\nu_1^G, \nu_1^H\}}\right)$.

Primenom formula izloženih u prethodnom odeljku za brojeve zatvorenih šetnji dužine 2-6 u čvoru j grafa G , relacija za rastojanje (3.6), postaje:

$$\begin{aligned} d(i, j) &= A \left| \mathcal{H}_i^G(t_0) - \mathcal{H}_j^H(t_0) \right| = \\ &= A \left| \sum_{k=0}^{+\infty} (N_k^G(i) - N_k^H(j)) t_0^k \right| = \\ &= A \left| (N_2^G(i) - N_2^H(j)) t_0^2 + (N_3^G(i) - N_3^H(j)) t_0^3 + (N_4^G(i) - N_4^H(j)) t_0^4 + \right. \\ &\quad \left. + (N_5^G(i) - N_5^H(j)) t_0^5 + \dots \right| = \tag{3.7} \\ &= A t_0^2 \left| (d_i - d_j) + 2(t_i - t_j) t_0 + ((d_i - d_j) + (u_1^i - u_1^j) + 2(u_2^i - u_2^j) + \right. \\ &\quad \left. 4(t_i - t_j) + 2(q_i - q_j)) t_0^2 + (10(t_i - t_j) + 2(u_9^i - u_9^j) + 2(u_{10}^i - u_{10}^j) + \right. \\ &\quad \left. 4(u_{11}^i - u_{11}^j) + 8(u_{12}^i - u_{12}^j) + 12(u_{13}^i - u_{13}^j) + 30(u_{14}^i - u_{14}^j) + \right. \\ &\quad \left. 2(p_i - p_j)) t_0^3 + \dots \right|. \end{aligned}$$

Naglasimo da u formuli (3.7) gornji indeksi i i j veličine u_s , označavaju pripadnost grafu G i grafu H , respektivno. S obzirom da je vrednost parametra t_0 praktično jako mala, sabirci koji sadrže t_0^k , za $k \geq 5$ u formuli (3.7) mogu da se zanemare, pa dobijamo:

$$\begin{aligned} d(i, j) &\approx A t_0^2 \left| (1 + t_0^2)(d_i - d_j) + t_0^2(u_1^i - u_1^j) + 2t_0^2(u_2^i - u_2^j) + \right. \\ &\quad \left. + 2t_0(1 + 2t_0 + 5t_0^2)(t_i - t_j) + 2t_0^2(q_i - q_j) \right|. \end{aligned}$$

Kako je $u_2^l + t_l = \binom{d_l}{2}$, to imamo:

$$d(i, j) \approx A t_0^2 |(d_i - d_j)(1 + t_0^2(d_i + d_j)) + t_0^2(u_1^i - u_1^j) + 2t_0(1 + t_0 + 5t_0^2)(t_i - t_j) + 2t_0^2(q_i - q_j)|.$$

Stoga, izostavljanjem sabiraka sa t_0^5 , formula (3.7) konačno postaje:

$$\begin{aligned} d(i, j) = & A t_0^2 |(1 + t_0^2)(d_i - d_j) + t_0^2(u_1^i - u_1^j) + 2 t_0^2(u_2^i - u_2^j) + \\ & 2 t_0(1 + 2t_0 + 5t_0^2)(t_i - t_j) + 2 t_0^2(q_i - q_j) + 2 t_0^3(u_9^i - u_9^j) + \\ & 2 t_0^3(u_{10}^i - u_{10}^j) + 4 t_0^3(u_{11}^i - u_{11}^j) + 8 t_0^3(u_{12}^i - u_{12}^j) + 12 t_0^3(u_{13}^i - u_{13}^j) + \\ & 30 t_0^3(u_{14}^i - u_{14}^j) + 2 t_0^3(p_i - p_j) + \dots|. \end{aligned}$$

Vidimo da rastojanje $d(i, j)$ zavisi od strukturalnih parametara koji karakterišu susedstva čvorova i i j . Čini se da samo neki grafiti utiču, odnosno doprinose novouvedenoj meri sličnosti između čvorova. Naravno, i članovi višeg reda, čiji je doprinos regulisan izborom t_0 , mogu se u (3.7) uzeti u razmatranje. Što je veća vrednost parametra t_0 , biće veća dužina zatvorenih šetnji, koje će značajno uticati na rastojanje $d(i, j)$.

Ovaj pododeljak zaključujemo nesto opštijim rezultatom. Iz Teoreme 3.2.2, nalazimo da je:

$$\mathcal{H}_j(t) = \sum_{k=0}^{\infty} N_k(j) t^k = \sum_{k=0}^{\infty} t^k \sum_{i=0}^{g-1} n_i^k u_i = \sum_{i=0}^{g-1} u_i \sum_{k=0}^{\infty} n_i^k t^k.$$

Ako sa $S_i(t) = \sum_{k=0}^{\infty} n_i^k t^k$ označimo funkciju generatrisu za brojeve n_i^k razapinjućih zatvorenih šetnji dužine k grafiteta tipa i , imamo da je

$$\mathcal{H}_j(t) = \sum_{i=0}^{g-1} u_i S_i(t).$$

Na taj način je dokazana sledeća:

Teorema 3.3.1 *Važi da je: $d(i, j) = A |\sum_{s=0}^{g-1} (u_s^i - u_s^j) S_s(t_0)|$.*

3.3.4 Analiza kompleksnosti

U nastavku upoređujemo brzine izvršavanja prvih faza nekih od prethodno opisanih algoritama za globalno poravnavanje mreža.

Kao što smo videli, u algoritmima GRAAL i H-GRAAL se pri definisanju mere sličnosti između čvorova poredbenih mreža koriste 73-dimenzionalni vektori stepena graflleta. Spomenutim algoritmima traže se graflleti do reda pet u određenom grafu sa n čvorova. Broj graflleta reda pet jednak je $\binom{n}{5} = \frac{1}{5!}n(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)$, pa je brzina izvršavanja prve faze algoritama GRAAL i H-GRAAL $O(n^5)$ (vidi [72]).

Mera sličnosti $R_{i,j}$ između čvora i grafa G reda n i čvora j grafa H reda m u okviru prve faze algoritma *IsoRank* interpretirana je kao koordinata glavnog sopstvenog vektora grafa $G \times H$. Kako je matrica susedstva grafa $G \times H$ jednaka Kronekerovom proizvodu matrica susedstva grafova G i H , i kako je glavni sopstveni vektor grafa $G \times H$ jednak Kronekerovom proizvodu glavnih sopstvenih vektora grafova G i H (vidi, na primer, [26], str. 69-70), to glavni sopstveni vektori grafova G i H mogu da se odrede nezavisno. Ukoliko bismo za određivanje svakoga od njih primenili, na primer, Stepenu metodu, brzina izvršavanja prve faze algoritma *IsoRank* bila bi $O(n^2)$.

S obzirom da je mera sličnosti $R_{i,j}$ jednaka proizvodu i -te koordinate glavnog sopstvenog vektora grafa G i j -te koordinate glavnog sopstvenog vektora grafa H , to je brzina izvršavanja prve faze algoritma *IsoRank* $O(n^2)$. Primitimo da je u [84] Stepena metoda primenjena na matricu susedstva reda $nm \times nm$ (odnosno matricu reda $n^2 \times n^2$ kada su grafovi G i H istog reda), što ima za posledicu brzinu izvršavanja $O(n^4)$. Na ovo je ukazano već u radu [18].

Iz formula koje su izložene u uvodnom delu ovog poglavlja vidimo da se uglovi grafa mogu lako izračunati pomoću sopstvenih vektora. Stoga je za izračunavanje upravo predložene mere sličnosti potrebno samo odrediti sopstvene vrednosti i sopstvene vektore odgovarajućih matrica susedstva. S obzirom da se sopstvene vrednosti i sopstveni vektori neke matrice izračunavaju brzinom $O(n^3)$, to bi brzina izvršavanja prve faze algoritma za poravnavanje mreža sa novouvedenom merom sličnosti bila $O(n^3)$, što je bolje od brzine izvršavanja prve faze algoritama GRAAL i H-GRAAL.

3.3.5 Za kraj ovog odeljka

Dakle, u ovom odeljku analizirani su neki algoritmi za globalno poravnavanje mreža striktno matematički i na teorijskom nivou, za razliku od bioinformatičke literature gde su opisani sprovedeni eksperimenti u kojima su se poravnavale određene PPI mreže. Stoga se u navedenom razmatranju poravnavanje mreža ne dovodi u vezu sa nekim drugim prirodnim naukama, pre svega biologijom.

Novopredloženi pristup, u osnovi koga su zatvorene šetnje u određenim čvorovima, po pitanju kompleksnosti nalazi se između pristupa implementiranog u algoritmu *IsoRank* i pristupa baziranog na frekvencijama graflata u određenim čvorovima, realizovanog u algoritmu GRAAL. Uz to, opisane analize pokazuju da je po pitanju kvaliteta predložena mera sličnosti uporediva sa merom koja se uz veće računsko vreme dobija u okviru pristupa sa graflima.

Poređenje izloženih pristupa u poravnavanju mreža možemo dalje da nastavimo analizom nedostataka. Kako su kod regularnih grafova sve koordinate glavnog sopstvenog vektora jednake, to će u slučaju da su poredbene mreže, odnosno grafovi G i H regularni mera sličnosti za svaki par čvorova i i j biti konstanta, pa je u tom slučaju algoritam *IsoRank* nepodesan. Slična situacija u novopredloženom pristupu javlja se u slučaju nešto uže klase grafova - kod jako regularnih grafova. Naime, kod jako regularnih grafova sa istim sopstvenim vrednostima, jednaki su i uglovi za sve čvorove (vidi [31], str. 77). Međutim, to nije slučaj sa svim predstavnicima klase regularnih grafova. Tako su, na primer, neki grafovi iz skupa kubnih grafova okarakterisani do na izomorfizam sopstvenim vrednostima i uglovima (vidi [31], str. 119).

Sa druge strane, u bioinformatičkoj literaturi, prilikom poređenja algoritama za poravnavanje mreža akcenat je stavljen na kvalitet postignutog poravnavanja, i to više sa biloškog aspekta. Analiza kompleksnosti u ovom slučaju nije od preterane važnosti s obzirom da je broj potencijalnih PPI mreža interesantnih za poravnavanje mali.

Kako je brzina izvršavanja prve faze algoritma GRAAL veća od brzine izvršavanja prve faze algoritma *IsoRank*, to je izvesno da se implementacijom ovog algoritma na poravnavanje konkretnih mreža, posebno PPI mreža, postižu bolja poravnavanja, u stvari jedna od najkompletnijih topoloških poravnavanja bioloških mreža (vidi [64]).

Smatramo da bi bilo interesantno i korisno neke od opisanih algoritama, koji bi u prvoj fazi kao meru sličnosti između čvorova koristili meru sličnosti (3.6), implementirati na poravnavanje konkretnih bioloških mreža.

4 Nenegativan spektar digrafa

U ovom Poglavlju razmatramo spektralno-strukturalne osobine digrafa D u odnosu na matrice $A^T A$ i AA^T , gde je A matrica susedstva digrafa D . Sprovedena istraživanja upotpunjuju i u izvesnom smislu unapređuju postojeće tehnike i rezultate problema spektralnog prepoznavanja grafova. Pozitivno semidefinitne matrice $A^T A$ i AA^T su u nešto drugačijem kontekstu još od ranije prisutne u literaturi, i njihov zajednički spektar kraće označavamo kao *nenegativan* ili *N -spektar* digrafa.

Tako, na primer, na celokupnu strukturu Interneta (engl. *World Wide Web*, kraće *WWW*), možemo da gledamo kao na jedan veliki digraf $D = (V(D), A(D))$. Čvorovi ovog digrafa odgovaraju internet stranicama, a svaka orijentisana grana $(v_i, v_j) \in A(D)$, znači da postoji link sa stranice v_i na stranicu v_j . Ulazni stepen čvora v_i predstavlja broj stranica koje imaju linkove na stranicu v_i , dok izlazni stepen čvora v_i odgovara broju stranica za koje na stranici v_i postoji link. Globalna struktura *WWW*-a je nepredvidiva, s obzirom da gotovo svaki korisnik može, uz ograničeni uticaj, da menja njegovu strukturu linkova. Stoga je aposteriorna analiza *WWW*-a od izuzetnog značaja, a kao jedan od glavnih zadataka nameće se pronalaženje merodavnih (engl. *authoritative*) web stranica za konkretan upit [81]. Za potrebe rešavanja zadataka ovog tipa, odnosno za istraživanje web podataka, razvijene su mnogobrojne metode, od kojih su za nas od posebnog interesa one koje su spektralnog karaktera.

Među najpopularnijim spektralno zasnovanim metodama za istraživanje web podataka su: *Hypertext Induced Topic Search*, kraće *HITS*, (vidi, na primer, [62]), razvijena 1997. godine od strane J. Kleinberg-a, *PageRank* (vidi [10] ili [11]), razvijena od strane S. Brin-a i L. Page-a, kao i *SALSA* (vidi, na primer, [67]), nastala 2000. godine. Spomenute metode opisane su u preglednom članku [66]. Metod *HITS*, na primer, koristi spektralne tehnike pri određivanju merodavnih stranica i koncentrišućih stranica (engl. *hubs*). Na koncentrišuće stranice možemo da gledamo (vidi [81]) kao na stranice koje sadrže linkove za razne merodavne izvore, dakle imaju izvestan broj izlaznih linkova (engl. *out-links*). Merodavna stranica je stoga stra-

nica koja je linkovana od strane više koncentrišućih stranica, odnosno ima izvestan broj ulaznih linkova (engl. *in-links*). U okviru metode HITS definisana je *Iterativna stepena metoda* (engl. *iterative power method*) za izračunavanje glavnog sopstvenog vektora matrica AA^T i $A^T A$ pridruženih digrafu koji modeluje internet mrežu. Matrica AA^T , s obzirom na svoje karakteristike, označena je kao *koncentrišuća matrica* (engl. *hub matrix*), dok je $A^T A$ nazvana *merodavna matrica* (engl. *authority matrix*). U ovom poglavlju analiziramo spektralno-strukturalne osobine digrafa upravo u odnosu na ove matrice.

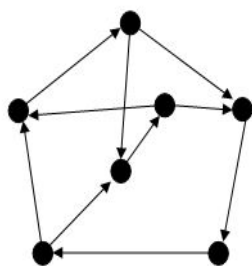
Sadržaj Poglavlja baziran je na rezultatima sumiranim u radu autora [56]. Poglavlje je organizovano na sledeći način. U Odeljku 1 dajemo pregled osnovnih digrafovskih pojmova koje koristimo. U Odeljku 2 izlažemo neke elementarne rezultate koji se odnose na spektralno-strukturalne osobine digrafa D u odnosu na matrice AA^T i $A^T A$. U Odeljku 3 razmatramo AA^T - i $A^T A$ -spektar digrafa pri određenim digrafovim operacijama i transformacijama. Poglavlje zaključujemo generalizacijom pojma kospektralnosti u Odeljku 4, gde navodimo primere $(N - Q)$ -kospektralnih parnjaka digrafova i multigrafova.

4.1 Pregled osnovnih digrafovskih pojmova

Teorija digrafova je jedna od jako važnih i plodonosnih grana teorije grafova, koja obiluje mnoštvom rezultata, uglavnom zbog velike mogućnosti primene. Tako se, na primer, digrafovi koriste kao modeli mreža protoka i električnih mreža. Oni se primenjuju i pri apstraktnoj reprezentaciji kompjuterskih programa, a korisni su i za sistemsku analizu u teoriji sistema (engl. *control theory*). Postoje različiti koncepti zasnivanja teorije digrafova, kao i različiti aspekti tretiranja problema u kojima se oni mogu javiti ili primeniti (vidi [5], [50], [49] ili [4]).

Orijentisani graf ili *digraf* D (engl. *directed graph*), možemo da definišemo (prema [88]) kao uređenu trojku $(V(D), A(D), \psi_D)$ koju čine neprazan skup $V(D) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ čvorova, skup $A(D)$ orijentisanih grana ili *lukova* i *funkcija incidencije* ψ_D , koja svakom luku a pridružuje uređen par (ne nužno različitih) čvorova v_i i v_j koje a spaja. Preciznije, ukoliko je $\psi_D(a) = (v_i, v_j)$, kažemo da orijentisana grana a spaja čvor v_i sa čvorom v_j , kao i da su v_i i v_j *krajnji čvorovi* od a , i to v_i *početni čvor*, a v_j *završni čvor*. Ukoliko, dakle, postoji grana od čvora v_i do čvora v_j , kažemo da su čvorovi v_i i v_j *susedni*, odnosno da je čvor v_i *zadnji sused* (engl. *in-neighbour*)

čvora v_j , dok je v_j *prednji sused* (engl. *out-neighbour*) čvora v_i . Često ćemo u daljem tekstu orijentisane grane, odnosno lukove zvati prosto *granama* digrafa D , koga ćemo označavati kao uređen par $D = (V(D), A(D))$, podrazumevajući da su elementi skupa $A(D)$ uređeni parovi čvorova. Nadalje, *izlazni stepen* (engl. *out-degree*) čvora v_i definišemo kao ukupan broj grana kojima je v_i početni čvor, dok ukupan broj grana kojima je v_i završni, odnosno krajnji čvor predstavlja *ulazni stepen* (engl. *in-degree*) čvora v_i . Izlazni i ulazni stepen čvora v_i digrafa D označavamo sa $outdeg_D(v_i)$ i $indeg_D(v_i)$, odnosno $d_D^+(v_i)$ i $d_D^-(v_i)$, respektivno. Primer digrafa dat je na Slici 4.1.



Slika 4.1: Primer digrafa

Slično multigrafu, *multidigraf* možemo da označimo kao digraf kod koga se između dva čvora nalazi više od jedne grane iste orijentacije. Naravno, ovde su moguće i višestruke petlje. Na slici 4.2 predstavljen je jedan multidigraf. U daljem tekstu pretpostavljaćemo da su petlje, odnosno grane oblika (v_i, v_i) dopuštene, za razliku od višestrukih grana. Takođe, naglasimo da

petlja u nekom čvoru doprinosi sa 1 vrednosti ulaznog i izlaznog stepena tog čvora. Mnoga druga svojstva koja srećemo kod (neorijentisanih) grafova važe i za digrafove, pa ćemo se u daljem tekstu koncentrisati uglavnom na pojmove i osobine digrafova na koje ne nailazimo kod grafova.

Digraf $D' = (V'(D'), A'(D'))$ predstavlja *orijentisani podgraf* (vidi [1]) digrafa $D = (V(D), A(D))$, što označavamo kao $D' = (V', A') \prec D = (V, A)$, ako je $V'(D') \subseteq V(D)$ i $A'(D') \subseteq A(D)$.

Za svaku granu datog digrafa $D = (V(D), A(D))$ neka je $A'(D) = A(D) \setminus \{(v, v), v \in V(D)\}$ tako da je $D' = (V(D), A'(D))$ orijentisani podgraf digrafa $D = (V(D), A(D))$ kome su uklonjene petlje. Neka je R simetrično zatvorenje (za dopunske definicije vidi [1]) skupa $A'(D)$, tako da ako $(v_i, v_j) \in A'(D)$, tada $(v_i, v_j), (v_j, v_i) \in R$ i E^S je skup grana koje predstavljaju relaciju R . Tada se graf $G^S = (V(D), E^S)$ naziva *nosećim grafom* orijentisanog grafa $D = (V(D), A(D))$. Izraženo neformalno, skup grana E^S nosećeg grafa $G^S = (V, E^S)$ je definisan sa $\{v_i, v_j\} \in E^S$ ako i samo ako $(v_i, v_j) \in A(D)$ ili $(v_j, v_i) \in A(D)$, za različite čvorove v_i i v_j .

Sem kada drugačije nije naglašeno, razmatraćemo povezane digrafove. Za digraf $D = (V(D), A(D))$ kažemo da je *povezan* (vidi [1]) ako je njegov noseći graf povezan. Pored toga, digraf D je *jako povezan* ako za svaki uređeni par čvorova $v_i, v_j \in V(D)$

postoji usmereni put od čvora v_i do čvora v_j . *Orijentisani put* P digrafa D jeste podgraf digrafa D sa skupom čvorova $\{v_1, v_2, \dots, v_p\}$, $1 \leq p \leq n$ i skupom grana $\{(v_i, v_{i+1}) : i = 1, 2, \dots, p-1\}$. *Orijentisana kontura* C digrafa D jeste podgraf digrafa D sa skupom čvorova $\{v_1, v_2, \dots, v_l\}$, $1 \leq l \leq n$ i skupom grana $\{(v_i, v_{i+1}) : i = 1, 2, \dots, l-1\} \cup \{v_l, v_1\}$.

Matrica susedstva digrafa D sa n čvorova jeste $(0, 1)$ -matrica $A = [a_{ij}]$ reda n , takva da je $a_{ij} = 1$ ukoliko postoji grana od čvora v_i do čvora v_j i $a_{ij} = 0$, u suprotnom, za svako $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$. Ukoliko je $|A(D)| = m$, matrica A će sadržati m jedinica. Različito uređenje skupa čvorova digrafa rezultira matricom susedstva u obliku PAP^T , za neku permutacionu matricu P . Za proizvoljnu kvadratnu binarnu matricu A reda n sa m jedinica, pod pretpostavkom o izvesnom uređenju skupa čvorova, može da se konstruiše digraf D reda n sa m grana čija je matrica susedstva upravo matrica A .

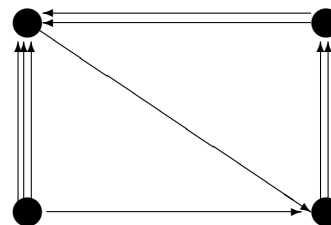
Karakteristični polinom $P_A(x) = \det(xI - A)$ matrice A jeste *karakteristični polinom* digrafa D , dok su sopstvene vrednosti λ , odnosno spektar $\sigma(A)$ matrice A *sopstvene vrednosti*, odnosno *spektar* digrafa D . Kako A nije neophodno simetrična matrica, sopstvene vrednosti digrafa D su u opštem slučaju kompleksni brojevi. Opšte je poznato (vidi, na primer, [73]) da je *spektralni radijus* $\rho(A)$ nenegativne matrice A jednak najvećoj sopstvenoj vrednosti te matrice. Među mnogobrojnim ocenama za spektralni radijus (neke su date u [94]), izdvajamo sledeću:

Teorema 4.1.1 (Frobenius-ova teorema [6]) *Neka je A nenegativna kvadratna matrica reda n . Tada je:*

$$\min\{R_i, 1 \leq i \leq n\} \leq \rho(A) \leq \max\{R_i, 1 \leq i \leq n\}. \quad (4.1)$$

Nadalje, ako je A ireducibilna, u (4.1) važi leva ili desna jednakost ako i samo ako je $R_1 = R_2 = \dots = R_n$, gde je $R_i = \sum_{j=1}^n a_{ij}$.

Pretpostavimo da su grane digrafa D uređene na određeni način, npr. a_1, a_2, \dots, a_m . *Ulazna matrica incidencije* digrafa D (engl. *in-incidence matrix*, vidi, na primer, [14]) jeste $n \times m$ matrica $B_{in} = [b_{ij}]$ takva da je $b_{ij} = 1$ ukoliko je $a_j = (v_k, v_i)$ za neki čvor v_k , i $b_{ij} = 0$, inače. Slično, *izlazna matrica incidencije* digrafa D (engl. *out-incidence matrix*) jeste $n \times m$ matrica $B_{out} = [b'_{ij}]$ takva da je $b'_{ij} = 1$ ukoliko je $a_j = (v_i, v_l)$ za neki čvor v_l , i $b'_{ij} = 0$, inače. Lako se proverava da važi: $A = B_{out}B_{in}^T$.



Slika 4.2: Primer multidigrafa

Većina pojmova iz teorije digrafova na koje se pozivamo u ostatku poglavlja biće propraćena odgovarajućim definicijama, dok za detaljnija objašnjenja čitaoca upućujemo na, na primer, [1], [3], [22] ili [88].

4.2 Elementarni rezultati

Kao što smo već nagovestili, u ovom poglavlju razmatramo digraf $D = (V(D), A(D))$ sa skupom čvorova $V(D) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ u kontekstu spektra matrice AA^T , odnosno $A^T A$, gde je A matrica susedstva datog digrafa. Matrice AA^T i $A^T A$ su nenegativne, kvadratne i simetrične. Pored toga, može se pokazati da su navedene matrice pozitivno semidefinitne, što znači da imaju nenegativne sopstvene vrednosti. Preciznije, važi sledeće tvrđenje (vidi [81]):

Lema 4.2.1 *Neka je $M \in R^{m \times n}$ matrica. Tada je MM^T pozitivna semidefinitna matrica.*

Dokaz. Neka je λ sopstvena vrednost matrice MM^T i x sopstveni vektor koji odgovara ovoj sopstvenoj vrednosti. Tada imamo da je:

$$\begin{aligned} (MM^T)x &= \lambda x \\ x^T(MM^T x) &= x^T(\lambda x) = \lambda(x^T x) \\ \frac{x^T MM^T x}{x^T x} &= \lambda, \end{aligned}$$

odnosno $\lambda = \frac{z^T z}{x^T x}$, gde je $z = M^T x$. Kako za proizvoljan vektor $v \in R^d$ važi $v^T v > 0$, to je $x^T x > 0$ i $z^T z \geq 0$, pa je stoga $\lambda \geq 0$. ■

Rezultat izložen u narednom tvrđenju takođe je dobro poznat (vidi, na primer, [66]).

Tvrđenje 4.2.1 *Element u preseku i -te vrste i j -te kolone matrice AA^T (odnosno $A^T A$) digrafa D jednak je broju zajedničkih prednjih (zadnjih) suseda čvorova v_i i v_j digrafa D . Specijalno, dijagonalni elementi ove matrice jednaki su izlaznim (ulaznim) stepenima odgovarajućih čvorova digrafa.*

Dokaz. Element u preseku i -te vrste i j -te kolone matrice AA^T nastaje sumiranjem svih proizvoda oblika $a_{il}a_{lj}^T$, za svako $l = 1, 2, \dots, n$. Važi da je $a_{il}a_{lj}^T = 1$ jedino ako je $a_{il} = 1$ i $a_{lj}^T = 1$, odnosno ukoliko čvorovi v_i i v_j imaju zajedničkog prednjeg suseda v_l .

Dokaz za slučaj matrice $A^T A$ izvodi se na analogan način. ■

Prema prethodnim napomenama i tvrđenju, možemo da uvedemo sledeće oznake: $N_{out} = N_{out}(D) = AA^T$ i $N_{in} = N_{in}(D) = A^T A$, gde je A matrica susedstva digrafa D . Karakteristični polinom $\det(xI - N_{in})$ matrice N_{in} jeste N_{in} -karakteristični polinom digrafa D , dok je karakteristični polinom $\det(xI - N_{out})$ matrice N_{out} zapravo N_{out} -karakteristični polinom digrafa D . Sopstvene vrednosti matrice N_{in} jesu N_{in} -sopstvene vrednosti digrafa D , a sopstvene vrednosti matrice N_{out} jesu N_{out} -sopstvene vrednosti digrafa D .

U [81] je takođe pokazano da važi i sledeće:

Lema 4.2.2 *Neka je $M \in R^{m \times n}$ proizvoljna matrica. Tada matrice MM^T i $M^T M$ imaju iste nenula sopstvene vrednosti, uključujući odgovarajuće multiplicite. Štaviše, ukoliko je x sopstveni vektor matrice MM^T , tada je $M^T x$ sopstveni vektor matrice $M^T M$.*

Dokaz. Neka je λ nenula sopstvena vrednost matrice MM^T i x sopstveni vektor koji odgovara sopstvenoj vrednosti λ . Imamo da je:

$$\begin{aligned} (MM^T)x &= \lambda x \\ M^T(MM^T)x &= M^T(\lambda x) \\ (M^T M)(M^T x) &= \lambda(M^T x), \end{aligned}$$

odakle slede oba tvrđenja iz formulacije leme. ■

S obzirom na navedenu lemu, zajednički spektar matrica N_{in} i N_{out} možemo da označimo sa $\eta_1 \geq \eta_2 \geq \dots \geq \eta_n$ i nazovemo *nenegativan* ili *N -spektar* (razmatranog digrafa D). U tom slučaju, karakteristični polinomi ovih matrica, u oznaci $N(x) = N_D(x)$, predstavljaju *N -karakteristični polinom* (razmatranog digrafa D). Naglasimo da smo se u istraživanju orijentisali na N_{out} matricu digrafa D i pri tom upotrebljavali prethodno navedene oznake. *N -spektralni radijus* $\rho_N(D)$ digrafa D definišemo kao spektralni radijus matrice $N_{out} = N_{out}(D)$, odnosno $N_{in} = N_{in}(D)$.

Iz prethodno izloženih rezultata direktno sledi sledeća:

Teorema 4.2.1 *Neka je $D = (V(D), A(D))$ orijentisani graf reda n čiji je N -spektar $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n$. Tada važe sledeća tvrđenja:*

1. Brojevi $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n$ su realni i nenegativni.
2. $\eta_1 + \eta_2 + \dots + \eta_n = \text{tr} N_{out} (= \text{tr} N_{in}) = \sum_{i=1}^n \text{outdeg}(v_i) (= \sum_{i=1}^n \text{indeg}(v_i))$.

3. D je prazan digraf, odnosno digraf koji se sastoji jedino od izolovanih čvorova, ako i samo ako važi da je: $\eta_1 = \eta_2 = \dots = \eta_n = 0$.

Za digraf D kažemo da je r -regularan digraf ukoliko su ulazni i izlazni stepen svakog čvora ovog digrafa jednaki r .

Lema 4.2.3 N -spektralni radijus $\rho_N(D)$ r -regularnog digrafa D reda n jednak je r^2 .

Dokaz. U dokazu ćemo, bez smanjenja opštosti, posmatrati N_{out} matricu digrafa D .

Suma elemenata svake vrste matrice N_{out} digrafa D iznosi r^2 . Naime, izlazni stepen svakog čvora digrafa D jednak je r , pa su svi dijagonalni elementi matrice N_{out} jednaki r . Uočimo čvor v_i digrafa D i orijentisanu granu (v_i, v_j) . Kako je ulazni stepen čvora v_j jednak r , postojaće $r - 1$ mogućih parova čvorova v_i, v_k takvih da im je čvor v_j zajednički prednji sused. Uz to, izlazni stepen čvora v_i je takođe r , pa postoji ukupno $r(r - 1)$ parova čvorova v_i, v_l koji imaju zajedničke prednje susede. Stoga je suma elemenata i -te vrste, za svako $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, matrice N_{out} jednaka $r + r(r - 1) = r^2$. Kako je N_{out} kvadratna nenegativna matrica takva da su sume elemenata svake od njenih vrsta međusobno jednake, to je prema Teoremi 4.1.1 spektralni radijus ove matrice r^2 . ■

Napomena 4.2.1 Sopstveni vektor koji odgovara N -sopstvenoj vrednosti r^2 regularnog digrafa D stepena r jeste vektor čije su sve koordinate jednake 1.

Kompletan digraf reda n , u oznaci \overleftrightarrow{K}_n , jeste digraf (vidi [14]) u kome za svaki par čvorova v_i, v_j postoji grana (v_i, v_j) , uključujući i petlju kod svakog čvora. Stoga, digraf \overleftrightarrow{K}_n ima n^2 orijentisanih grana i predstavlja n -regularni digraf.

Primer 4.2.1 (N -karakteristični polinom kompletnog digrafa)

Izlazni (ulazni) stepen svakog od čvorova digrafa \overleftrightarrow{K}_n jeste n , i svaki par čvorova ima n zajedničkih prednjih (zadnjih) suseda, tako da su svi elementi matrice N_{out} (N_{in}) ovog digrafa jednaki n . Stoga je N - karakteristični polinom ovog digrafa:

$$N_{\overleftrightarrow{K}_n}(x) = (x - n^2)x^{n-1},$$

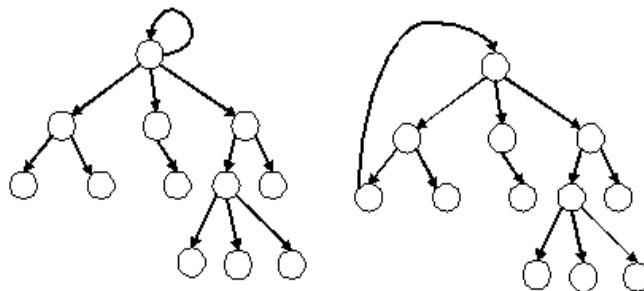
odnosno N -spektar je sastavljen od: $n^2, [0]^{n-1}$.

Razmotrimo nadalje digrafove kod kojih ne postoje parovi čvorova sa zajedničkim prednjim susedima. Podsetimo se najpre definicija nekih pojmova.

Korensko orijentisano stablo, ili samo korensko stablo, (vidi [3]) jeste orijentisano stablo sa specijalno odabranim čvorom v_1 , koji se naziva *koren*, takvo da za svaki drugi čvor v_j put koji povezuje v_1 i v_j jeste orijentisani put od v_1 do v_j . Ovo znači da je $\text{indeg}(v_1) = 0$.

Digraf \vec{P}_n reda n definišemo kao digraf sa skupom čvorova $V(\vec{P}_n) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ i skupom orijentisanih grana (v_i, v_{i+1}) , za svako $i = 1, 2, \dots, n - 1$. Ovakav digraf je zapravo specijalan slučaj korenskog orijentisanog stabla.

Ako je $D = (V(D), A(D))$ digraf kod koga ne postoje parovi čvorova sa zajedničkim prednjim susedima, onda za svaki čvor $v_i \in V(D)$ važi da je $\text{indeg}_D(v_i) \leq 1$. Uz to, ako za svaki čvor $v_i \in V(D)$ važi $\text{indeg}_D(v_i) = 0$, D nije povezan digraf.



Slika 4.3: Uniciklični digrafovi čiji čvorovi nemaju zajedničke prednje susede

Prema Teoremi 15.2 iz [1], digraf D je korensko stablo ako i samo ako je D povezan digraf u kome postoji jedinstven čvor v_1 takav da je $\text{indeg}_D(v_1) = 0$ i $\text{indeg}_D(v_i) = 1$, za sve ostale čvorove v_i digrafa D . Jasno je da čvorovi ovog digrafa nemaju zajedničke prednje susede. Korensko stablo je jedini povezan digraf čiji čvorovi nemaju zajedničke prednje susede sa osobinom da $\text{indeg}_D(v_i) = 1$ ne važi za svaki čvor v_i ovog digrafa.

Pokušajmo da konstruišemo povezan digraf D reda n čiji čvorovi nemaju zajedničke prednje susede. Počnimo od nekog čvora v_1 . Kako v_1 ne bi trebalo da ima zajedničke prednje susede ni sa jednim čvorom digrafa D , sledi da je $\text{indeg}(v_1) = 0$ ili $\text{indeg}(v_1) = 1$. Pretpostavimo da je $\text{indeg}(v_1) = 0$. Kako je D povezan digraf, ukoliko za red ovog digrafa važi $n \neq 1$, to postoji barem jedna grana (v_1, v_x) , za neki čvor $v_x \neq v_1$. Kako je $\text{indeg}(v_x) \leq 1$ i D je povezan, to jedino grane oblika (v_x, v_y) mogu da budu incidentne čvoru v_x . Ulazni stepen svakog ovakvog čvora v_y takođe je 1, pa je za svakog od njih dopušteno postojanje jedino izlaznih grana,

tj. grana oblika (v_y, v_z) , i tako redom. Na kraju, kao rezultat povezivanja svih n čvorova granama na opisan način, prema Teoremi 15.2 iz [1], dobijamo korensko stablo. Kako je $\text{indeg}(v_1) = 0$, ovo stablo možemo dopuniti još jednom granom tako da i u rezultujućem digrafu ne postoje čvorovi sa zajedničkim prednjim susedima. Razlikujemo dve mogućnosti: dodata grana može da bude petlja u čvoru v_1 ili grana (v_x, v_1) , za tačno jedan od preostalih čvorova v_x digrafa D . U ovom slučaju je, dakle, rezultujući digraf unicikličan¹ digraf izveden iz korenskog stabla (Slika 4.3).

Ovim smo pokazali da važi:

Tvrđenje 4.2.2 *U povezanom digrafu D ni jedan par čvorova nema zajedničke prednje susede ako i samo ako je D korensko orijentisano stablo ili uniciklični digraf izveden iz korenskog orijentisanog stabla na prethodno opisan način.*

Napomena 4.2.2 *Konverzni digraf digrafa D , u oznaci $\text{Conv}(D)$, jeste (vidi [3]) digraf D sa granama izmenjene orijentacije. Preciznije, svaka grana (v_i, v_j) digrafa D jeste grana (v_j, v_i) u digrafu $\text{Conv}(D)$. Stoga je digraf kod koga ni jedan par čvorova nema zajedničke zadnje susede konverzni digraf korenskog orijentisanog stabla ili unicikličnog digrafa koji iz njega može da se izvede.*

Tvrđenje 4.2.3 *N -spektar povezanog digrafa D sa skupom čvorova $V(D) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ takvim da ni jedan par čvorova nema zajedničke prednje susede sastoji se od: $\text{outdeg}_D(v_1), \text{outdeg}_D(v_2), \dots, \text{outdeg}_D(v_n)$.*

Dokaz. Kako ni jedan par čvorova nema zajedničke prednje susede, N_{out} matrica digrafa D je:

$$N_{\text{out}}(D) = \begin{pmatrix} \text{outdeg}(v_1) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \text{outdeg}(v_2) & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \text{outdeg}(v_n) \end{pmatrix}.$$

■

Primer 4.2.2 *Ukoliko je D korensko orijentisano stablo, N -karakteristični polinom ovog digrafa je:*

$$N_D(x) = x^l \prod_{v_i \in U(D)} (\text{outdeg}_D(v_i) - x),$$

gde je l broj listova (odnosno čvorova v_x takvih da je $\text{outdeg}(v_x) = 0$), a $U(D) \subset V(D)$ skup čvorova koji imaju bar jednu izlaznu granu.

¹Unicikličan digraf jeste digraf u kome postoji jedinstvena orijentisana kontura.

N -karakteristični polinom digrafa \vec{P}_n je:

$$N_{\vec{P}_n}(x) = x(x-1)^{n-1}.$$

Ako sa \vec{C}_n označimo povezan 1-regularan digraf, onda je:

$$N_{\vec{C}_n}(x) = (x-1)^n.$$

4.3 Nenegativan spektar digrafa u odnosu na neke digrafovske operacije i transformacije

U ovom odeljku razmatramo kako se menja N -spektar digrafa pri određenim digrafovim operacijama, kao što su komplement ili digraf grana, odnosno pri nekim digrafovim transformacijama poput uklanjanja ili dodavanja grane.

Komplement D^C digrafa $D = (V(D), A(D))$ jeste digraf sa skupom čvorova $V(D)$ i skupom orijentisanih grana $A(D^C)$ takvih da je a orijentisana grana digrafa D^C ako i samo ako a nije orijentisana grana digrafa D . Pritom, ukoliko u digrafu D nije postojala petlja kod čvora v_i , postojaće u digrafu D^C . Slično dokazu Teoreme 2.1.2 iz [30] možemo dokazati i sledeće:

Tvrđenje 4.3.1 *Ako su $\eta_i(D)$, $i = 1, 2, \dots, n$ N -sopstvene vrednosti r -regularnog digrafa D sa n čvorova, onda su N -sopstvene vrednosti digrafa D^C jednake $\eta_1(D^C) = (n-r)^2$ i $\eta_i(D^C) = \eta_i(D)$, $i = 2, 3, \dots, n$.*

Dokaz. Dokaz ćemo sprovesti za matricu N_{out} digrafa D . Ukoliko sa J označimo kvadratnu matricu reda n čiji su svi elementi jednaki 1, matrica susedstva digrafa D^C biće: $A_{D^C} = J - A_D$, odnosno $A_{D^C}^T = J - A_D^T$, gde je A_D matrica susedstva digrafa D . Stoga je:

$$\begin{aligned} N_{out}(D^C) &= A_{D^C} A_{D^C}^T = \\ &= J^2 - A_D J - J A_D^T + A_D A_D^T = \\ &= (n-2r)J + N_{out}(D), \end{aligned}$$

jer je suma svake vrste matrice susedstva A_D digrafa D jednaka r . Neka je sada $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ ortogonalna baza prostora R^n takva da važi: $N_{out}(D)x_i = \eta_i(D)x_i$, $i = 2, 3, \dots, n$ i $x_1 = j = (1, 1, \dots, 1)$. Tada je:

$$N_{out}(D^C)x_1 = ((n-2r)J + N_{out}(D))x_1 = (n(n-2r) + r^2)x_1,$$

odakle sledi da je $\eta_1(D^C) = n^2 - 2nr + r^2$, odnosno: $N_{out}(D^C)x_i = \eta_i x_i, i = 2, 3, \dots, n$. ■

U nastavku ćemo razmotriti odnos N -spektra digrafa D , čiji je skup čvorova $V(D) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, i N -spektra digrafa D' koji je dobijen od D uklanjanjem grane (v_i, v_j) , pri čemu je moguće da je $i = j$ ukoliko u D postoji petlja kod čvora v_i . Kao i do sada, posmatraćemo N_{out} matrice ovih digrafova. Kako je

$$\sum_{i=1}^n \eta_i(D) - \sum_{i=1}^n \eta_i(D') = m - (m - 1) = 1,$$

to je uvek $\eta_j(D) > \eta_j(D')$, za najmanje jednu vrednost j , gde m označava broj grana digrafa D . Nadalje, imamo da je: $N_{out}(D) = N_{out}(D') + M$, gde je $M = [m_{pq}]$ kvadratna matrica reda n takva da važi: $m_{ii} = 1$ i $m_{il} = m_{li} = 1$, za svako $l \in \{1, 2, \dots, n\} \setminus \{i\}$ tako da je $(v_i, v_j), (v_l, v_j) \in A(D)$.

Rang matrice M je uvek jednak 2, sem u slučaju kada je (v_i, v_j) jedina ulazna grana za čvor v_j . U prvom slučaju spektar matrice M se sastoji od $[0]^{n-2}$ i dve nenula sopstvene vrednosti, od kojih je jedna negativna. U drugom slučaju, rang matrice je jednak 1, dok su sopstvene vrednosti: $[1], [0]^{n-1}$. Stoga se uz pomoć Courant-Weyl-ovih nejednakosti (Teorema 1.1.2 iz uvodnog poglavlja) pokazuje da važi sledeća:

Teorema 4.3.1 (Teorema o preplitanju za N -spektre digrafova) *Neka je D digraf sa n čvorova i N -spektrom $\eta_1(D) \geq \eta_2(D) \geq \dots \geq \eta_n(D)$, i neka je D' digraf dobijen od D uklanjanjem grane (v_i, v_j) takve da je $\text{indeg}_D(v_j) = 1$. Ako su N -sopstvene vrednosti digrafa D' jednake $\eta_1(D') \geq \eta_2(D') \geq \dots \geq \eta_n(D')$, onda za N -spektre ovih digrafova važi da je:*

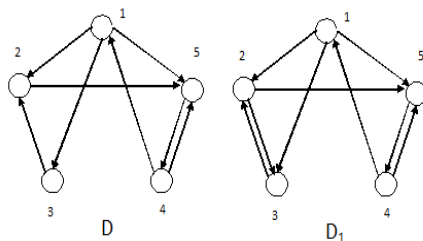
$$\eta_1(D) \geq \eta_1(D') \geq \eta_2(D) \geq \eta_2(D') \geq \dots \eta_n(D) \geq \eta_n(D') \geq 0.$$

U opštem slučaju ovakvo preplitanje N -sopstvenih vrednosti digrafova D i D' ne važi, što pokazuje i sledeći primer.

Primer 4.3.1 N_{out} matrice digrafa D , koji je predstavljen na Slici 4.4 i digrafa D' koji je nastao od D uklanjanjem grane $(1, 3)$ su, redom:

$$N_{out}(D) = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \text{ i } N_{out}(D') = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

pa za njihove spektre, odnosno sopstvene vrednosti važi: $4.390 \geq 3.879 \geq 1.838 \geq 1.653 \geq 1 \geq 1 \geq 0.544 \geq 0.468 \geq 0.228 \geq 0$.



Slika 4.4: Digrafovi D i D_1 iz primera 4.3.1

Međutim, za spektre digrafova D_1 (Slika 4.4), i D'_1 koji je dobijen od D_1 uklanjanjem grane $(1, 3)$, preplitanje N -sopstvenih vrednosti opisano u prethodnom tvrđenju ne važi. Naime, N_{out} matrice ovih digrafova su, redom:

$$N_{out}(D_1) = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \text{ i } N_{out}(D'_1) = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

dok su njihovi N -spektri, redom: $5.303 \geq 1.697 \geq 1 \geq 1 \geq 0$, odnosno $4.115 \geq 1.764 \geq 1 \geq 1 \geq 0.139$.

Pri analizi N -karakterističnog polinoma digrafa D^* koji je od datog digrafa D nastao dodavanjem viseće grane², pravimo razliku u zavisnosti od stepena čvora u kom dodajemo viseću granu.

Teorema 4.3.2 Neka je D^* digraf dobijen od digrafa D reda n dodavanjem viseće grane (v_j, v_i) kod čvora v_i takvog da je $indeg_D(v_i) = 0$. Tada je

$$N_{D^*}(x) = (x - 1)N_D(x).$$

Dokaz. Kako je $indeg_{D^*}(v_i) = 1$, $N_{out}(D^*)$ matrica digrafa D^* je:

$$N_{out}(D^*) = \begin{pmatrix} N_{out}(D) & 0 \\ 0^T & 1 \end{pmatrix}_{(n+1) \times (n+1)},$$

²Viseća grana je grana incidentna čvoru stepena 1, odnosno visećem čvoru. U orijentisanom digrafu D za viseći čvor v važi $outdeg_D(v) = 1$ i $indeg_D(v) = 0$ ili $indeg_D(v) = 1$ i $outdeg_D(v) = 0$.

gde je 0 nula-vektor reda n (jer čvor v_j nema zajedničkih prednjih suseda ni sa jednim čvorom digrafa D). ■

Za proizvoljan digraf D sa skupom čvorova $V(D) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ neka je $\mu_D(v_i, v_j) = 1$, ako je $(v_i, v_j) \in A(D)$, i $\mu_D(v_i, v_j) = 0$, u suprotnom, za svako $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$.

Definicija 4.3.1 *Neka je D digraf sa skupom čvorova $V(D) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ i skupom grana $A(D)$, i neka je D_{v_k} digraf dobijen od D uklanjanjem čvora v_k takvog da je $(v_k, v_i) \in A(D)$ i $\text{indeg}_D(v_i) = 1$. Digraf $D_{out}^{v_k}$ je izlazna v_k -kontrakcija digrafa D ako: $V(D_{out}^{v_k}) = V(D_{v_k})$ i $A(D_{out}^{v_k}) = A(D_{v_k}) \cup \{(v_j, v_i) | \mu_D(v_j, v_k) = 1, \text{ za svako } j \neq k\}$.*

Iz definicije je jasno da je $N_{out}(D_{out}^{v_k})$ matrica digrafa $D_{out}^{v_k}$ upravo $N_{out}(D)$ matrica digrafa D bez k -te vrste i k -te kolone.

Teorema 4.3.3 *Neka je D^* digraf dobijen od digrafa D reda n dodavanjem viseće grane (v_j, v_i) u čvoru v_i tako da je $(v_k, v_i) \in A(D)$ i $\text{indeg}_D(v_i) = 1$. Tada je*

$$N_{D^*}(x) = (x - 1)N_D(x) - N_{D_{out}^{v_k}}(x),$$

gde je $N_{D_{out}^{v_k}}(x)$ N -karakteristični polinom digrafa $D_{out}^{v_k}$ koji je izlazna v_k -kontrakcija digrafa D .

Dokaz. Imamo da je $\text{indeg}_{D^*}(v_i) = 2$, pa N_{out} matrica digrafa D^* ima sledeću strukturu:

$$N_{out}(D^*) = \begin{pmatrix} N_{out}(D) & r \\ r^T & 1 \end{pmatrix}_{(n+1) \times (n+1)},$$

gde je $r = (0, \dots, 0, \underbrace{1}_k, 0, \dots, 0)^T$ vektor dužine n . Jedina nenula koordinata ovog vektora odgovara zajedničkom prednjem susedu čvorova v_k i v_j . Razvijanjem determinante matrice $N_{out}(D^*)$ po poslednjoj vrsti, imamo da je:

$$N_{D^*}(x) = \det(xI - N_{out}(D^*)) = (x - 1)N_D(x) + (-1)^{(n+1)+k} \cdot \det(M|r),$$

gde je matrica M dobijena uklanjanjem k -te kolone matrice $xI - N_{out}(D)$. Razvijanjem determinante matrice $(M|r)$ po poslednjoj koloni, dobijamo:

$$\begin{aligned} N_{D^*}(x) &= (x - 1)N_D(x) + (-1)^{(n+1)+k}(-1)^{k+n} \det(xI - M') = \\ &= (x - 1)N_D(x) - \det(xI - M'), \end{aligned}$$

gde je M' matrica dobijena od matrice $N_{out}(D)$ uklanjanjem k -te vrste i k -te kolone. Matrica M' jeste $N_{out}(D_{out}^{v_k})$ matrica digrafa $D_{out}^{v_k}$ koji je izlazna v_k -kontrakcija digrafa D . ■

Digraf grana $\mathcal{L}(D)$ (engl. *line digraph*) digrafa D jeste (prema [14]) digraf čiji su čvorovi grane a_1, a_2, \dots, a_m digrafa D tako da su čvorovi a_i i a_j u $\mathcal{L}(D)$ povezani granom ako i samo ako je krajnji čvor grane a_i jednak početnom čvoru grane a_j u D . Grana a_p koja predstavlja petlju u nekom čvoru digrafa D postaje petlja u čvoru a_p digrafa $\mathcal{L}(D)$.

Izvesni rezultati vezani za spektar i energiju *iterativnih grafova grana* u odnosu na matricu susedstva izloženi su u [80]. Na analogan način možemo da definišemo i iterativne digrafove grana. Ako je $D = \mathcal{L}^0(D)$ digraf i $\mathcal{L}(D) = \mathcal{L}^1(D)$ njegov digraf grana, tada su digrafovi $\mathcal{L}^k(D)$, $k = 2, 3, \dots$, definisani rekurzivno formulom $\mathcal{L}^k(D) = \mathcal{L}(\mathcal{L}^{k-1}(D))$, *iterativni digrafovi grana* digrafa D .

Digraf grana r -regularnog digrafa takođe je r -regularni digraf. Naime, svaka grana (a_i, a_j) digrafa $\mathcal{L}(D)$ odgovara putu dužine 2 u digrafu D . Kako je broj puteva dužine 2 u digrafu D koji kao početnu granu imaju granu a_i jednak izlaznom stepenu krajnjeg čvora grane a_i , odnosno r , zaključujemo da je izlazni stepen čvora a_i u digrafu $\mathcal{L}(D)$ takođe jednak r . Preciznije, digraf grana $\mathcal{L}^1(D)$ r -regularnog digrafa D reda n jeste regularni digraf reda $n_1 = nr$ i stepena regularnosti $r_1 = r$. Sledstveno, red i stepen regularnosti digrafa $\mathcal{L}^k(D)$, $k = 2, 3, \dots$ su, redom, $n_k = rn_{k-1}$ i $r_k = r$, gde je n_{k-1} red digrafa $\mathcal{L}^{k-1}(D)$, odnosno $n_k = r \cdot r \cdot n_{k-2} = r \cdot r \cdot r \cdot n_{k-3} = \dots = r^k n$ i $r_k = r$.

Napomena 4.3.1 *Kako svaka grana digrafa $\mathcal{L}(D)$ odgovara putu dužine 2 u digrafu D , broj svih orijentisanih puteva dužine k u digrafu D biće jednak tragu matrice $N_{out}(\mathcal{L}^{k-1}(D))$ digrafa $\mathcal{L}^{k-1}(D)$, odnosno broju njegovih grana.*

Tvrđenje 4.3.2 *N -spektar digrafa grana $\mathcal{L}(D)$ r -regularnog digrafa D reda n sastoji se od: $[r^2]^n$ i $[0]^{(r-1)n}$.*

Dokaz. Odredićemo N -karakteristični polinom digrafa $\mathcal{L}(D)$ razmatranjem $N_{out}(\mathcal{L}(D))$ matrice ovog digrafa.

Kako je $L = B_{in}^T B_{out}$ matrica susedstva digrafa grana $\mathcal{L}(D)$ digrafa D (vidi [14]), gde su B_{in} i B_{out} ulazna i izlazna matrica incidencije digrafa D , respektivno, nalazimo da je:

$$N_{out}(\mathcal{L}(D)) = r B_{in}(D)^T B_{in}(D),$$

jer je dijagonalna matrica izlaznih, odnosno ulaznih stepeni čvorova digrafa D :

$$\Delta = rI = B_{in}B_{in}^T = B_{out}B_{out}^T.$$

Shodno lemi 8.2.3 iz [39] biće:

$$\det(I - B_{in}(D)B_{in}^T(D)) = \det(I - B_{in}^T(D)B_{in}(D)),$$

odnosno

$$\det(I_n - x^{-1}rI_n) = \det\left(I_m - x^{-1}\frac{1}{r}N_{out}(\mathcal{L}(D))\right).$$

Dalje je:

$$\begin{aligned} x^{m-n} \det(xI_n - rI_n) &= \det\left(xI_m - \frac{1}{r}N_{out}(\mathcal{L}(D))\right), \\ \det((x - r + 1)I_n - I_n) &= x^{n-m} \frac{1}{r^m} \det(rxI_m - N_{out}(\mathcal{L}(D))), \\ N_{\vec{C}_n}(x - r + 1) &= x^{n-m} \frac{1}{r^m} N_{\mathcal{L}(D)}(rx), \end{aligned}$$

odnosno

$$N_{\mathcal{L}(D)}(x) = x^{m-n}(x - r^2)^n,$$

odakle sledi dokaz. ■

Dakle, spektar digrafa $\mathcal{L}^k(D)$ r -regularnog digrafa D sastoji se od: $[r^2]^{n_k} = [r^2]^{nr^k}$ i $[0]^{(r-1)n_k} = [0]^{(r-1)r^k n}$. Shodno tome, možemo da zaključimo da su iterativni digrafovi grana $\mathcal{L}^k(D_1)$ i $\mathcal{L}^k(D_2)$ dva regularna digrafa D_1 i D_2 istog reda n i istog stepena regularnosti r uvek N -kospektralni, bez obzira na kospektralnost digrafova D_1 i D_2 . Ovim je dokazana:

Posledica 4.3.1 *Neka su D_1 i D_2 regularni digrafovi reda n i stepena regularnosti r . Tada su za svako $k \geq 1$ digrafovi $\mathcal{L}^k(D_1)$ i $\mathcal{L}^k(D_2)$ N -kospektralni, nezavisno od kospektralnosti digrafova D_1 i D_2 .*

4.4 Multigrafovi i $(X - Y)$ -kospektralnost

U uvodnom poglavlju smo spomenuli da se grafovi koji imaju iste spektre u odnosu na određenu matricu, kao što je, na primer, matrica susedstva ili nenegativna Laplasova matrica, nazivaju *izospektralnim* ili *kospektralnim grafovima* (za detalje vidi [26]). Sledećom definicijom uopštavamo pojam kospektralnosti:

Definicija 4.4.1 *Multi(di)grafovi \mathcal{G}_1 i \mathcal{G}_2 čiji je spektar isti u odnosu na matrice X i Y , respektivno nazivaju se $(X - Y)$ -kospektralni multi(di)grafovi.*

U nastavku, za dati digraf $D = (V(D), A(D))$, sa skupom čvorova $V(D) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ definišemo multigrafove koji predstavljaju njegove $(N - A)$ -kospektralne parnjake, gde je A matrica susedstva odgovarajućeg multigrafa, a N jedna od matrica N_{in} , odnosno N_{out} datog digrafa.

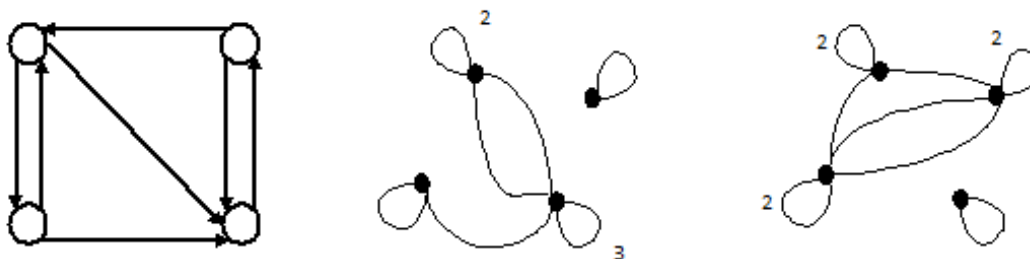
Definicija 4.4.2 *Ulazni multigraf (engl. in-multigraph) $M_D^- = (V(M_D^-), E(M_D^-))$ digrafa D jeste multigraf takav da je $V(M_D^-) = V(D)$, $\{v_i, v_j\} \in E(M_D^-)$ ako i samo ako postoji čvor $v_k \in V(D)$ tako da je $(v_k, v_i), (v_k, v_j) \in A(D)$, i za svaku granu (v_k, v_i) u D postoji petlja u čvoru v_i multigrafa M_D^- .*

Dakle, broj grana između čvorova v_i i v_j multigrafa M_D^- jednak je broju njihovih zajedničkih zadnjih suseda. Iz načina na koji je dati multigraf formiran jasno je da je njegova matrica susedstva A jednaka N_{in} matrici digrafa D , tj. $A(M_D^-) = N_{in}(D)$, što znači da su digraf D i multigraf M_D^- $(N - A)$ -kospektralni.

Definicija 4.4.3 *Izlazni multigraf (engl. out-multigraph), čija je oznaka $M_D^+ = (V(M_D^+), E(M_D^+))$, digrafa D jeste multigraf takav da je $V(M_D^+) = V(D)$, $\{v_i, v_j\} \in E(M_D^+)$ ako i samo ako postoji čvor $v_k \in V(D)$ tako da je $(v_i, v_k), (v_j, v_k) \in A(D)$, i za svaku granu (v_i, v_k) u D postoji petlja u čvoru v_i multigrafa M_D^+ .*

Iz definicije je jasno da je broj grana između čvorova v_i i v_j u multigrafu M_D^+ jednak broju njihovih zajedničkih prednjih suseda u digrafu D . U ovom slučaju važi da je $A(M_D^+) = N_{out}(D)$, pa je A -spektar multigrafa M_D^+ jednak N -spektaru digrafa D , odnosno digraf D i multigraf M_D^+ su $(N - A)$ -kospektralni.

Kako su spektri matrica N_{in} i N_{out} isti, zaključujemo da su multigrafovi M_D^+ i M_D^- kospektralni u odnosu na matricu susedstva. Stoga, izloženi postupak za formiranje multigrafova koji odgovaraju datim digrafovima predstavlja jedan od načina da se konstruišu parovi kospektralnih, i ne nužno izomorfni, multigrafova.



Slika 4.5: Digraf iz Primera 4.4.1 i odgovarajući ulazni i izlazni multigraf, redom

Primer 4.4.1 Na slici 4.5 prikazan je digraf D reda 4, čije su matrica susedstva A , N_{out} i N_{in} matrica, redom jednake:

$$A(D) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, N_{out}(D) = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 2 \end{pmatrix}, i N_{in}(D) = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ulazni multigraf M_D^- i izlazni multigraf M_D^+ datog digrafa D prikazani su takođe na Slici 4.5, gde numerička vrednost pored petlje u grafu ukazuje na broj petlji u datom čvoru. Odgovarajuće matrice susedstva ovih multigrafova redom su jednake:

$$A(M_D^-) = N_{in}(D) = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, odnosno A(M_D^+) = N_{out}(D) = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Napomena 4.4.1 Za konverzni digraf $Conv(D)$ datog digrafa D , važi:

$$A(M_D^+) = N_{out}(D) = N_{in}(Conv(D)) = A(M_{Conv(D)}^-),$$

odnosno

$$A(M_D^-) = N_{in}(D) = N_{out}(Conv(D)) = A(M_{Conv(D)}^+).$$

U nastavku odeljka govorimo o $(N - Q)$ -kospektralnosti digrafova i multigrafova, gde je matrica Q nenegativna Laplasova matrica (multi)grafa. Narednim tvrđenjem odredićemo $(N - Q)$ -kospektralne parnjake regularnog digrafa.

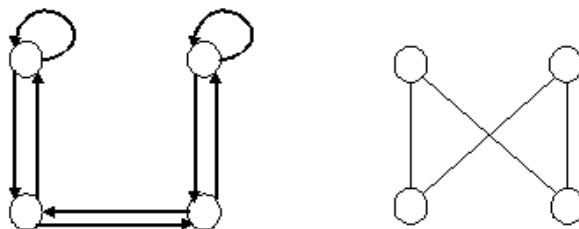
Teorema 4.4.1 Neka je $D = (V(D), A(D))$ povezan r -regularan digraf reda n . Tada je $N_{out}(D) = Q(M)$ za neki r -regularan multigraf M bez petlji ako i samo ako je $r = 0$ ili $r = 2$.

Dokaz. Kako je D r -regularan digraf, to je $N_{out}(D) = rI + C$. Svi dijagonalni elementi matrice C jednaki su 0, a suma elemenata svake njene vrste je $r(r - 1)$.

Ako je $N_{out}(D) = [n_{ij}]$ nenegativna Laplasova matrica nekog multigrafa bez petlji, to važi da je $n_{ii} = r = r(r - 1) = \sum_{j \neq i} n_{ij}$, za svako $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, odnosno $r = 0$ ili $r = 2$. Ako je $N_{out}(D)$ nenegativna Laplasova matrica multigrafa koji ima petlju bar u jednom čvoru, neka je to $v_i \in V(D)$, to za elemente i -te vrste ove matrice važi $n_{ii} = r > r(r - 1) = \sum_{j \neq i} n_{ij}$. Ova nejednakost je zadovoljena za $r = 1$, pa imamo da je $N_{out} = I$, gde je I jedinična matrica. Kako ne postoji

multigraf čija je nenegativna Laplasova matrica jedinična matrica I , s obzirom na prethodno, zaključujemo da je $r = 0$ ili $r = 2$.

Obratno, ukoliko je $r = 0$, digraf D se sastoji od izolovanih čvorova, pa je $N_{out}(D) = Q(M)$ za multigraf M koji se takođe sastoji od izolovanih čvorova. Ukoliko je $r = 2$, to je $n_{ii} = r = r(r - 1) = \sum_{j \neq i} n_{ij}$, za svako $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, pa za neki 2-regularan multigraf M bez petlji imamo da je $Q(M) = N_{out}(D)$. ■



Slika 4.6: $(N - Q)$ -kospektralni par iz Primera 4.4.2

Primer 4.4.2 $N_{out}(D)$ matrica 2-regularnog digrafa D koji je prikazan na Slici 4.6 je:

$$N_{out}(D) = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = A(M) + D(M),$$

gde je $A(M) + D(M) = Q(M)$ nenegativna Laplasova matrica odgovarajućeg $(N - Q)$ -kospektralnog parnjaka M datog digrafa.

Primer 4.4.3 Za 3-regularni digraf čija je N_{out} matrica:

$$N_{out}(D) = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 & 0 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & 0 & 2 & 2 & 1 \\ 2 & 0 & 3 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 1 & 3 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 1 & 1 & 3 & 0 \\ 1 & 1 & 2 & 2 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

ne postoji multigraf čija je nenegativna Laplasova matrica $Q(M) = N_{out}(D)$.

U daljem tekstu ćemo razmatrati disjunktne digrafove $D_1 = (V(D_1), A(D_1))$ i $D_2 = (V(D_2), A(D_2))$, odnosno digrafove bez zajedničkih čvorova i grana tj. $V(D_1) \cap V(D_2) = \emptyset$ i $A(D_1) \cap A(D_2) = \emptyset$.

Definicija 4.4.4 *Izlazno spajanje (engl. out-join) $D_1 \nabla_{out} D_2$ disjunktних digrafova $D_1 = (V(D_1), A(D_1))$ i $D_2 = (V(D_2), A(D_2))$ jeste digraf $D = (V(D), A(D))$ takav da je $V(D) = V(D_1) \cup V(D_2)$ i $A(D) = A(D_1) \cup A(D_2) \cup \{(u, v) | u \in V(D_1), v \in V(D_2)\}$, za svako $u \in V(D_1)$ i svako $v \in V(D_2)$.*

Očigledno je da ovako definisana digrafovska operacija nije komutativna, tj. $D_1 \nabla_{out} D_2 \neq D_2 \nabla_{out} D_1$. Ukoliko je n_1 red digrafa D_1 i n_2 red digrafa D_2 , rezultujući digraf $D = D_1 \nabla_{out} D_2$ ima $n_1 + n_2$ čvorova i $m_1 + m_2 + n_1 n_2$ grana, gde su m_1 i m_2 brojevi grana digrafova D_1 i D_2 , respektivno. $N_{out}(D) = N_{out}(D_1 \nabla_{out} D_2)$ matrica digrafa $D = D_1 \nabla_{out} D_2$ ima sledeću strukturu:

$$N_{out}(D) = N_{out}(D_1 \nabla_{out} D_2) = \begin{pmatrix} A_1 & J \\ O & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^T & O^T \\ J^T & A_2^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_{out}(D_1) + JJ^T & (A_2 J^T)^T \\ A_2 J^T & N_{out}(D_2) \end{pmatrix}.$$

Ovde su A_1 i A_2 matrice susedstva digrafova D_1 i D_2 , respektivno, dok je J matrica čiji su svi elementi jednaki 1. Uz to, naglasimo da je svaki element j -te vrste, $j = 1, 2, \dots, n_2$ matrice $A_2 J^T$ jednak $outdeg_{D_2}(u_j)$, gde je $u_j \in V(D_2)$.

Na sličan način možemo da govorimo o:

Definicija 4.4.5 *Ulazno spajanje (engl. in-join) $D_1 \nabla_{in} D_2$ disjunktних digrafova $D_1 = (V(D_1), A(D_1))$ i $D_2 = (V(D_2), A(D_2))$ jeste digraf $D = (V(D), A(D))$ takav da je $V(D) = V(D_1) \cup V(D_2)$ i $A(D) = A(D_1) \cup A(D_2) \cup \{(v, u) | v \in V(D_2), u \in V(D_1)\}$, za svako $u \in V(D_1)$ i svako $v \in V(D_2)$.*

S obzirom na prethodnu definiciju, važi: $D_1 \nabla_{out} D_2 = D_2 \nabla_{in} D_1$.

Definicija 4.4.6 *Spajanje (engl. join) $D_1 \nabla D_2$ digrafova $D_1 = (V(D_1), A(D_1))$ i $D_2 = (V(D_2), A(D_2))$ koji su disjunktни jeste digraf $D = (V(D), A(D))$ takav da je $V(D) = V(D_1) \cup V(D_2)$ i $A(D) = A(D_1 \nabla_{out} D_2) \cup A(D_1 \nabla_{in} D_2) \setminus (A(D_1) \cup A(D_2))$.*

Dakle, skup grana digrafa $D = D_1 \nabla D_2$ je:

$$A(D) = A(D_1) \cup A(D_2) \cup \{(u, v), (v, u) | u \in V(D_1), v \in V(D_2)\},$$

za svako $u \in V(D_1)$ i svako $v \in V(D_2)$.

Sada možemo dokazati sledeću:

Teorema 4.4.2 *Za digraf $D = D_1 \nabla_{out} D_2$ koji je rezultat izlaznog spajanja povezanih disjunktних digrafova D_1 i D_2 čiji je red n_1 i n_2 , respektivno, postoji multigraf M takav da je $N_{out}(D) = Q(M)$ ako i samo ako je D_2 korensko orijentisano stablo ili unicikličan digraf izveden iz ovog stabla. Specijalno, ako je D_2 izolovan čvor³, onda je D_1 digraf reda $n_1 \leq 2$ ili je 1-regularan digraf reda 3. U ovom slučaju ne postoji digraf D_1 reda $n_1 \geq 4$ takav da je $N_{out}(D) = Q(M)$. Ako digraf D_2 nije izolovan čvor, tada mora biti $n_1 = 1$.*

Dokaz. Označimo sa $V(D_1) = \{u_1, u_2, \dots, u_{n_1}\}$ i $V(D_2) = \{v_1, v_2, \dots, v_{n_2}\}$ skupove čvorova digrafova D_1 i D_2 , respektivno.

Ako je matrica

$$N_{out}(D) = \begin{pmatrix} N_{out}(D_1) + JJ^T & (A_2 J^T)^T \\ A_2 J^T & N_{out}(D_2) \end{pmatrix}$$

nenegativna Laplasova matrica nekog multigrafa, tada za elemente ove matrice važi da je:

$$n_{kk}(N_{out}(D)) \geq \sum_{l=1, l \neq k}^{n_1+n_2} n_{kl}(N_{out}(D)), \quad (4.2)$$

za svako $k = 1, 2, \dots, n_1 + n_2$. Za $k = n_1 + 1, n_1 + 2, \dots, n_1 + n_2$ prethodna nejednakost zapravo znači da je: $outdeg_{D_2}(v_p) \geq n_1 \times outdeg_{D_2}(v_p) +$ ukupan broj zajedničkih prednjih suseda čvora v_p sa ostalim čvorovima digrafa D_2 u D_2 , za svako $p = 1, 2, \dots, n_2$. Da bi poslednja nejednakost bila zadovoljena to ni jedan čvor digrafa D_2 ne bi trebalo da ima zajedničke prednje susede ni sa jednim drugim čvorom digrafa D_2 u D_2 . To prema Tvrdjenju 4.2.2 znači da je D_2 korensko orijentisano stablo ili unicikličan digraf izveden iz ovog stabla. Uz to, ako D_2 nije izolovan čvor, onda u D_2 postoji sigurno jedan čvor v_p takav da je $outdeg_{D_2}(v_p) \geq 1$, pa mora biti $n_1 = 1$.

Ako je D_2 izolovan čvor, nejednakost (4.2) se za $k = 1, 2, \dots, n_1$ svodi na:

$$n_{kk}(N_{out}(D_1)) \geq \sum_{l=1, l \neq k}^{n_1} n_{kl}(N_{out}(D_1)) + n_1 - 2. \quad (4.3)$$

Razmotrimo u tom slučaju strukturu digrafa D_1 .

Ako je $n_1 = 1$, relacija (4.3) postaje:

$$outdeg_{D_1}(u_1) \geq 0 - 1,$$

³Ovde podrazumevamo da takav čvor nema petlju.

što važi jer je izlazni stepen čvora u_1 u digrafu D_1 nenegativan broj.

Kada je $n_1 = 2$, relacija (4.3) ima sledeći oblik:

$$outdeg_{D_1}(u_p) \geq \sum_{q=1, q \neq p}^2 n_{pq}(N_{out}(D_1)), \quad (4.4)$$

za svako $p = 1, 2$. Izlazni stepeni čvorova digrafa D_1 tada mogu biti 0, 1 ili 2, pa je mogućí broj njihovih zajedničkih prednjih suseda redom jednak 0, 0 ili 1, i 0, 1 ili 2, što znači da je relacija (4.4) zadovoljena.

Razmotrimo sada slučaj kada je $n_1 = 3$. Tada relacija (4.3) postaje:

$$outdeg_{D_1}(u_p) \geq \sum_{q=1, q \neq p}^3 n_{pq}(N_{out}(D_1)) + 1, \quad (4.5)$$

pa da bi bila zadovoljena mora biti $3 \geq outdeg_{D_1}(u_p) \geq 1$, za svako $p = 1, 2, 3$. Neka je u_1 proizvoljan čvor digrafa D_1 . Ukoliko je $outdeg_{D_1}(u_1) = 3$, to znači da je $indeg_{D_1}(u_1) = indeg_{D_1}(u_2) = indeg_{D_1}(u_3) = 1$, pa kako izlazni stepen čvorova u_2 i u_3 mora biti barem 1, to relacija (4.5) neće biti zadovoljena za svaki čvor digrafa. Ako je $outdeg_{D_1}(u_1) = 2$, to zbog $outdeg_{D_1}(u_2), outdeg_{D_1}(u_3) \geq 1$, relacija (4.5) neće biti zadovoljena barem za jedan čvor $u_p, p \in \{1, 2, 3\}$ digrafa D_1 . I naposljetku, ukoliko je $outdeg_{D_1}(u_1) = 1$, relacija (4.5) će biti zadovoljena ako i samo ako je $\sum_{q=1, q \neq i}^3 n_{1q}(N_{out}(D_1)) = 0$. Kako izlazni stepen svakog čvora mora biti barem 1, to sledi da je D_1 1-regularan digraf.

U nastavku ćemo pokazati da ne postoji digraf D_{n_1} reda $n_1 \geq 4$ čiji svi čvorovi zadovoljavaju relaciju (4.3). Dokaz ćemo izvesti primenom principa matematičke indukcije po broju čvorova n_1 digrafa D_{n_1} .

Neka je $n_1 = 4$. Relacija (4.3) tada postaje:

$$outdeg_{D_4}(u_p) \geq \sum_{q=1, q \neq p}^4 n_{pq}(N_{out}(D_4)) + 2, \quad (4.6)$$

za svako $p = 1, 2, 3, 4$. Kako je $\sum_{q=1, q \neq p}^4 n_{pq}(N_{out}(D_4)) \geq 0$ za svako p , da bi relacija (4.3) bila zadovoljena, trebalo bi da je $4 \geq outdeg_{D_4}(u_p) \geq 2$, za svako $p = 1, 2, 3, 4$. Uočimo proizvoljan čvor u_1 digrafa D_4 . Ako je $outdeg_{D_4}(u_1) = 4$, tada je $indeg_{D_4}(u_1) = indeg_{D_4}(u_2) = indeg_{D_4}(u_3) = indeg_{D_4}(u_4) = 1$, pa kako izlazni stepen svakog čvora mora biti barem 2, relacija (4.6) neće biti zadovoljena za svaki čvor digrafa D_4 . Slično, ako je $outdeg_{D_4}(u_1) = 3$ ili $outdeg_{D_4}(u_1) = 2$, kako izlazni

stepen svakog čvora mora biti barem 2, relacija (4.6) neće biti zadovoljena za svaki čvor digrafa D_4 .

Dakle, pokazali smo da u digrafu D_4 reda 4 postoji barem jedan čvor koji ne zadovoljava relaciju (4.6), tj. takav da je $outdeg_{D_4}(u_p) < \sum_{q=1, q \neq p}^4 n_{pq}(N_{out}(D_4)) + 2$, za barem jedno $p \in \{1, 2, 3, 4\}$.

Pretpostavimo da u digrafu reda s postoji barem jedan čvor koji ne zadovoljava relaciju (4.3).

Posmatrajmo digraf D_{s+1} reda $s + 1$. Uklanjanjem jednog čvora ovog digrafa i njemu incidentnih grana, dobijamo digraf D_s reda s u kome, prema induktivnoj hipotezi, postoji barem jedan čvor, označimo ga sa u_x , koji ne zadovoljava relaciju (4.3), tj. takav da je

$$outdeg_{D_s}(u_x) < \sum_{q=1, q \neq x}^s n_{xq}(N_{out}(D_s)) + s - 2.$$

Ukoliko vratimo uklonjeni čvor i njemu incidentne grane, tada za prethodno uočeni čvor u_x u digrafu D_{s+1} reda $s + 1$ važi:

$$outdeg_{D_{s+1}}(u_x) \leq outdeg_{D_s}(u_x) + 1 < \sum_{q=1, q \neq x}^s n_{xq}(N_{out}(D_s)) + s - 2 + 1 \leq \sum_{q=1, q \neq x}^{s+1} n_{xq}(N_{out}(D_{s+1})) + s - 1.$$

Dakle, prema principu matematičke indukcije pokazano je da u slučaju kada je D_2 izolovan čvor ne postoji digraf D_1 reda $n_1 \geq 4$ takav da je $N_{out}(D) = N_{out}(D_1 \nabla_{out} D_2) = Q(M)$.

Dokažimo obrat tvrđenja. Ako je $n_1 = 1$ i ni jedan par čvorova digrafa D_2 nema zajedničke prednje susede u D_2 , matrica $N_{out}(D)$ ima sledeću strukturu:

$$N_{out}(D) = \begin{pmatrix} outdeg_D(u_1) & outdeg_{D_2}(v_1) & outdeg_{D_2}(v_2) & \dots & outdeg_{D_2}(v_{n_2}) \\ outdeg_{D_2}(v_1) & outdeg_{D_2}(v_1) & 0 & \dots & 0 \\ outdeg_{D_2}(v_2) & 0 & outdeg_{D_2}(v_2) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ outdeg_{D_2}(v_{n_2}) & 0 & 0 & \dots & outdeg_{D_2}(v_{n_2}) \end{pmatrix}.$$

Kako u D_2 ne postoje čvorovi sa zajedničkim prednjim susedima, to imamo da je: $\sum_{i=1}^{n_2} outdeg_{D_2}(v_i) \leq n_2 = outdeg_D(u_1)$, ako kod čvora u_1 digrafa D_1 nema petlje, odnosno $\sum_{i=1}^{n_2} outdeg_{D_2}(v_i) \leq n_2 < n_2 + 1 = outdeg_D(u_1)$, ako kod čvora u_1 postoji petlja, tj. $D_1 = \vec{K}_1$. U ovom slučaju je matrica $N_{out}(D)$ nenegativna Laplasova matrica nekog multigrafafa M .

Ukoliko je, pak, $n_2 = 1$ i kod jedinstvenog čvora digrafa D_2 nema petlje, N_{out} matrica digrafa D ima oblik:

$$N_{out}(D) = \begin{pmatrix} N_{out}(D_1) + JJ^T & O^T \\ O & 0 \end{pmatrix},$$

pa se neposrednom proverom za slučaj da je $n_1 \leq 2$ ili da je D_1 1-regularan digraf reda 3 pokazuje da važi:

$$n_{kk}(N_{out}(D_1)) \geq \sum_{l=1, l \neq k}^{n_1} n_{kl}(N_{out}(D_1)) + n_1 - 2,$$

za svako $k = 1, 2, \dots, n_1$, odnosno da je $N_{out}(D)$ nenegativna Laplasova matrica nekog multigrafa. ■

Napomena 4.4.2 *Iz prethodne teoreme možemo da zaključimo da je matrica N_{out} digrafa $D = D_1 \nabla_{out} D_2$, koji je rezultat izlznog spajanja izolovanog čvora D_1 (ili izolovanog čvora sa petljom, $D_1 = \overleftrightarrow{K}_1$) sa povezanim r -regularnim digrafom D_2 reda n_2 , gde je $r > 0$, nenegativna Laplasova matrica $Q(M)$ nekog multigrafa M ako i samo ako je $r = 1$. U tom slučaju je:*

$$N_{out}(D) = \begin{pmatrix} n_2 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix},$$

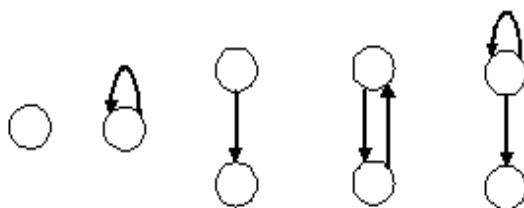
ukoliko je D_1 izolovan čvor, odnosno:

$$N_{out}(D) = \begin{pmatrix} n_2 + 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix},$$

ukoliko je $D_1 = \overleftrightarrow{K}_1$, pa je odgovarajući multigraf parnjak zvezda tj. $M = S_{n_2+1}$, odnosno zvezda sa petljom.

Teorema 4.4.3 *Za digraf $D = D_1 \nabla D_2$ koji je rezultat spajanja povezanih disjunkt-nih digrafova D_1 i D_2 čiji je red n_1 i n_2 , respektivno postoji multigraf M takav da je $N_{out}(D) = Q(M)$ ako i samo ako je:*

1. jedan od digrafova D_1 i D_2 je izolovan čvor, a drugi jedan od sledećih digrafova: izolovan čvor, čvor sa petljom, dva čvora povezana granom, dva čvora povezana dvema granama tako da je $\text{indeg}(v_1) = \text{indeg}(v_2) = 1$ ili dva čvora povezana granom sa petljom kod jednog čvora tako da ni jedan od ta dva čvora nema ulazni stepen jednak 2 (Slika 4.7);
2. oba digrafa su čvorovi sa petljom, odnosno $D_1 = D_2 = \overleftrightarrow{K}_1$.



Slika 4.7: Digrafovi iz Teoreme 4.4.3

Dokaz. Označimo sa $V(D_1) = \{v_1, v_2, \dots, v_{n_1}\}$ i $V(D_2) = \{u_1, u_2, \dots, u_{n_2}\}$ skupove čvorova digrafova D_1 i D_2 , respektivno. $N_{out}(D)$ matrica digrafa D ima sledeću strukturu:

$$N_{out}(D) = N_{out}(D_1 \nabla D_2) = \begin{pmatrix} A_1 & J^T \\ J & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^T & J^T \\ J & A_2^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_{out}(D_1) + J^T J & A_1 J^T + J^T A_2^T \\ (A_1 J^T + J^T A_2^T)^T & N_{out}(D_2) + J J^T \end{pmatrix},$$

gde su A_1 i A_2 matrice susedstva digrafova D_1 i D_2 , respektivno. Uz to, matrica $A_1 J^T + J^T A_2^T$ je sledećeg oblika:

$$A_1 J^T + J^T A_2^T = \begin{pmatrix} \text{outdeg}_{D_1}(v_1) + \text{outdeg}_{D_2}(u_1) & \cdots & \text{outdeg}_{D_1}(v_1) + \text{outdeg}_{D_2}(u_{n_2}) \\ \text{outdeg}_{D_1}(v_2) + \text{outdeg}_{D_2}(u_1) & \cdots & \text{outdeg}_{D_1}(v_2) + \text{outdeg}_{D_2}(u_{n_2}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{outdeg}_{D_1}(v_{n_1}) + \text{outdeg}_{D_2}(u_1) & \cdots & \text{outdeg}_{D_1}(v_{n_1}) + \text{outdeg}_{D_2}(u_{n_2}) \end{pmatrix}.$$

Ako je $N_{out}(D)$ nenegativna Laplasova matrica, onda za vrste $1, 2, \dots, n_1$ matrice $N_{out}(D)$ važi da je:

$$n_{ii}(N_{out}(D_1)) + n_2 \geq \sum_{j=1, j \neq i}^{n_1} (n_{ij}(N_{out}(D_1)) + n_2) + n_2 \times \text{outdeg}_{D_1}(v_i) + \sum_{k=1}^{n_2} \text{outdeg}_{D_2}(u_k),$$

za svako $i = 1, 2, \dots, n_1$, dok za vrste $n_1 + 1, n_1 + 2, \dots, n_1 + n_2$ imamo da je:

$$n_{kk}(N_{out}(D_2)) + n_1 \geq \sum_{l=1, l \neq k}^{n_2} (n_{kl}(N_{out}(D_2)) + n_1) + n_1 \times outdeg_{D_2}(u_k) + \sum_{i=1}^{n_1} outdeg_{D_1}(v_i),$$

za svako $k = 1, 2, \dots, n_2$.

Nakon sređivanja, prethodne relacije postaju:

$$outdeg_{D_1}(v_i) + n_2 \geq \sum_{j=1, j \neq i}^{n_1} n_{ij}(N_{out}(D_1)) + (n_1 - 1)n_2 + n_2 \times outdeg_{D_1}(v_i) + m_2, \quad (4.7)$$

za svako $i = 1, 2, \dots, n_1$, odnosno

$$outdeg_{D_2}(u_k) + n_1 \geq \sum_{l=1, l \neq k}^{n_2} n_{kl}(N_{out}(D_2)) + (n_2 - 1)n_1 + n_1 \times outdeg_{D_2}(u_k) + m_1, \quad (4.8)$$

za svako $k = 1, 2, \dots, n_2$, gde su m_1 i m_2 brojevi grana digrafova D_1 i D_2 , respektivno.

U nastavku ćemo najpre pokazati da je $n_1 < 3$. Naime, za $n_1 \geq 3$ iz (4.7) imamo da je:

$$outdeg_{D_1}(v_i) + n_2 \geq \sum_{j=1, j \neq i}^{n_1} n_{ij}(N_{out}(D_1)) + (3 - 1)n_2 + n_2 \times outdeg_{D_1}(v_i) + m_2,$$

za svako $i = 1, 2, \dots, n_1$, odnosno

$$outdeg_{D_1}(v_i) \geq \sum_{j=1, j \neq i}^{n_1} n_{ij}(N_{out}(D_1)) + (outdeg_{D_1}(v_i) + 1)n_2 + m_2,$$

pa kako je $n_2 \geq 1$, odavde imamo da je:

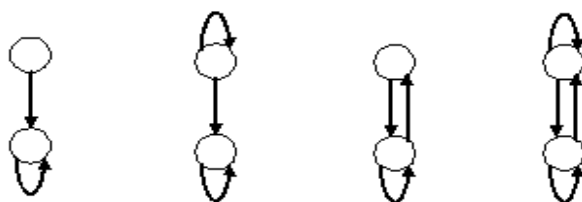
$$outdeg_{D_1}(v_i) \geq \sum_{j=1, j \neq i}^{n_1} n_{ij}(N_{out}(D_1)) + outdeg_{D_1}(v_i) + 1 + m_2,$$

za svako $i = 1, 2, \dots, n_1$.

Na analogan način može da se pokaže da je $n_2 < 3$.

Detaljnim razmatranjem relacija (4.7) i (4.8) za $n_1 = 1$ i $m_1 = 0$, $n_1 = 1$ i $m_1 = 1$, $n_1 = 2$ i $m_1 = 1$, $n_1 = 2$ i $m_1 = 2$, $n_1 = 2$ i $m_1 = 3$, i $n_1 = 2$ i $m_1 = 4$, dolazi se do strukturalnih karakteristika digrafova D_1 i D_2 iz formulacije teoreme.

Obrat tvrđenja se dokazuje direktnom proverom. ■



Slika 4.8: Digrafovi reda 2 koji ne mogu učestvovati u operaciji spajanja iz Teoreme 4.4.3

Definicija 4.4.7 Sparivanje (engl. matching) $D_1 +_M D_2$ disjunktnih digrafova $D_1 = (V(D_1), A(D_1))$ i $D_2 = (V(D_2), A(D_2))$ istog reda n jeste digraf $D = (V(D), A(D))$ takav da je $V(D) = V(D_1) \cup V(D_2)$ i $A(D) = A(D_1) \cup A(D_2) \cup \{a_{1i}, a_{2i}\}$, gde $(\forall i \in \{1, 2, \dots, n\}) (\exists! j \in \{1, 2, \dots, n\}) a_{1i} = (v_i, u_j)$, $a_{2i} = (u_j, v_i)$ i $v_i \in V(D_1)$, $u_j \in V(D_2)$.

Digraf $D = D_1 +_M D_2$ ima $2n$ čvorova i $m_1 + m_2 + 2n$ grana, gde su m_1 i m_2 brojevi grana digrafova D_1 i D_2 , respektivno. Ukoliko su D_1 i D_2 1-regularni digrafovi, digraf $D = D_1 +_M D_2$ je 2-regularan, pa prema Teoremi 4.4.1 postoji multigraf M koji je $(Q - N)$ -kospektralan sa digrafom $D = D_1 +_M D_2$. U opštem slučaju važi sledeća:

Teorema 4.4.4 Neka su D_1 i D_2 povezani disjunktni digrafovi reda n . Tada za digraf $D = D_1 +_M D_2$ postoji multigraf M koji je $(Q - N)$ -kospektralan sa digrafom D ako i samo ako su D_1 i D_2 korenska orijentisana stabla ili uniciklični digrafovi koji iz njih mogu da se izvedu.

Dokaz. Neka su $V(D_1) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ i $V(D_2) = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ skupovi čvorova digrafova D_1 i D_2 , respektivno. $N_{out}(D)$ matrica digrafa $D = D_1 +_M D_2$ ima sledeću strukturu:

$$N_{out}(D) = \begin{pmatrix} A_1 & P \\ P^T & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^T & P \\ P^T & A_2^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_{out}(D_1) + I & A_1 P + P A_2^T \\ (A_1 P + P A_2^T)^T & N_{out}(D_2) + I \end{pmatrix},$$

gde su A_1 i A_2 matrice susedstva digrafova D_1 i D_2 , respektivno, dok je P permutaciona matrica reda n .

Ako je $N_{out}(D)$ nenegativna Laplasova matrica, imamo da je:

$$(\forall i \in \{1, 2, \dots, n\}) (\exists! k \in \{1, 2, \dots, n\})$$

$$outdeg_{D_1}(v_i) + 1 \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n n_{ij}(N_{out}(D_1)) + outdeg_{D_1}(v_i) + indeg_{D_2}(u_k),$$

kao i

$$(\forall i \in \{1, 2, \dots, n\})(\exists! k \in \{1, 2, \dots, n\}) \\ outdeg_{D_2}(u_i) + 1 \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n n_{ij}(N_{out}(D_2)) + outdeg_{D_2}(u_i) + indeg_{D_1}(v_k).$$

Iz prethodnih relacija zaključujemo da je ulazni stepen svakog čvora u digrafova D_1 i D_2 najviše 1, pa ni jedan par čvorova ovih digrafova ne može imati zajedničke prednje susede. To znači da su D_1 i D_2 korenska orijentisana stabla ili unicitlični digrafovi koji mogu iz njih da se izvedu.

Obrat tvrđenja se dokazuje direktnom proverom. ■

Po analogiji sa prethodno definisanim izlaznim i ulaznim spajanjem disjunktних digrafova, možemo da govorimo o izlaznom i ulaznom sparivanju disjunktних digrafova istog reda.

Definicija 4.4.8 *Izlazno sparivanje (engl. out-matching) $D = D_1 +_{M_F} D_2$ disjunktних digrafova $D_1 = (V(D_1), A(D_1))$ i $D_2 = (V(D_2), A(D_2))$ reda n jeste digraf čiji je skup čvorova $V(D) = V(D_1) \cup V(D_2)$ i skup orijentisanih grana $A(D) = A(D_1) \cup A(D_2) \cup \{a_i\}$, gde $(\forall i \in \{1, 2, \dots, n\})(\exists! j \in \{1, 2, \dots, n\}) a_i = (v_i, u_j)$ i $v_i \in V(D_1), u_j \in V(D_2)$.*

Definicija 4.4.9 *Ulazno sparivanje (engl. in-matching) $D = D_1 +_{M_B} D_2$ disjunktних digrafova $D_1 = (V(D_1), A(D_1))$ i $D_2 = (V(D_2), A(D_2))$ reda n jeste digraf čiji je skup čvorova $V(D) = V(D_1) \cup V(D_2)$ i skup orijentisanih grana $A(D) = A(D_1) \cup A(D_2) \cup \{a'_i\}$, gde $(\forall i \in \{1, 2, \dots, n\})(\exists! j \in \{1, 2, \dots, n\}) a'_i = (u_j, v_i)$ i $v_i \in V(D_1), u_j \in V(D_2)$.*

Prethodno definisane digrafovske operacije nisu komutativne. Slično ranije sprovedenim dokazima, može se pokazati da važi i sledeća:

Teorema 4.4.5 *Neka su $D_1 = (V(D_1), A(D_1))$ i $D_2 = (V(D_2), A(D_2))$ povezani disjunktni digrafovi reda n . Tada za digraf $D = D_1 +_{M_F} D_2$ postoji multigraf M koji je $(Q - N)$ -kospektral sa digrafom D ako i samo ako je D_2 korensko orijentisano stablo ili unicitličan digraf koji iz njega može da se izvede, dok u digrafu D_1 važi $(\forall i \in \{1, 2, \dots, n\})(\exists! k \in \{1, 2, \dots, n\}) n_{ii}(N_{out}(D_1)) + 1 \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n n_{ij}(N_{out}(D_1)) + indeg_{D_2}(u_k)$, gde je $u_k \in V(D_2)$.*

LITERATURA

- [1] Anderson J. A., *Discrete Mathematics with Combinatorics*, Pearson Prentice Hall, Pearson Education Inc., New Jersey, 2nd ed., 2004.
- [2] Arsić B., Cvetković D., Simić S.K., Škarić M., *Graph spectral techniques in computer sciences*, *Applicable Analysis and Discrete Mathematics*, **6**(1) (2012), 1–30.
- [3] Bang-Jensen J., Gutin G., *Digraphs: Theory, Algorithms and Applications*, Springer-Verlag, London, Springer Monographs in Mathematics, 2000.
- [4] Behzad M., Chartrand G., Lesniak-Foster L., *Graphs & Digraphs*, Wadsworth International Group, 1981.
- [5] Berge C., *The Theory of Graphs*, Courier Dover Publications, 2001.
- [6] Berman A., Plemmons R. J., *Nonnegative Matrices in Mathematics Science*, New York: Academic Press, 1979.
- [7] Björklund A., Husfeldt T., Koivisto M., *Exact graph coloring using inclusion-exclusion*, u knjizi *Encyclopedia of Algorithms*, Springer US, 2008.
- [8] Björklund A., Husfeldt T., Koivisto M., *Set partitioning via inclusion-exclusion*, *SIAM Journal on Computing*, **39** (2009), 546–563.
- [9] Blondel V.D., Gajardo A., Heymans M., Senellart P., Van Doren P., *A measure of similarity between graph vertices: applications to synonym extraction and web searching*, *SIAM Review*, **46** (2004), No. 4, 647–666.
- [10] Brin S, Page L., *The anatomy of a large-scale hypertextual Web search engine*, *Computer Networks and ISDN Systems*, **33** (1998), 107–117.
- [11] Brin S, Page L., Motwami R., Winograd T., *The PageRank citation ranking: bringing order to the Web*, Technical Report 1999-0120, Computer Science Department, Stanford University, 1999.

-
- [12] Brouwer A.E., Haemers W.H., *Spectra of Graphs*, Springer New York, 2012.
- [13] Brualdi R.A., *Introductory Combinatorics*, Pearson Education International, 2012.
- [14] Brualdi R.A., *Spectra of digraphs*, Linear Algebra and its Applications, **432** (2010), 2181–2213.
- [15] Caporossi G., Cvetković D., Gutman I., Hansen P., *Variable neighborhood search for extremal graphs: 2. Finding graphs with extremal energy*, Journal of Chemical Information and Computer Sciences, **39** (1999), 984–996.
- [16] Caporossi G., Hansen P., *Variable neighborhood search for extremal graphs: 1. The AutoGraphiX system*, Discrete Mathematics, **212** (2000), 29–44.
- [17] Caporossi G., Hansen P., *Variable neighborhood search for extremal graphs: 5. Three ways to automate finding conjectures*, Discrete Mathematics, **276** (2004), 81–94.
- [18] Cvetković D., *Spectral recognition of graphs*, Yugoslav Journal of Operations Research, **20** (2012), No. 2, 145–161.
- [19] Cvetković D., *Spectral Theory of Graphs Based on the Signless Laplacian - Research Report*, u pripremi
- [20] Cvetković D., *Spektralna teorija grafova i kombinatorna teorija matrica - Autoreferati*, Akademska misao, Beograd, 2012.
- [21] Cvetković D., *Teorija grafova, diskretna matematika i računari*, Glas SANU, **381** (1996), No. 58, 61–83.
- [22] Cvetković D., *Teorija grafova i njene primene*, Naučna knjiga, Beograd, treće dopunjeno izdanje, 1990.
- [23] Cvetković D., *Teorija spektara grafova - teorija u kojoj se na specifičan način prepliću matematika i kompjuterske nauke*, Glas SANU, **353** (1988), No. 52, 161–171.
- [24] Cvetković D., *The number of antichains of finite power sets*, Publications de l'Institut Mathématique, Belgrade, **13**(27) (1972), 5–9.
- [25] Cvetković D., Doob M., Gutman I., Torgašev A., *Recent Results in the Theory of Graph Spectra*, North Holland, Amsterdam, 1988.

-
- [26] Cvetković D.M., Doob M., Sachs H., *Spectra of Graphs – Theory and Application*, Johann Ambrosius Barth Verlag, Heidelberg–Leipzig, 3rd edition, 1995.
- [27] Cvetković D., Jovanović I. *Network alignment using self-returning walks*, Bulletin T. CXLV de l' Académie Serbe des sciences et des arts, Classe des sciences mathématiques et naturelles, Sciences mathématiques, No. **38** (2013), 43–61.
- [28] Cvetković D., Petrić M., *A table of connected graphs on six vertices*, Discrete Mathematics, **50** (1984), No. 1, 37–49.
- [29] Cvetković D., Rowlinson P., *Spectra of unicyclic graphs*, Graphs and Combinatorics, **3** (1987), 7–23.
- [30] Cvetković D.M. , Rowlinson P., Simić S., *An Introduction to the Theory of Graph Spectra*, Cambridge University Press, 2010.
- [31] Cvetković D., Rowlinson P., Simić S. K., *Eigenspaces of Graphs*, Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [32] Cvetković D., Simić S., *Towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian, I*, Publications de L'Intitute Mathematique Belgrade, **85** (2009), 19–33.
- [33] Cvetković D., Simić S., *Towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian, II*, Linear Algebra and its Application, **432** (2010), 2257–2272.
- [34] Cvetković D., Simić S., *Towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian, III*, Applicable Analysis and Discrete Mathematics, **4** (2010), 156–166.
- [35] Dam E.R. van, Haemers W., *Which graphs are determined by their spectrum?*, Linear Algebra and its Application, **373**, (2003), 241–272.
- [36] Even S., Gillis J. *Derangements and Laguerre polynomials*, Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, **79** (1976), 135–143.
- [37] Fomin F.V., Kratsch D., *Inclusion-Exclusion*, u knjizi *Exact Exponential Algorithms*, Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [38] Freitas M., Del-Vecchio R., Abreu N., *Spectral properties of KK_n^j graphs*, Matemática Contemporanea, **39** (2010), 129–134.

-
- [39] Godsil C.D., Royle G., *Algebraic Graph Theory, Graduate Texts In Mathematics*, vol. 207, Springer-Verlag, New York, 2001.
- [40] Golub G.H., Van Loan C. *Matrix Computations*, Johns Hopkins University Press, 2006.
- [41] Golub, G.H., van der Vorst, H.A., *Eigenvalue computation in the 20th century*, Journal of Computational and Applied Mathematics, **123** (2000), 35–65.
- [42] Gutman I., *The energy of a graph*, Ber. Math.-Statist. Sect. Forschungsz. Graz, **103** (1978), 1-22.
- [43] Gutman I., *The energy of a graph: old and new results*, u: Algebraic Combinatorics and Applications (Betten A., Kohner A., Laue R., and Wassermann A., eds.), Springer, Berlin, (2001), 196–211.
- [44] Gutman I., Zare Firoozabadi S. , De la Peña J. A., Rada J., *On the energy of regular graphs*, MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, **57** (2007), 435–442.
- [45] Gutman I., Zhou B., *Laplacian energy of a graph*, Linear Algebra and its Application, **414** (2006), 29–37.
- [46] Hansen P., Mladenović N., *Variable neighborhood search: principles and applications*, European Journal of Operational Research, **130** (2001), 449–467.
- [47] Hansen P., Mladenović N, Perez J.A.M., *Variable neighborhood search: methods and applications*, Annals of Operations Research, **175** (2010), 367–407.
- [48] Harary F., *The number of linear, directed, rooted, and connected graphs*, Transactions of the American Mathematical Society, **78** (1955), 445–463.
- [49] Harary F., Buckley F., *Distance in Graphs*, Addison-Wesley Pub.Co., 1990.
- [50] Harary F., Norman R.Z., Cartwright D., *Structural Models: An Introduction to the Theory of Directed Graphs*, New York, Wiley, 1965.
- [51] Indulal G., *Spectrum of two new joins of graphs and infinite families of integral graphs*, Kragujevac Journal of Mathematics, **36** (2012), 133–139.
- [52] Indulal G., Vijayakumar A., *A note on energy of some graphs*, MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, **59** (2008), 269–274.

-
- [53] Jaccard P., *Étude comparative de la distribution florale dans une portion des alpes et des jura*, Bulletin de la Société Vaudoise des Science Naturelles, **37** (1901), 547-579.
- [54] Jovanović I.M., *Closed walks and graphlets*, prihvaćeno za publikovanje u Utilitas Mathematica, UM 13-338.
- [55] Jovanović I.M., *Network alignment algorithms*, Proceedings Of XXXIX Symposium on Operational Research SYM-OP-IS 2012, (2012), 225–228.
- [56] Jovanović I.M., *Non-negative spectrum of a digraph*, u procesu recenzije
- [57] Jovanović I.M., *Pregled osnovnih karakteristika i rezultata sistema AutoGraphiX - Seminarski rad*, Univerzitet u Beogradu, Matematički fakultet, 2013.
- [58] Jovanović I.M., *Some results on spectral distances of graphs*, u procesu recenzije
- [59] Jovanović I.M., Stanić Z., *Spectral distances of graphs*, Linear Algebra and its Application, **436** (2012) 1425–1435.
- [60] Jovanović I.M., Stanić Z., *Spectral distances of graphs based on their different matrix representations*, Filomat, **28:4** (2014) 723–734.
- [61] Kernighan B., Ritchie D., *Programski jezik C*, Prevod drugog izdanja, Prentice Hall Software Series, Savremena administracija, Beograd, 1992.
- [62] Kleinberg J., *Authoritative sources in a hyperlinked environment*, Journal of the ACM, **46**, (1999), 604–632.
- [63] Koolen J., Moulton V., *Maximal energy graphs*, Advances in Applied Mathematics, **26** (2001), 47–52.
- [64] Kuchaiev O., Milenković T., Memišević V., Hayes W., Pržulj N., *Topological network alignment uncovers biological function and phylogeny*, Journal of the Royal Society Interface, **7**(50) (2010), 1341–1354.
- [65] Kuchaiev O., Pržulj N., *Integrative network alignment reveals large regions of global network similarity in yeast and human*, Bioinformatics, **27**(10) (2011), 1390–1396.
- [66] Langville A.N., Meyer C.D., *A survey of eigenvector methods for web information retrieval*, SIAM Review, **47** (2005), No.1, 135–161.

-
- [67] Lempel R., Moran S., *The stochastic approach for link-structure analysis (SALSA) and the TKC effect*, The Ninth International WWW Conference, 2000.
- [68] Liao C.-S., Lu K., Baym M., Singh R., Berger B., *IsorankN: spectral methods for global alignment of multiple protein networks*, *Bioinformatics*, **25** (2009), 253–258.
- [69] McKay, B.D., Piperno, A., *Practical graph isomorphism, {II}*, *Journal of Symbolic Computation*, **60** (2014), 94–112.
- [70] Memišević V., Pržulj N., *C-GRAAL: Common-neighbors-based global GRaph ALignment of biological networks*, *Integrative Biology: quantitative biosciences from nano to macro*, **4**(7) (2012), 734–743.
- [71] Milenković T., Ng W.L., Hayes W., Pržulj N., *Optimal network alignment with graphlet degree vectors*, *Cancer Informatics*, **9** (2010), 121–137.
- [72] Milenković T., Pržulj N., *Uncovering biological network function via graphlet degree signatures*, *Cancer Informatics*, **6** (2008), 257–273.
- [73] Minc H., *Nonnegative Matrices*, New York: Academic Press, 1988.
- [74] Minchenko M., Wanless I.M., *Spectral moments of regular graphs in terms of subgraph counts*, *Linear Algebra and its Application*, **446** (2014), 166–176.
- [75] Mladenović N., Hansen P., *Variable neighborhood search*, *Computers and Operations Research*, **24** (1997), 1097–1100.
- [76] Papadimitriou C., Steiglitz K. *Combinatorial Optimization: Algorithms and Complexity*, Dover, 1998.
- [77] Peeters R., *Uniqueness of Strongly Regular Graphs Having Minimal p-Rank*, *Linear Algebra and its Applications*, (1995), 226–228 : 9–31.
- [78] Petrović M., *The spectrum of infinite complete multipartite graphs*, *Publications De L’Institut Mathématique, Nouvelle série, Belgrade* **31** (45) (1982), 169–176.
- [79] Pinto A., MIREX2007 - *Graph spectral method*, u štampi
- [80] Ramane H.S., Walikar H.B., Rao S.B., Acharya B.D., Hampiholi P.R., Jog S.R., Gutman I., *Spectra and energies of iterated line graphs of regular graphs*, *Applied Mathematics Letters*, **18** (2005), 679–682.

-
- [81] Randall D., O'Neill A., Irani A., *Design and Analysis of Algorithms, Lecture and Notes*, 2005, <http://people.math.gatech.edu/~randall/AlgsF05/nov14.pdf>
- [82] Read R.C., Wilson R.J., *An Atlas of Graphs*, Clarendon Press, 1998.
- [83] Shokoufandeh A., Dickinson S.J., Siddiqi K., Zucker S.W., *Indexing using a spectral encoding of topological structure*, IEEE Transactions on Computer Vision and Pattern Recognition, **2** (1999), 491–497
- [84] Singh R., Xu J., Berger B., *Pairwise global alignment of protein interaction networks by matching neighborhood topology*, Research in Computational Molecular Biology, Springer, (2007), 16–31.
- [85] Stevanović D., *Research problems from the Aveiro workshop on graph spectra*, Linear Algebra and its Applications, **423** (2007), 172–181.
- [86] Stevanović D., *Neke kompozicije grafova i grafovi sa celobrojnim spektrom - Doktorska disertacija*, Univerzitet u Nišu, Prirodno-matematički fakultet, 2000.
- [87] Trefethen L.N., Bau D. III, *Numerical Linear Algebra*, SIAM, 1997.
- [88] Veljan D., *Kombinatorika s teorijom grafova*, Školska knjiga, Zagreb, 1989.
- [89] Wei T.H., *The algebraic foundations of ranking theory*, Thesis, Cambridge, 1952.
- [90] Wu B.-F., Shao J.-Y., Liu Y., *Interlacing eigenvalues on some operations of graphs*, Linear Algebra and its Applications, **430** (2009), 1140–1150.
- [91] Xuan Q., Yu L., Du F., Wu T.J., *A review on node-matching between networks*, New Frontiers in Graph Theory, Ed. Y. Zhang, Intex, Rijeka, 2012, 153-167.
- [92] Xueliang L., Yongtang S., Gutman I., *Graph Energy*, Springer, New York, 2012, XII + 266 pp., ISBN 978-1-4614-4219-6.
- [93] Zaslavskiy M., Bach F., Vert J.-P., *Global alignment of protein-protein interaction networks by graph matching methods*, Bioinformatics, **25** (2009), i259–i267.
- [94] Zhang X.D., Li J.S., *Spectral radius of non-negative matrices and digraphs*, Acta Mathematica Sinica, English Series, **18** (2002), No.2, 293–300.

- [95] Zou L., Chen L., Yu J.X., Lu Y., *A novel spectral coding in a large graph database*, EDBT'08, March 25-30, 2008, Nantes, France.

A Program SDCalc

SDCalc¹ (Jovanović I., Stanić Z.) je jednostavan program namenjen izračunavanju spektralnih rastojanja parova grafova istog reda. Napisan je u programskom jeziku *C++*.

Grafovima čije je spektralno rastojanje (u odnosu na matricu susedstva) potrebno izračunati pristupa se preko odgovarajućih matrica susedstva. Spomenute matrice susedstva predstavljaju izlazni rezultat skupa procedura **nauty**, i deo su .txt fajla koji istovremeno predstavlja ulazne podatke za program **SDCalc**. **Nauty**, od engleskog *no automorphisms, yes?*, jeste program (vidi [69]) za izračunavanje grupa automorfizama grafova i digrafova. Podaci u ulaznom fajlu, pored matrica susedstva određenih grafova, sadrže i imena grafova, koja su u ovom slučaju predstavljena određenim numeričkim vrednostima, kao i red grafova. Naravno, korisniku je ostavljena mogućnost reimenovanja ulaznih fajlova, čija je imena shodno izboru potrebno podesiti u glavnoj programskoj funkciji. Na primer, ulazni fajl koji možemo da nazovemo "tree5" a koji sadrži sva neizomorfna stabla reda 5 generisana pomoću programa **nauty** ima sledeću formu:

Graph 1, order 5.

0 0 0 0 1

0 0 0 0 1

0 0 0 0 1

0 0 0 0 1

1 1 1 1 0

Graph 2, order 5.

0 0 0 1 1

0 0 0 0 1

0 0 0 0 1

1 0 0 0 0

1 1 1 0 0

¹Za detalje i kompletan *C++* kod kontaktirati autora: irenaire@gmail.com.

Graph 3, order 5.

```
0 0 1 0 1
0 0 0 1 1
1 0 0 0 0
0 1 0 0 0
1 1 0 0 0
```

Nakon podešavanja naziva ulaznog fajla u glavnoj programskoj funkciji *main()*, i pokretanja programa, izračunavaju se i sortiraju spektralna rastojanja grafova iz ulaznog fajla. Komunikacija korisnika sa programom obavlja se putem standardnog ulaza, odnosno izlaza, gde korisnik uvek ima trenutni pregled faza rada programa - koji grafovi, odnosno matrice susedstva, su učitani radi dalje obrade, da li se spektralna rastojanja izračunavaju ili je nastupila faza sortiranja. Putem konzolne aplikacije korisnik takođe može da izabere način na koji želi da izračunata i sortirana spektralna rastojanja budu upisana u rezultujućí fajl. Nešto preciznije, mogu da budu realizovane neke od sledećih programskih funkcija:

`void determineKDistances(FILE *f,int k,int choice)` - željeni broj ekstremalnih (najmanjih ili najvećih) spektralnih rastojanja.

`void determineLessMore(FILE* f,real v,int choice)` - spektralna rastojanja koja su manja ili veća od izabrane vrednosti.

`void distancesInInterval(FILE* f,real first,real end)` - spektralna rastojanja u zadatom intervalu.

`void printAllDistances()` - sva spektralna rastojanja.

`void printAllDistancesAscending(FILE* f)` - spektralna rastojanja prikazana u rastućem poretku;

`void printAllDistancesDescending(FILE* f)` - spektralna rastojanja prikazana u opadajućem poretku.

Rezultati izvršavanja programa upisani su u .txt fajl. Intervenisanjem u glavnom programu, odnosno delu koda koji opisuje željenu funkciju, korisnik može da menja nazive fajlova u koje su upisani rezultati. Linije izlaznog .txt fajla sadrže nazive parova grafova za kojim sledi vrednost spektralnog rastojanja (zaokružena na dvanaest decimala) tih grafova. Na primer, izlazni fajl u koji su upisana sva spektralna rastojanja za grafove iz fajla *"tree5"* ima sledeću sadržinu:

1, 2 : 1.83521559941

1, 3 : 2.53589838486

2, 3 : 0.70068278544

Pored željenog rezultujućeg .txt fajla, pokretanjem programa korisnik dobija još jedan izlazni .txt fajl označen kao *graphspectra*. U taj fajl je, pored imena, reda i matrice susedstva grafa, upisan i spektar grafa u odnosu na matricu susedstva. Izračunavanje spektra matrice susedstva, odnosno pripadajućeg grafa, bazirano je na Jakobijevoj iterativnoj metodi za izračunavanje sopstvenih vrednosti i sopstvenih vektora realnih simetričnih matrica (vidi, na primer, [41])

Izračunavanje i sortiranje spektralnih rastojanja realizovano je definisanjem dve strukture podataka, označene kao *GRAPH* i *Distance*. Prva među njima broji tri člana koji se odnose na labelu, odnosno ime grafa, zatim red grafa, i naposljetku spektar grafa. Članovi druge strukture podataka u vezi su sa spektralnim rastojanjem i grafovima za koje je ono izračunato. Sortiranje izračunatih spektralnih rastojanja sprovedeno je parcijalnom obradom podataka koji su organizovani po datotekama, pri čemu je korišćena korisnička funkcija:

```
void qsort (void* base, size_t num, size_t size,  
int (*cmp)(const void*,const void*));
```

iz zaglavlja `< cstdlib >`, (stdlib.h) biblioteke jezika C (vidi [61]), čiji su elementi kao podskup uključeni u C++ Standardnu biblioteku. U nastavku navodimo delove glavnog C++ programa koji se, redom, odnose na izračunavanje i sortiranje spektralnih rastojanja grafova.

```
/*Izracunavanje spektralnih rastojanja */
```

```
FILE *ff,*f1,*f2;  
GRAPH g1,g2;  
f=fopen("array.dat","rb");  
ff=fopen("distances.dat","wb");  
int i,j;  
Distance d;  
long counterd=0;  
for(i=0;i<counter-1;i++)  
{  
    fseek(f,i*sizeof(GRAPH),SEEK_SET);  
    fread(&g1,sizeof(GRAPH),1,f);  
    for(j=i+1;j<counter;j++)
```

```
{
    fseek(f,j*sizeof(GRAPH),SEEK_SET);
    fread(&g2,sizeof(GRAPH),1,f);
    d.graph1=g1.label;
    d.graph2=g2.label;
    real sigma=0;
    for(int i1=0;i1<g1.order;i1++)
        sigma += abs(g1.vector[i1] - g2.vector[i1]);
    d.dst=sigma;
    fwrite(&d,sizeof(Distance),1,ff);
    counterd++;
}
}
fclose(f);
fclose(ff);
```

```
/*Sortiranje spektralnih rastojanja */
```

```
long k=0,n,num=1;
f=fopen("distances.dat","rb+");
f1=fopen("sort1.dat","wb");
f2=fopen("sort2.dat","wb");
while (fread(&d,sizeof(Distance),1,f) && k<10000000)
{
    a[k]=d;
    k++;
}
n=k;
qsort(a,n,sizeof(Distance),compare);
for(k=0;k<n;k++)
{
    fwrite(&a[k],sizeof(Distance),1,f2);
}
fclose(f2);
k=0;
while (fread(&d,sizeof(Distance),1,f))
{
    if(k<10000000)
    {
        a[k]=d;
        k++;
    }
}
```

```
else
{
    n=k;
    qsort(a,n,sizeof(Distance),compare);
    k=0;
    if(num % 2==1)
    {
        f1=fopen("sort1.dat","wb");
        f2=fopen("sort2.dat","rb");
    }
    else
    {
        f1=fopen("sort2.dat","wb");
        f2=fopen("sort1.dat","rb");
    }
    while(k<n && fread(&d,sizeof(Distance),1,f2))
    {
        while(a[k].dst<=d.dst && k<n)
        {
            fwrite(&a[k],sizeof(Distance),1,f1);
            k++;
        }
        fwrite(&d,sizeof(Distance),1,f1);
    }
    while(k<n)
    {
        fwrite(&a[k],sizeof(Distance),1,f1);
        k++;
    }
    while(fread(&d,sizeof(Distance),1,f2))
    {
        fwrite(&d,sizeof(Distance),1,f1);
    }
    num++;
    k=0;
    fclose(f1);
    fclose(f2);
}
}
fclose(f);
if (k>0)
{
    n=k;
```



```
qsort(a,n,sizeof(Distance),compare);
k=0;
if(num%2==1)
{
f1=fopen("sort1.dat","wb");
f2=fopen("sort2.dat","rb");
}
else
{
f1=fopen("sort2.dat","wb");
f2=fopen("sort1.dat","rb");
}
while(k<n && fread(&d,sizeof(Distance),1,f2))
{
while(a[k].dst<=d.dst && k<n)
{
fwrite(&a[k],sizeof(Distance),1,f1);
k++;
}
fwrite(&d,sizeof(Distance),1,f1);
}
while(k<n)
{
fwrite(&a[k],sizeof(Distance),1,f1);
k++;
}
while(fread(&d,sizeof(Distance),1,f2))
{
fwrite(&d,sizeof(Distance),1,f1);
}
num++;
fclose(f1);
fclose(f2);
}

if(num%2==1)
{
f1=fopen("sort1.dat","wb");
f2=fopen("sort2.dat","rb+");
}
else
{
f1=fopen("sort2.dat","wb");
```

```
        f2=fopen("sort1.dat","rb+");  
    }  
    fclose(f1);
```

Naravno, postojeći C++ kod poslužio je za izračunavanje L - i Q -spektralnih razstojanja, s obzirom da su prema definiciji Laplasova matrica i nenegativna Laplasova matrica nastale od matrice susedstva A , tj. $L = D - A$ i $Q = D + A$, gde je matrica D dijagonalna matrica stepena čvorova.

B Spektralna rastojanja grafova malog reda

U ovom Dodatku izloženi su rezultati izračunavanja sprovedenih u programu **SDCalc**.

U Tabelama B.1, B.2, B.3 i B.4 data su A -spektralna rastojanja grafova malog reda iz skupa, redom, svih grafova, povezanih regularnih grafova, povezanih bipartitnih grafova i skupa stabala. Prva kolona ovih tabela označava red grafova, druga kolona vrednost minimalnog nenula A -spektralnog rastojanja, treća kolona sadrži vrednost maksimalnog A -spektralnog rastojanja, dok je u četvrtoj naveden broj parova kospektralnih grafova. Broj parova grafova čije A -spektralno rastojanje pripada numeričkom intervalu oblika $(0, b]$, gde je $b \in \{0.5, 1, 2\}$ naveden je u naredne tri kolone. Poslednja kolona sadrži broj parova grafova čije je rastojanje veće od A -energije kompletnog grafa K_n .

Tabela B.1: A -spektralna rastojanja svih grafova do reda 8

n	$\min \sigma$	$\max \sigma$	$\sigma = 0$	$\sigma \leq 0.5$	$\sigma \leq 1$	$\sigma \leq 2$	$2n - 2 \leq \sigma$
3	0.83	4	0	0	1	4	1
4	0.54	6	0	0	5	29	1
5	0.47	8	1	2	33	211	1
6	0.30	10	5	26	395	3214	1
7	0.22	12	58	345	9283	112937	2
8	0.12	14.33	963	13862	544525	12244923	29

Tabela B.2: A -spektralna rastojanja povezanih regularnih grafova do reda 11

n	$\min \sigma$	$\max \sigma$	$\sigma = 0$	$\sigma \leq 0.5$	$\sigma \leq 1$	$\sigma \leq 2$	$2n - 2 \leq \sigma$
6	2	8	0	0	0	1	0
7	4	11.21	0	0	0	0	0
8	2	13.65	0	0	0	1	0
9	0.93	16	0	0	2	16	2
10	0.90	20	4	0	14	514	34
11	0.52	22.45	28	0	204	8636	186

 Tabela B.3: A -spektralna rastojanja povezanih bipartitnih grafova do reda 11

n	$\min \sigma$	$\max \sigma$	$\sigma = 0$	$\sigma \leq 0.5$	$\sigma \leq 1$	$\sigma \leq 2$	$2n - 2 \leq \sigma$
4	0.54	2	0	0	1	3	0
5	0.70	3.43	0	0	3	7	0
6	0.30	6	0	7	21	78	0
7	0.23	7.59	0	25	134	448	0
8	0.13	10	8	244	1449	6155	0
9	0.10	11.96	102	2136	16071	85262	0
10	0.06	14.94	690	29396	294681	2075391	0
11	0.05	16.42	6416	505931	6985367	$> 10^8$	0

 Tabela B.4: A -spektralna rastojanja stabala do reda 11

n	$\min \sigma$	$\max \sigma$	$\sigma = 0$	$\sigma \leq 0.5$	$\sigma \leq 1$	$\sigma \leq 2$	$2n - 2 \leq \sigma$
5	0.70	2.54	0	0	1	2	0
6	0.48	4.25	0	1	3	10	0
7	0.42	5.56	0	1	12	32	0
8	0.32	7.29	1	10	48	139	0
9	0.25	8.68	5	37	184	539	0
10	0.20	10.38	4	119	750	2577	0
11	0.17	11.79	33	418	2995	11786	0

Tabele B.5, B.6, B.7 i B.8 sadrže slične rezultate. U Tabeli B.5 data su L - i Q -spektralna rastojanja grafova iz skupa svih grafova reda $3 \leq n \leq 8$. Prva kolona tabele sadrži ukupan broj grafova reda n , u drugoj i trećoj koloni date su

vrednosti minimalnog nenula i maksimalnog spektralnog rastojanja, respektivno, dok četvrta kolona sadrži broj parova L -, odnosno Q -kospektralnih grafova. Preostale tri kolone sadrže brojeve parova grafova čije spektralno rastojanje pripada numeričkom intervalu oblika $(0, b]$, gde je $b \in \{0.5, 1, 2\}$. U Tabelama B.6, B.7 i B.8 navedena su L - (i, s obzirom na podudarnost odgovarajućih numeričkih podataka, Q -) spektralna rastojanja grafova malog reda iz klase, redom, povezanih regularnih grafova, povezanih bipartitnih grafova i klase stabala.

Tabela B.5: L - i Q -spektralna rastojanja grafova reda $3 \leq n \leq 8$.

n	# grafovi	min σ_L	max σ_L	$\sigma_L = 0$	$\sigma_L \leq 0.5$	$\sigma_L \leq 1$	$\sigma_L \leq 2$
3	4	2	6	0	0	0	3
4	11	2	12	0	0	0	20
5	34	0.83	20	0	0	2	124
6	156	0.47	30	2	4	48	1357
7	1044	0.36	42	74	26	976	25813
8	12346	0.16	56	1112	1582	55148	1515175

n	# grafovi	min σ_Q	max σ_Q	$\sigma_Q = 0$	$\sigma_Q \leq 0.5$	$\sigma_Q \leq 1$	$\sigma_Q \leq 2$
3	4	2	6	0	0	0	3
4	11	2	12	1	0	0	20
5	34	0.78	20	2	0	5	129
6	156	0.34	30	8	9	85	1450
7	1044	0.25	42	54	119	1813	30720
8	12346	0.13	56	694	3397	93430	2064027

Tabela B.6: L (i Q)-spektralna rastojanja povezanih regularnih grafova do reda 11.

n	min σ_L	max σ_L	$\sigma_L = 0$	$\sigma_L \leq 0.5$	$\sigma_L \leq 1$	$\sigma_L \leq 2$
6	4	18	0	0	0	0
7	4	28	0	0	0	0
8	2.64	40	0	0	0	0
9	0.93	54	0	0	2	16
10	0.90	70	4	0	14	471
11	0.52	88	28	0	204	8636

Tabela B.7: L (i Q)-spektralna rastojanja povezanih bipartitnih grafova do reda 11.

n	$\min \sigma_L$	$\max \sigma_L$	$\sigma_L = 0$	$\sigma_L \leq 0.5$	$\sigma_L \leq 1$	$\sigma_L \leq 2$
4	2	2	0	0	0	3
5	1.38	4	0	0	0	4
6	0.47	8	0	1	2	47
7	0.68	12	2	0	12	201
8	0.50	18	6	1	102	1903
9	0.31	24	54	22	777	16585
10	0.15	32	216	267	9009	243043
11	0.09	40	1718	2077	114346	5051403

 Tabela B.8: L (i Q)-spektralna rastojanja stabala do reda 11.

n	$\min \sigma_L$	$\max \sigma_L$	$\sigma_L = 0$	$\sigma_L \leq 0.5$	$\sigma_L \leq 1$	$\sigma_L \leq 2$
5	1.38	4	0	0	0	1
6	0.92	6	0	0	1	7
7	0.98	8.49	0	0	2	20
8	0.52	10.83	0	0	7	87
9	0.42	13.06	0	1	37	294
10	0.24	15.59	0	3	126	1249
11	0.23	17.98	3	19	472	5222

U Tabelama B.9 i B.10 navedeni su podaci koji se odnose na Q -energije i Q -spektralna rastojanja grafova malog reda iz skupa svih grafova, skupa povezanih regularnih grafova, zatim povezanih bipartitnih grafova i skupa stabala. Prva kolona ovih tabela označava red grafa. U drugoj koloni je data vrednost maksimalne Q -energije, a u trećoj broj parova grafova čije Q -spektralno rastojanje premašuje vrednost maksimalne energije. Četvrta kolona sadrži broj grafova koji imaju maksimalnu Q -energiju, dok su u poslednjoj koloni navedeni grafovi sa maksimalnom Q -energijom. Napominjemo da je u poslednjoj koloni oznaka R_r upotrebljavana za označavanje nekog r -regularnog grafa. Zbog podudaranja numeričkih rezultata za L - i Q -energije i spektralna rastojanja grafova iz klase povezanih bipartitnih grafova i stabala, u Tabelama B.11 i B.12 date su vrednosti L -energija i L -spektralnih rastojanja samo za grafove iz skupa svih grafova do reda 8 i grafova iz skupa povezanih regularnih grafova do reda 11.

Tabela B.9: Q -energije i Q -spektralna rastojanja svih grafova do reda 8 i povezanih regularnih grafova do reda 11

n	$\max QE(G)$	$\sigma \geq \max QE(G)$	No.	G
grafovi				
3	4	3	1	K_3
4	6	18	1	K_4
5	8	148	1	K_5
6	10.93	1573	1	$CS_{2,4}$
7	14.49	34439	1	$CS_{2,5}$
8	18.80	2212476	1	$CS_{3,5}$
povezani regularni grafovi				
6	10	4	1	K_6
7	12	5	1	K_7
8	14	51	2	K_8, R_5
9	16.47	105	1	R_6
10	20	3938	1	R_6
11	22.45	2534	1	R_6

Tabela B.10: Q -energije i Q -spektralna rastojanja povezanih bipartitnih grafova i stabala do reda 11

n	$\max QE(G)$	$\sigma \geq \max QE(G)$	No.	G
povezani bipartitni grafovi				
4	5	0	1	$K_{1,3}$
5	6.8	0	1	$K_{1,4}$
6	9.33	0	1	$K_{2,4}$
7	12.57	0	1	$K_{2,5}$
8	16	103	1	$K_{2,6}$
9	19.56	587	1	$K_{2,7}$
10	23.2	11771	1	$K_{2,8}$
11	27.82	196914	1	$K_{3,8}$
stabla				
5	6.8	0	1	$K_{1,4}$
6	8.67	0	1	$K_{1,5}$
7	10.57	0	1	$K_{1,6}$
8	12.5	0	1	$K_{1,7}$
9	14.44	0	1	$K_{1,8}$
10	16.4	0	1	$K_{1,9}$
11	18.36	0	1	$K_{1,10}$

Tabela B.11: L -energije i L -spektralna rastojanja svih grafova do reda 8

n	$\max LE(G)$	$\sigma \geq \max LE(G)$	G
3	4	3	K_3
4	6	18	$PA_{3,1}, K_3 \cup K_1, K_2 \nabla 2K_1, K_4$
5	9.6	84	$K_4 \cup K_1$
6	13.33	907	$K_5 \cup K_1$
7	17.14	19868	$K_6 \cup K_1, K_5 \cup 2K_1$
8	22.5	686232	$K_6 \cup 2K_1$

Tabela B.12: L -energije i L -spektralna rastojanja povezanih regularnih grafova do reda 11

n	$\max LE(G)$	$\sigma \geq \max LE(G)$	G
6	10	4	K_6
7	12	5	K_7
8	14	51	K_8, R_5
9	16.47	105	R_6
10	20	3938	R_6
11	22.45	2396	R_6

C Brojevi razapinjućih zatvorenih šetnji

U ovom Dodatku ćemo sumirati računске rezultate za brojeve razapinjućih zatvorenih šetnji u graletima do reda pet zaključno. Izložit ćemo algebarske formule za brojeve razapinjućih zatvorenih šetnji za gralete do reda četiri, kao i numeričke rezultate koji se odnose na težine graleta određenih tipova, a koji su korišćeni pri razmatranju mera sličnosti čvorova poredbenih mreža.

Računski rezultati u Tabeli C.1 dobijeni su korišćenjem formule (3.3). Prva kolona tabele sadrži labelu korena grafa, odnosno tip graleta, dok je u drugoj koloni navedena oznaka grafa kome dati koren pripada. Koristili smo oznake kao u [64]. U trećoj koloni se nalaze brojevi razapinjućih zatvorenih šetnji dužine k u odgovarajućem čvoru. Poslednja kolona tabele sadrži dužinu najkraće razapinjuće zatvorene šetnje u datom korenu, odnosno graletu određenog tipa.

Tabela C.1: Broj razapinjućih zatvorenih šetnji u određenom čvoru izračunat primenom principa uključenja-isključenja.

Početak tabele			
o	G	n_o^k	min k
0	0	a_0^k	2
1	1	$a_1^k - a_0^k$	4
2	1	$a_2^k - 2a_0^k$	4
3	2	$a_3^k - 2a_0^k$	3
4	3	$a_4^k - a_1^k$	6
5	3	$a_5^k - a_2^k - a_1^k + a_0^k$	6
6	4	$a_6^k - 2a_1^k + a_0^k$	6
7	4	$a_7^k - 3a_2^k + 3a_0^k$	6

Nastavak Tabele C.1			
o	G	n_o^k	min k
8	5	$a_8^k - a_2^k - 2a_1^k + 2a_0^k$	4
9	6	$a_9^k - 2a_1^k + a_0^k$	5
10	6	$a_{10}^k - a_3^k - a_1^k + a_0^k$	5
11	6	$a_{11}^k - a_3^k - 2a_2^k + 3a_0^k$	5
12	7	$a_{12}^k - a_3^k - 2a_1^k + 2a_0^k$	4
13	7	$a_{13}^k - 2a_3^k - a_2^k + 3a_0^k$	4
14	8	$a_{14}^k - 3a_3^k + 3a_0^k$	4
15	9	$a_{15}^k - a_4^k$	8
16	9	$a_{16}^k - a_5^k - a_4^k + a_1^k$	8
17	9	$a_{17}^k - 2a_5^k + a_2^k$	8
18	10	$a_{18}^k - 2a_4^k + a_1^k$	8
19	10	$a_{19}^k - a_6^k - a_4^k + a_1^k$	8
20	10	$a_{20}^k - a_6^k - 2a_5^k + a_2^k + 2a_1^k - a_0^k$	8
21	10	$a_{21}^k - a_7^k - 2a_5^k + 2a_2^k + a_1^k - a_0^k$	8
22	10	$a_{22}^k - 3a_6^k + 3a_1^k - a_0^k$	8
23	11	$a_{23}^k - 4a_7^k + 6a_2^k - 4a_0^k$	8
24	12	$a_{24}^k - a_9^k - a_4^k + a_1^k$	7
25	12	$a_{25}^k - 2a_{10}^k + a_3^k$	7
26	12	$a_{26}^k - a_{11}^k - a_{10}^k - a_5^k + a_3^k + a_2^k + a_1^k - a_0^k$	7
27	13	$a_{27}^k - 2a_4^k + a_1^k$	7
28	13	$a_{28}^k - a_9^k - 2a_5^k + a_2^k + 2a_1^k - a_0^k$	7
29	13	$a_{29}^k - a_{10}^k - a_4^k + a_1^k$	7
30	13	$a_{30}^k - a_{11}^k - 2a_5^k + 2a_2^k + a_1^k - a_0^k$	7
31	14	$a_{31}^k - a_9^k - 2a_6^k + 3a_1^k - a_0^k$	7
32	14	$a_{32}^k - 2a_{10}^k - a_6^k + a_3^k + 2a_1^k - a_0^k$	7
33	14	$a_{33}^k - 2a_{11}^k - 2a_7^k + a_3^k + 5a_2^k - 4a_0^k$	7
34	15	$a_{34}^k - 2a_5^k - 2a_4^k + a_2^k + 2a_1^k$	5
35	16	$a_{35}^k - a_6^k - 2a_4^k + 2a_1^k$	6
36	16	$a_{36}^k - a_8^k - 2a_4^k + 2a_1^k$	6
37	16	$a_{37}^k - a_8^k - a_6^k - a_5^k + a_2^k + 2a_1^k - a_0^k$	6
38	16	$a_{38}^k - a_8^k - a_7^k - 2a_5^k + 3a_2^k + 2a_1^k - 2a_0^k$	6
39	17	$a_{39}^k - 2a_9^k - a_6^k + 3a_1^k - a_0^k$	6
40	17	$a_{40}^k - a_{12}^k - a_{10}^k - a_6^k + a_3^k + 2a_1^k - a_0^k$	6

Nastavak Tabele C.1			
o	G	n_o^k	min k
41	17	$a_{41}^k - a_{13}^k - 2a_{10}^k + 2a_3^k + a_1^k - a_0^k$	6
42	17	$a_{42}^k - a_{13}^k - 2a_{11}^k - a_7^k + 2a_3^k + 4a_2^k - 4a_0^k$	6
43	18	$a_{43}^k - 2a_{10}^k - a_9^k + a_3^k + 2a_1^k - a_0^k$	6
44	18	$a_{44}^k - 4a_{11}^k + 2a_3^k + 4a_2^k - 4a_0^k$	6
45	19	$a_{45}^k - a_9^k - 2a_4^k + 2a_1^k$	6
46	19	$a_{46}^k - a_{12}^k - 2a_4^k + 2a_1^k$	6
47	19	$a_{47}^k - a_{12}^k - a_{11}^k - 2a_5^k + a_3^k + 2a_2^k + 2a_1^k - 2a_0^k$	6
48	19	$a_{48}^k - a_{13}^k - a_{10}^k - a_5^k + a_3^k + a_2^k + a_1^k - a_0^k$	6
49	20	$a_{49}^k - 2a_8^k - 2a_6^k + a_2^k + 4a_1^k - 2a_0^k$	6
50	20	$a_{50}^k - 3a_8^k - a_7^k + 3a_2^k + 3a_1^k - 3a_0^k$	6
51	21	$a_{51}^k - a_9^k - a_8^k - a_5^k - a_4^k + a_2^k + 3a_1^k - a_0^k$	5
52	21	$a_{52}^k - 2a_{10}^k - 2a_4^k + a_3^k + 2a_1^k$	5
53	21	$a_{53}^k - a_{11}^k - a_{10}^k - a_8^k - a_5^k + a_3^k + 2a_2^k + 2a_1^k - 2a_0^k$	5
54	22	$a_{54}^k - 2a_{12}^k - 2a_6^k + a_3^k + 4a_1^k - 2a_0^k$	6
55	22	$a_{55}^k - 3a_{13}^k - a_7^k + 3a_3^k + 3a_2^k - 4a_0^k$	6
56	23	$a_{56}^k - 3a_9^k + 3a_1^k - a_0^k$	6
57	23	$a_{57}^k - a_{14}^k - 2a_{10}^k + 2a_3^k + a_1^k - a_0^k$	6
58	23	$a_{58}^k - a_{14}^k - 3a_{11}^k + 3a_3^k + 3a_2^k - 4a_0^k$	6
59	24	$a_{59}^k - a_{12}^k - a_{10}^k - a_9^k - a_4^k + a_3^k + 3a_1^k - a_0^k$	5
60	24	$a_{60}^k - a_{13}^k - a_{12}^k - a_{10}^k - a_5^k + 2a_3^k + a_2^k + 2a_1^k - 2a_0^k$	5
61	24	$a_{61}^k - 2a_{13}^k - 2a_{11}^k + 3a_3^k + 3a_2^k - 4a_0^k$	5
62	25	$a_{62}^k - 2a_9^k - 2a_8^k + a_2^k + 4a_1^k - 2a_0^k$	5
63	25	$a_{63}^k - a_{12}^k - a_{11}^k - 2a_8^k + a_3^k + 2a_2^k + 3a_1^k - 3a_0^k$	5
64	25	$a_{64}^k - a_{13}^k - 2a_{10}^k - a_8^k + 2a_3^k + a_2^k + 2a_1^k - 2a_0^k$	5
65	26	$a_{65}^k - 2a_{12}^k - 2a_9^k + a_3^k + 4a_1^k - 2a_0^k$	5
66	26	$a_{66}^k - a_{14}^k - a_{12}^k - 2a_{10}^k + 3a_3^k + 2a_1^k - 2a_0^k$	5
67	26	$a_{67}^k - a_{14}^k - 2a_{13}^k - a_{11}^k + 4a_3^k + 2a_2^k - 4a_0^k$	5
68	27	$a_{68}^k - a_{13}^k - 2a_{12}^k - a_8^k + 2a_3^k + a_2^k + 3a_1^k - 3a_0^k$	5
69	27	$a_{69}^k - 4a_{13}^k + 4a_3^k + 2a_2^k - 4a_0^k$	5
70	28	$a_{70}^k - a_{14}^k - 3a_{12}^k + 3a_3^k + 3a_1^k - 3a_0^k$	5
71	28	$a_{71}^k - 2a_{14}^k - 2a_{13}^k + 5a_3^k + a_2^k - 4a_0^k$	5
72	29	$a_{72}^k - 4a_{14}^k + 6a_3^k - 4a_0^k$	5
Kraj tabele			

U Tabeli C.2 izloženi su računski rezultati za brojeve razapinjućih zatvorenih šetnji u graffetima do reda pet dobijeni korišćenjem formule (3.4). Slično kao i u prethodnom slučaju, prva kolona tabele sadrži labelu korena grafa, u drugoj je naveden graf kome dati koren pripada (kao u [64]), dok se u trećoj koloni nalaze brojevi razapinjućih zatvorenih šetnji dužine k u odgovarajućem korenu.

Tabela C.2: Broj razapinjućih zatvorenih šetnji u određenom korenu.

Početak tabele		
o	G	n_o^k
0	0	n_0^k
1	1	$a_1^k - n_0^k$
2	1	$a_2^k - 2n_0^k$
3	2	$a_3^k - 2n_0^k$
4	3	$a_4^k - n_1^k - n_0^k$
5	3	$a_5^k - n_2^k - n_1^k - 2n_0^k$
6	4	$a_6^k - 2n_1^k - n_0^k$
7	4	$a_7^k - 3n_2^k - 3n_0^k$
8	5	$a_8^k - n_2^k - 2n_1^k - 2n_0^k$
9	6	$a_9^k - 2n_1^k - n_0^k$
10	6	$a_{10}^k - n_3^k - n_1^k - 2n_0^k$
11	6	$a_{11}^k - n_3^k - 2n_2^k - 3n_0^k$
12	7	$a_{12}^k - n_3^k - 2n_1^k - 2n_0^k$
13	7	$a_{13}^k - 2n_3^k - n_2^k - 3n_0^k$
14	8	$a_{14}^k - 3n_3^k - 3n_0^k$
15	9	$a_{15}^k - n_4^k - n_1^k - n_0^k$
16	9	$a_{16}^k - n_5^k - n_4^k - n_2^k - n_1^k - 2n_0^k$
17	9	$a_{17}^k - 2n_5^k - n_2^k - 2n_1^k - 2n_0^k$
18	10	$a_{18}^k - 2n_4^k - n_1^k - n_0^k$
19	10	$a_{19}^k - n_6^k - n_4^k - 2n_1^k - n_0^k$
20	10	$a_{20}^k - n_6^k - 2n_5^k - n_2^k - 2n_1^k - 2n_0^k$
21	10	$a_{21}^k - n_7^k - 2n_5^k - 3n_2^k - n_1^k - 3n_0^k$
22	10	$a_{22}^k - 3n_6^k - 3n_1^k - n_0^k$
23	11	$a_{23}^k - 4n_7^k - 6n_2^k - 4n_0^k$

Nastavak Tabele C.2		
o	G	n_o^k
24	12	$a_{24}^k - n_9^k - n_4^k - 2n_1^k - n_0^k$
25	12	$a_{25}^k - 2n_{10}^k - n_3^k - 2n_1^k - 2n_0^k$
26	12	$a_{26}^k - n_{11}^k - n_{10}^k - n_5^k - n_3^k - 2n_2^k - n_1^k - 3n_0^k$
27	13	$a_{27}^k - 2n_4^k - n_1^k - n_0^k$
28	13	$a_{28}^k - n_9^k - 2n_5^k - n_2^k - 2n_1^k - 2n_0^k$
29	13	$a_{29}^k - n_{10}^k - n_4^k - n_3^k - n_1^k - 2n_0^k$
30	13	$a_{30}^k - n_{11}^k - 2n_5^k - n_3^k - 2n_2^k - n_1^k - 3n_0^k$
31	14	$a_{31}^k - n_9^k - 2n_6^k - 3n_1^k - n_0^k$
32	14	$a_{32}^k - 2n_{10}^k - n_6^k - n_3^k - 2n_1^k - 2n_0^k$
33	14	$a_{33}^k - 2n_{11}^k - 2n_7^k - n_3^k - 5n_2^k - 4n_0^k$
34	15	$a_{34}^k - 2n_5^k - 2n_4^k - n_2^k - 2n_1^k - 2n_0^k$
35	16	$a_{35}^k - n_6^k - 2n_4^k - 2n_1^k - n_0^k$
36	16	$a_{36}^k - n_8^k - 2n_4^k - n_2^k - 2n_1^k - 2n_0^k$
37	16	$a_{37}^k - n_8^k - n_6^k - n_5^k - n_2^k - 3n_1^k - 2n_0^k$
38	16	$a_{38}^k - n_8^k - n_7^k - 2n_5^k - 3n_2^k - 2n_1^k - 3n_0^k$
39	17	$a_{39}^k - 2n_9^k - n_6^k - 3n_1^k - n_0^k$
40	17	$a_{40}^k - n_{12}^k - n_{10}^k - n_6^k - n_3^k - 3n_1^k - 2n_0^k$
41	17	$a_{41}^k - n_{13}^k - 2n_{10}^k - 2n_3^k - n_2^k - n_1^k - 3n_0^k$
42	17	$a_{42}^k - n_{13}^k - 2n_{11}^k - n_7^k - 2n_3^k - 4n_2^k - 4n_0^k$
43	18	$a_{43}^k - 2n_{10}^k - n_9^k - n_3^k - 2n_1^k - 2n_0^k$
44	18	$a_{44}^k - 4n_{11}^k - 2n_3^k - 4n_2^k - 4n_0^k$
45	19	$a_{45}^k - n_9^k - 2n_4^k - 2n_1^k - n_0^k$
46	19	$a_{46}^k - n_{12}^k - 2n_4^k - n_3^k - 2n_1^k - 2n_0^k$
47	19	$a_{47}^k - n_{12}^k - n_{11}^k - 2n_5^k - n_3^k - 2n_2^k - 2n_1^k - 3n_0^k$
48	19	$a_{48}^k - n_{13}^k - n_{10}^k - n_5^k - 2n_3^k - n_2^k - n_1^k - 3n_0^k$
49	20	$a_{49}^k - 2n_8^k - 2n_6^k - n_2^k - 4n_1^k - 2n_0^k$
50	20	$a_{50}^k - 3n_8^k - n_7^k - 3n_2^k - 3n_1^k - 3n_0^k$
51	21	$a_{51}^k - n_9^k - n_8^k - n_5^k - n_4^k - n_2^k - 3n_1^k - 2n_0^k$
52	21	$a_{52}^k - 2n_{10}^k - 2n_4^k - n_3^k - 2n_1^k - 2n_0^k$
53	21	$a_{53}^k - n_{11}^k - n_{10}^k - n_8^k - n_5^k - n_3^k - 2n_2^k - 2n_1^k - 3n_0^k$
54	22	$a_{54}^k - 2n_{12}^k - 2n_6^k - n_3^k - 4n_1^k - 2n_0^k$
55	22	$a_{55}^k - 3n_{13}^k - n_7^k - 3n_3^k - 3n_2^k - 4n_0^k$
56	23	$a_{56}^k - 3n_9^k - 3n_1^k - n_0^k$

Nastavak Tabele C.2		
o	G	n_o^k
57	23	$a_{57}^k - n_{14}^k - 2n_{10}^k - 3n_3^k - n_1^k - 3n_0^k$
58	23	$a_{58}^k - n_{14}^k - 3n_{11}^k - 3n_3^k - 3n_2^k - 4n_0^k$
59	24	$a_{59}^k - n_{12}^k - n_{10}^k - n_9^k - n_4^k - n_3^k - 3n_1^k - 2n_0^k$
60	24	$a_{60}^k - n_{13}^k - n_{12}^k - n_{10}^k - n_5^k - 2n_3^k - n_2^k - 2n_1^k - 3n_0^k$
61	24	$a_{61}^k - 2n_{13}^k - 2n_{11}^k - 3n_3^k - 3n_2^k - 4n_0^k$
62	25	$a_{62}^k - 2n_9^k - 2n_8^k - n_2^k - 4n_1^k - 2n_0^k$
63	25	$a_{63}^k - n_{12}^k - n_{11}^k - 2n_8^k - n_3^k - 2n_2^k - 3n_1^k - 3n_0^k$
64	25	$a_{64}^k - n_{13}^k - 2n_{10}^k - n_8^k - 2n_3^k - n_2^k - 2n_1^k - 3n_0^k$
65	26	$a_{65}^k - 2n_{12}^k - 2n_9^k - n_3^k - 4n_1^k - 2n_0^k$
66	26	$a_{66}^k - n_{14}^k - n_{12}^k - 2n_{10}^k - 3n_3^k - 2n_1^k - 3n_0^k$
67	26	$a_{67}^k - n_{14}^k - 2n_{13}^k - n_{11}^k - 4n_3^k - 2n_2^k - 4n_0^k$
68	27	$a_{68}^k - n_{13}^k - 2n_{12}^k - n_8^k - 2n_3^k - n_2^k - 3n_1^k - 3n_0^k$
69	27	$a_{69}^k - 4n_{13}^k - 4n_3^k - 2n_2^k - 4n_0^k$
70	28	$a_{70}^k - n_{14}^k - 3n_{12}^k - 3n_3^k - 3n_1^k - 3n_0^k$
71	28	$a_{71}^k - 2n_{14}^k - 2n_{13}^k - 5n_3^k - n_2^k - 4n_0^k$
72	29	$a_{72}^k - 4n_{14}^k - 6n_3^k - 4n_0^k$
Kraj tabele		

U Tabeli C.3 izlažemo algebarske izraze za brojeve razapinjućih zatvorenih šetnji dužine k za sve graflete sa dva do četiri čvora. Za dobijanje ovih rezultata koristili smo programski paket *Mathematica* (www.wolfram.com/mathematica/).

Brojevi a_9^k , a_{10}^k i a_{11}^k iz Tabele C.3 redom su jednaki $b+d$, $2a+2b+d$ i $2a+3b+d$, gde su a , b i d rešenja sledećeg sistema linearnih jednačina:

$$\begin{aligned} x_1^3 a + x_1^2 b + x_1 c + d &= x_1^k, \\ x_2^3 a + x_2^2 b + x_2 c + d &= x_2^k, \\ x_3^3 a + x_3^2 b + x_3 c + d &= x_3^k, \\ x_4^3 a + x_4^2 b + x_4 c + d &= x_4^k. \end{aligned}$$

Koeficijenti sistema su i -ti stepeni, $i \in \{0, 1, 2, 3, k\}$, sopstvenih vrednosti x_1, x_2, x_3, x_4 matrice susedstva grafa G_6 . Izraze za brojeve razapinjućih zatvorenih šetnji dužine k u korenima 9, 10 i 11 izostavili smo zbog složenosti učestvujućih sabiraka.

Tabela C.3: Algebarski izrazi za brojeve razapinjućih zatvorenih šetnji dužine k u grafetima do reda četiri

o	n_o^k
0	$\frac{1}{2}(1 + (-1)^k)$
1	$\frac{1}{2}(1 + (-1)^k) \left(\frac{(\sqrt{2})^k}{2} - 1 \right)$
2	$\frac{1}{2}(1 + (-1)^k) \left((\sqrt{2})^k - 2 \right)$
3	$\frac{1}{3}(2^k - (-1)^k - 3)$
4	$\frac{1+(-1)^k}{4} \left(\frac{\sqrt{5}-1}{\sqrt{5}} \left(\sqrt{\frac{3+\sqrt{5}}{2}} \right)^k + \frac{\sqrt{5}+1}{\sqrt{5}} \left(\sqrt{\frac{3-\sqrt{5}}{2}} \right)^k - (\sqrt{2})^k \right)$
5	$\frac{1+(-1)^k}{20} \left(10 - 15(\sqrt{2})^k - (\sqrt{5}-5) \left(\sqrt{\frac{3-\sqrt{5}}{2}} \right)^k + (\sqrt{5}+5) \left(\sqrt{\frac{3+\sqrt{5}}{2}} \right)^k \right)$
6	$\frac{1+(-1)^k}{2} \left(\frac{(\sqrt{3})^k}{3} - (\sqrt{2})^k + 1 \right)$
7	$\frac{1+(-1)^k}{2} \left((\sqrt{3})^k - 3(\sqrt{2})^k + 3 \right)$
8	$(1 + (-1)^k)(2^{k-2} + 1 - (\sqrt{2})^k)$
9	$a_9^k - \frac{1}{2}(1 + (-1)^k)((\sqrt{2})^k - 1)$
10	$a_{10}^k - \left(\frac{1}{2}(1 + (-1)^k) \left(\frac{(\sqrt{2})^k}{2} - 1 \right) + \frac{1}{3}(2^k + 2(-1)^k) \right)$
11	$a_{11}^k - \left(1 + (-1)^k \right) \left((\sqrt{2})^k - \frac{3}{2} \right) - \frac{1}{3}(2^k + 2(-1)^k)$
12	$\left(1 - 2^{\frac{1}{2}(-2+k)} \right) \left(1 + (-1)^k \right) + \frac{1}{3}(-2(-1)^k - 2^k) + \frac{2^{-2-k}}{\sqrt{17}}$ $\left((1 - \sqrt{17})^k(1 + \sqrt{17}) + (\sqrt{17} - 1)(1 + \sqrt{17})^k \right)$
13	$\frac{1}{51}2^{-2-k}(-3(1 - \sqrt{17})^k(-17 + \sqrt{17}) + 3(1 + \sqrt{17})^k(17 + \sqrt{17}) -$ $17 \cdot 2^{1+k}(-9 - 4(-1)^k + 2^{2+k} + 3 \cdot 2^{k/2}(1 + (-1)^k)))$
14	$\frac{1}{4}(6 + (-1)^k - 2^{2+k} + 3^k)$

U Tabeli C.4 izračunate su prema formuli $w_k = 1 - \frac{\log(o_k)}{\log(73)}$ težine grafleta tipa 0-72. Prva vrsta tabele sadrži oznaku tipa grafleta (odnosno oznaku orbite prema [64]). U drugoj vrsti naveden je broj korena (odnosno orbita) koji utiču na koren i , pri čemu se podrazumeva da svaki koren utiče na samog sebe. U trećoj vrsti su dati odgovarajući numerički rezultati (zaokruženi na tri decimale).

Tabela C.4: Težine grafleta određenih tipova.

Početak Tabele										
$No(i)$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
o_i	1	2	2	2	3	4	3	3	4	3
w_i	1	0.838	0.838	0.838	0.744	0.677	0.744	0.744	0.677	0.744

Nastavak Tabele C.4									
$No(i)$	10	11	12	13	14	15	16	17	18
o_i	4	4	4	4	3	4	6	5	4
w_i	0.677	0.677	0.677	0.677	0.744	0.677	0.582	0.625	0.677

Nastavak Tabele C.4									
$No(i)$	19	20	21	22	23	24	25	26	27
o_i	5	6	6	4	4	5	5	8	4
w_i	0.625	0.582	0.582	0.677	0.677	0.625	0.625	0.515	0.677

Nastavak Tabele C.4									
$No(i)$	28	29	30	31	32	33	34	35	36
o_i	6	6	7	5	6	6	6	5	6
w_i	0.582	0.582	0.546	0.625	0.582	0.582	0.582	0.625	0.582

Nastavak Tabele C.4									
$No(i)$	37	38	39	40	41	42	43	44	45
o_i	7	7	5	7	7	7	6	5	5
w_i	0.546	0.546	0.625	0.546	0.546	0.546	0.582	0.625	0.625

Nastavak Tabele C.4									
$No(i)$	46	47	48	49	50	51	52	53	54
o_i	6	8	8	6	6	8	6	9	6
w_i	0.582	0.515	0.515	0.582	0.582	0.515	0.582	0.488	0.582

Nastavak Tabele C.4									
$No(i)$	55	56	57	58	59	60	61	62	63
o_i	6	4	6	6	8	9	6	6	8
w_i	0.582	0.677	0.582	0.582	0.515	0.488	0.582	0.582	0.515

Nastavak Tabele C.4									
$No(i)$	64	65	66	67	68	69	70	71	72
o_i	8	6	7	7	8	5	6	6	4
w_i	0.515	0.582	0.546	0.546	0.515	0.625	0.582	0.582	0.677
Kraj tabele C.4									

Biografija autora

Irena M. Jovanović je rođena 1981. godine u Kraljevu, gde je kao nosilac Vukove diplome završila osnovnu školu, a potom sa odličnim uspehom i Gimnaziju prirodno-matematičkog usmerenja. Na Matematičkom fakultetu Univerziteta u Beogradu, odsek za numeričku matematiku i optimizaciju, diplomirala je 2006. godine. Godinu dana kasnije na istoj katedri je odbranila master tezu pod nazivom *Jednačina provođenja toplote sa koncentrisanim kapacitetom*, pod mentorstvom prof. dr Boška Jovanovića. Doktorske studije Matematičkog fakulteta u Beogradu upisala je 2009. godine.

Do 2008. godine obavljala je poslove *SQL developer*-a u *Fadata, d.o.o*, Bugarska, odeljenje u Srbiji, a potom je u svojstvu testnog inženjera bila angažovana na projektima za mobilnu telefoniju Srbije u *DIV Inženjering*, Srbija u saradnji sa *Sitronics*, CZ Republic. Trenutno je zaposlena na Računarskom fakultetu Univerziteta Union u Beogradu. U zvanju asistenta na Računarskom fakultetu držala je vežbe iz sledećih kurseva: *Linearna algebra*, *Diskretna matematika 1 i 2*, *Matematička analiza*, *Verovatnoća i statistika*, *Teorija algoritama, jezika i automata* i *Napredna matematička analiza*.

Irena Jovanović se bavi naučno-istraživačkim radom iz oblasti spektralne teorije grafova. Od 2010. godine angažovana je na projektima iz domena fundamentalnih i interdisciplinarnih istraživanja Ministarstva prosvete i nauke Republike Srbije. Pohađala je više letnjih škola i radionica posvećenih rešavanju raznorodnih matematičkih problema.

Rezultati njenog dosadašnjeg istraživanja sumirani su u:

1. Jovanović I.M., *Non-negative spectrum of a digraph*, u procesu recenzije;
2. Jovanović I.M., *Some results on spectral distances of graphs*, u procesu recenzije;

3. Jovanović I.M., *Closed walks and graphlets*, prihvaćeno za publikovanje u *Utilitas Mathematica*, UM 13-338;
4. Jovanović I.M., Stanić Z., *Spectral distances of graphs based on their different matrix representations*, *Filomat*, **28:4** (2014), 723–734.
5. Cvetković D., Jovanović I. *Network alignment using self-returning walks*, *BULLETIN T. CXLV de l' Académie Serbe des sciences et des arts, Classe des sciences mathématiques et naturelles, Sciences mathématiques*, No. **38** (2013), 43–61;
6. Jovanović I.M., *Network alignment algorithms*, *Proceedings Of XXXIX Symposium on Operational Research SYM-OP-IS 2012*, (2012), 225–228;
7. Jovanović I.M., Stanić Z., *Spectral distances of graphs*, *Linear Algebra and its Application*, **436** (2012) 1425–1435.

Prilog 1.

Izjava o autorstvu

Potpisana: Irena M. Jovanović

Broj upisa: 2039/2009

Izjavljujem

da je doktorska disertacija pod naslovom

Spektralno prepoznavanje grafova i mreža

- rezultat sopstvenog istraživačkog rada,
- da predložena disertacija u celini ni u delovima nije bila predložena za dobijanje bilo koje diplome prema studijskim programima drugih visokoškolskih ustanova,
- da su rezultati korektno navedeni i
- da nisam kršila autorska prava i koristila intelektualnu svojinu drugih lica.

Potpis doktoranda

U Beogradu, 06.10.2014.

Irena M. Jovanović

Prilog 2.

Izjava o istovetnosti štampane i elektronske verzije doktorskog rada

Ime i prezime autora: Irena M. Jovanović

Broj upisa: 2039/2009

Studijski program: Matematika

Naslov rada: Spektralno prepoznavanje grafova i mreža

Mentor: docent Dr Zoran Stanić

Potpisani: Zoran Stanić

Izjavljujem da je štampana verzija mog doktorskog rada istovetna elektronskoj verziji koju sam predala za objavljivanje na portalu **Digitalnog repozitorijuma Univerziteta u Beogradu**.

Dozvoljavam da se objave moji lični podaci vezani za dobijanje akademskog zvanja doktora nauka, kao što su ime i prezime, godina i mesto rođenja i datum odbrane rada.

Ovi lični podaci mogu se objaviti na mrežnim stranicama digitalne biblioteke, u elektronskom katalogu i u publikacijama Univerziteta u Beogradu.

Potpis doktoranda

U Beogradu, 06.10.2014.

Jovanović Irena

Prilog 3.

Izjava o korišćenju

Ovlašćujem Univerzitetsku biblioteku „Svetozar Marković“ da u Digitalni repozitorijum Univerziteta u Beogradu unese moju doktorsku disertaciju pod naslovom:

Spektralno prepoznavanje grafova i mreža

koja je moje autorsko delo.

Disertaciju sa svim prilogima predala sam u elektronskom formatu pogodnom za trajno arhiviranje.

Moju doktorsku disertaciju pohranjenu u Digitalni repozitorijum Univerziteta u Beogradu mogu da koriste svi koji poštuju odredbe sadržane u odabranom tipu licence Kreativne zajednice (Creative Commons) za koju sam se odlučila.

1. Autorstvo
2. Autorstvo - nekomercijalno
3. Autorstvo - nekomercijalno – bez prerade
4. Autorstvo - nekomercijalno – deliti pod istim uslovima
5. Autorstvo – bez prerade
6. Autorstvo – deliti pod istim uslovima

Potpis doktoranda

U Beogradu, 06.10.2014.

