ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. МАТЕМАТИКА, ИНФОРМАТИКА, ПРОЦЕССЫ УПРАВЛЕНИЯ, 2020, том 494, с. 43–47

МАТЕМАТИКА

УДК 517.545+517.962.2+519.173

ИНДЕКС КИРХГОФА ДЛЯ ЦИРКУЛЯНТНЫХ ГРАФОВ И ЕГО АСИМПТОТИКА

© 2020 г. А. Д. Медных[1,2,*], И. А. Медных[1,2,]**

Представлено академиком РАН Ю.Г. Решетняком 06.12.2019 г.
Поступило 06.12.2019 г.
После доработки 29.08.2020 г.
Принято к публикации 31.08.2020 г.

Целью сообщения является нахождение явной аналитической формулы для индекса Кирхгофа циркулянтных графов $C_n(s_1, s_2, \ldots, s_k)$ и $C_{2n}(s_1, s_2, \ldots, s_k, n)$ с четной и нечетной валентностью вершин соответственно. Изучено асимптотическое поведение индекса Кирхгофа при n, стремящемся к бесконечности. Доказано, что индекс Кирхгофа представляется в виде суммы кубического многочлена от n и экспоненциально малого остаточного члена.

Ключевые слова: циркулянтный граф, матрица Лапласа, собственное число, индекс Винера, индекс Кирхгофа

DOI: 10.31857/S2686954320050379

Пусть G – связный конечный граф на n вершинах. Обозначим через $D(G)$ диагональную матрицу, составленную из валентностей вершин G, а через $A(G)$ – матрицу смежности графа G. Матрица $L(G) = D(G) - A(G)$ называется матрицей Лапласа графа G. Известно [1], что если граф связен, то все собственные значения $L(G)$, за исключением одного, равного 0, строго положительны. То есть спектр матрицы Лапласа графа G имеет вид $0 = \lambda_1 < \lambda_2 \le \ldots \le \lambda_n$.

Изначально индекс Кирхгофа графа G был определен Клейном и Рандичем [2] как среднее резистивное расстояние между его вершинами. Точнее, пусть вершины графа G обозначаются $1, 2, \ldots, n$. Тогда резистивное расстояние между вершинами i и j, обозначаемое $r_{ij} = r_{ij}(G)$, определяется как эффективное сопротивление между ними, если мы наделим каждое ребро G единичным сопротивлением. Следуя [2], определим индекс Кирхгофа графа G как величину

$$Kf(G) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} r_{ij}.$$

Такое определение было мотивировано известным индексом Винера $W(G)$, подсчитывающим сумму расстояний между парами вершин графа G [3]. То есть

$$W(G) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} d_{ij},$$

где через d_{ij} обозначается расстояние вершинами между i и j. Клейн и Рандич [2] показали, что $Kf(G) \le W(G)$, где равенство достигается тогда и только тогда, когда граф G – это дерево. Интересная зависимость между индексом Кирхгофа и спектром матрицы Лапласа была независимо найдена в работах [4, 5]:

$$Kf(G) = n\sum_{j=2}^{n}\frac{1}{\lambda_j}. \tag{1}$$

Индексы Кирхгофа для различных семейств графов были изучены в работах [6–13].

Цель настоящей работы – найти явные аналитические формулы для индекса Кирхгофа циркулянтных графов $C_n(s_1, s_2, \ldots, s_k)$ и $C_{2n}(s_1, s_2, \ldots, s_k, n)$, а также изучить их асимптотическое поведение при n, стремящемся к бесконечности. Указанные

[1] *Институт математики им С.Л. Соболева Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия*
[2] *Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия*
**E-mail: smedn@mail.ru*
***E-mail: ilyamednykh@mail.ru*

формулы будут представлены в виде конечного не зависящего от n числа слагаемых, каждое из которых представляет собой рациональную функцию, вычисленных в корнях некоторого фиксированного многочлена.

1. ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Рассмотрим конечный связный граф G, допускающий кратные ребра, но не имеющий петель. Обозначим через $V(G)$ и $E(G)$, соответственно, множество вершин и ребер графа G. Матрица $A = A(G) = \{a_{uv}\}_{u,v\in V(G)}$, где a_{uv} – число ребер между u и v, называется матрицей смежности графа G. Обозначим через $d(v)$ валентность вершины $v \in V(G)$ и рассмотрим диагональную матрицу $D = D(G)$ с элементами $d_{vv} = d(v)$. Матрица $L = L(G) = D(G) - A(G)$ называется матрицей Лапласа, или лапласианом графа G.

Пусть $s_1, s_2, \ldots, s_k$ – целые числа, такие что $1 \le s_1 < s_2 < \ldots < s_k \le \frac{n}{2}$. Циркулянтным графом $C_n(s_1, s_2, \ldots, s_k)$ на n вершинах $0, 1, 2, \ldots, n-1$ называется простой граф, у которого вершина i, $0 \le i \le$ $\le n - 1$, смежна вершинам $i \pm s_1, i \pm s_2, \ldots, i \pm s_k$ $(\mathrm{mod}\ n)$. Если $s_k < n/2$, то все вершины графа имеют четную валентность $2k$. В случае когда n – четно и $s_k = n/2$, все вершины графа имеют нечетную валентность $2k - 1$. Циркулянтный граф $C_n(s_1, s_2, \ldots, s_k)$ связен, если $\gcd(s_1, s_2, \ldots, s_n) = 1$. Это условие в рамках сообщения всегда предполагаем выполненным.

2. ИНДЕКС КИРХГОФА ДЛЯ ЦИРКУЛЯНТНЫХ ГРАФОВ С ЧЕТНОЙ ВАЛЕНТНОСТЬЮ

В текущем разделе будут приведены явные формулы для индекса Кирхгофа $Kf(G_n)$ циркулянтных графов

$$G_n = C_n(s_1, s_2, \ldots, s_k), \quad 1 \le s_1 < s_2 < \ldots < s_k < n/2.$$

Данные формулы представляются в виде сумм s_k членов, каждый из которых выражается через полиномы Чебышева порядка n, вычисленные в корнях заданного полинома степени s_k.

Т е о р е м а 1. *Индекс Кирхгофа циркулянтного графа $G_n = C_n(s_1, s_2, \ldots, s_k)$ вычисляется по формуле*

$$Kf(G_n) = \frac{n}{12\sum_{j=1}^{k} s_j^2}\left(n^2 - \frac{\sum_{j=1}^{k} s_j^4}{\sum_{j=1}^{k} s_j^2}\right) + \\ + \sum_{p=2}^{s_k} \frac{n^2 U_{n-1}(w_p)}{(1 - T_n(w_p))Q'(w_p)},$$

где w_p – отличные от 1 корни полинома $Q(w) =$ $= \sum_{j=1}^{k}(2 - 2T_{s_j}(w))$, а $T_n(w)$ и $U_{n-1}(w)$ – полиномы Чебышева первого и второго рода соответственно.

Д о к а з а т е л ь с т в о основано на следующих рассуждениях. Заметим, что собственные значения оператора Лапласа графа G_n имеют вид

$$\lambda_j = 2k - 2\sum_{i=1}^{k}\cos\left(\frac{2\pi j s_i}{n}\right) = \\ = 2k - 2\sum_{i=1}^{k} T_{s_i}\left(\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right)\right) = \\ = Q\left(\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right)\right), \quad j = 1, \ldots, n,$$

а числа $\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right)$ являются корнями полинома $P(z) = T_n(z) - 1$. В силу связности, граф G_n имеет ровно одно нулевое собственное значение. Отсюда, $z = 1$ – единственный общий корень полиномов $P(z)$ и $Q(z)$. Воспользуемся следующим вспомогательным предложением.

П р е д л о ж е н и е 1. *Пусть $P(z)$ и $Q(z)$ – полиномы степеней n и m, соответственно, имеющие простые корни. Обозначим корни полинома $P(z)$ через $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$, а корни полинома $Q(z)$ через $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m$. Предположим, что $P(z)$ и $Q(z)$ имеют единственный общий корень $\alpha_1 = \beta_1 = 1$. Тогда имеет место равенство*

$$\sum_{j=2}^{n}\frac{1}{Q(\alpha_j)} = -\operatorname*{Res}_{z=1}\frac{1}{Q(z)}\frac{P'(z)}{P(z)} - \sum_{j=2}^{m}\frac{1}{Q'(\beta_j)}\frac{P'(\beta_j)}{P(\beta_j)}.$$

Для доказательства предложения заметим, что

$$\operatorname*{Res}_{z=\alpha_j}\frac{1}{Q(z)}\frac{P'(z)}{P(z)} = \frac{1}{Q(\alpha_j)},$$

$$\operatorname*{Res}_{z=\beta_j}\frac{1}{Q(z)}\frac{P'(z)}{P(z)} = \frac{1}{Q'(\beta_j)}\frac{P'(\beta_j)}{P(\beta_j)}.$$

Тогда, по классической теореме о вычетах, имеем

$$0 = \frac{1}{2\pi i}\int\limits_{|z|=R}\frac{1}{Q(z)}\frac{P'(z)}{P(z)}dz = \operatorname*{Res}_{z=1}\frac{1}{Q(z)}\frac{P'(z)}{P(z)} + \\ + \sum_{j=2}^{n}\frac{1}{Q(\alpha_j)} + \sum_{j=2}^{m}\frac{1}{Q'(\beta_j)}\frac{P'(\beta_j)}{P(\beta_j)},$$

где $R > \max_{j,k}\{|\alpha_j|, |\beta_k|\}$. Полученное равенство доказывает предложение.

Вычет в точке $z = 1$ находится с помощью следующей леммы, которая доказывается непосредственным разложением $P(z)$ и $Q(z)$ в степенные ряды.

Л е м м а 1. *Пусть полиномы $P(z)$ и $Q(z)$ имеют общий корень $z = 1$ кратности 1. Тогда*

$$\operatorname*{Res}_{z=1}\frac{1}{Q(z)}\frac{P'(z)}{P(z)} = \frac{1}{2Q'(1)}\left(\frac{P''(1)}{P'(1)} - \frac{Q''(1)}{Q'(1)}\right).$$

Для доказательства теоремы 1 положим $P(w) = T_n(w) - 1$ и $Q(w) = \sum_{i=1}^{k}(2 - 2T_{s_i}(w))$. Поскольку индекс Кирхгофа

$$Kf(G_n) = n\sum_{j=2}^{n}1/\lambda_j = n\sum_{j=2}^{n}1\Big/Q\left(\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right)\right),$$

для его вычисления используем предложение 1 и лемму 1. Непосредственными вычислениями по лемме 1 получим

$$\operatorname*{Res}_{z=1}\frac{1}{Q(z)}\frac{P'(z)}{P(z)} = -\frac{1}{12\sum_{j=1}^{k}s_j^2}\left(n^2 - \frac{\sum_{j=1}^{k}s_j^4}{\sum_{j=1}^{k}s_j^2}\right).$$

Учитывая, что $T_n'(w) = nU_{n-1}(w)$, по предложению 1, завершим доказательство теоремы.

Для исследования асимптотического поведения индекса Кирхгофа при $n \to \infty$ удобно переписать теорему 1 в следующем виде.

Т е о р е м а 2. *Индекс Кирхгофа циркулянтного графа $G_n = C_n(s_1, s_2, \ldots, s_k)$ вычисляется по формуле*

$$Kf(G_n) = \frac{n}{12\sum_{j=1}^{k}s_j^2}\left(n^2 - \frac{\sum_{j=1}^{k}s_j^4}{\sum_{j=1}^{k}s_j^2}\right) - \\ - \sum_{\substack{z:L(z)=0,\\ |z|>1}}\frac{n^2}{zL'(z)}\frac{z^n+1}{z^n-1},$$

где $L(z) = 2k - \sum_{j=1}^{k}(z^{s_j} + z^{-s_j})$, а суммирование ведется по всем корням $L(z)$, модуль которых больше 1.

Теорема 2 получается из теоремы 1 с помощью замены переменных $w = (z + z^{-1})/2$ и равенств $T_n((z + z^{-1})/2) = (z^n + z^{-n})/2$ и $U_{n-1}((z + z^{-1})/2) = (z^n - z^{-n})/(z - z^{-1})$.

Как следствие, мы получим следующую асимптотическую формулу поведения индекса Кирхгофа для циркулянтных графов $G_n = C_n(s_1, s_2, \ldots, s_k)$ при n, стремящемся к бесконечности.

С л е д с т в и е 1. *Имеет место асимптотическая формула*

$$Kf(G_n) = \frac{n}{12\sum_{j=1}^{k}s_j^2}\left(n^2 - \frac{\sum_{j=1}^{k}s_j^4}{\sum_{j=1}^{k}s_j^2}\right) - \\ - \sum_{\substack{z:L(z)=0,\\ |z|>1}}\frac{n^2}{zL'(z)} + O\left(\frac{n^2}{A^n}\right), \quad n \to \infty,$$

где $L(z) = 2k - \sum_{j=1}^{k}(z^{s_j} + z^{-s_j})$, а $A = \min\{|z| : L(z) = 0, |z| > 1\}$ — константа, зависящая только от $s_1, s_2, \ldots, s_k$.

Заметим, что главный член асимптотики представляет собой кубический полином от n со свободным членом, равным нулю.

3. ИНДЕКС КИРХГОФА ДЛЯ ЦИРКУЛЯНТНЫХ ГРАФОВ С НЕЧЕТНОЙ ВАЛЕНТНОСТЬЮ

Текущий раздел содержит явные аналитические формулы для индекса Кирхгофа $Kf(D_n)$ циркулянтных графов с нечетной валентностью вершин

$$D_n = C_{2n}(s_1, s_2, \ldots, s_k, n), \\ 1 \le s_1 < s_2 < \ldots < s_k < n.$$

Эти формулы содержат суммы, слагаемые которых представляют собой простые аналитические выражения, вычисленные в корнях заданного полинома степени $2s_k$. Справедлива следующая

Т е о р е м а 3. *Индекс Кирхгофа $Kf(D_n)$ циркулянтного графа с нечетной валентностью вершин*

$$D_n = C_{2n}(s_1, s_2, \ldots, s_k, n), \quad 1 \le s_1 < s_2 < \ldots < s_k < n$$

задается формулой

$$\frac{n}{6\sum_{j=1}^{k}s_j^2}\left(n^2-\frac{\sum_{j=1}^{k}s_j^4}{\sum_{j=1}^{k}s_j^2}\right)-$$

$$-\sum_{\substack{z:L(z)=0,\\ |z|>1}}\frac{2n^2}{zL'(z)}\frac{z^n+1}{z^n-1}-\sum_{\substack{z:L(z)+2=0,\\ |z|>1}}\frac{2n^2}{zL'(z)}\frac{z^n-1}{z^n+1},$$

где $L(z)=2k-\sum_{j=1}^{k}(z^{s_j}+z^{-s_j})$.

Доказательство теоремы 3 проводится по той же схеме, что и доказательство аналогичного утверждения для циркулянтных графов с четной валентностью. Теорема 3, как и теорема 2, может быть сформулирована в терминах полиномов Чебышева.

Следующее утверждение позволяет вычислить асимптотику индекса Кирхгофа для циркулянтных графов с нечетной валентностью.

С л е д с т в и е 2. *Справедлива следующая асимптотическая формула для индекса Кирхгофа*

$$Kf(D_n)=\frac{n}{6\sum_{j=1}^{k}s_j^2}\left(n^2-\frac{\sum_{j=1}^{k}s_j^4}{\sum_{j=1}^{k}s_j^2}\right)-$$

$$-\sum_{\substack{z:L(z)(L(z)+2)=0,\\ |z|>1}}\frac{2n^2}{zL'(z)}+O\left(\frac{n^2}{A^n}\right),\quad n\to\infty.$$

Здесь $L(z)=2k-\sum_{j=1}^{k}(z^{s_j}+z^{-s_j})$, *а* $A=\min\{|z|:L(z)(L(z)+2)=0,|z|>1\}$ — *константа, зависящая только от* $s_1,s_2,\ldots,s_k$.

4. ПРИМЕРЫ

1. Ц и к л и ч е с к и й г р а ф C_n. Индекс Кирхгофа циклического графа равен

$$Kf(C_n)=\frac{n^3-n}{12}.$$

2. Г р а ф $C_n(1,2)$. Для данного семейства графов индекс Кирхгофа может быть вычислен по формуле

$$Kf(C_n(1,2))=\frac{n}{300}(5n^2-17)+\frac{n^2F_{2n}}{25F_n^2},$$

где F_n — n-е число Фиббоначи. Заметим, что $\frac{F_{2n}}{F_n^2}=1+O\left(\frac{1}{\phi^{2n}}\right)$, где $\phi=\frac{1+\sqrt{5}}{2}$ — золотое сечение.

3. Г р а ф $C_n(1,3)$. Индекс Кирхгофа циркулянтных графов $C_n(1,3)$ имеет следующее асимптотическое поведение:

$$Kf(C_n(1,3))=$$
$$=\frac{n}{600}(5n^2+6\sqrt{110+50\sqrt{5}}n-41)+O\left(\frac{n^2}{A^n}\right),\ n\to\infty,$$

где $A=\sqrt{\frac{1}{2}(1+\sqrt{5}+\sqrt{2(1+\sqrt{5})})}\simeq 1.700015\ldots$

4. Г р а ф Л е с т н и ц а М ё б и у с а $C_{2n}(1,n)$. Индекс Кирхгофа лестницы Мёбиуса $C_{2n}(1,n)$ имеет следующее асимптотическое поведение:

$$Kf(C_{2n}(1,n))=$$
$$=\frac{n}{6}(n^2+2\sqrt{3}n-1)+O\left(\frac{n^2}{A^n}\right),\quad n\to\infty,$$

где $A=2+\sqrt{3}\simeq 3.73205$. (Ср. с результатом [13].)

5. Г р а ф $C_{2n}(1,2,n)$. Для графа $C_{2n}(1,2,n)$ индекс Кирхгофа допускает следующее асимптотическое поведение:

$$Kf(C_{2n}(1,2,n))=$$
$$=\frac{n}{1650}(55n^2+Kn-187)+O\left(\frac{n^2}{A^n}\right),\quad n\to\infty,$$

где $K=2(66\sqrt{5}+25\sqrt{99+44\sqrt{3}})$ и $A=\frac{1}{4}(-1+\sqrt{33}+\sqrt{2(9-\sqrt{33})})\simeq 1.824051$.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена при поддержке Математического Центра в Академгородке, соглашение с Министерством науки и высшего образования Российской Федерации номер 075-15-2019-1613.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Mohar B.* In: Y. Alavi, G. Chartrand, O.R. Oellermann, A.J. Schwenk (eds.). Graph theory, combinatorics, and applications, Wiley, New York, 2 (1991), 871–898.
2. *Klein D.J., Randić M.* // J. Math. Chem. 1993. V. 12. P. 81–95.
3. *Wiener H.* // J. Amer. Chem. Soc. 1947. V. 1. № 69. P. 17–20.
4. *Gutman I., Mohar B.* // J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1996. V. 36. P. 982–985.
5. *Zhu H.Y., Klein D.J., Lukovits I.* // J. Chemical Information and Computer Sciences 1996. V. 36. № 3. P. 420-428.
6. *Lukovits I., Nikolić S., Trinajstić N.* // Int. J. Quantum Chem. 1999. V. 71. P. 217–225.
7. *Palacios J.L.* // Int. J. Quantum Chem. 2001. V. 81. P. 135–140.

8. *Zhang H., Yang Y.* // Int. J. Quantum Chem. 2007. V. 107. P. 330–339.
9. *Xiao W., Gutman I.* // Theor. Chem. Acc. 2009. V. 110. P. 284–289.
10. *Luzhen Ye* // Linear and Multilinear Algebra. 2011. V. 59. № 6. P. 645–650.
11. *Cinkir Z.* // J. Math. Chem. 2016. V. 54. № 4. P. 955–966.
12. *Kagan M., Mata B.* // Math. Comput. Sci. 2019. V. 13. P. 105–115.
13. *Baigonagova G.A., Mednykh A.D.* // Sib. Electron. Math. Rep. 2019. V. 16, P. 1654–1661.

KIRCHHOFF INDEX FOR CIRCULANT GRAPHS AND ITS ASYMPTOTIC

A. D. Mednykh[a,b,*] **and I. A. Mednykh**[a,b,**]

[a] *Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russian Federation*

[b] *Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation*

Presented by Academician of the RAS Yu.G. Reshetnyak

Main aim of this report is to find analytical formula for the Kirchhoff index of circulant graphs $C_n(s_1, s_2, \ldots, s_k)$ and $C_{2n}(s_1, s_2, \ldots, s_k, n)$ with even and odd valency respectively. Kirchhoff index's asymptotic behaviour as n tends to ∞ is investigated. We proof that Kirchhoff index of a circulant graph can be expressed as a sum of a cubic polynomial of n and a term that exponentially vanishes as n tends to ∞.

Keywords: circulant graph, Laplace matrix, eigenvalue, Wiener index, Kirchhoff index