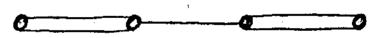
Линейная алгебра.

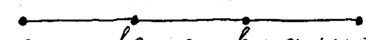
Спектральная теория графов.

12.02.2004г.

Молекула бутадиена:



сопряженная молекула



соответствующий граф

Граф – совокупность упорядоченных или неупорядоченных пар вершин.

Упорядоченная пара вершин – дуга;

Неупорядоченная пара вершин – ребро.

Совокупность вершин – V

Набор упоряд. и неуп. пар вершин – E.

• граф

•   • несвязанный граф

•—ребро—• связанный неупорядоченный граф

•—дуга→• связанный упорядоченный граф.

Графы, не содержащий дуг, называют неориентированными.

Соответственно, графы, содержащие дуги, ориентированные.

Граф может быть задан с помощью матрицы смежности:

$$A = \| a_{ik} \|$$

$a_{ik} = a_{ki} = \mu$, если i-ая и k-ая вершины соединены ребрами кратности μ.

граф G (хюккелевский)

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

A_G – матрица смежности.

Граф называется хюккелевским, когда он получается из сопряженной молекулы сопоставлением двойной связи ребра весом 1.

Характеристический полином матрицы:

$$\det(A_G - \lambda \cdot \mathbb{1}) = P_G(\lambda)$$

$$P_G(\lambda) = \det(A_G - \lambda \cdot \mathbb{1})(-1)^n, \quad n - \dim A_G$$

$P_G(\lambda) = 0$ – характеристическое уравнение.

Его решения – спектр графа.

Т.о. спектр графа – это набор собственных значений его матрицы смежности.

Для сопряженной молекулы это спектр π-электронов в хюккелевском приближении.

$E_\pi = \alpha + x\cdot\beta$, $x = -\lambda$; α и β – некот. интегралы.

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

$$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} = \{x\cdot x^3 - \overset{?}{1}\cdot(x^2)\} = x^4 - 3x^2 + 1$$

$x(x^3 - x - x) - 1(x^2 - 1) =$

$P_G(\lambda) = \lambda^4 - 3\lambda^2 + 1$ (т.к. $x = -\lambda$, то $x^2 = \lambda^2$ и $x^4 = \lambda^4$)

$x^4 - 3x^2 + 1 = 0$

$t^2 - 3t + 1 = 0$

$D = 9 - 4 = 5$

$t_{1,2} = \frac{3 \pm \sqrt{5}}{2}$

$x^2_{1,2} = \frac{3+\sqrt{5}}{2} \Rightarrow x_{1,2} = \frac{\pm 1 + \sqrt{5}}{2}$; $x_{3,4} = \frac{\pm 1 - \sqrt{5}}{2}$

$x = \frac{-1-\sqrt{5}}{2}$; $\frac{+1+\sqrt{5}}{2}$; $\frac{-1+\sqrt{5}}{2}$; $\frac{1+\sqrt{5}}{2}$.

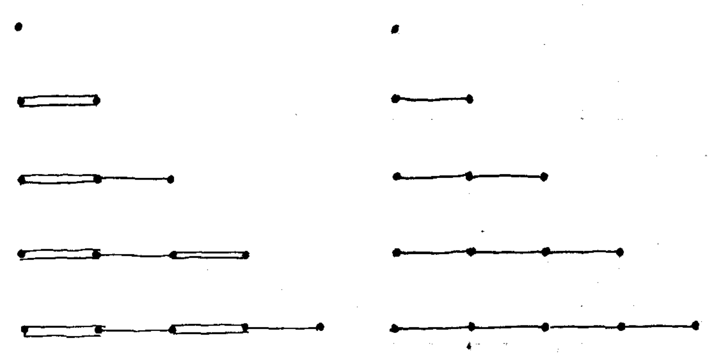
$n = 1$

$n = 2$

$n = 3$

$n = 4$

$n = 5$



$D_1(x) = x$

$D_2(x) = \begin{vmatrix} x & 1 \\ 1 & x \end{vmatrix} = x^2 - 1$

$D_3(x) = x^3 - 2x$

$D_4(x) = x^4 - 3x^2 + 1$

$D_5(x) =$

$D_1(x) = 0$: $x = 0$

$D_2(x) = 0$: $x = 1; -1$

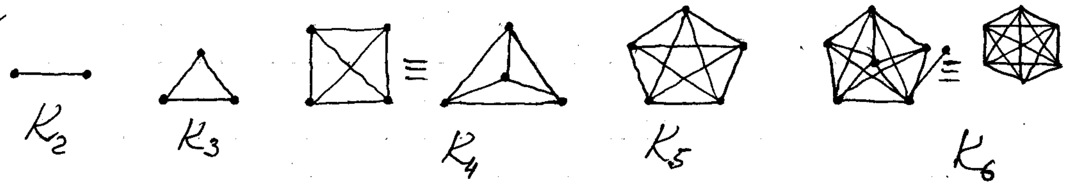
$D_3(x) = 0$: $x = \sqrt{2}; 0; \sqrt{2}$

$D_4(x) = 0$: $x = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$; $\frac{-1+\sqrt{5}}{2}$; $\frac{1-\sqrt{5}}{2}$; $\frac{-1-\sqrt{5}}{2}$.

$x = 2\cos\frac{\pi k}{n+1}$

$k = 1, 2, \dots, n$

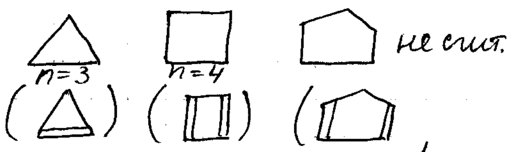
Экз-зад. 1)



спектры K_2, K_3, K_4? $P_G(\lambda)$ – ? Закономерность?

det в общем виде: все строки прибавить к I, преобр, вынесть ее изо всех.

2)



Проверить $2\cos\frac{2\pi k}{n}$, $k = 1, 2, \dots, n$

Док-во $x = 2\cos\frac{\pi k}{n+1}$

Лемма: $D_n(2\cos\varphi) = \sin(n+1)\varphi / \sin\varphi$

$D_4(x) = x^4 - 3x^2 + 1$

$$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} = x \cdot D_3(x) - \cancel{x} \cdot D_2(x) = x \cdot D_3 - D_2$$

Т.о. $D_n = x \cdot D_{n-1} - D_{n-2}$

$D_1(x) = x \qquad x = 2\cos\varphi$

$D_1(2\cos\varphi) = 2\cos\varphi = \frac{\sin 2\varphi}{\sin\varphi}$

$D_2(2\cos\varphi) = 4\cos^2\varphi - 1 = \frac{\sin 3\varphi}{\sin\varphi} = \frac{3\cos^2\varphi\sin\varphi - \sin^3\varphi}{\sin\varphi} = 3\cos^2\varphi - (1-\cos^2\varphi) = 4\cos^2\varphi - 1.$

$D_{n+1}(2\cos\varphi) = 2\cos\varphi\, D_n(2\cos\varphi) - D_{n-1}(2\cos\varphi)$

$D_{n+1}(2\cos\varphi) = 2\cos\varphi \cdot \frac{\sin(n+1)\varphi}{\sin\varphi} - \frac{\sin n\varphi}{\sin\varphi} =$

$= \frac{\sin(n+2)\varphi + \sin n\varphi - \sin n\varphi}{\sin\varphi} = \frac{\sin(n+2)\varphi}{\sin\varphi}.$

(по методу математической индукции). Доказано

Экзаменационная задача. 15.02.2004г.

№1. В общем виде интересующий детерминант будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{vmatrix} x & 1 & 1 & 1 & \dots & \\ 1 & x & 1 & 1 & \dots & 1 \\ \dots & & & & & \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & x \end{vmatrix}$$

Это детерминант для графа, где все вершины связаны со всеми.

Количество вершин n.

Прибавим все строки к первой, разделим ее на $(x+n-1)$ и вычтем из остальных.

$$\begin{vmatrix} x & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & x & 1 & 1 & \dots & 1 \\ \dots & & & & & \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & x \end{vmatrix} \sim \begin{vmatrix} x+n-1 & x+n-1 & x+n-1 & \dots & x+n-1 \\ 1 & x & 1 & 1 \dots & 1 \\ 1 & \dots & & & \\ 1 & 1 & 1 & \dots & x \end{vmatrix} \sim \begin{vmatrix} x+n-1 & x+n-1 & x+n-1 & \dots & x+n-1 \\ 0 & x-1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & x-1 \end{vmatrix}$$

Разлагая по первому столбцу, учитывая, что детерминант диагональной матрицы равен произведению диагональных элементов, получаем

$$\begin{vmatrix} x+n-1 & x+n-1 & x+n-1 & \dots & x+n-1 \\ 0 & x-1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & x-1 \end{vmatrix} = (x+n-1)\cdot(x-1)^{n-1}$$

Т.о. общий вид $P_G(x) = (x+n-1)(x-1)^{n-1}$,

соответственно, $P_G(\lambda) = (-1)^n(\lambda-(n-1))(\lambda+1)^{n-1}$

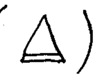
Откуда легко определить общий вид спектра:

$P_G(\lambda)=0$: $\lambda = \underbrace{-1; -1; \dots; -1}_{n-1}; n-1$

Спектры для K_2 $\lambda = -1; 1$

K_3 $\lambda = -1; -1; 2$

K_4 $\lambda = -1; -1; -1; 3$

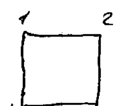
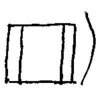
№2  () Спектр для K_3 уже определен: $\lambda = -1; -1; 2$

Проверка по $x = -2\cos\frac{2\pi k}{n}$; $x = +1; +1; -2$

$k=1$: $x = -2\cos\frac{2\pi}{3} = +1$

$k=2$: $x = -2\cos\frac{4\pi}{3} = +1$

$k=3$: $x = -2\cos 2\pi = -2$

 () Вычислим детерминант:

$$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 1 \\ 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 1 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} = x\cdot\begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} - 1\cdot\begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & x & 1 \\ 1 & 1 & x \end{vmatrix} - 1\cdot\begin{vmatrix} 1 & x & 0 \\ 0 & 1 & x \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} =$$

$$= x(x^3-2x) - 1\cdot(x^2+\cancel{1}-\cancel{1}) - 1\cdot(1+x^2) \overset{-1}{=} x^4-2x^2-x^2-\cancel{x^2} = x^4-4x^2-1$$

$x^4 - 4x^2 = 0 \Rightarrow \lambda^4 - 4\lambda^2 = 0$

$\lambda^2(\lambda-2)(\lambda+2) = 0$

$\lambda = -2;\ 0;\ 0;\ 2$

Проверка: $\lambda = 2\cos\frac{2\pi k}{n}$ $\quad k=1 \quad \lambda = 2\cos\frac{\pi}{2} = 0;$

$k=2 \quad \lambda = 2\cos\pi = -2;$

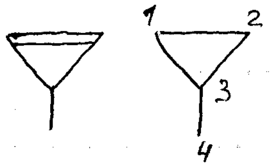
$k=3 \quad \lambda = 2\cos\frac{3\pi}{2} = 0;$

$k=4 \quad \lambda = 2\cos 2\pi = 2.$

Спектры для K_3 $\quad \lambda = -1; -1; 2$

$K_4.$ $\quad \lambda = -2; 0; 0; 2.$

Лекция №2.

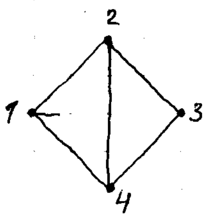


$\begin{vmatrix} x & 1 & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 \\ 1 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} =$

$\lambda^4 - 4\lambda^2 + 2\lambda + 1 = 0;$

$\lambda = -1;$

$\lambda^3 - \lambda^2 - 3\lambda + 1 = 0\ ;\ \lambda = -1 \Rightarrow (\lambda+1)(\lambda^3 - \lambda^2 - 3\lambda + 1)$



$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 1 \\ 1 & x & 1 & 1 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 1 & 1 & 1 & x \end{vmatrix} = x \cdot \begin{vmatrix} x & 1 & 1 \\ 1 & x & 1 \\ 1 & 1 & x \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & x & 1 \\ 1 & 1 & x \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \\ 1 & 1 & 1 \end{vmatrix} =$

$= x\,(x^3 + 1 + 1 - x - x - x) - (x^2 - 1) - (1 - x) - (1 - x) - 1(x^2 - 1) =$

$= x^4 + 2x - 3x^2 - x^2 + \cancel{1} - \cancel{1} + x - \cancel{1} + x - x^2 + \cancel{1} = x^4 - 5x^2 + 4x$

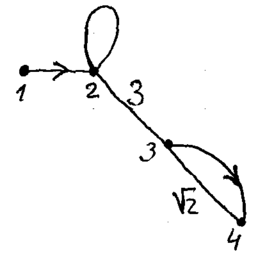
$P_G(\lambda) = \lambda^4 - 5\lambda^2 - 4\lambda = 0;$

$\lambda = 0; \quad \lambda = -1; \quad \lambda_{3,4} = \frac{1 \pm \sqrt{17}}{2}$

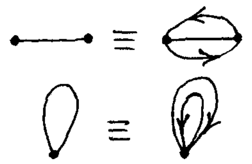
$P_G(\lambda) = \lambda(\lambda+1)(\lambda^2 - \lambda + 4)$

Ответ: $P_G(\lambda) = \lambda(\lambda+1)(\lambda^2 - \lambda - 4).$

Случай с петлями и дугами.



$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{2}+1 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$



Петля в вершине позволяет отличить атомы N или O от C.

Дуги, а также ребра с некоторым весом говорят о неравноправности кратных и одинарных связей.

Правила МакКлелланда: McClelland's rules.

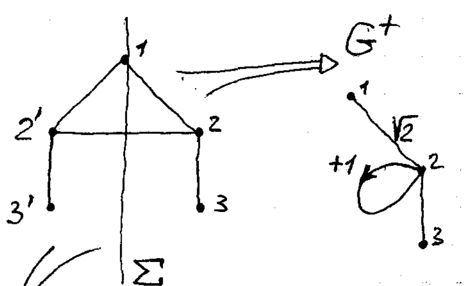
Пусть имеется зеркально симметричный граф.

Плоскость симметрии Σ

1) Vertices which lie on the symmetry plane are included in G^+

2) If a vertex μ lies in Σ and ν doesn't, then $a^+_{\mu\nu}$ is $a_{\mu\nu}\sqrt{2}$

3) $a^\pm_{\mu\nu} = a_{\mu\nu} \pm a_{\mu\nu'}$ where ν' is the symmetry partiner of ν with respect to Σ.



$a_{22'} = 1$

$a^+_{22} = a_{22} + a_{22'} = 0+1 = 1$

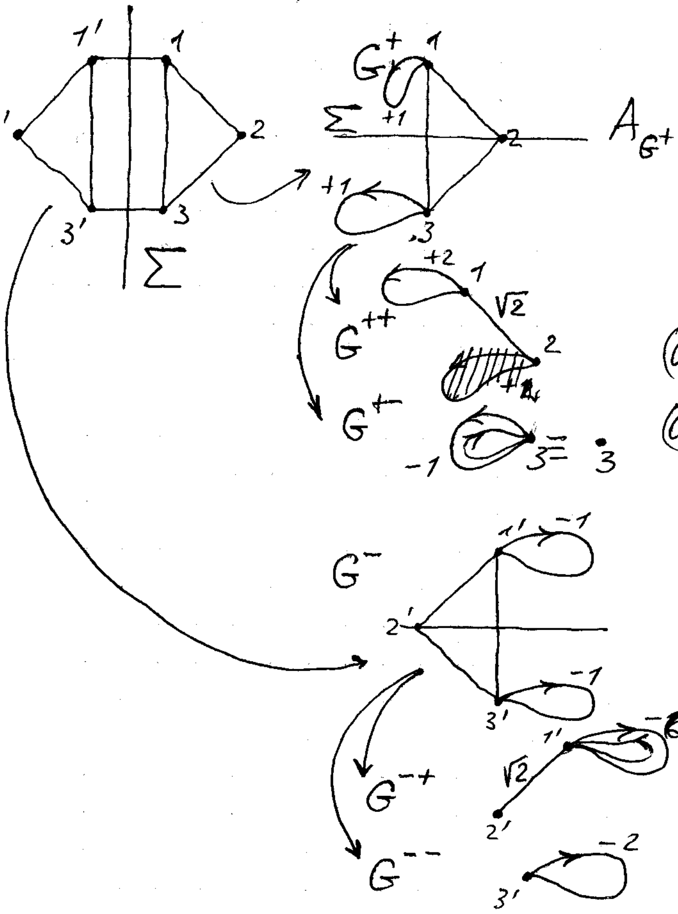
$a^-_{22} = a_{22} - a_{22'} = 0-1 = -1$

$$A_{G^+} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{vmatrix} -\lambda & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 1-\lambda & 1 \\ 0 & 1 & -\lambda \end{vmatrix} = +\lambda^2(1-\lambda) + \lambda - \sqrt{2}\cdot\sqrt{2}\cdot(-\lambda) = \lambda^2 - \lambda^3 + \lambda + 2\lambda =$$

$$= -\lambda^3 + \lambda^2 + 3\lambda \; ; \quad \lambda_1 = 0; \; \lambda_{2,3} = \frac{+1 \pm \sqrt{13}}{2}$$

$$A_{G^-} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{vmatrix} -1-\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda(1+\lambda) - 1 = \lambda^2 + \lambda - 1; \quad \lambda_{1,2} = \frac{-1 \pm \sqrt{5}}{2}.$$

Т.о. $P_G = \lambda(\lambda^2-\lambda-3)(\lambda^2+\lambda-1)$



$(a_{22'}^{+} = a_{22} + a_{23'} = 0+1 = 1)$

$(a_{22}^{-} = a_{22} + a_{23} = 0-1 = -1)$

G^{++} $\begin{pmatrix} 2 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$ $\begin{vmatrix} 2-\lambda & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 2\lambda - 2 = 0$

$\lambda_{1,2} = 1 \pm \sqrt{3}$

G^{+-} $\lambda = 0$

G^{-+} $\begin{pmatrix} -2 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$ $\begin{vmatrix} -2-\lambda & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 + 2\lambda - 2;$

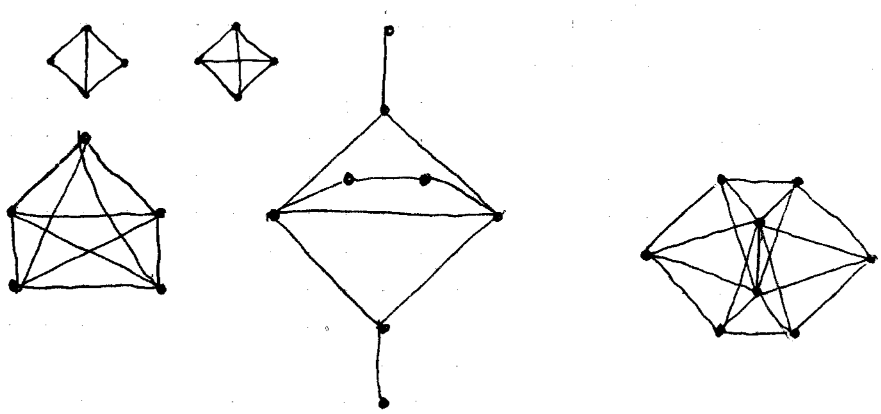
$\lambda = \pm\sqrt{2}$

G^{--} $\lambda = -2$

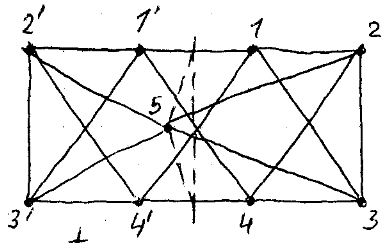
Т.о. спектр

$$\lambda = \left[\begin{array}{l} 1 \pm \sqrt{3} \\ \pm\sqrt{2} \\ 0 \\ -2 \end{array}\right.$$

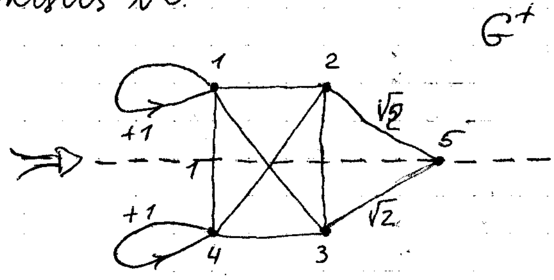
Экзам:



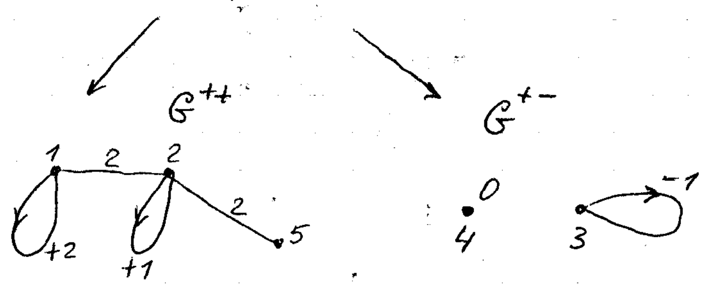
4.03.2004г. Лекция №3.

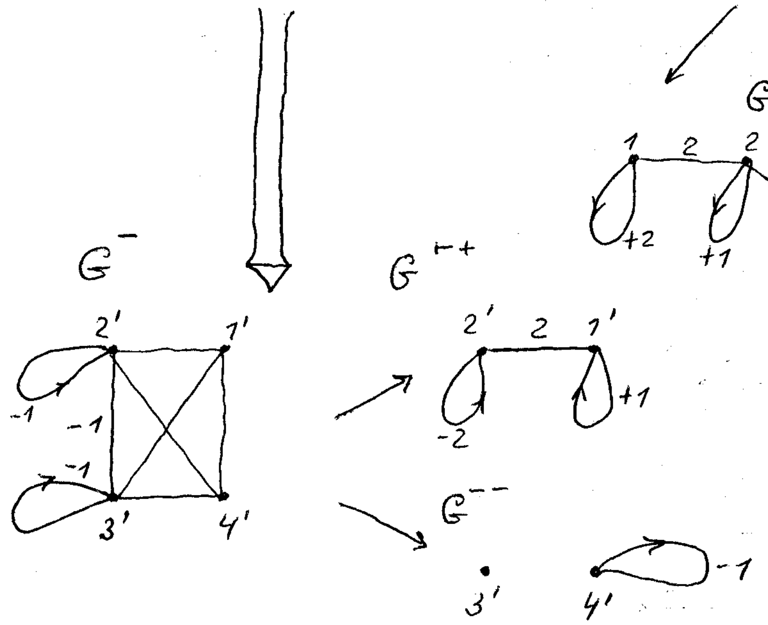


$$a^{\pm}_{\mu\nu} = a_{\mu\nu} \pm a_{\mu\nu'}$$



$$a^{\pm}_{14} = a_{14} \pm a_{14'} = 0 \pm 1$$





G^{++} $\begin{vmatrix} 2-\lambda & 2 & 0 \\ 2 & 1-\lambda & 2 \\ 0 & 2 & -\lambda \end{vmatrix} = (2-\lambda)(1-\lambda)(-\lambda) - (2-\lambda)\cdot 4 - 2\cdot 2\cdot(-\lambda) =$

$= -\lambda^3 + 3\lambda^2 + 6\lambda - 8$

$\lambda = 1;\ -2;\ 4$

G^{+-} и G^{-+} $\begin{vmatrix} -\lambda & 0 \\ 0 & -1-\lambda \end{vmatrix} \Rightarrow \lambda = 0^2; -1^2$

G^{--} $\begin{vmatrix} -2-\lambda & 2 \\ 2 & 1-\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 + \lambda - 6 \Rightarrow \lambda = -3;\ 2.$

Спектр: $-3; -2; -1; -1; 0; 0; 1; 2; 4.$

4.03.2004г. Лекция №4.

Определитель блочной ~~распечат~~ матрицы.

Не уверен – не применяй!

$$\det\left(\begin{array}{c|c} A & B \\ \hline B & D \end{array}\right) = \det A \det(D - CA^{-1}B)$$

Док-во:

$$\left(\begin{array}{c|c} X & 0 \\ \hline Y & E\end{array}\right)\left(\begin{array}{c|c} A & B \\ \hline C & D\end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} E & U \\ \hline 0 & V\end{array}\right)$$

X, Y, U, V — неизвестные матрицы

$$\begin{cases} XA = E & YA + C = 0 \\ XB = U & YB + D = V \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} X = A^{-1} & Y = -CA^{-1} \\ U = XB = A^{-1}B & V = -CA^{-1}B + D \end{cases}$$

$$\det X \cdot \det\left(\begin{array}{c|c} A & B \\ \hline C & D\end{array}\right) = \det V$$

$$(\det A)^{-1} \det\left(\begin{array}{c|c} A & B \\ \hline C & D\end{array}\right) = \det(D - CA^{-1}B)$$

$$\det\left(\begin{array}{c|c} A & B \\ \hline C & D\end{array}\right) = \det A \det(D - CA^{-1}B)$$

Следствия:

1. Пусть A, B, C, D — квадр. блоки одинаковой размерност
$\dim A = \dim B$

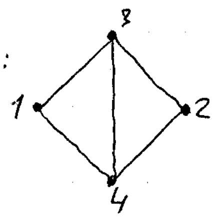
$$\det\left(\begin{array}{c|c} A & B \\ \hline C & D\end{array}\right) = \det A \det(\cancel{A}D - \cancel{A}CA^{-1}B) = \det(AD - ACA^{-1}B) =$$
$$= \det(DA - CA^{-1}BA)$$

Если $CA = AC$, то $\det(AD - ACA^{-1}B) = \det(AD - CAA^{-1}B) =$
$$= \det(AD - CB)$$

A и C коммутируют, если A (или C) диаг. (не только!)

Если $BA = AB$, то $\det(DA - CA^{-1}BA) = \det(DA - CB)$

Лучше пользоваться когда A - диагональна.

Пример: 

$$\det\left(\begin{array}{cc|cc} x & 0 & 1 & 1 \\ 0 & x & 1 & 1 \\ \hline 1 & 1 & x & 1 \\ 1 & 1 & 1 & x \end{array}\right) = \det\left(\begin{pmatrix} x^2 & x \\ x & x^2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}\right) = \det\begin{pmatrix} x^2-2 & x-2 \\ x-2 & x^2-2 \end{pmatrix} =$$

$$\det\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \det(AD - CB) = \det(DA - CB)$$

если A - диагональна!

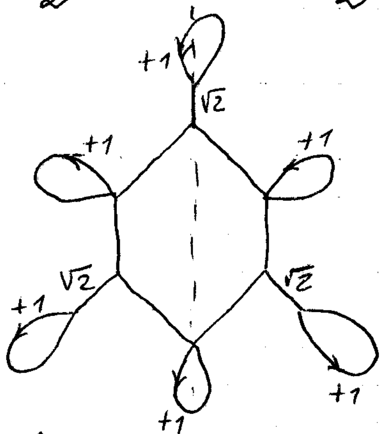
$\ominus$ $(x^2-2)^2-(x-2)^2=(x^2-2-x+2)(x^2-2+x-2)=x(x-1)(x^2+x-4)$

Т.о. $x=0;\ 1;\ \frac{-1\pm\sqrt{17}}{2}$

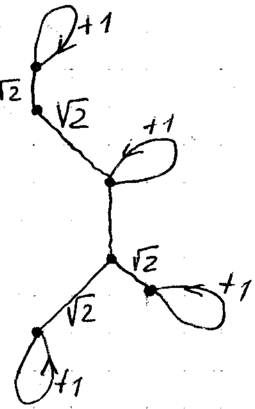
Спектр: $\frac{1-\sqrt{17}}{2};\ -1;\ 0;\ \frac{1+\sqrt{17}}{2}$.

C_{60}

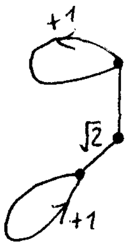
G^{+++}



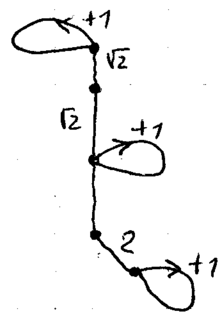
G^{++++}



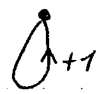
G^{+++-}



G^{+++++}



G^{++++-}



$\lambda=1$

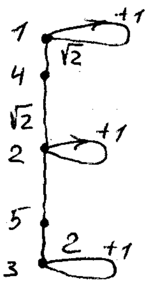
G^{+++-}

$$\det\begin{pmatrix}1+x & 1 & 0\\ 1 & x & \sqrt2\\ 0 & \sqrt2 & 1+x\end{pmatrix}=(1+x)^2x-2(1+x)-1(1+x)=$$

$$=(x+x^2-3)(1+x)$$

$$\lambda=1;\quad \frac{1\pm\sqrt{13}}{2}.$$

G^{+++++}



$$\det\left(\begin{array}{ccc|cc}1+x & 0 & 0 & \sqrt2 & 0\\ 0 & 1+x & 0 & \sqrt2 & 1\\ 0 & 0 & 1+x & 0 & 2\\ \hline \sqrt2 & \sqrt2 & 0 & x & 0\\ 0 & 1 & 2 & 0 & x\end{array}\right)=\det\left(\begin{pmatrix}x & 0\\ 0 & x\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\sqrt2 & \sqrt2 & 0\\ 0 & 1 & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{1+x} & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{1+x} & 0\\ 0 & 0 & \frac{1}{1+x}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt2 & 0\\ \sqrt2 & 1\\ 0 & 2\end{pmatrix}\right)\cdot$$

$$\cdot\det\begin{pmatrix}1+x & 0 & 0\\ 0 & 1+x & 0\\ 0 & 0 & 1+x\end{pmatrix}=\det((1+x)\mathbb{1})\cdot/\det\begin{pmatrix}x-4 & -\sqrt2\\ -\sqrt2 & x-5\end{pmatrix}/.$$

$$A^{-1}=\frac{1}{x+1}\cdot\mathbb{1}$$

$$\begin{pmatrix}\sqrt2 & \sqrt2 & 0\\ 0 & 1 & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt2 & 0\\ \sqrt2 & 1\\ 0 & 2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}4 & \sqrt2\\ \sqrt2 & 5\end{pmatrix}$$

$$/\det\left(\frac{1}{x+1}\cdot\mathbb{1}-\ ^{1}/\right.$$

$$\cdot\det\left(\frac{1}{x+1}\begin{pmatrix}x(x+1)-4 & -\sqrt2\\ -\sqrt2 & x(x+1)-5\end{pmatrix}\right)=$$

$$=\frac{(x+1)^3}{(x+1)^2}\begin{vmatrix}y-4 & -\sqrt2\\ -\sqrt2 & y-5\end{vmatrix}=$$

$$=(x+1)\big((y-4)(y-5)-2\big)\ \ominus$$

$\ominus\ (x+1)(y^2-9y+\cancel{7}8)$

$\cancel{x}\ \lambda=1$

$y^2-9y+18=0$

$y_{1,2}=\dfrac{9\pm3}{2}=6;\ 3$

$x^2+x-\cancel{3}=0 \qquad x^2+x-\cancel{6}=0$

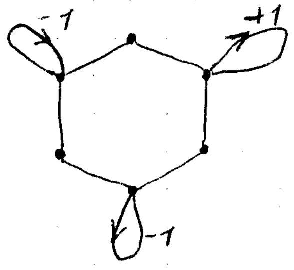
$\left(x=\dfrac{-1\pm\sqrt{17}}{2}\right); \qquad \left(x=\dfrac{-1\pm\sqrt{21}}{2}\right)$

$x=\dfrac{-1\pm\sqrt{13}}{2} \qquad x=-3;\ x=2.$

T.c. $P_G(x)=(x+1)^3(x^2+x-3)^2(x+3)(x-2)$

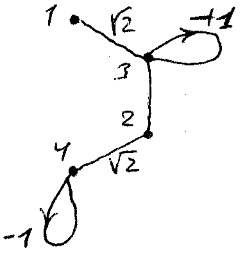
(G^{+++})

G^{---}



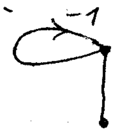
$\longrightarrow$

G^{---+}



$\downarrow$

G^{----}



$\det\begin{pmatrix}-1-\lambda & 1\\ 1 & -\lambda\end{pmatrix}=(1+\lambda)\lambda-1=$

$=\lambda^2+\lambda-1$

$\lambda=\dfrac{-1\pm\sqrt5}{2}$

$\det\left(\begin{array}{cc|cc}x & 0 & \sqrt2 & 0\\ 0 & x & 1 & \sqrt2\\ \hline \sqrt2 & 1 & x-1 & 0\\ 0 & \sqrt2 & 0 & x-1\end{array}\right)=\det\left(x(x-1)\cdot\mathbb{1}-\begin{pmatrix}\sqrt2 & 0\\ 1 & \sqrt2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt2 & 1\\ 0 & \sqrt2\end{pmatrix}\right)=$

$=\det\left(\underbrace{x(x\cancel{+}1)}_{y}\cdot\mathbb{1}-\begin{pmatrix}2 & \sqrt2\\ \sqrt2 & 3\end{pmatrix}\right)=\det\begin{pmatrix}y-2 & -\sqrt2\\ -\sqrt2 & y-3\end{pmatrix}=$

$=(y-2)(y-3)-2=y^2-5y+4=0$

$y=1,\ y=4: \qquad x^2-x-1=0 \qquad x=\dfrac{1\pm\sqrt5}{2}$

$x^2-x-4=0 \qquad x=\dfrac{1\pm\sqrt{17}}{2}$

$P_{G^{---}}(\lambda)=(\lambda^2+\lambda-1)^2(\lambda^2+\lambda-4)$

18.03.2004г. Лекция № 5.

Теорема Харари-Коулсона-Сакса

Н. Тринайстич „Теория Хюккеля и топология"

И. С. Дмитриев „Молекулы без химических связей."

$$P_G(\lambda) = \det(A - \lambda E)\cdot(-1)^n = \sum_{k=0}^{n} a_k \lambda^{n-k}$$

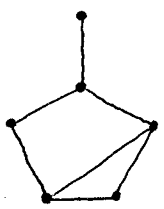
$$a_k = \sum_{S \in S_k} (-1)^{c(S)} \cdot 2^{r(S)}$$

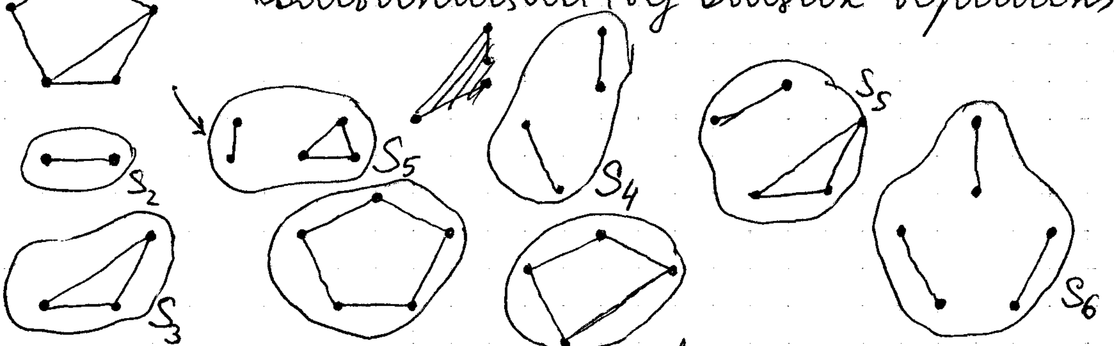
$c(S)$ – число компонент в саксовом графе S.

$r(S)$ – число циклов в нем же.

S_k – мн-во всех саксов. граф. с k вершин

Саксов граф – (пара); (цикл); или их комбинации (без общих вершин)





разбиение на саксовы графы.

$a_0 \equiv 1$

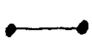
$S_1 = \varnothing$ если нет петель

$\Downarrow$

$a_1 = 0 \qquad a_1 = -\sum_i \lambda_i$

S_2 – кол-во пар равно числу ребер. ν

$a_2 = \nu(-1)^1 \cdot 2^0 = -\nu$



$P_G(\lambda) = \lambda^2 - 1 \quad (\lambda = 1; -1)$

$a_0 = 1$

$a_1 = 0$

$a_2 = -1$

$P_G(\lambda) = \lambda^3 - 2\lambda \quad (\lambda = 0; \pm\sqrt{2})$

$S_3 = \varnothing$

$a_3 = 0$

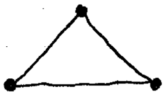
$P_G(\lambda) = \lambda^4 - 3\lambda^2 + 1$

$S_4 = \{$  $\}$

$a_4 = 1$

$P_G(\lambda) = \lambda^5 - 4\lambda^3 + 3\lambda$

$a_4 = 3$

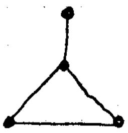


$P_G(\lambda) = \lambda^3 - 3\lambda - 2 \quad (\lambda = 2; -1; -1)$

$a_1 = 0$

$a_2 = -3$

$a_3 = -2 \quad S_3 = \{\triangle\}$

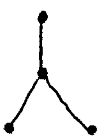


$P_G(\lambda) = \lambda^4 - 4\lambda^2 - 2\lambda + 1 \quad (\lambda =$

$a_1 = 0 \qquad a_4 = 1$

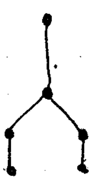
$a_2 = -4$

$a_3 = -2$



$a_1 = 0 \quad a_3 = 0 \quad P_G(\lambda) = \lambda^4 - 3\lambda^2$

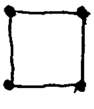
$a_2 = -3 \quad a_4 = 0$



$a_1 = 0 \quad a_3 = 0 \quad a_5 = 0$

$a_2 = -5 \quad a_4 = 5 \quad a_6 = -1$

$P_G(\lambda) = \lambda^6 - 5\lambda^4 + 5\lambda^2 - 1$



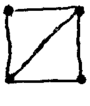
$a_1 = 0 \quad a_3 = 0$

$a_2 = -4 \quad a_4 = 0$

$a_4 = (-1)^1 \cdot 2^1 + (-1)^2 \cdot 2^0 = 2 + 2 = 0$

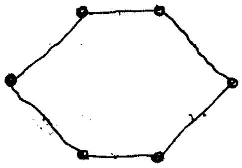
$P_G(\lambda) = \lambda^4 - 4\lambda^2$

$\lambda = 2\cos\frac{2\pi k}{n}$



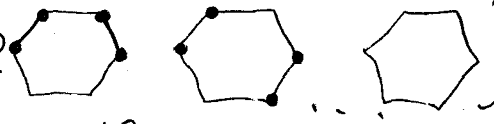
$a_1 = 0 \quad a_3 = -4 \ (-2 \cdot 2)$

$a_2 = -5 \quad a_4 = 0 \quad P_G(\lambda) = \lambda^4 - 5\lambda^2 - 4\lambda$



$a_0 = 1 \quad a_2 = -6 \quad a_4 = \cancel{1}9 \quad a_6 = -4$

$a_1 = 0 \quad a_3 = 0 \quad a_5 = 0$

$S_4 \{ 2$  $\}$

10

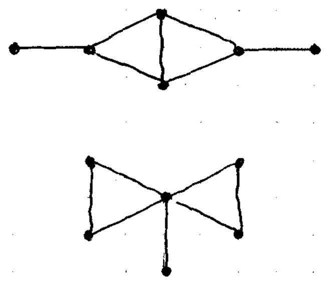
$P_6(\lambda) = \lambda^6 - 6\lambda^4 + 9\lambda^2 - 4$

$(\lambda = \pm 1^2; \pm 2)$

$2\cos\frac{2\pi k}{n}$

Жуали. задача

 Home!

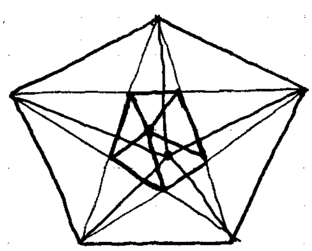


изоспектральные графы.

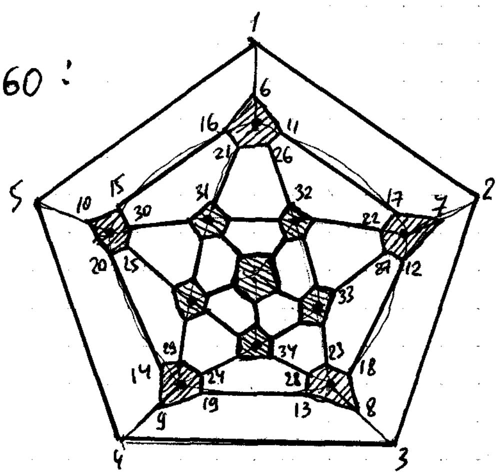
25.03.2004г. Лекция №6.

Расчет графа C_{60}.

Проекция икосаэдра



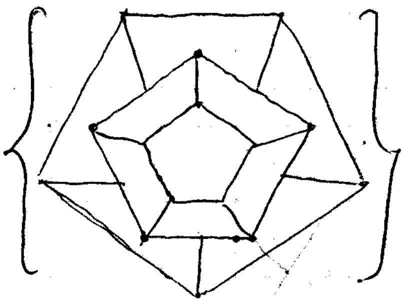
C_{60}:

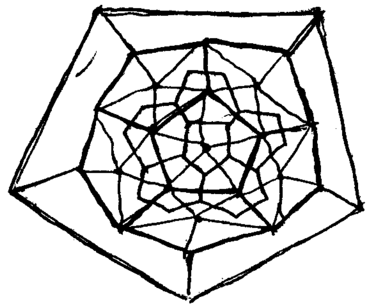


Leapfrog-преобразование:

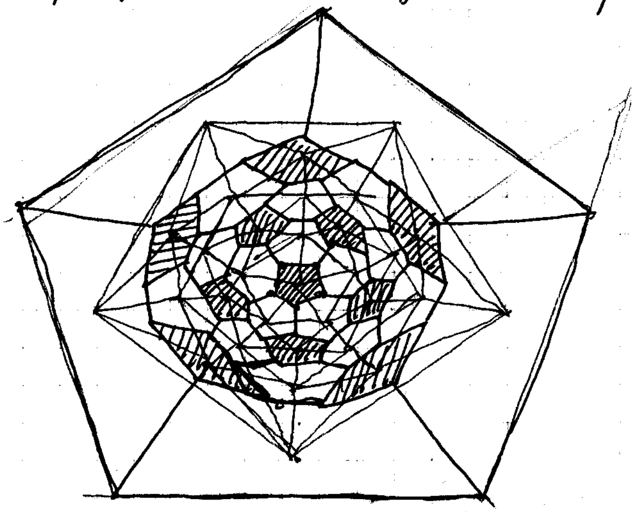
$C_{20} \to C_{60} \to C_{180} \to C_{540}$

Граф Шлегеля - это граф многогранника, распятый на плоскости.





Capping – разбиение всех граней на треугольники.
Середины соседних граней соединяются.



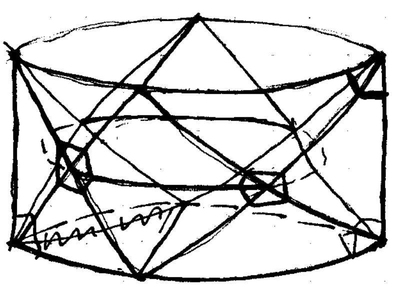
Если $\mathbb{T}$ – усечение (truncation)
$\mathbb{C}$ – capping (триангуляция)
$\mathbb{D}$ – дуализация (dualization)

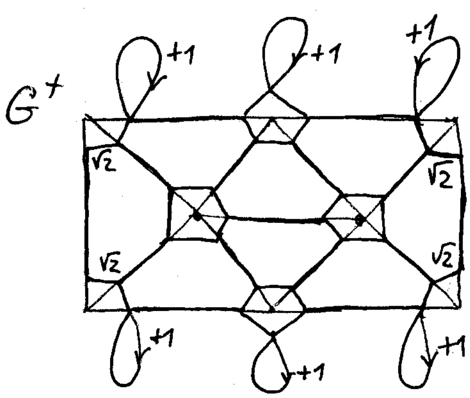
dodecah. : $\mathbb{DC}$dodecah. $= C_{60}$

$\mathbb{TD}$dodecah. $= C_{60}$

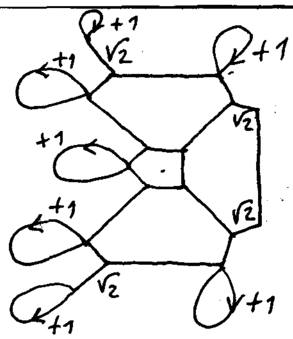
Т.о. $\mathbb{DC}\,G = \mathbb{TD}\,G$

Как нарисовать икосаэдр, чтобы были видны 3 плоскости симметрии:

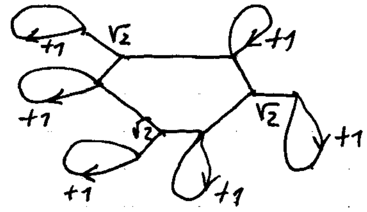




G^{++}

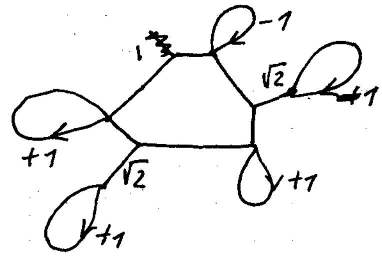


G^{+++}



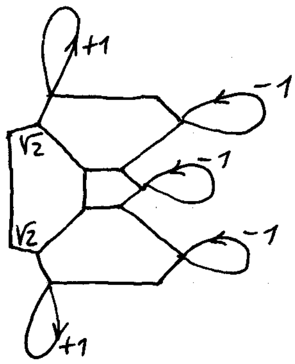
9

G^{++-}

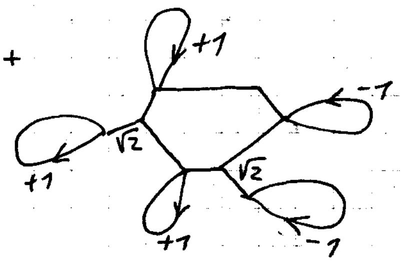


8

G^{+-}

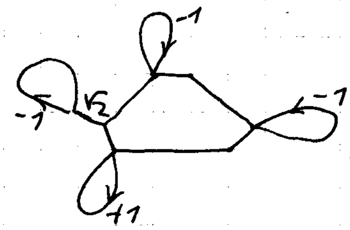


G^{+-+}



8

G^{+--}



7

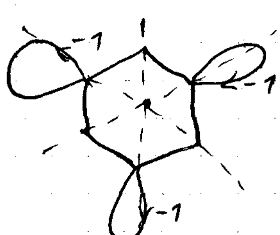
$$P_{G^{+++}}(\lambda) = (\lambda-3)(\lambda+2)(\lambda-1)^2(\lambda^2-\lambda-3)^2$$

$$P_{G^{++-}}(\lambda) = P_{G^{+-+}}(\lambda) = \lambda^8-\lambda^7-12\lambda^6+10\lambda^5+42\lambda^4-28\lambda^3-47\lambda^2+23\lambda+4$$

$\{G^{++} \Leftrightarrow G^{+-+}\}$

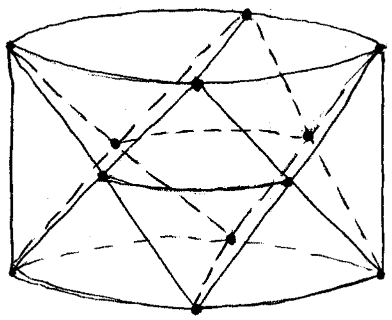
$$P_{G^{+--}}(\lambda) = \lambda^7+2\lambda^6-8\lambda^5-14\lambda^4+16\lambda^3+20\lambda^2-11\lambda-6$$

G^{---}

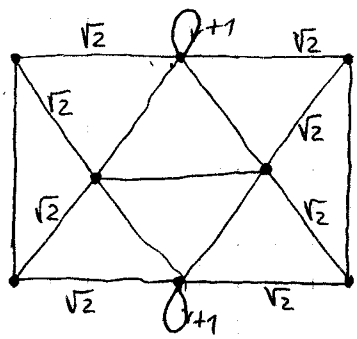


$$P_{G^{---}}(\lambda) = (\lambda^2+\lambda-4)^2(\lambda^2+\lambda-1)^2$$

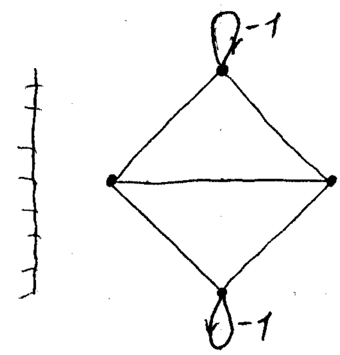
Лекция №7. 1.04.2004г.



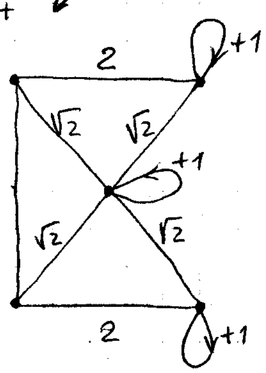
G^+



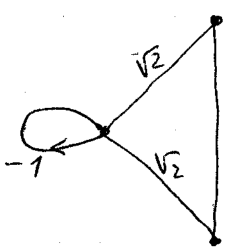
G^-



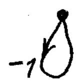
G^{++}



G^{+-}

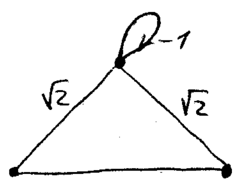


G^{--}

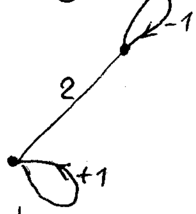


$\lambda = -1$

G^{-+}



G^{-++}

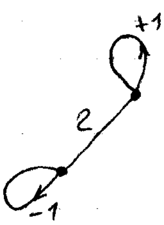


G^{-+-}

$\lambda = -1$

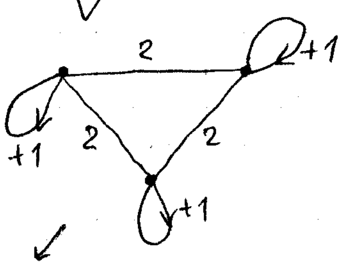
$$\begin{vmatrix} -1-\lambda & 2 \\ 2 & 1-\lambda \end{vmatrix} = (\lambda-1)(\lambda+1)-4 = \lambda^2-5$$

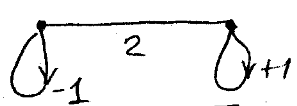
$\lambda = \pm\sqrt5$



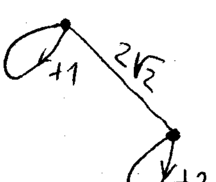
$\lambda = \pm\sqrt5$

$\lambda = -1$





$\lambda = \pm\sqrt5$



$\lambda = -1$

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 2\sqrt2 \\ 2\sqrt2 & 3-\lambda \end{vmatrix} = \cancel{\lambda^2-2\lambda-8=0} = (1-\lambda)(3-\lambda)-8 = 3-4\lambda+\lambda^2-8 = \lambda^2-4\lambda-5=0$$

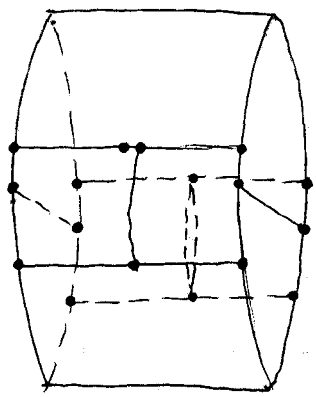
$\cancel{D = 4+32 = 36}$ $\cancel{D = 9+24 =}$

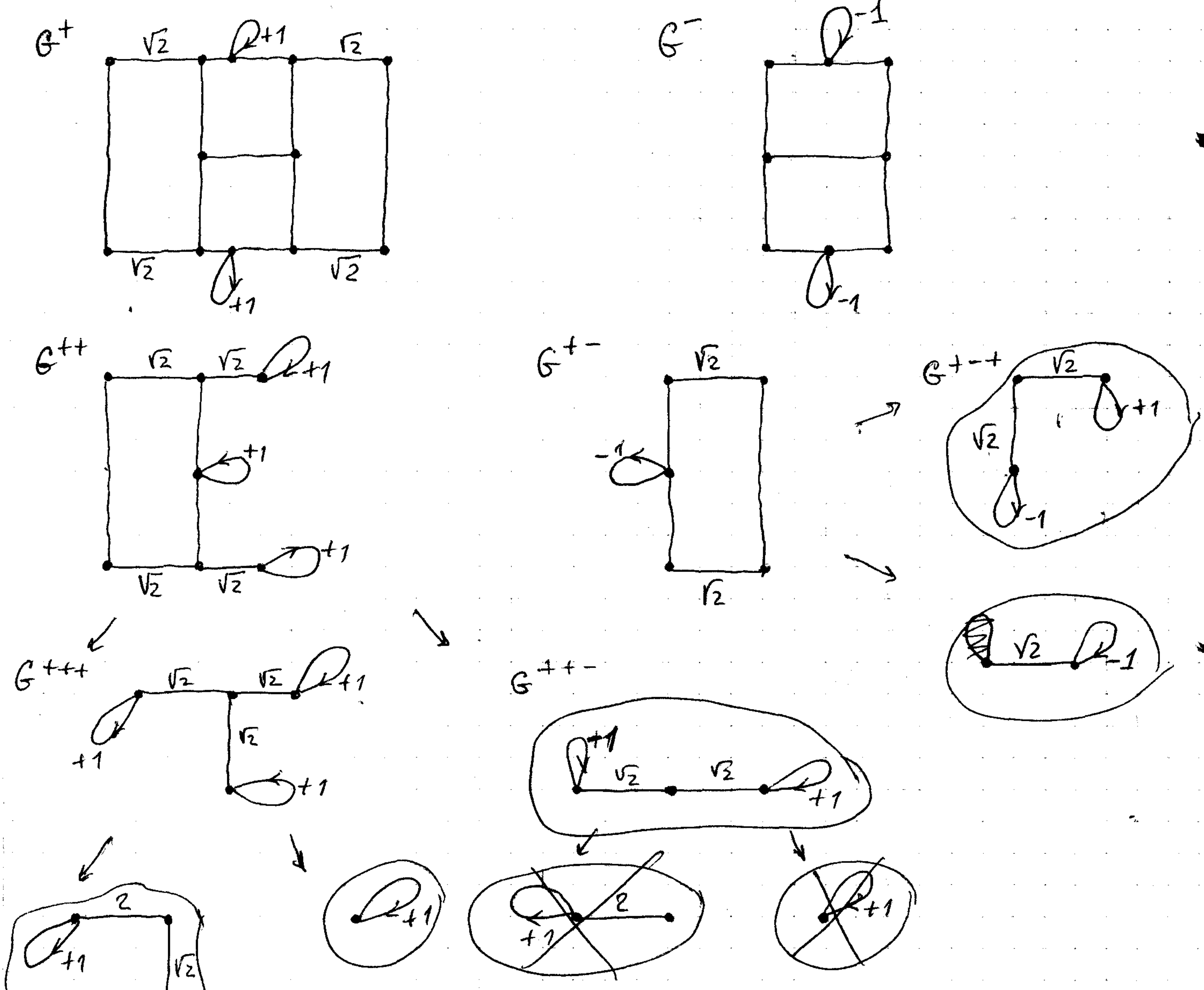
$\lambda = 5;\ \lambda = -1$

Спектр: $\lambda = -1^5;\ \pm\sqrt5^{\,3};\ \cancel{4};\ 5.$

Спектр графа-икосаэдра: $-1^5;\ \pm\sqrt{5}^3;\ 5.$

Додекаэдр





$$\lambda = 1; \quad \begin{vmatrix} -\lambda & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & -1-\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2+\lambda-2=0$$

$$\lambda = \cancel{\frac{-1\pm\sqrt{5}}{2}}\ -2;\ 1$$

$$\left\{ \begin{vmatrix} 1-\lambda & 1 & 0 \\ 1 & \lambda & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & -1-\lambda \end{vmatrix} = \lambda^3-\lambda-2(1-\lambda)+(1+\lambda) = \lambda^3-\lambda-2+2\lambda+1+\lambda = \lambda^3+2\lambda-1=0 \right\}$$

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & \sqrt2 & 0 \\ \sqrt2 & -\lambda & \sqrt2 \\ 0 & \sqrt2 & -1-\lambda \end{vmatrix} = -\lambda^3+\lambda-2+2\lambda+2+2\lambda = -\lambda^3+5\lambda$$

$\lambda = 0; \pm\sqrt5$

G^{++-} $\lambda = 0; \pm\sqrt5$

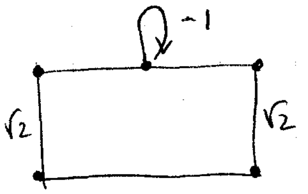
$$\begin{vmatrix} -\lambda+1 & 2 & 0 \\ 2 & -\lambda & \sqrt2 \\ 0 & \sqrt2 & 1-\lambda \end{vmatrix} = -\lambda^3+2\lambda^2-\lambda-6+6\lambda = -\lambda^3+2\lambda^2+5\lambda-6=0$$

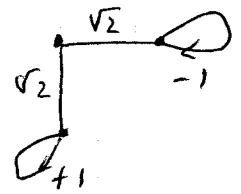
$\lambda = +1$

$$\begin{array}{l|l} \lambda^3-2\lambda^2-5\lambda+6 & \lambda-1 \\ \lambda^3-\lambda^2 & \lambda^2-\lambda-6 \\ \hline -\lambda^2-5\lambda & \\ -3\lambda^2-3\lambda & \end{array}$$

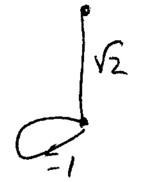
$\lambda = -2; 3$

G^-

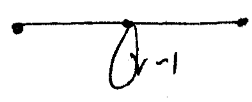


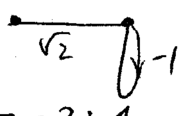


$0; \pm\sqrt5$



$\lambda = -2; 1$





$\lambda = -2; 1$

$\bullet$ 0

Спектр графа-додекаэдра: $\lambda = -2^4; 0^4; \pm\sqrt5^{\,3}; 1^5; 3$

$\nu = 5$ - число ребер, сходящихся в вершине.

5- валентный граф. Соотв. $\lambda_{max} = 5$, оно всегда единств.

Если нет петель, то сумма корней равна 0.

Додекаэдр - граф C_{20}.

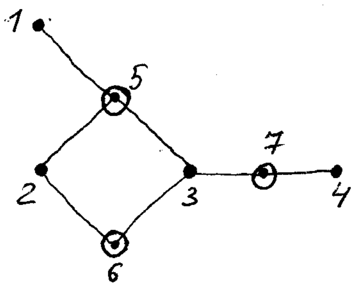
$\nu = 3$ $\lambda_{max} = +3$ $x_{min} = -3$

15.04.2004г.

Лекция № 8.

Двудольные графы.

Граф называется двудольным (бихроматическим), если его можно раскрасить двумя красками так, что любые смежные вершины окрашены в разные цвета.



$$A = \left(\begin{array}{c|c} 0 & B \\ \hline B^T & 0 \end{array}\right) \qquad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Блочная структура матрицы смежностей этого графа следует из его двудольности.

Утверждение: Матрица вида:

$$A = \left(\begin{array}{c|c} 0 & B \\ \hline C & 0 \end{array}\right)\begin{array}{l} \}m_1 \\ \}m_2 \end{array}$$

имеет спектр, симметричный относительно точки 0.

Доказательство:

Пусть $|\lambda>$ - собственный вектор с собственным значением $\lambda \neq 0$

$$|\lambda> = \left(\begin{array}{c} X \\ \hline Y \end{array}\right)\begin{array}{l} \}m_1 \\ \}m_2 \end{array}$$

$$A|\lambda> = \left(\begin{array}{c|c} 0 & B \\ \hline C & 0 \end{array}\right)\left(\begin{array}{c} X \\ \hline Y \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} BY \\ \hline CX \end{array}\right) = \lambda|\lambda> = \left(\begin{array}{c} \lambda X \\ \hline \lambda Y \end{array}\right)$$

Т.о. $BY = \lambda X$

$CX = \lambda Y$

Утверждается, что собственное значение $-\lambda$ $\exists$, т.к.

Возьмем вектор: $|?> = \left(\begin{array}{c} X \\ \hline Y \end{array}\right)$

$$A|?> = \left(\begin{array}{c|c} 0 & B \\ \hline C & 0 \end{array}\right)\left(\begin{array}{c} X \\ \hline Y \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} -BY \\ \hline CX \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} -\lambda X \\ \hline \lambda Y \end{array}\right) = -\lambda\left(\begin{array}{c} X \\ \hline -Y \end{array}\right) = -\lambda|?>$$

Т.о. $|?>$ является собственным и соответствует собственному значению $-\lambda$.

$|?> \equiv |-\lambda>$

Собственное значение $-\lambda$ существует.

<u>Следствие:</u> Спектр матрицы A симметричен относительно точки 0, а матрица смежностей двудольного графа имеет как раз такой вид.

Взгляд с точки зрения теоремы Харари-Коулсона-Сакса.
Раскрасить граф двумя цветами может помешать наличие цикла нечетной длины.

$$P_G(\lambda) = \lambda^n + 0\cdot\lambda^{n-1} + a_2\lambda^{n-2} + 0\cdot\lambda^{n-3} + a_4\lambda^{n-4} + 0\cdot\lambda^{n-5} + \ldots$$

(чтобы граф был двудольным) (-"-)

Т.о. если граф двудолен, то в его характеристическом полиноме отсутствуют нечетные члены

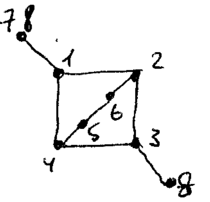
Это уравнение решается сведением к биквадратному, $\lambda^2 = t$, а значит, спектр симметр. от-но 0.

Двудольные графы соответствуют альтернантным углеводородам.

Лекция № 9. 22.04.2004г.

Maple 8

Работа с пакетом Networks:




```
with(networks):
G: = void(8):
addedge([{1,7}, {8,3}, {...}, ...], G):
addedge(Cycle(1,2,3,4), G):
addedge(Path(4,5,6,2), G):
draw(Concentric([1,2,3,4], G):
adjacency(G);
h: = sort(simplify(charpoly(G,x)))
factor(h);
```

/Графы с целыми спектрами/

Двудольный дубль.

$\tilde{G}$ – двудольный дубль графа G, если

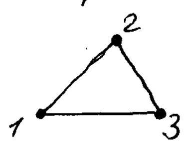
$$A_{\tilde{G}} = \left(\begin{array}{c|c} 0 & A_G \\ \hline A_G & 0 \end{array}\right)$$

← матрица смежностей графа G.

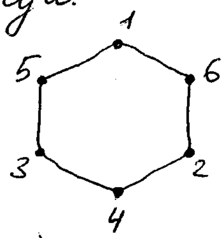
/Всякий двудольный граф есть двудольный дубль, но/ обратное неверно.

Всякий двудольный дубль есть двудольный граф, обратное верно не всегда.

Ex



K_3 $\quad G$



$\tilde{G}$

$$A_{\tilde{G}} = \left(\begin{array}{ccc|ccc} & & & 0 & 1 & 1 \\ & 0 & & 1 & 0 & 1 \\ & & & 1 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 1 & & & \\ 1 & 0 & 1 & & 0 & \\ 1 & 1 & 0 & & & \end{array}\right)$$

$$P_G(\lambda) = P_{K_3}(\lambda) = (\lambda-2)(\lambda+1)^2$$

P_G для полного графа:

1) На г.д. – 0, все остальное – 1
2) все строчки прибавить к первой
3) Из первой строчки вынести общ. множитель.
4) Вычесть первую строку из всего остального.

$$P_{\tilde{G}}(\lambda) = (\lambda-2)(\lambda+2)(\lambda-1)^2(\lambda+1)^2$$

$G: \ \{2; -1; -1\}$

$\tilde{G}: \ \{2; -2; 1; 1; -1; -1\}$.

$$P_G(-\lambda) = (-1)^3(\lambda+2)(\lambda-1)^2$$

$P_{\tilde{G}} = P_G(\lambda)\,P_G(-\lambda)(-1)^n$, n – размерность G (число вершин)

~~Док-во:~~

$$P_G(\lambda) = \det\left(\begin{array}{c|c} -\lambda E & A_G \\ \hline A_G & -\lambda E \end{array}\right)$$

Известно, что $\det\left(\begin{array}{c|c} A & B \\ \hline C & D \end{array}\right) = \det A \det(D - CA^{-1}B) =$

$\xlongequal[AC=CA]{\dim A = \dim D} \det(AD - CB)$

В нашем случае:

$$A_{\tilde G}(\lambda) = \det\left(\begin{array}{c|c} -\lambda E & A_G \\ \hline A_G & -\lambda E \end{array}\right) = |(-\lambda)^2 E^2 - A_G^2| = \underbrace{|-\lambda E - A_G|}_{\cancel{(-1)^n}|\lambda E + A_G|}\,\underbrace{|-\lambda E + A_G|}_{P_G(\lambda)\cdot\cancel{(-1)^n}} =$$

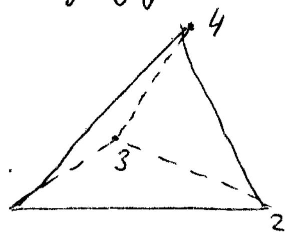
$A^2 - B^2 \neq (A-B)(A+B)$,

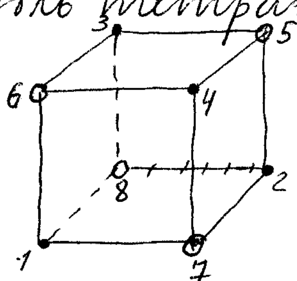
но $A^2 - E^2 = (A-E)(A+E)$

$$= P_G(\lambda)\underbrace{|\lambda E + A_G|}_{P_G(-\lambda)\cdot(-1)^n} = P_G(\lambda)P_G(-\lambda)(-1)^n$$

Доказано.

Куб — двудольный дубль тетраэдра





$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \left(\begin{array}{c|c} 0 & A \\ \hline A & 0 \end{array}\right)$$

Тетраэдр: K_4 $\{3; -1; -1; -1\}$

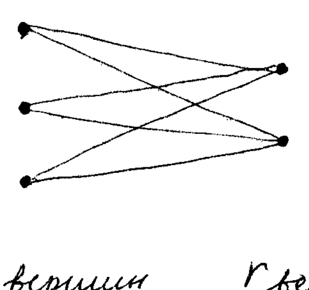
$$P_G(\lambda) = (\lambda - 3)(\lambda + 1)^3$$

Куб: $P_{\tilde G}(\lambda) = P_G(\lambda) P_G(-\lambda)$

$$\lambda = \{3; -3; 1^3; -1^3\}$$

Экзам.!
Посчитать полные графы.

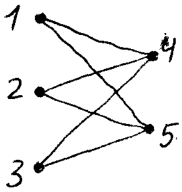
Полные двудольные графы.



Вершины одного множества не связаны.

Каждая вершина одного мн-ва связана с каждой другого.

$K_{r,s}$ — полные двудольные графы.



$$A_G = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{array}{c} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \}3 \\ \}2 \end{array} \\ \underbrace{\quad}_{3}\ \underbrace{\quad}_{2} \end{array}$$

$rang A = 2$ (для $\forall\, r, s$)

$defect A = dim A - rang A = 3$

$defect A = r + s - 2$

Дефективную матрицу нельзя обратить.

Если матрица <u>приводится к диагональному виду</u>, то кратность с.з. $\lambda = 0$ равна дефекту.

По теореме Харара-Коулсона-Сакса:

$$P_G(\lambda) = \lambda^{r+s} + 0 + a_2 \lambda^{r+s-2}$$

Больше ничего нет, т.к. кратность $\lambda = 0$ равна дефекту.

$a_2 = -r \cdot s \Rightarrow$

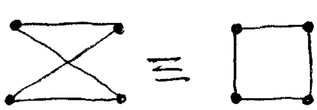
$$P_G(\lambda) = \lambda^{r+s} - rs\lambda^{r+s-2} = \lambda^{r+s-2}(\lambda^2 - rs)$$

Т.о. $\lambda = \{\underbrace{0, 0, 0, \ldots, 0}_{r+s-2}, \pm\sqrt{rs}\}$ — спектр полного двудольного графа.

$$\boxed{\lambda = \{\pm\sqrt{rs};\ 0^{r+s-2}\}}$$

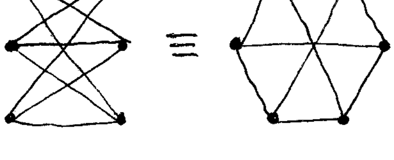
Если $r = s$, то $P_G(\lambda) = \lambda^{2r-2}(\lambda - r)(\lambda + r)$

$r = s = 2$

K_{22} 

$\lambda = \{-2; 2; 0; 0\}$

$P_G(\lambda) = \lambda^2(\lambda - 2)(\lambda + 2)$

K_{33} 

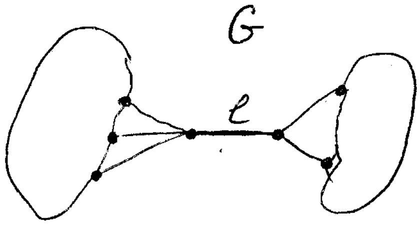
$P_G(\lambda) = \lambda^4(\lambda - 3)(\lambda + 3)$

Рекурентные формулы Хельброннера.

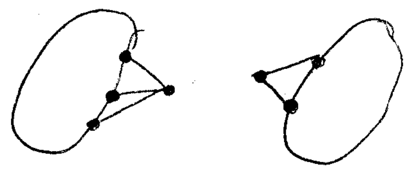
Эти формулы позволяют графически понижать степень хар. полинома.

! Пусть граф G после удаления ребра e распадается на две части.

Тогда $P_G(\lambda) = P_{G-e}(\lambda) - P_{G\ominus e}(\lambda)$ (выбир. $P_G(\lambda)$ так, что старш. член будет полож.)



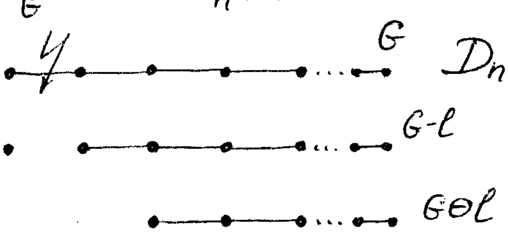
$G-e$ (малая ампутация – тюк!)



$G\ominus e$ (больш. ампут. – ТЮК!)

Ex. Линейные цепочки.

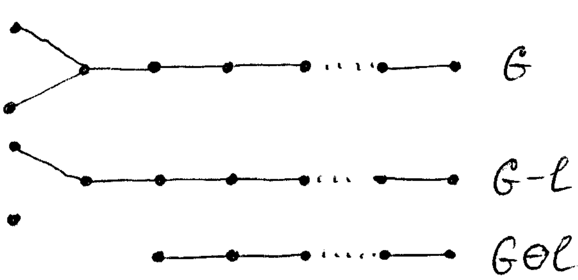
$P_G(\lambda) = D_n(\lambda)$



$$D_n(\lambda) = \lambda D_{n-1}(\lambda) - D_{n-2}(\lambda)$$

$$D_n(\lambda) = \lambda D_{n-1}(\lambda) - D_{n-2}(\lambda)$$

Двухвостка:



$$W_n(\lambda) = \lambda D_{n-1}(\lambda) - \lambda D_{n-3}(\lambda)$$

29.04.2004г. Лекция № 10.

Разностные уравнения.

$$a_0 y_{n+k} + a_1 y_{n+k-1} + \ldots + a_{k-1} y_{n+1} + a_k y_n = 0$$

Ex: $u_{n+1} = u_n + u_{n-1}$

$u_0 = 0,\ u_1 = 1$ – числа Фибоначчи.

Общее решение: λ^n:

$y_n = c_1 \lambda_1^n + c_2 \lambda_2^n + \ldots$

$a_0 \lambda^{n+k} + a_1 \lambda^{n+k-1} + \ldots + a_{k-1} \lambda^{n+1} + a_k \lambda^n = 0$

$\lambda^n (a_0 \lambda^k + a_1 \lambda^{k-1} + \ldots + a_{k-1} \lambda + a_k) = 0$

Нулевые решения не рассматриваются.

Ненулевые решения $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$.

Если все они различны

$y_n = c_1 \lambda_1^n + c_2 \lambda_2^n + \ldots + c_k \lambda_k^n$

Здесь роль переменной играет n.

Если есть корень λ_j кратности μ:

$\lambda_j^n, n\lambda_j^n, \ldots, n^{\mu-1}\lambda_j^n$

Если есть пара комплексно-сопряженных корней

$\lambda_{j,j+1} = \alpha \pm i\beta$: $c_j (\alpha + i\beta)^n + c_{j+1} (\alpha - i\beta)^n$ или:

$\alpha \pm i\beta = \rho e^{\pm i\varphi}$,

$(\alpha + i\beta)^n = \rho^n e^{\pm in\varphi}$ можно взять другие линейные комбинации: $\rho^n \cos n\varphi$ и $\rho^n \sin n\varphi$, тогда вклад в решение имеет вид:

$\tilde{c}_j \rho^n \cos n\varphi + \tilde{c}_{j+1} \rho^n \sin n\varphi$

<u>Example</u>: Числа Фибоначчи:

$$\begin{cases} u_n = u_{n-1} + u_{n-2}; \\ u_0 = 0; \\ u_1 = 1; \end{cases}$$

Формула Бине:

$\lambda^2 = \lambda + 1$ – характеристическое уравнение

$$\lambda_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{5}}{2}$$

$$u_n = \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^n c_1 + \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^n c_2$$

$$\begin{cases} u_1 = c_1 \cdot \frac{1+\sqrt{5}}{2} + c_2 \cdot \frac{1-\sqrt{5}}{2} = 1 \\ u_0 = c_1 + c_2 = 0 \end{cases}$$

$c_2 = -c_1$: $\quad c_1 \cdot \frac{1+\sqrt{5}}{2} - c_1 \frac{1-\sqrt{5}}{2} = 1;$

$$c_1 \sqrt{5} = 1 \Rightarrow c_{1,2} = \pm \frac{\sqrt{5}}{5}.$$

Формула Бине:

$$\boxed{u_n = \frac{1}{\sqrt{5}}\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^n - \frac{1}{\sqrt{5}}\left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^n}$$

$$\lim_{n\to\infty} \frac{u_{n+1}}{u_n} = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$$

$$\lim_{n\to\infty} \frac{u_{n+1}}{u_n} = \lim_{n\to+\infty} \frac{\lambda_1^{n+1} + \lambda_2^{n+1}}{\lambda_1^n + \lambda_2^n} = \frac{\lambda_1 + \frac{\lambda_2^{n+1}}{\lambda_1^n}}{1 + \frac{\lambda_2^n}{\lambda_1^n}} = \lambda_1 = \frac{1+\sqrt{5}}{2}.$$

Приложение разностных уравнений в теории графов.

Линейные цепочки.

$$D_{n+2} = x D_{n+1} - D_n$$

$$D_1 = x$$

$$D_2 = x^2 - 1$$

$D_n(2\cos\varphi) = \frac{\sin(n+1)\varphi}{\sin\varphi}$ — утверждение.

<u>Доказательство:</u>

$$D_{n+2} - 2\cos\varphi\, D_{n+1} + D_n = 0$$

$$\lambda^2 - 2\cos\varphi\, \lambda + 1 = 0$$

$D = 4\cos^2\varphi - 4 = -4\sin^2\varphi; \quad \lambda_{1,2} = \cos\varphi \pm i\sin\varphi$

$$D_n = c_1 e^{i\varphi n} + c_2 e^{-i\varphi n}$$

$$D_n(2\cos\varphi) = c_1 e^{in\varphi} + c_2 e^{-in\varphi}$$

$$D_2 = x D_1 - D_0$$

$$x^2 - 1 = x \cdot x - D_0 \Rightarrow D_0 = 1$$

$$D_0 = 1, \quad D_1 = x = 2\cos\varphi = e^{i\varphi} + e^{-i\varphi} = \lambda_1 + \lambda_2$$

$$D_0 = c_1 + c_2 = 1$$

$$D_1 = c_1 e^{i\varphi} + c_2 e^{-i\varphi} = e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}$$

$$c_1 = 1 - c_2: \quad e^{i\varphi} - c_2 e^{i\varphi} + c_2 e^{-i\varphi} = e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}$$

$$c_2 (e^{-i\varphi} - e^{i\varphi}) = e^{-i\varphi}$$

$$c_2 = \frac{e^{-i\varphi}}{e^{-i\varphi} - e^{i\varphi}}$$

$$c_1 = 1 - c_2 = \frac{-e^{i\varphi}}{e^{-i\varphi} - e^{i\varphi}}$$

$$D_n(2\cos\varphi) = \frac{-e^{i\varphi(n+1)} + e^{-i\varphi(n+1)}}{e^{-i\varphi} - e^{i\varphi}} = \frac{\sin(n+1)\varphi}{\sin\varphi}$$

$$\boxed{D_n(2\cos\varphi) = \frac{\sin(n+1)\varphi}{\sin\varphi}}$$

Доказано.

Спектр: $\quad D_n(2\cos\varphi) = \dfrac{\sin(n+1)\varphi}{\sin\varphi} = 0 \Rightarrow$

$$\begin{cases} \sin(n+1)\varphi = 0 \\ \sin\varphi \neq 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} (n+1)\varphi = \pi k \\ \varphi \neq 0, \pi \end{cases} \Rightarrow \varphi = \frac{\pi k}{n+1}, \; k = 1, 2, 3, \ldots, n$$

$$\varphi = \frac{\pi k}{n+1}, \; k = \overline{1,n}$$

$$x = 2\cos\varphi \Rightarrow \boxed{x = 2\cos\frac{\pi k}{n+1}, \; k = \overline{1,n}}$$

$$\Delta_n = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 1 & 2 & 1 & \ldots & 0 \\ 0 & 1 & 2 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 2 \end{vmatrix} = 2\Delta_{n-1} - \Delta_{n-2}$$

Traning: 1)

$$\Delta_4 = \begin{vmatrix} 3\alpha + 2\beta & \alpha\beta & 0 & 0 & 0 \\ 5 & \alpha+\beta & \alpha\beta & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \alpha+\beta & \alpha\beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \alpha+\beta & \alpha\beta \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \alpha+\beta \end{vmatrix}$$

$$\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3, \ldots, \Delta_n$$

$$\Delta_n - ?$$

Comment: раскладывать по последней строчке.

2)

$$\Delta_3 = \begin{vmatrix} 2\operatorname{tg}x & \sin x & 0 \\ \frac{1}{\cos^2 x} & 2\operatorname{tg}x & \sin^2 x \\ 0 & \frac{1}{\cos^2 x} & 2\operatorname{tg}x \end{vmatrix}$$

$\lambda^2 - 2\lambda + 1 = 0$

$\lambda_{1,2} = 1 \Rightarrow \Delta_n = c_1 + n c_2$

$\Delta_1 = 2$

$\Delta_2 = 3$

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 2 \\ c_1 + 2c_2 = 3 \end{cases} \Rightarrow c_1 = c_2 = 1$$

Т.о. $\boxed{\Delta_n = 1 + n}$

Ex $a, b, -a, -b, a, b, \dots$

$u_{n+2} = -u_n$

$u_0 = a, \quad u_1 = b$

$\lambda^2 + 1 = 0$

$\lambda_{1,2} = \pm i$

$u_n = \cancel{c_1 e^{i\varphi}}\ c_1 \cos\varphi n + c_2 \sin\varphi n = c_1 \cos\frac{\pi n}{2} + c_2 \sin\frac{\pi n}{2}$

$c_1 = a$

$u_1 = c_1 \cos\varphi + c_2 \sin\varphi$

$u_1 = \cancel{c_1}\ c_2 = b \Rightarrow$

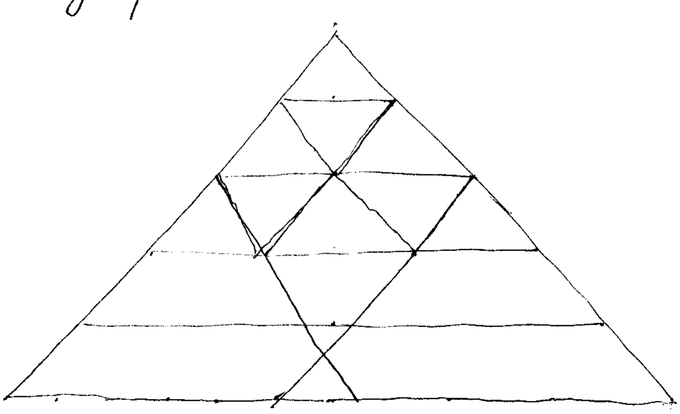
$\boxed{u_n = a\cos\frac{\pi}{2}n + b\sin\frac{\pi}{2}n}$

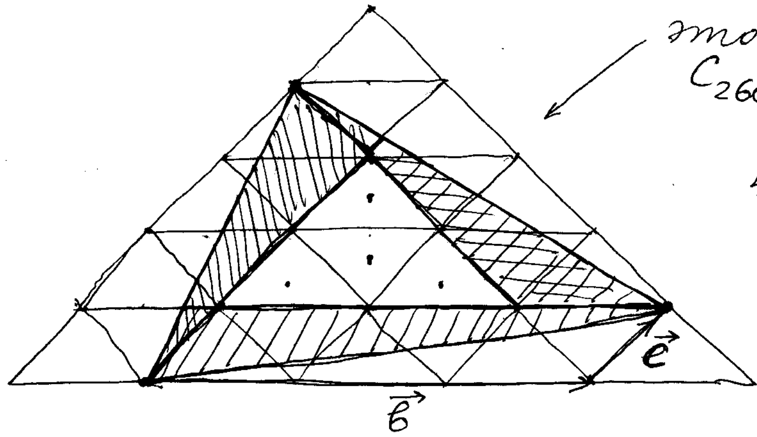
Лекция № 11

6.05.2004г.

Фуллерены с икосаэдрической симметрии.

Фигуры такого типа называют многогранниками Гольдберга





этот фрагмент дуален для C_{260}

в центр. Δ малых Δ
4 — $(b-c)^2$

По "косым" Δ: в каждом
$b \cdot c$.

Т.о. всего в большом Δ
$(b-c)^2+3bc = b^2+c^2+bc$

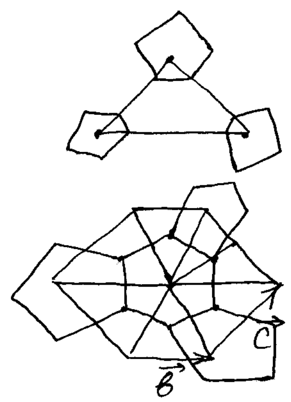
Т.к. в икосаэдре 20 граней, то
всего вершин $20(b^2+c^2+bc)$.

$|\vec{b}| \equiv b = 3$

$|\vec{c}| \equiv c = 1$

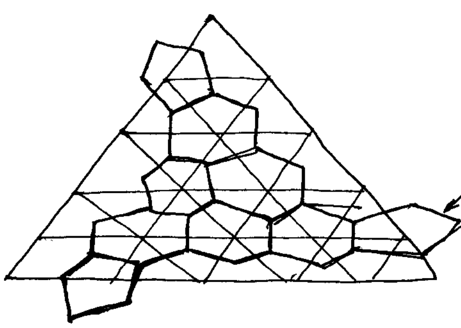
Число вершин высших фуллеренов.
$20(b^2+c^2+bc)$

Для C_{60}:



$b=1,\ c=1$

$ЧВ = 20(1^2+1^2+1\cdot 1) = 60$



таких фрагментов 20.
Получается C_{260}.

c	b						
	1	2	3	4	5	6	7
0	20	80	180	320	500	720	980
1	60	140	260	420	620	860	...
		240	380	560	780	......	
			540	740	980	...	...
			~~960~~	960	...	...	...

Симметрия I_h – если $b=c$ или $c=0$

Для I возможны правая и левая формы.

$$T = b^2 + c^2 + bc = \begin{cases} 3N+1 \\ 3N \end{cases}$$

Соотв., ЧВ = $60N$ или $60N+20$.

C_{80} – икосаэдр: триангуляция, выброс старых ребер, сру пятивалентных вершин.