بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه یزد

دانشکده ریاضی

گروه ریاضی محض

پایان‌نامه

برای دریافت درجه‌ی کارشناسی ارشد

ریاضی محض

عنوان:

شاخص و چند جمله‌ای همبندی خروج از مرکز برخی نانوساختارها

استاد راهنما:

دکتر سعید علیخانی

استاد مشاور:

دکتر مهدیه هاشمی نژاد

پژوهش و نگارش:

وحید رحمانی

مهر ۱۳۹۲

تقدیم به

همسر مهربان

و فرزند عزیزم نیکان

سپاس گزاری

حمد و سپاس خدایی را که قلم را به اذن او به دست گرفتم تا ذره ای از دریای بی منتهای دانشش را فرا گیرم.

اکنون که به لطف خداوند و همراهی همه ی کسانیکه همواره پشتیبان و راهنمایم بودند تا در این زمان، در این مرحله از زندگی ام قرار بگیرم، بر حسب وظیفه و به مصداق «من لم یشکر المخلوق لم یشکر الخالق» تشکر و قدردانی می نمایم.

از آنان که نفس خیرشان و دعای روح پرورشان بدرقه ی راهم بوده است، مخصوصاً از خانواده ی عزیزم، به ویژه دو گوهر گرانبهای زندگیم، پدر و مادر عزیزم . . . این دو معلم بزرگوارم . . . که همواره بر کوتاهی و درشتی من قلم عفو کشیده و کریمانه از کنار غفلت هایم گذشته اند و در تمام عرصه های زندگی یار و یاوری بی چشم داشت برای من بوده اند و حضورشان آرامش و امید زیستنم بوده است،

از تمام کسانی که در راه کسب دانش راهنمایم بودند، مخصوصاً از استاد راهنمای بزرگوارم، جناب آقای دکتر سعید علیخانی که در این مدت همچون دوستی مهربان همواره همراهم بوده اند، از استاد مشاورم، سرکار خانم دکتر مهدیه هاشمی نژاد به خاطر راهنمایی های سودمندشان، و همچنین از جناب آقای دکتر قدیری و جناب آقای دکتر هوشمند که زحمت داوری این پایان نامه را بر عهده گرفتند و از تمام کسانی که مرا آموختند، حتی به یک کلام یا یک نگاه.

پروردگارا،

حسن عاقبت، سلامت و سعادت را برای آنان مقدر نما.

به من کمک کن تا بتوانم ادای دین کنم و به خواسته های آنان جامه ی عمل بپوشانم.

توفیق خدمتی سرشار از شور و نشاط و همراه و همسو با دانش و پژوهش جهت رشد و شکوفایی ایران سرافراز عنایت فرما.

وحید رحمانی

چکیده

فرض کنید G یک گراف ساده همبند است. شاخص همبندی خروج از مرکز گراف مولکولی G به صورت

$$\xi^c(G) = \sum_{v \in V(G)} deg(v)ecc(v)$$

تعریف می‌شود، که در آن $deg(v)$ و $ecc(v)$ به ترتیب درجه و خروج از مرکز رأس v می‌باشد.
چند جمله‌ای همبندی خروج از مرکز گراف مولکولی G، $ECP(G,x)$، به صورت

$$ECP(G,x) = \sum_{v \in V(G)} deg(v)x^{ecc(v)}$$

تعریف می‌شود. بنابراین شاخص همبندی خروج از مرکز گراف مولکولی G، برابر با مشتق اول $ECP(G,x)$ به ازای $x = ۱$ است. ما در این پایان نامه ضمن بررسی ویژگی‌های شاخص و چندجمله‌ای همبندی خروج از مرکز، این دو اندیس را برای برخی از نانوساختارها محاسبه می‌کنیم.

واژه‌های کلیدی:

گراف، درخت، همبندی، خروج از مرکز، شاخص توپولوژیک، ساختار مولکولی، دندریمر

فهرست مطالب

فهرست نمادها

مجموعه رئوس گراف G .... $V(G)$

مجموعه یال های گراف G .... $E(G)$

فاصله بین رئوس u و v .... $d(u,v)$

درجه رأس v .... $deg(v)$

خروج از مرکز رأس v .... $ecc(v)$

شعاع گراف G .... $r(G)$

قطر گراف G .... $d(G)$

مکمل گراف G .... $\overline{G}$

مجموعه‌ی رئوس مرکزی G .... $C(G)$

میانگین خروج از مرکز گراف G .... $ece(G)$

شاخص همبندی خروج از مرکز گراف G .... $\xi^c(G)$

چند جمله ای همبندی خروج از مرکز گراف G .... $ECP(G)$

خروج از مرکز کلی گراف G .... $\zeta(G)$

شاخص خروج از مرکز زاگرب گراف G .... $E_1(G)$

چند جمله ای خروج از مرکز زاگرب گراف G .... $ZE_1(G)$

حاصل ضرب دکارتی گراف های G_1 و G_2 .... $G_1 \square G_2$

حاصل ضرب سلسله مراتبی تعمیم یافته گراف های G_1 و G_2 .... $G_1 \sqcap G_2$

حاصل ضرب تاج دو گراف G_1 و G_2 .... $G_1 \circ G_2$

$join$ دو گراف G_1 و G_2	$G_1 \vee G_2$
گراف کامل	K_n
گراف کامل دوبخشی	$K_{m,n}$
مسیر	P_n
دور	C_n
گراف ستاره	S_n
گراف ابر مکعب	Q_n
دندریمر $popam$	$PD_2[n]$
دندریمر $pamam$	$PMD_2[n]$

مقدمه

شاخص توپولوژیکی یک کمیت عددی مربوط به گراف است که تحت خودریختی‌های گراف ثابت می‌ماند.

تعداد زیادی شاخص توپولوژیکی متغیر برای گراف معرفی و مورد مطالعه قرار گرفته است. اولین و شناخته‌ترین پارامتر، شاخص وینر، در سال ۱۹۴۰ میلادی در تلاش برای تجزیه و تحلیل خواص شیمیایی پارافین‌ها (آلکان‌ها) معرفی شد. مرجع [۲۲] را ببینید. این یک شاخص مبتنی بر فاصله است که خواص ریاضی و کاربردهای شیمیایی آن به طور گسترده مورد بررسی قرار گرفته شده است. طی چند دهه گذشته شاخص‌های توپولوژیکی بسیاری مطرح شده‌اند و مطالعات بسیاری روی این شاخص‌ها صورت گرفته از جمله شاخص رندیک ، شاخص زاگرب ، شاخص بالابان و شاخص هوسایا. اخیراً شاخص‌هایی مانند مجموع فاصله‌ای خروج از مرکز و مجموع فاصله‌ای خروج از مرکز بر اساس شاخص همبندی خروج از مرکز مطرح شده است. این شاخص توپولوژیکی به منظور کسب درجه بالایی از پیش‌بینی خواص دارویی مطرح شده و ممکن است منجربه توسعه و پیشرفت ترکیبات ایمن و قوی ضد HIV شود. [۲۳]

شاخص همبندی خروج از مرکز گراف مولکولی G، $\xi^c(G)$، یک شاخص توپولوژیکی است که قابل استفاده برای مدل‌سازی فعالیت‌های بیولوژیک می‌باشد و نخستین بار در [۲۱] در سال ۱۹۹۷ توسط شارما [۱] ،

[۱] Sharma

گوسوامی [۲] و مادان [۳] مطرح شد و به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\xi^c(G) = \sum_{v\in V(G)} deg(v)ecc(v)$$

که در آن $deg(v)$ و $ecc(v)$ به ترتیب درجه و خروج از مرکز رأس v می‌باشد.

چند جمله‌ای همبندی خروج از مرکز گراف مولکولی G، $ECP(G,x)$، به صورت

$$ECP(G,x) = \sum_{v\in V(G)} deg(v)x^{ecc(v)}$$

تعریف می‌شود.[۱۵] بنابراین شاخص همبندی خروج از مرکز گراف مولکولی G، برابر با مشتق اول $ECP(G,x)$ به ازای $x = ۱$ است.

این پایان نامه شامل پنج فصل است که در فصل اول همه تعاریف و مفاهیم مقدماتی گردآوری شده است.

فصل دوم در سه بخش تدوین گردیده است. در بخش اول تبدیلاتی که در ادامه جهت اثبات قضایا مورد نیاز است آورده شده، دربخش دوم کران‌های بالا و پایین برای شاخص همبندی خروج از مرکز بدست آورده و در بخش سوم شاخص همبندی خروج از مرکز دو گراف مرکب حاصل ضرب دکارتی $G_۱\Box G_۲$ و حاصل ضرب سلسه مراتبی تعمیم یافته $G_۱ \sqcap G_۲$ محاسبه شده است.

فصل سوم به شاخص همبندی خروج از مرکز گراف‌های با حداکثر یک دور اختصاص داده شده که به طبع نخست، گراف‌هایی که فاقد دور هستند یعنی درخت‌ها، مورد مطالعه قرار گرفته شده و در ادامه شاخص همبندی خروج از مرکز دو دسته از گراف‌های تک دوری که با $L_{n,k}$ و $H_{n,k}$ نشان داده شده، محاسبه شده است.

فصل چهارم با عنوان چند جمله‌ای همبندی خروج از مرکز، در سه بخش تدوین گردیده است. در بخش اول چند جمله‌ای همبندی خروج از مرکز گراف‌های خاص همچون مسیر P_n، دور C_n، گراف کامل K_n و گراف کامل دو بخشی $K_{m,n}$ محاسبه شده است. بخش دوم به ارتباط بین شاخص و چند جمله‌ای همبندی خروج از مرکز گراف G و گراف خاردار آن که با G^* نشان داده می‌شود، اختصاص داده شده و در بخش سوم شاخص و چند جمله‌ای همبندی خروج از مرکز جمع $G_۱ \vee G_۲$ و حاصل ضرب تاج $G_۱ \circ G_۲$

[۲] Goswami

[۳] Madan

محاسبه شده است.

و در فصل آخر به محاسبه چند جمله‌ای همبندی خروج از مرکز گراف سه خانواده از دندریمرها که با $D_3[n]$، $PD_2[n]$ و $PMD_2[n]$ نشان داده می‌شوند پرداخته شده است.

فصل ۱

تعاریف و مفاهیم مقدماتی

گراف مدلی ریاضی برای یک مجموعه گسسته است که اعضای آن به طریقی به هم مرتبط هستند. اعضای این مجموعه می‌توانند انسان باشند و ارتباط آن‌ها تحت رابطه معینی باشد. اعضا می‌توانند اتم‌ها در یک مولکول باشند و ارتباط آن‌ها اتصال‌های شیمیایی باشد یا اعضا می‌توانند قسمت‌های مختلف زمین و ارتباط بین آن‌ها پل‌هایی باشد که آن‌ها را به هم مرتبط می‌کند(همانند مسأله کونیگسبرگ). بیشتر تعاریف و مفاهیم زیر از مراجع [۱] و [۲] آورده شده است.

تعریف ۱.۰.۱. یک گراف شامل دو مجموعه است؛ مجموعه‌ی غیر تهی از گره‌ها یا رئوس و مجموعه‌ای از یال‌ها که رأس‌ها را به هم متصل می‌کنند.

گراف ساده G به صورت زوج مرتب $(V(G), E(G))$ تعریف می‌گردد که در آن $V(G)$ مجموعه‌ای از رئوس یا تقاطع‌ها (مجموعه‌ای متناهی و غیر تهی) و $E(G)$ مجموعهای از زوجهای نامرتب و نامساوی از عناصر $V(G)$ است یعنی:

$$E(G) \subseteq \{\{x, y\} | x, y \in V(G), x \neq y\}$$

تعریف ۲.۰.۱. یک گراف تهی گرافی است که تنها شامل رأس است و مجموعه یالهای آن تهی است یعنی یالی ندارد.

تعریف ۳.۰.۱. منظور از مرتبه گراف تعداد رأس‌های گراف می‌باشد. به عبارت دیگر داریم:

$$n = |V(G)|$$

تعریف ۴.۰.۱. منظور از اندازه گراف تعداد یال‌های گراف می‌باشد. به عبارت دیگر داریم:

$$m = e = |E(G)|$$

تعریف ۵.۰.۱. یک گراف می‌تواند به دو شکل جهت‌دار یا غیر جهت‌دار باشد.

یک گراف جهت‌دار گرافی است که جهت هر یال در آن تعیین شده است. در گراف جهت‌دار ترتیب رئوس در هر یال اهمیت دارد و یال‌ها با پیکان‌هائی از رأس ابتدا به رأس انتها رسم می‌شوند. در گراف غیرجهت‌دار می‌توان در هر دو جهت بین رأس‌ها حرکت کرد و ترتیب رأس‌های یال اهمیت ندارد.

تعریف ۶.۰.۱. یال‌های گراف می‌توانند وزن‌دار یا بدون وزن باشند. گرافی که یال‌های آن وزن‌دار باشد گراف وزن‌دار نامیده می‌شود. وزن می‌تواند نشان دهنده هزینه، مسافت، زمان یا هر مشخصه دیگری از یال باشد.

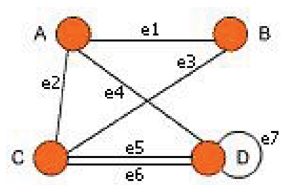
تعریف ۷.۰.۱. هر یال بوسیله یک جفت رأس مشخص می‌شود. دو رأسی که توسط یک یال به هم متصل می‌شوند را رئوس مجاور می‌نامند.

تعریف ۸.۰.۱. یک حلقه یالی است که یک رأس را به خودش متصل می‌کند. به عبارت دیگر رأس ابتدا و انتهایش یکسان باشد.

تعریف ۹.۰.۱. یال‌های موازی یا چندگانه یال‌هایی هستند که رئوس یکسان را به هم مرتبط می‌کنند. گرافی که دارای یال‌های موازی باشد را گراف چندگانه می‌نامند.

تعریف ۱۰.۰.۱. رأس منفرد رأسی است که از آن یالی نگذرد.

مثال ۱۱.۰.۱. گراف شکل زیر را در نظر بگیرید.



شکل ۱.۱: گراف G

$V(G) = \{A, B, C, D\}$

$E(G) = \{e_۱, e_۲, e_۳, e_۴, e_۵, e_۶, e_۷\}$

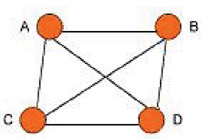
یال $e_۷$ یک طوقه روی رأس D است.

یال‌های گراف G بدون وزن هستند.

یال‌های $e_۵$ و $e_۶$ یال‌های چندگان هستند.

تعریف ۱.۰.۱۲. گراف بدون یال موازی و طوقه را گراف ساده می‌نامند. گراف جهت‌دار را وقتی ساده می‌گویند که یال موازی نداشته باشد.

تعریف ۱.۰.۱۳. یک گراف کامل گراف ساده‌ای است که هر جفت رأس آن مجاور باشند یعنی از هر رأس به تمام رئوس دیگر یالی وجود داشته باشد. گراف کامل n رأسی را با K_n نشان می‌دهند.



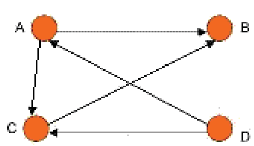
شکل ۱.۲: گراف کامل $K_۴$

تعریف ۱.۰.۱۴. درجه هر رأس توسط تعداد یال‌های متلاقی با رأس مشخص می‌شود.

تعریف ۱.۰.۱۵. در گراف جهت‌دار درجه ورودی

یک رأس تعداد یال‌هائی است که به آن رأس وارد شده‌اند و درجه خروجی یک رأس تعداد یال‌هائی است که از آن رأس خارج شده‌اند.

مثال ۱.۰.۱۶. در گراف زیر درجه خروجی رأس A دو و درجه ورودی آن یک است.



شکل ۱.۳: درجه ورودی و خروجی

تعریف ۱.۰.۱۷. گرافی که کلیه رأس‌های آن از یک درجه باشد گراف منتظم نامیده می‌شود. گراف مکعب گراف منتظم درجه ۳ است.

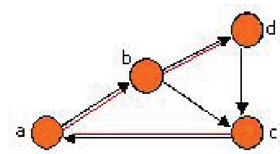
لم ۱.۰.۱۸. هرگاه $G(V,E)$ گراف ساده یا چندگان بدون جهت باشد، مجموع درجات کلیه رئوس G همواره عددی زوج است. به عبارت دیگر:

$$\sum_{v\in V(G)} deg(v) = ۲e$$

تعریف ۱.۰.۱۹. منظور از یک گشت درگراف G دنباله‌ای از رئوس و یال‌ها به صورت $v_0 e_1 v_1 e_2 v_2 \ldots e_n v_n$ می‌باشد که در آن $e_i = v_{i-1}v_i \in E(G)$.

تعریف ۱.۰.۲۰. در یک گشت اگر تمامی رئوس آن متمایز باشند، آن گشت را مسیر می‌نامند. به عبارت دیگر یک مسیر یک گذر از رأس‌های متوالی در امتداد یک سری از یال‌ها است. رأس انتهای یک یال رأس ابتدای یال بعدی در توالی محسوب می‌شود. طول مسیر تعداد یال‌های مسیر است که در مسیر طی می‌شود. یک مسیر با طول n دارای $n+1$ رأس و n یال است.

مثال ۱.۰.۲۱. در شکل زیر یک مسیر نشان داده شده است که از رأس C آغاز و به رأس D ختم می‌شود.



شکل ۱.۴: مسیر

تعریف ۱.۰.۲۲. دورأس را متصل می‌گویند اگر مسیری بین آنها وجود داشته باشد.

تعریف ۱.۰.۲۳. یک دور مسیر ساده‌ای است که رأس شروع و پایانی آن یکی باشد. یک دور در گراف ساده بدون جهت حداقل شامل سه یال متفاوت است که هیچ رأسی در آن تکراری نیست بجز رأس شروع و پایان.

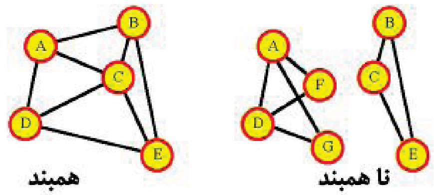
تعریف ۱.۰.۲۴. یک گراف غیر جهت‌دار متصل یا همبند گفته می‌شود اگر بین هر دو رأس آن مسیری وجود داشته باشد. یعنی هر دو رأس آن متصل باشند و در غیر این صورت گراف را ناهمبند می‌نامند.

مثال ۱.۰.۲۵. در شکل زیر دو گراف همبند و ناهمبند آورده شده است.

تعریف ۱.۰.۲۶. دو گراف G و H یکریخت‌اند اگر و فقط اگر تابعی یک به یک و پوشا به صورت

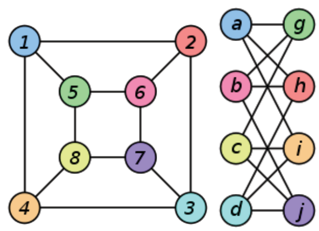
$$f : V(G) \longrightarrow V(H)$$

بین مجموعه رئوس دو گراف G و H وجود داشته باشد به طوری که $uv \in E(G)$، اگر و فقط اگر $f(u)f(v) \in E(H)$. در این صورت دو گراف را یکریخت گویند و می‌نویسند: $G \cong H$.



شکل ۵.۱: گراف همبند و نا همبند

مثال ۲۷.۰.۱. دو گراف زیر با این که ظاهر متفاوتی دارند اما با هم یکریختند.



شکل ۶.۱: یکریختی گراف

$$f(a) = ۱ \qquad f(b) = ۶ \qquad f(c) = ۸ \qquad f(d) = ۳$$

$$f(g) = ۵ \qquad f(h) = ۲ \qquad f(i) = ۴ \qquad f(j) = ۷$$

تعریف ۲۸.۰.۱. گراف H را زیر گراف G گوییم اگر و فقط اگر

$V(H) \subseteq V(G), E(H) \subseteq E(G)$

تعریف ۲۹.۰.۱. فرض کنید G یک گراف ساده، با مجموعه رئوس $V(G)$ است. مکمل G که با $\overline{G}$ نشان می‌دهند یک گراف ساده دیگر است که همان مجموعه رئوس $V(G)$ را دارد و در آن هر دو رأسی که در G مجاور نبوده‌اند مجاور می‌باشند.

⋆ توجه کنید تعداد یال‌های گراف G به علاوه یال‌های مکمل آن برابر یال‌های گراف کامل $|V(G)|$ رأسی خواهد شد.

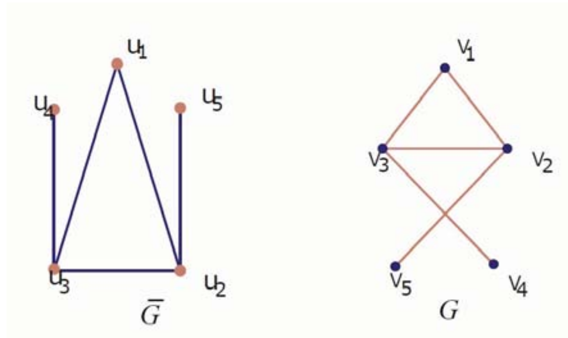
⋆ مکمل گراف کامل تهی است و بالعکس.

⋆ مکمل یک گراف دو بخشی کامل عبارتست از اجتماع دو گراف کامل.

قضیه ۳۰.۰.۱. اگر گراف G ناهمبند باشد $\overline{G}$ همبند است.

تعریف ۳۱.۰.۱. گراف G را خود مکمل گویند اگر G و $\overline{G}$ یکریخت باشند.

مثال ۳۲.۰.۱. در شکل زیر دو گراف G و $\overline{G}$ یکریختند، بنابراین G خود مکمل است.



شکل ۷.۱: یکریختی گراف

تعریف ۳۳.۰.۱. یک گراف ساده همبند بدون دور را درخت می‌نامند. درخت گرافی است که فقط یک مسیر بین هر دو رأس آن وجود دارد.

تعریف ۳۴.۰.۱. برای رئوس $v \in V(G)$ و u فاصله بین دو رأس u و v را با نماد $d(u,v)$ نشان داده و عبارت است از طول کوتاهترین مسیر بین دو رأس u و v.

تعریف ۳۵.۰.۱. خروج از مرکز رأس u را با نماد $ecc(u)$ و یا $e(u)$ نشان داده و برابر است با حداکثر فاصله رأس u از سایر رئوس G. یعنی:

$$ecc(v) = Max\{d(u,v)|u \in V(G)\}$$

تعریف ۳۶.۰.۱. شعاع گراف G را با $r(G)$ نشان داده و برابر است با حداقل مقدار خروج از مرکز رئوس G. یعنی:

$$r(G) = Min\{ecc(v)|v \in V(G)\}$$

تعریف ۳۷.۰.۱. قطر گراف G را با $d(G)$ یا $dim(G)$ نشان داده و برابر است با حداکثر مقدار خروج از مرکز رئوس G. یعنی: