



دانشکده علوم پایه

محاسبه شاخص همبندی خروج از مرکز گراف‌های فولرینی

نگارش

خدیجه ملک جانی

اساتید راهنما: دکتر مجتبی قربانی، دکتر حمید رضا میمنی

استاد مشاور: دکتر علی زعیم باشی

پایان نامه کارشناسی ارشد

رشته ریاضی کاربردی

تقدیم به:

فرزند دلبندم

قدردانی و تشکر

سپاس بی قیاس خداوندی را سرزاست که نامش کریم و کرمش فراوان، درود فراوان بر آخرین فرستاده پاک او. بی تردید تهیه این مجموعه را مرهون تلاش و زحمات استاد راهنمایم، جناب آقای دکتر مجتبی قربانی و جناب آقای دکتر حمیدرضا میمنی می دانم که فراتراز یک استاد راهنما، در نهایت صبر و شکیبایی، تشویق و راهنمایی نموده و در تمام مراحل مرا مورد لطف و محبت خویش قرار دادند. به همین لحاظ از این استاد گران قدر که در این مجموعه یاریم نمودند، خالصانه و از صمیم قلب سپاسگزارم. وظیفه خود می دانم به استاد بزرگوار جناب آقای پروفسور سید علی رضا اشرفی و سرکار خانم دکتر کمالی که این پایان نامه را مورد مطالعه قرار دادند، مراتب تشکر و امتنان را تقدیم دارم.

چکیده

در این پایان نامه به بررسی شاخص تپولوژیکی مبتنی بر خروج از مرکز گراف، به نام شاخص همبندی خروج از مرکز می‌پردازیم. این شاخص اولین بار توسط شارما، مادان و همکارانش برای توسعه مدل‌های ریاضی و پیش‌بینی رفتارهای بیولوژیکی مولکول‌ها ارائه شد. شاخص همبندی خروج از مرکز، از جمله شاخص‌هایی است که براساس فاصله بین رئوس گراف تعریف می‌شود. در این پایان نامه ابتدا کران‌هایی برای شاخص همبندی خروج از مرکز گراف‌ها به دست می‌آوریم. در ادامه این شاخص را برای برخی از گراف‌های حاصل‌ضربی پیدا کرده و در نهایت روشی برای محاسبه شاخص همبندی خروج از مرکز چندین دسته از دندریمرها و فولرین‌ها ارائه می‌دهیم.

کلمات کلیدی: شاخص همبندی خروج از مرکز، مجموع فاصله خروج از مرکز، دندریمر، فولرین.

فهرست مندرجات

۱	۱	مفاهیم و قضیه‌های مقدماتی
۲	۱-۱	گراف و مفاهیم مقدماتی
۷	۲-۱	معرفی چند گراف
۱۰	۱-۳	معرفی شاخص همبندی خروج از مرکز
۱۳	۲	محاسبه کران‌های شاخص‌های مبتنی بر خروج از مرکز
۱۴	۱-۲	کران‌های شاخص همبندی خروج از مرکز
۲۹	۲-۲	نتایج برای درخت‌ها
۳۵	۳-۲	مجموع فاصله خروج از مرکز گراف‌ها

۴۳	۳	محاسبه شاخص همبندی خروج از مرکز برای اعمال گراف‌ها
۴۴	۱-۳	شاخص همبندی خروج از مرکز گراف‌های حاصل‌ضربی
۶۱	۲-۳	مجموع فاصله خروج از مرکز برخی از گراف‌های حاصل‌ضربی
۷۱	۴	محاسبه شاخص همبندی خروج از مرکز دندریمرها و فولرین‌ها
۷۲	۱-۴	محاسبه شاخص همبندی خروج از مرکز دندریمرها
۸۵	۲-۴	محاسبه شاخص مجموع فاصله خروج از مرکز دندریمرها
۹۱	۳-۴	محاسبه شاخص همبندی خروج از مرکز فولرین‌ها
۱۰۳	۴-۴	محاسبه شاخص مجموع فاصله خروج از مرکز فولرین‌ها

فهرست جداول

۱—۴ درجه، تعداد و خروج از مرکز رئوس گراف دندريمر $G[n]$	۷۵
۲—۴ درجه، تعداد و خروج از مرکز رئوس گراف دندريمر $H[n]$	۷۹
۳—۴ درجه، تعداد و خروج از مرکز رئوس گراف دندريمر $K[n]$	۸۳
۴—۴ تعداد، خروج از مرکزو مجموع فاصله رئوس گراف دندريمر $M[n]$	۸۸
۵—۴ تعداد، خروج از مرکزو مجموع فاصله رئوس گراف دندريمر $Q[n]$	۹۰
۶—۴ تعداد و خروج از مرکز رئوس گراف فولريين F_{24n}	۹۴
۷—۴ تعداد و خروج از مرکز رئوس گراف فولريين F_{12n+6}	۹۷
۸—۴ تعداد و خروج از مرکز رئوس گراف فولريين F_{20n}	۱۰۰
۹—۴ تعداد و خروج از مرکز رئوس گراف فولريين F_{40n+6}	۱۰۳
۱۰—۴ تعداد و خروج از مرکز رئوس گراف فولريين F_{10n}	۱۰۳

۱۱-۴ تعداد، خروج از مرکزو فاصله جمعی رئوس گراف فولرین F_{10n} ۱۰۵

۱۲-۴ تعداد، خروج از مرکزو فاصله جمعی رئوس گراف فولرین F_{20n} ۱۰۸

فهرست شکل‌ها

۱	۱-۱ گراف‌های یکریخت	
۲		
۳	۱-۲ گراف پترسون	
۴		
۵	۱-۳ گراف k -بخشی کامل	
۶		
۷	۱-۴ گراف یالی $L(G)$	
۸	۱-۵ چند گراف معروف هندسی	
۹	۱-۶ گراف فولرینی F_2	
۱۰	۱-۷ گراف‌های $G(p+1, q-1)$ و $G(p+q)$	
۱۱		
۱۲	۲-۱ گراف $Lp_{12,4}$	
۱۳		
۱۴	۲-۲ گراف $L_{7,3}$ و $H_{9,4}$	
۱۵		
۱۶	۴-۱ درخت‌های G_1 و G_2	
۱۷		

۳۲.....	۵-۲ درخت‌های T_1 و T_2
۳۷.....	۶-۲ گراف‌های $G(p+q, 0)$ و $G(p, q)$
۴۶.....	۱-۳ گراف نانوچنبره $S = C_k \times C_m$
۴۶.....	۲-۲ گراف نانولوله $R = P_n \times C_m$
۵۸.....	۳-۳ ضرب تاج
۷۳.....	۴-۱ گراف دندریمر $G[1]$
۷۳.....	۴-۲ زیرگراف اضافه شده به گراف $G[n]$ همراه با نماینده‌های آن
۷۴.....	۴-۳ گراف دندریمر $G[2]$
۷۶.....	۴-۴ گراف دندریمر $G[n]$
۷۷.....	۴-۵ گراف دندریمر $H[1]$
۷۷.....	۴-۶ زیرگراف اضافه شده به گراف $H[n]$ همراه با نماینده‌های آن

۷۸.....	۴-۷ گراف دندانه‌ی $H[2]$
۸۰.....	۴-۸ گراف دندانه‌ی $H[n]$
۸۱.....	۴-۹ گراف دندانه‌ی $K[1]$
۸۲.....	۴-۱۰ زیرگراف اضافه شده به گراف $K[n]$ همراه با نماینده‌های آن
۸۴.....	۴-۱۱ گراف دندانه‌ی $K[2]$
۸۴.....	۴-۱۲ گراف دندانه‌ی $K[n]$
۸۵.....	۴-۱۳ گراف دندانه‌ی $M[1]$
۸۶.....	۴-۱۴ زیرگراف اضافه شده به گراف $M[n]$ همراه با نماینده‌های آن
۸۶.....	۴-۱۵ گراف دندانه‌ی $M[2]$
۸۷.....	۴-۱۶ گراف دندانه‌ی $M[n]$
۸۹.....	۴-۱۷ گراف دندانه‌ی $Q[1]$
۹۰.....	۴-۱۸ گراف دندانه‌ی $Q[2]$

- ۹۱..... گراف دندريمر $Q[n]$ ۱۹-۴
- ۹۲..... گراف فولرين F_{24n} ۲۰-۴
- ۹۳..... گراف فولرين F_{168} ۲۱-۴
- ۹۶..... گراف فولرين F_{12n+6} ۲۲-۴
- ۹۷..... گراف فولرين F_{114} ۲۳-۴
- ۹۹..... گراف فولرين F_{20n} ۲۴-۴
- ۹۹..... گراف فولرين F_{120} ۲۵-۴
- ۱۰۱..... گراف فولرين F_{126} ۲۶-۴
- ۱۰۲..... گراف فولرين F_{40n+6} ۲۷-۴
- ۱۰۴..... گراف فولرين F_{10n} ۲۸-۴

فهرست علائم و اختصارات

٤

ماکسیمم عدد در میان مجموعه درجات رئوس گراف G

σ

مینیمم عدد در میان مجموعه درجات رئوس گراف G

$V(G)$

مجموعه رئوس گراف G

$E(G)$

مجموعه یال های گراف G

$|V(G)|$

مرتبه گراف G

$|E(G)|$

اندازه گراف G

G

مکمل گراف G

$d_G(u, v)$

فاصله دوراس u و v در گراف G

$\deg(v)$

درجه راس v در گراف G

P_n

مسیر از مرتبه n

C_n دور از مرتبه n S_n گراف ستاره n راسی K_n گراف کامل از مرتبه n $K_{m,n}$ گراف دو بخشی کامل m و n راسی $L(G)$ گراف یالی G W_n هرم n وجهی یا چرخ با $1 + n$ راس B_n دو هرم n وجهی یا $2 + n$ راس π_n منشور n پهلو با $2n$ راس A_n پادمنشور n پهلو با $2n$ راس H_n مکعب n - بعدی با 2^n راس $\varepsilon(u)$ خروج از مرکز راس u

$d(G)$ قطر گراف G $r(G)$ شعاع گراف G $c(G)$ مرکز گراف G $\zeta(G)$ خروج از مرکز کل گراف G $D(v)$ فاصله جمعی راس v در گراف G $DD(G)$ شاخص فاصله درجه گراف G $W(G)$ شاخص وینر گراف G $M_1(G)$ شاخص زاگرب نوع اول گراف G $\xi(G)$ شاخص همبندی خروج از مرکز گراف G $\xi^d(G)$

شاخص مجموع فاصله خروج از مرکز گراف

 $w(G)$ تعداد رئوس خوش - همبند در گراف G $\alpha(G)$ عدد اسقلال گراف G

$\beta(G)$	عدد تطابق گراف G
$\chi(G)$	عدد رنگی راسی گراف G
$\omega(G)$	عدد خوش‌های گراف G
$k(G)$	همبندی راسی گراف G
$G_1 \cup G_2$	اجتماع دو گراف G_1 و G_2
$G_1 \times G_2$	حاصل ضرب دکارتی گراف‌های G_1 و G_2
$G_1 \vee G_2$	الحاق دو گراف G_1 و G_2
$G_1 + G_2$	پیوند دو گراف G_1 و G_2
$G_1 \oplus G_2$	تفاضل متقارن دو گراف G_1 و G_2
$G_1[G_2]$	ترکیب دو گراف G_1 و G_2
$G_1 \circ G_2$	حاصل ضرب تاج دو گراف G_1 و G_2

گراف نردبان با r راس

L_r

گراف توران با n راس

$T_{n,k}$

گراف آبنبات با n راس

$Lp_{n,d}$

گراف فولرین با n راس

F_n

فصل ۱

مفاهیم و قضیه‌های مقدماتی

در این فصل، مفاهیم مقدماتی که در این پایان‌نامه از آن استفاده خواهیم کرد را توضیح می‌دهیم. این فصل شامل ۳ بخش است: در بخش اول به مفاهیمی مقدماتی از نظریه گراف می‌پردازیم، بخش دوم چند گراف معروف را معرفی کرده، در بخش سوم، به معرفی دو شاخص همبندی خروج از مرکز و مجموع فاصله خروج از مرکز می‌پردازیم.

۱-۱ گراف و مفاهیم مقدماتی

تعریف ۱-۱-۱- یک گراف عبارت است از دوتایی $(G = (V(G), E(G))$ ، که در آن $V(G)$ مجموعه‌ای ناتنهی و $E(G)$ مجموعه‌ای از زیرمجموعه‌های دو عضوی $V(G)$ است. عناصر $V(G)$ را رئوس G و عناصر $|V(G)|$ را یال‌های G می‌نامیم. تعداد رئوس و یال‌های G را به ترتیب مرتبه و اندازه G نامیده و با $|E(G)|$ نشان می‌دهیم. گراف G را متناهی گوییم هرگاه $\infty < |V(G)|$ و $\infty < |E(G)|$. هم‌چنین گرافی که شامل یک راس باشد را گراف بدیهی و سایر گراف‌ها را غیر بدیهی می‌نامیم. گراف G را یک (n, m) -گراف گوییم هرگاه $n = |V(G)|$ و $m = |E(G)|$. هرگاه برای یال e از E داشته باشیم $\{u, v\} = e$ آنگاه می‌نویسیم. در این صورت گوییم راس u با راس v مجاور است و u و v را رئوس پایانی e می‌نامیم. دو راس u و v از گراف را مجاور نامیم هرگاه يالی از G با رئوس پایانی u و v موجود باشد. دو یال را مجاور گوییم اگر و تنها اگر در یک راس مشترک باشند. یال با دو انتهای یکسان را طوقه و یال با دو انتهای مجزا را پیوند می‌نامیم. در تعریف کلی گراف ممکن است یک یال چند بار تکرار شود که در این حالت یال چندگانه داریم. گراف ساده گرافی است که در آن یال چندگانه و طوقه وجود نداشته باشد. در سراسر این پایان‌نامه منظور از گراف، گراف ساده و متناهی می‌باشد.

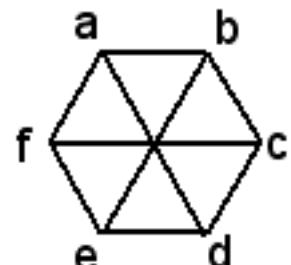
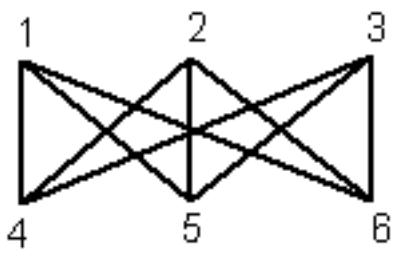
درجه راس v از گراف G ، برابر تعداد یال‌هایی است که راس v بر آنها واقع است که آن را با $\deg(v)$ نشان می‌دهیم. راس v را یک راس تنها گوییم هرگاه $\deg(v) = 0$. هم‌چنین راس v یک راس انتهایی (پایانی یا آویزان) گوییم هرگاه $\deg(v) = 1$. قضیه معروفی از اویلر بیان می‌کند که مجموع درجات رئوس گراف مساوی دو برابر تعداد یال‌های آن است.

گرافی که درجه هر راس آن کوچکتر یا مساوی ۴ باشد را یک گراف شیمیایی یا مولکولی می‌نامند. یک گراف مولکولی گرافی است که به یک مولکول نسبت داده می‌شود. در این گراف اتم‌ها معرف رئوس گراف و پیوندهای بین اتم‌ها معرف یال‌های گراف هستند.

تعريف ۱-۱-۲ - فرض کنید $G_1 = (V(G_1), E(G_1))$ و $G_2 = (V(G_2), E(G_2))$ دو گراف و $f : V(G_1) \rightarrow V(G_2)$ یک تابع باشد. f هم‌ریختی است هرگاه مجاورت دو راس از دامنه، مجاورت تصاویر آن‌ها را نتیجه دهد. f یک‌ریختی است هرگاه f دوسوئی، f^{-1} هم‌ریختی باشند. یک‌ریختی بین دو گراف G_1 و G_2 را با $G_1 \cong G_2$ نمایش می‌دهند. f خودریختی است هرگاه f یک‌ریختی و $V(G_1) = V(G_2)$ باشد.

مثال ۱-۱-۳ - دو گراف شکل ۱-۱ یک‌ریخت هستند. یک‌ریختی بین آن‌ها را می‌توان به صورت زیر در نظر گرفت.

$$f := \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ b & d & f & c & e & a \end{pmatrix}.$$



شکل ۱-۱: گراف‌های یک‌ریخت.

تعريف ۱-۱-۴ - مکمل گراف G که آن را با G نشان می‌دهیم، بدین صورت تعریف می‌شود که رئوس آن با رئوس G یکسان بوده و دو راس در G مجاورند اگر و فقط اگر در G مجاور نباشند. گراف G را خود مکمل نامیم هرگاه $G \cong G$. توجه کنید اگر m و n به ترتیب تعداد یال‌های G و G باشند، آنگاه

$$m + n = \binom{n}{2}$$