دانشکده علوم پایه

محاسبه شاخص استرادای درخت های شیمیایی و دندریمرها

نگارش:

لیلا وثوقی

اساتید راهنما:

دکتر مجتبی قربانی

دکتر حمید رضا میمنی

استاد مشاور:

دکتر حمید مسگرانی

پایان نامه کارشناسی ارشد

رشته ریاضی محض

اسفند ماه ۱۳۹۰

تاییدیه هیات داوران

تقدیم

تقدیم به خدایی که آفرید

جهان را، انسان را، عشق را، علم را، عقل را، معرفت را،

و به کسانی که عشقشان را در وجودم دمید:

مادرم

روح آسمانی پدرم

همسرم

برادر و خواهران عزیز تر از جانم

لیلا وثوقی

اسفند ۱۳۹۰

تقدیر و تشکر

سپاس بیکران بر همدلی و همراهی و همگامی مادر دلسوز و مهربانم که سجده‌ی ایثارش گل محبت را در وجودم پروراند و دامان گهربارش لحظه‌های مهربانی را به من آموخت.

با تقدیر و تشکر شایسته از اساتید فرهیخته و فرزانه‌ام جناب آقای دکتر مجتبی قربانی و جناب آقای دکتر میمنی که با نکته‌های دلاویز و گفته‌های بلند صحیفه‌های سخن را علم پرور نمودند و همواره راهنما و راهگشای اینجانب در اتمام و اکمال پایان‌نامه بوده اند.

معلما مقامت ز عرش برتر باد　　　　همیشه توسن اندیشه‌ات مظفر باد.

لیلا وثوقی

اسفند ۱۳۹۰

چکیده

فرض کنید G یک گراف با n راس و $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n$ مقادیر ویژه‌ی گراف G باشند، در این صورت شاخص استرادای گراف G به صورت زیر محاسبه می شود:

$$EE(G) = \sum_{i=1}^{n} e^{\lambda_i}.$$

این مفهوم نخستین بار در سال ۲۰۰۰میلادی توسط ارنستو استرادا برای مطالعه شبکه های کامپیوتری مطرح شد، بعدها کاربردهای زیادی از این شاخص در سایر علوم (شیمی، فیزیک،...)بدست آمد و نظر ریاضیدانان را نیز بخود جلب کرد. مطالعه ریاضی این شاخص از سالهای اخیر آغاز شده و تا کنون کرانهای زیادی بدست آمده است و مساله مقادیر اکسترمال این شاخص برای درخت ها حل شده است. در این پایان نامه ابتدا به مفهوم پوچی گراف پرداخته و سپس کران هایی برای شاخص استرادا معرفی می‌کنیم. در فصل آخر پوچی و شاخص استرادای دندریمرها را بررسی خواهیم کرد، همچنین فرمول هایی برای $(3,6)$– فولرن‌ها ارائه خواهیم کرد.
کلمات کلیدی: شاخص استرادا، دندریمر، پوچی گراف، درخت‌های شیمیایی، شاخص توپولوژیک، (۶و۳)–فولرن‌ها، مقادیر ویژه.

فهرست مندرجات

فهرست شکل‌ها

فهرست علائم و اختصارات

مجموعه رئوس گراف G	$V(G)$
مجموعه یال های گراف G	$E(G)$
درجه راس v در گراف G	$deg_G(v)$
می نیمم عدد در میان مجموعه درجات رئوس گراف G	$\delta(G)$
ماکسیمم عدد در میان مجموعه درجات رئوس گراف G	$\Delta(G)$
فاصله رئوس u و v در گراف G	$d_G(u,v)$
مسیر از مرتبه n	P_n
دور از مرتبه n	C_n
ستاره از مرتبه n	S_n
گراف کامل $n-$راسی	K_n
گراف دوبخشی کامل n و m راسی	$K_{n,m}$
مکمل گراف G	$\bar{G}$
ماتریس مجاورت گراف	$A(G)$
جمع درایه‌های روی قطر اصلی ماتریس A	$trac(A)$
انرژی گراف G	$E(G)$
گراف تهی با n راس	N_n
گشتاور طیفی گراف G	$M_k(G)$
اجتماع دو گراف G و H	$G \cup H$
ضرب دو گراف G و H	$G \times H$
مقدار ویژه گراف G	$\lambda(G)$

چندجمله ای مشخصه گراف G	$P_G(x)$
طیف گراف G	$Spec(G)$
شاخص استرادا گراف G	$EE(G)$
پوچی گراف G	$\eta(G)$
فولرین با n راس	F_n

فصل ۱

تعاریف و قضایای مقدماتی

در این فصل به طور خلاصه، به تعاریف و مفاهیمی که در فصل‌های بعدی مورد استفاده قرار می‌گیرند می‌پردازیم، همچنین در قسمت‌های پایانی این فصل شاخص استرادا را معرفی و ویژگی‌های مقدماتی آن را بررسی می‌کنیم. برای نگارش مطالب این فصل از مراجع[۱۶, ۱۴, ۱۱, ۹, ۵, ۴, ۳, ۲, ۱] استفاده نموده‌ایم.

یک گراف، عبارت‌است از دو تایی مرتب $G = (V(G), E(G))$، که در آن $V(G)$ مجموعه‌ای ناتهی و $E(G)$ مجموعه‌ای از زیرمجموعه‌های دو عضوی $V(G)$ است. عناصر $V(G)$ را رئوس (یا گره‌ها یا نقاط) G و عناصر $E(G)$ را یال‌ها(یا خطوط) G می‌نامیم. تعداد رئوس و یال‌های گراف G را به ترتیب، مرتبه و اندازه G نامیده و با $|V(G)|$ یا به اختصار n و $|E(G)|$ یا به اختصار m نشان می‌دهیم. هر گراف با n راس و m یال را یک $(n,m)-$گراف نیز می‌نامند. یالی با دو انتهای یکسان را طوقه و یالی با دو انتهای مجزا را پیوند می نامند. دو یال را مجاور گوییم اگر و فقط اگر در یک راس مشترک باشند. دو راس را مجاور گوییم هرگاه بر یالی مشترک واقع باشند. مجموعه‌ای متشکل از حداقل دو یال از گراف G را که پایان‌های یکسان داشته باشند را یال‌های چندگانه یا موازی می‌نامیم. گرافی که طوقه و یال چندگانه نداشته باشد را گراف ساده می‌نامیم. اگر هر دو مجموعه $V(G)$ و $E(G)$ متناهی باشند، گراف را متناهی و گرافی که تنها یک راس داشته باشد را گراف بدیهی می‌نامیم.

درجه راس v در گراف G که به صورت $d_G(v)$ یا برای سادگی $d(v)$ نشان می‌دهیم تعداد یال‌های گذرا از آن راس است. راس از درجه صفر را راس تنها و راس از درجه یک را راس آویزان می‌نامیم. هرگاه درجه راس v در گراف G زوج باشد، آن راس را راس زوج می‌نامیم و راس فرد نیز مشابها تعریف می‌شود. گرافی که هر دو راس آن مجاورند را گراف کامل گفته با K_n نمایش می‌دهیم. گراف G را منتظم از درجه k نامیم هرگاه برای هر راس v از G، $d(v) = k$ با شد، چنین گراف‌هایی را $k-$منتظم نیز می‌نامند، بنابراین K_n یک گراف $(n-۱)$منتظم است و $m = \frac{n(n-۱)}{۲}$. بزرگترین عدد در میان درجه رئوس G را ماکزیمم درجه گراف نامیده و با $\Delta(G)$ نشان می‌دهیم و مشابها مینیمم درجه تعریف می‌شود که با$\delta(G)$ نشان می‌دهیم. مکمل گراف G، را با $\bar{G}$ نشان می‌دهیم که$\bar{G}$ مجموعه‌ی راس‌های یکسان با G دارد، دو راس در $\bar{G}$ مجاورند اگر و فقط اگر در G،

مجاور نباشند. بوضوح :

$$\begin{aligned} &E(G) \bigcup E(\bar{G}) = E(K_n) \\ &\qquad \Rightarrow \bar{m} = \mid E(\bar{G}) \mid = (n(n-۱)/۲) - m, \\ &\qquad \Rightarrow d_{\bar{G}}(v) = n - ۱ - d_G(v). \end{aligned}$$

تذکر— در سراسر این پایان نامه تمامی گراف‌ها ساده و متناهی در نظر گرفته می‌شوند.

تعریف ۱—۱— یک زیر گراف از گراف G، گرافی مانند H است به طوری که $V(H) \subseteq V(G)$ و $E(H) \subseteq E(G)$. زیر گراف H از G را زیر گراف سره‌ی G گوییم هرگاه $V(H) \neq V(G)$ یا $E(H) \neq E(G)$. زیر گراف القایی از G، زیرگرافی مانند H است به طوری‌که هر یال G که رئوس پایانی‌اش در $V(H)$ باشد، یک یال در H نیز باشد. زیرگراف H از G را زیرگراف فراگیر G گوییم هرگاه $V(H) = V(G)$. زیرگراف القایی از G، با مجموعه‌ی رئوس $S \subseteq V(G)$ را زیرگراف القاشده از G توسط S نامیم و با $G[S]$ نشان می‌دهیم. دو زیرگراف $H_۱$ و $H_۲$ از گراف G را راس مجزا گوییم، هرگاه $V(H_۱) \bigcap V(H_۲) = \emptyset$.

منظور از $G + uv$، گراف حاصل از افزودن یال جدید uv، به G می‌باشد. اگر S زیرمجموعه‌ی سره‌ای از $V(G)$ و E' زیرمجموعه‌ای از $E(G)$ باشد، زیر گراف $G[V(G) - S]$ را زیرگراف حاصل از G با حذف S نامیده و با نماد $G - S$ نشان می‌دهیم. اگر $S = \{v\}$، گراف $G - S$ را با $G - v$ نشان می‌دهند. زیرگراف فراگیر از G با مجموعه یال $E(G) - E'$ را زیر گراف حاصل از G با حذف مجموعه یال E' نامیده و با $G - E'$ نشان می‌دهند. هرگاه $E' = e$، گراف $G - E'$ را با $G - e$ نشان می‌دهند.

نکته قابل توجه اینکه با حذف یک راس همه‌ی یال‌های مجاور آن نیز از G حذف می‌شوند در حالیکه حذف یک یال تاثیری بر راس‌های G ندارد.

تعریف ۱—۲— در گراف ساده G، یک گشت به طول k از $v_۰$ به v_k، (یا به اختصار یک $v_۰v_k$ گشت) یک دنباله‌ی $W = v_۰ \ e_۱ \ v_۱ \ e_۲ \ v_۲ \ ... \ e_k \ v_k$ از راس‌ها و یال‌هاست به‌طوری‌که به ازای هر $۱ \leq i \leq k$،

$e_i = v_{i-1}v_i$.

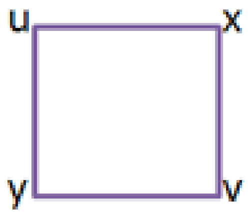
لازم به ذکر است v_0 و v_k را به ترتیب مبدا و انتهای گشت و $v_1, ..., v_{k-1}$ را راس داخلی‌اش می‌نامیم و عدد صحیح k نیز طول گشت نامیده می‌شود. یک گشت بدیهی شامل هیچ یالی نیست. دو $u-v$ گشت $u = u_0, u_1, ..., u_k = v$ و $u = v_0, ..., v_l = v$ را برابر گوییم هرگاه $(0 \leq i \leq k)$ $u_i = v_i$، و $k = l$، در غیر اینصورت آن‌ها را متفاوت گوییم. یک $u-v$ گشت بسته(باز) است هرگاه $u = v (u \neq v)$. گشتی که هیچ یال تکراری نداشته باشد را گذر می‌نامیم و در این حالت طول W، $| E(W) |$ می‌باشد. یک گذر بسته غیر بدیهی از G یک مدار نامیده می‌شود. گشتی که هیچ راس تکراری نداشته باشد را مسیر نامیده و در این حالت طول W، $k-1$ است. مسیری با n راس و $n-1$ یال را با P_n نشان می‌دهیم. کوتاه‌ترین مسیر بین دو راس از یک گراف مسیری است که دارای کم‌ترین طول باشد. مسیری با n راس که راس‌های ابتدایی و انتهایی آن برابر باشد را دور نامیده با C_n نمایش می‌دهند. طول کوتاهترین دور در G را کمر G، می‌نامیم. یک طوقه دوری به طول حداقل یک است.

گراف G همبند است اگر به ازای هر جفت $v \in V(G)$ و u، دارای یک $u-v$ مسیر باشد. رابطه‌ی همبندی یک رابطه‌ی هم ارزی روی $V(G)$ است. اگر V_1،...،V_2،V_n رده‌های هم ارزی باشند، زیرگراف‌های $G[V_1]$،...،$G[V_n]$ را مولفه‌های همبندی G گوییم. اگر $n = 1$، گراف را همبند در غیر این‌صورت گراف را ناهمبند با n مولفه‌ی همبندی می‌نامیم. طول کوتاهترین مسیر بین دو راس دلخواه v و u در گراف را فاصله‌ی آن دو راس نامیده و با $d_G(u, v)$ یا ساده‌تر $d(u, v)$ نمایش می‌دهیم. اگر هیچ مسیری بین دو راس v و u وجود نداشته باشد $d(u, v) = \infty$ تعریف می‌شود.

تعریف ۱—۳— گراف همبند و بدون دور را درخت می‌نامیم. یک جنگل، گراف بدون دور است. یک درخت با n ر اس، دارای $n-1$ یال است.

یک زیر گراف فراگیر از یک گراف، که درخت نیز باشد را درخت فراگیر می‌نامیم. گراف تک دور گرافی است که تعداد رئوس و یال‌هایش برابر باشند. با افزودن یک یال به درخت گراف تک دور ساخته می‌شود.

تعریف ۱—۴— یک مجموعه مستقل در گراف G، یک زیر مجموعه از راس‌های G است مانند S، $(S \subset V(G))$ به طوری که زیر گراف القایی $G(S)$، هیچ یالی نداشته باشد. به عنوان مثال در شکل ۱—۱، مجموعه $\{u \ , \ v\}$ یک مجموعه مستقل است.



شکل ۱—۱ : رئوس مستقل در گراف C_4.

یک گراف دو بخشی است، هرگاه بتوان مجموعه‌ی رئوس آن را (حداکثر) به دو مجموعه‌ی مستقل افراز کرد، اگر هر راس از V_1 و هر راس از V_2 مجاور باشند گراف حاصل را دوبخشی کامل گویند و با K_{n_2,n_1} نشان می‌دهند که n_1،n_2 تعداد رئوس V_1،V_2 می‌باشند. به همین ترتیب هرگاه بتوان مجموعه رئوس را حداکثر به k مجموعه مستقل مانند V_1،...،V_k افراز کرد، گراف را k بخشی می‌نامند. اگر همه رئوس V_j و V_i مجاور باشند،($i \neq j$ و $1 \leq i,j \leq k$) گراف را k−بخشی کامل نامیده و با $K_{n_1,n_2,n_3,...,n_k}$ نشان می‌دهیم که n_i معرف تعداد رئوس V_i است. در حالت خاص گراف $K_{1,n-1}$ را گراف ستاره نامیده و با S_n نشان می‌دهیم.

گراف G را مسطح می‌نامیم، هرگاه بتوان G را چنان روی صفحه رسم نمود که فقط در رئوس G همدیگر را قطع کنند.

بنابر قضیه‌ای معروف از اویلر، اگر G یک گراف مسطح و همبند با n راس، m یال و f وجه باشد آن گاه $n - m + f = 2$.

تعریف ۱—۵— الحاق $G + H$ از دو گراف G و H را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

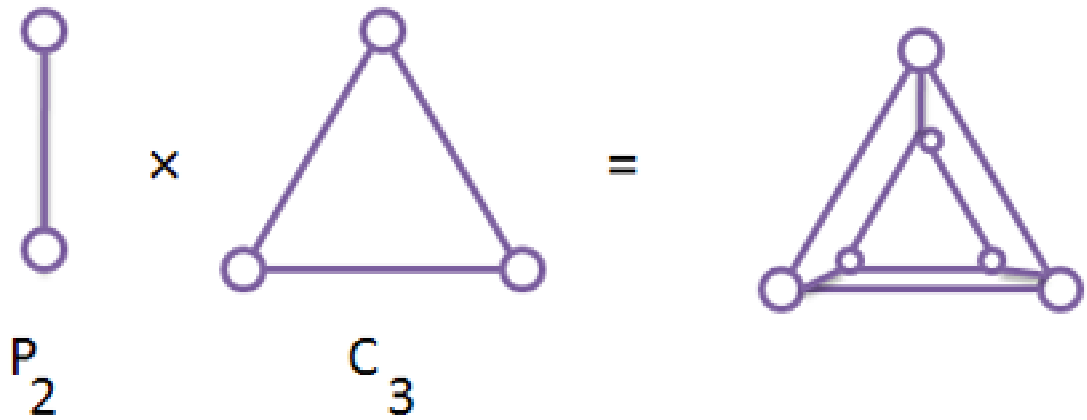
فرض کنید G و H دو گراف باشند که $E(G) \bigcap E(H) = V(G) \bigcap V(H) = \emptyset$، در این‌صورت:

$$V(G+H) = V(G) \bigcup V(H),$$

$$E(G+H)=E(G)\bigcup E(H)\bigcup\{xy : x\in V(G), y\in V(H)\}.$$

اگر $G_۱ = (V(G_۱), E(G_۱))$ و $G_۲ = (V(G_۲), E(G_۲))$ دو گراف باشند، اجتماع دو گراف $G_۱$ و $G_۲$ گراف $G = (V(G), E(G))$ است که آن را با $G = G_۱ \bigcup G_۲$ نشان می‌دهیم و در آن $E(G) = E(G_۱) \bigcup E(G_۲)$ و $V(G_۱) \bigcup V(G_۲)$.

حاصل ضرب دکارتی دو گراف G و H را با $G \times H$ نشان می‌دهیم که، مجموعه‌ی راس‌ها عبارتست از $V(G \times H) = V(G) \times V(H)$ و دو راس (a, x) و (b, y) مجاورند اگر و فقط اگر $a = b$ و $xy \in E(H)$ یا $ab \in E(H)$ یا $x = y$. در شکل ۱ــ۲ حاصل‌ضرب دکارتی دو گراف $P_۲$ و $C_۳$ آمده است.



شکل ۱ــ۲: حاصل‌ضرب دکارتی گراف‌های $P_۲$ و $C_۳$.

تعریف ۱ــ۶ــ فرض کنیم G یک گراف همبند با مجموعه‌ی رئوس $\{v_۱, ..., v_n\}$ باشد، در این صورت ماتریس مجاورت G را با $A(G) = [a_{ij}]$، که $۱ \le i, j \le n$ نمایش داده چنین تعریف می‌کنیم:

$$a_{ij} = \begin{cases} ۱ & \text{اگر } v_i \text{ مجاور با } v_j \text{ باشد} \\ ۰ & \text{در غیر این صورت} \end{cases} .$$

با توجه به تعریف فوق، ماتریس مجاورت گراف، متقارن و حقیقی است و درایه‌های روی قطر اصلی

آن صفرند.

تعریف ۱—۷— فرض کنیم F یک میدان دلخواه باشد. یک فضای برداری V روی F، عبارت است از مجموعه ای ناتهی مانند V از اشیاء $\{v\}$، که بردار نامیده می‌شوند، همراه با دو عمل، که یکی از آنها به هر دو بردار v و w برداری مانند $v+w$ به نام حاصل جمع v و w را نسبت می‌دهد و عمل دیگر، به هر عنصر $\alpha \in F$ و هر بردار $v \in V$، برداری مانند αv به نام حاصل ضرب v در $\alpha \in F$ را نسبت می‌دهد. فرض بر این است که این اعمال، به ازای $\alpha, \beta \in F$ و $u, v, w \in V$، در اصول موضوع زیر صدق می‌کنند:

۱) $u+(v+w)=(u+v)+w$ و $u+v=v+u$،

۲) برداری مانند ۰ وجود دارد به طوری که به ازای هر $u \in V$، $u+\circ=u$،

۳) به ازای هر بردار u، برداری مانند $-u$ وجود دارد به طوری که $u+(-u)=\circ$،

۴) $\alpha(u+v)=\alpha u+v$،

۵) $(\alpha+\beta)u=\alpha u+\beta u$،

۶) $(\alpha\beta)u=\alpha(\beta u)$،

۷) $1u=u$.

فرض کنیم V فضایی برداری روی میدان F و T عملگری خطی روی V باشد، یک مقدار ویژه T اسکالری چون c در F است که برای آن بردار غیر صفری چون α در V با خاصیت $T\alpha=c\alpha$ وجود داشته باشد. اگر c یک مقدار ویژه T باشد، آن گاه:

۱) هر α با خاصیت $T\alpha=c\alpha$ یک بردار ویژه T وابسته به مقدار ویژه c نامیده می‌شود.

۲) مجموعه همه α هایی که $T\alpha=c\alpha$ فضای ویژه وابسته به c نامیده می‌شود.

حال اگر A ماتریسی $n \times n$ بر روی میدان F باشد یک مقدار ویژه A در F، اسکالری چون c از F است که ماتریس $(A-cI)$ منفرد(معکوس پذیر) باشد. از جبر خطی می‌دانیم c یک مقدار ویژه A است اگر و تنها اگر $det(A-cI)=\circ$ یا به طور هم ارز، اگر و تنها اگر $det(cI-A)=\circ$، بنابراین چندجمله‌ای

$f(x) = det(xI - A) = \circ$ را در نظر بگیرید. به وضوح مقادیر ویژه A در F، دقیقا اسکالرهایی چون c هستند که $f(c) = \circ$. به این دلیل، f چندجمله‌ای مشخصه A نامیده می‌شود.

چند جمله ای مشخصه ماتریس مجاورت گراف را چند جمله ای مشخصه گراف نامیده و ریشه های چند جمله ای مشخصه را مقادیر ویژه گراف می نامیم. به عبارت دیگر اگر G یک گرافی با n راس و ماتریس مجاورت A باشد، آن گاه چند جمله‌ای مشخصه آن عبارتست از:

$$P_G(x) = det(xI - A).$$

به عبارت دیگر اگر قرار دهیم $P_G(x) = x^n + c_۱x^{n-۱} + ... + c_n$ آن گاه ریشه های $P_G(x) = \circ$ همان مقادیر ویژه گراف G می‌باشند که آنها را با $\lambda_۱, \lambda_۲, ...\lambda_n$ نشان می دهیم. به عنوان مثال، اگر G گراف تهی با n راس باشد، آن گاه $P_G(x) = x^n$ و لذا G دارای مقدار ویژه صفر با تکرار n می‌باشد. به وضوح، صفر تنها مقدار ویژه G است. دیدیم λ مقدار ویژه A است اگر و تنها اگر به ازای یک بردار غیر صفر مانند v، $Av = \lambda v$ در این حالت v بردار ویژه نظیر مقدار ویژه λ نامیده می شود.

قضیه ۱—۱—[۱۱]. فرض کنید G یک گراف k منتظم باشد در این صورت:

الف) k یک مقدار ویژه G است،

ب) اگر G همبند باشد آن گاه تکرر k برابر با یک است،

ج) برای هر مقدار ویژه G مانند λ داریم $|\lambda| \leq k$.

تعریف ۱—۸— مجموعه‌ی همه‌ی مقادیر ویژه‌ی یک گراف را طیف گراف می‌گوییم به عبارت دیگر، اگر m_i تکرار ریشه‌ی λ_i از چندجمله‌ای مشخصه‌ی ماتریس مجاورت باشد، طیف این گراف که با $spec(G)$ نشان می‌دهیم به صورت زیر است که در آن λ_i ها مقادیر ویژه‌ی متمایز گراف G هستند:

$$Spec(G) = \begin{pmatrix} \lambda_۱ & \lambda_۲ & . & . & . & \lambda_r \\ m_۱ & m_۲ & . & . & . & m_r \end{pmatrix}.$$

تعریف ۱—۹— اگر G، گرافی با n، راس باشد، پوچی گراف G، که با $\eta(G)$ نشان داده می‌شود، تعداد تکرار مقدار ویژه‌ی صفر در طیف گرافش می‌باشد.

به عنوان مثال پوچی گراف تهی با n راس، برابر است با $\eta(\bar{K_n}) = n$.

تعریف ۱—۱۰— تعداد گشت‌های به طول k، از راس v_i به راس v_i را گشتاور طیفی گراف G نامیده و به صورت $M_k = \Sigma_{i=1}^{n} \lambda_i^k$ تعریف می‌کنیم.

تعریف ۱—۱۱— جورسازی M از گراف G، زیر مجموعه‌ای از یال های گراف G است به طوری که هیچ دو یالی از M راس مشترک نداشته باشند. جورسازی M را در گراف G ماکزیمم گوییم هرگاه برای هر جورسازی M'، $|M| < |M'|$. عدد جورسازی گراف G را با m نشان می‌دهیم که m برابر با تعداد یال های جورسازی ماکزیمم G است. هرگاه $m = \frac{n}{2}$ گوییم G یک جورسازی تام دارد. جورسازی M در گراف G را ماکسیمال گوییم هرگاه M زیرمجموعه محض هیچ جورسازی دیگری نباشد. همچنین راس x توسط جورسازی M آغشته می‌شود هرگاه x انتهای یالی از M باشد. راس x را غیر آغشته گوییم هرگاه توسط هیچ یالی آغشته نشود. بدیهی است یک جورسازی تام، جورسازی است که تمام رئوس گراف G توسط M آغشته شوند. اگر تمام رئوس گراف G توسط جورسازی M آغشته شوند، جورسازی M را تام می‌گوییم.

تعریف ۱—۱۲— اگر G، یک گراف با n راس و $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n$ مقادیر ویژه‌ی ماتریس مجاورت این گراف باشند آن‌گاه، انرژی گراف به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\varepsilon = \varepsilon(G) = \sum_{i=1}^{n} \mid \lambda_i \mid .$$

این مفهوم برای اولین بار توسط ایوان گوتمن در سال ۱۹۷۰ مطرح شد.