بسم ا... الرحمن الرحیم

مقادیرویژه ماتریس لاپلاسین درخت‌ها

توسط:

مریم احمدی

پایان نامه

ارائه شده به مدیریت تحصیلات تکمیلی به عنوان بخشی از فعالیت های

تحصیلی لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

در رشته ریاضی کاربردی(آنالیز عددی)

از

دانشگاه اراک

اراک-ایران

ارزیابی و تصویب شده توسط کمیته پایان نامه با درجه: ....

دکتر علی‌محمد نظری (استاد راهنما و رئیس کمیته)..................استادیار

دکتر بهنام سپهریان (استاد مشاور) ....استادیار

دکتر مهدی سهرابی حقیقت(دانشگاه اراک)...............................استادیار

شهریور ۱۳۹۱

بسم الله الرحمن الرحيم

دانشکده علوم پایه
گروه ریاضی کاربردی

پایان‌نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته
ریاضی کاربردی، گرایش آنالیز عددی

عنوان

مقادیرویژه ماتریس لاپلاسین درخت‌ها

استاد راهنما

دکتر علی محمد نظری

استاد مشاور

دکتر بهنام سپهریان

پژوهشگر

مریم احمدی

تابستان ۱۳۹۱

نام خانوادگی دانشجو: احمدی نام: مریم

عنوان: مقادیرویژه ماتریس لاپلاسین درخت‌ها

استاد راهنما: دکتر علی محمد نظری

استاد مشاور: دکتر بهنام سپهریان

مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد رشته: ریاضی کاربردی گرایش: آنالیز عددی

دانشگاه: اراک دانشکده علوم پایه

تاریخ فارغ‌التحصیلی: تابستان ۱۳۹۱ تعداد صفحات: ۱۰۴

واژگان کلیدی: درخت، ماتریس لاپلاسین، مقادیرویژه، انرژی لاپلاسین، آلکان‌ها، الگوریتم قطری‌سازی ژاکوب و ترویسان.

چکیده

گراف n رأسی $G = (V, E)$ در نظر گرفته شده است، منظور از طیف لاپلاسین G، مجموعه‌ی مقادیرویژه ماتریس لاپلاسین $L = D - A$، می‌باشد که D و A به ترتیب ماتریس قطری و ماتریس مجاورت G را نشان می‌دهند.

در این پایان‌نامه، به مطالعه‌ی درخت‌ها و طیف لاپلاسین آن‌ها می‌پردازیم و با دقتی بالاتر، کران بالای جدیدی برای مجموع k مقدارویژه‌ی بزرگ ماتریس لاپلاسین هر درخت n رأسی می‌یابیم. توجه داشته باشیم که $k \in \{۱, ۲, ..., n\}$. هم‌چنین در این پایان‌نامه با به کارگیری الگوریتم ژاکوب و ترویسان، کران بالایی برای مقادیرویژه‌ی ماتریس لاپلاسین درخت مربوط به آلکان‌ها می‌یابیم.

نتایج به دست آمده در این پایان‌نامه، برای اثبات این موضوع که در میان تمام درخت‌های n رأسی، ستاره‌ی n رأسی بالاترین انرژی لاپلاسین را دارد، به کار برده می‌شود.

تقدیم به

پدر بزرگوارم برای همه تشویق هایش

،

مادر مهربانم برای تمام صبوری هایش

و

همسر عزیزم برای تمام حمایت هایش

خدایا...[1]

به من زیستنی عطا کن که در لحظه مرگ، بر بی‌ثمری لحظه‌ای که برای زیستن گذشته است، حسرت نخورم و مُردنی عطا کن که بر بیهودگیش، سوگوار نباشم. بگذار تا آن را، خود انتخاب کنم، اما آنچنان که تو دوست می‌داری.

تو می‌دانی و همه می‌دانند که شکنجه دیدن بخاطر تو، زندانی کشیدن بخاطر تو و رنج بردن به پای تو تنها لذت بزرگ زندگی من است، از شادی توست که من در دل می‌خندم، از امید رهایی توست که برق امید در چشمان خسته‌ام می‌درخشد و از خوشبختی توست که هوای پاک سعادت را در ریه‌هایم احساس می‌کنم. نمی‌توانم خوب حرف بزنم. نیروی شگفتی را که در زیر کلمات ساده و جمله‌های ضعیف و افتاده، پنهان کرده‌ام دریاب، دریاب.

تو می‌دانی و همه می‌دانند که زندگی از تحمیل لبخندی بر لبان من، از آوردن برق امیدی در نگاه من، از برانگیختن موج شعفی در دل من، عاجز است.

تو، چگونه زیستن را به من بیاموز، چگونه مردن را خود خواهم آموخت.

به من توفیق تلاش در شکست، صبر در نومیدی، رفتن بی‌همراه، جهاد بی‌سلاح، کار بی‌پاداش، فداکاری در سکوت، دین بی‌دنیا، مذهب بی‌عوام، عظمت بی‌نام، خدمت بی‌نان، ایمان بی‌ریا، خوبی بی‌نمود، گستاخی بی‌خامی، قناعت بی‌غرور، عشق بی‌هوس، تنهایی در انبوه جمعیت، و دوست داشتن بی‌آنکه دوست بداند، روزی کن.

اگر تنهاترین تنها شوم، باز خدا هست

او جانشین همه نداشتن هاست...

---

[1] مناجاتی از دکتر علی شریعتی.

سپاس گزاری... [۲]

به نام آن یگانه که از نسبت محیط بر قطر دایره آگاه است و سلام بر محمد مصطفی و خاندان پاک او که محیط بر اقطار دایره آفرینش‌اند.(غیاث الدین جمشید کاشانی)

سپاس خداوندگار حکیم را که به من قدرت تشخیص داد تا راه علم و اندیشیدن را برگزینم. درست است که راه علم، راهی است بی‌انتها اما هر گامی که در این راه سپری شود به نوبه‌ی خود ارزشمند می‌باشد حتی اگر به اندازه‌ی قدم‌های کوتاه و لرزان ما باشد.
گام کوچک من، نیاز به کمک گام‌های بزرگ و ارزشمند بزرگواران و عزیزانی داشت تا گامی ولو کوچک به حساب بیاید و لایق قرار گرفتن در این راه شود. وظیفه خود می‌دانم در این‌جا و در این نقطه از زندگی‌ام صمیمانه از این بزرگواران قدردانی کنم.
از استاد فرزانه‌ام جناب آقای دکتر علی‌محمد نظری صمیمانه تشکر و قدردانی می‌کنم که قطعاً بدون رهنمودهای ارزنده ایشان این مجموعه به انجام نمی‌رسید. هم‌چنین از اساتید گرانقدرم جناب آقای دکتر بهنام سپهریان و جناب آقای دکتر مهدی سهرابی که زحمت مطالعه‌ی این رساله را تقبل کردند و بنده افتخار شاگردیشان را نیز داشته‌ام، کمال تشکر را می‌نمایم. همین‌طور به رسم وظیفه از تمامی اساتید خوب گروه ریاضی دانشگاه اراک قدردانی می‌نمایم.
در این‌جا لازم می‌دانم از خانواده‌ی عزیزم، به پاس عاطفه سرشار و گرمای امیدبخش وجودشان که در این سردترین روزگاران، بهترین پشتیبان من بودند، تشکر کنم به ویژه از همسر عزیزم که صمیمانه در این راه مرا یاری کرد.
در پایان نیز از همه بزرگوارانی که در این مدت همواره یاری‌گر این‌جانب بوده‌اند، صمیمانه قدردانی می‌کنم.
نمی‌خواهم در انتظار آینده بنشینم، خداوندا از تو می‌خواهم به من قدرت ساختن بهترین آینده را عطا فرمایی ...

مریم احمدی
تابستان ۱۳۹۱

[۲] M.Ahmadi۹۵۳@yahoo.com

چکیده

گراف n رأسی $G=(V,E)$ در نظر گرفته شده است، منظور از طیف لاپلاسین G، مجموعه‌ی مقادیرویژه ماتریس لاپلاسین $L=D-A$، می‌باشد که D و A به ترتیب ماتریس قطری و ماتریس مجاورت G را نشان می‌دهند.
در این پایان‌نامه، به مطالعه‌ی درخت‌ها و طیف لاپلاسین آن‌ها می‌پردازیم و با دقتی بالاتر، کران بالای جدیدی برای مجموع k مقدارویژه‌ی بزرگ ماتریس لاپلاسین هر درخت n رأسی می‌یابیم. توجه داشته باشید که $k\in\{۱,۲,...,n\}$. هم‌چنین در این پایان‌نامه با به کارگیری الگوریتم ژاکوب و ترویسان، کران بالایی برای مقادیرویژه‌ی ماتریس لاپلاسین درخت مربوط به آلکان‌ها می‌یابیم.
نتایج به دست آمده در این پایان‌نامه، برای اثبات این موضوع که در میان تمام درخت‌های n رأسی، ستاره‌ی n رأسی بالاترین انرژی لاپلاسین را دارد، به کار برده می‌شود.

واژگان کلیدی

درخت، ماتریس لاپلاسین، مقادیرویژه، انرژی لاپلاسین، آلکان‌ها، الگوریتم قطری‌سازی ژاکوب و ترویسان.

پیشگفتار

در مبحث نظریه گراف، بحث درخت‌ها جایگاه ویژه‌ای را به خود اختصاص داده است. همان‌گونه که می‌دانیم نظریه گراف در کاربردهای شیمیایی بسیار سودمند واقع می‌شود. درخت‌ها اغلب به صورت نمایشی برای مولکول‌ها استفاده می‌شوند و خواص ترمودینامیکی مولکول‌ها با خواص طیفی ماتریس‌های وابسته به این درخت‌ها در ارتباط می‌باشد.

در این پایان‌نامه ما به مطالعه‌ی درخت‌ها و طیف لاپلاسین آن‌ها می‌پردازیم و همان‌طور که بیان خواهد شد ماتریس لاپلاسین برابر با $L = D - A$ می‌باشد که D و A به ترتیب ماتریس قطری و ماتریس مجاورت درخت می‌باشند.

مبحث اصلی در این‌جا، اثبات قضیه (۱.۲.۱) برای درخت‌ها می‌باشد. در این قضیه کران بالایی، برای مجموع k مقدارویژه‌ی بزرگ‌تر ماتریس لاپلاسین درخت T به دست می‌آید. بعد، با تعریف انرژی لاپلاسین به این نکته، که از نتایج مهم قضیه (۱.۲.۱) می‌باشد، اشاره می‌کنیم که در میان تمامی درخت‌های n رأسی ستاره بالاترین انرژی لاپلاسین را دارد.

در مجموع این پایان‌نامه از پنج فصل تشکیل شده است که در فصل اول آن به مفاهیم اولیه‌ی نظریه گراف و تاریخچه‌ای از کران بالای مورد بحث می‌پردازیم. هم‌چنین به لم‌ها و قضایایی اشاره داریم که از مقاله‌های متفاوتی گرفته شده و مورد نیاز است. طی فصل دوم با الگوریتم مهمی آشنا می‌شویم که الگوریتم قطری‌سازی ژاکوب و ترویسان نام دارد و نقش مهمی در این پایان‌نامه دارد. در ادامه قضیه (۱.۲.۱) را برای خانواده‌های خاصی از درخت‌ها که ستاره‌ها را نیز شامل می‌شوند (درخت‌های ستاره-ستاره)، مطرح کرده و به اثبات می‌رسانیم. گام بعدی در اثبات قضیه مورد نظر بیان و اثبات آن برای درخت‌های ستاره-ناستاره می‌باشد که موضوع فصل سوم می‌باشد و نهایتاً در فصل چهارم قضیه را به شکل کلی مطرح کرده و به کمک استقرا آن را به اثبات می‌رسانیم. به کمک همین قضیه در انتهای این فصل نشان می‌دهیم که ستاره‌ها درخت‌هایی با بالاترین انرژی لاپلاسین می‌باشند.

در فصل هفت پایان‌نامه پژوهش‌های جدیدی در زمینه هیدروکربن‌های اشباع شده غیر حلقوی تک پیوندی که آلکان نامیده می‌شوند صورت می‌گیرد. در این فصل به بررسی کران بالای جدیدی برای مقادیرویژه‌ی ماتریس لاپلاسین آلکان‌ها که نوعی درخت می‌باشند، می‌پردازیم و به نتایج قابل توجهی دست پیدا می‌کنیم.

فهرست مطالب

فصل ۱
تعاریف، مفاهیم و قضایای مقدماتی

در این فصل ابتدا به بیان مختصری از مفاهیم اولیه‌ی نظریه‌ی گراف می‌پردازیم. پس از آن تاریخچه کوتاهی از پژوهش‌های ریاضیدانان را در زمینه این پایان‌نامه عنوان کرده، سپس به سراغ قضایا و لم‌هایی که در این‌جا مورد نیاز است می‌رویم و در آخر نیز مروری بر روند پایان‌نامه خواهیم داشت.

۱.۱ مفاهیم اولیه نظریه گراف

تعریف ۱.۱.۱. گراف G از سه جزء اصلی تشکیل شده که عبارتند از مجموعه‌ی ناتهی $V(G)$ از رأس‌ها، مجموعه‌ی $E(G)$ از یال‌ها و تابعی که به هر یال G، یک زوج نامرتب از رأس‌های G را نسبت می‌دهد.
اگر این تابع به یال e دو رأس u و v را نسبت دهد، گوییم رأس‌های u و v بر یال e واقع شده‌اند و نقاط انتهایی e هستند، در این صورت دو رأس u و v را مجاور، همسایه و یا متصل می‌نامیم و یال e را نیز یک یال مجاور و یا واقع بر رأس v می‌گوئیم.
به اختصار $V(G)$ و $E(G)$ را به ترتیب با V و E نشان می‌دهیم و گراف G را با مجموعه‌ی یال‌ها و رأس‌های آن به صورت $G=(V,E)$ نشان می‌دهیم.

تعریف ۲.۱.۱. مرتبه‌ی یک گراف، تعداد رأس‌های آن و اندازه‌ی گراف، تعداد یال‌های آن

است. یال‌هایی که دارای نقاط انتهایی یکسان هستند، یال‌های چندگانه و یالی را که دارای دو انتهای یکسان است، طوقه می‌نامیم. گراف بدون یال چندگانه و طوقه را گراف ساده می‌گوئیم.

در این پایان نامه گراف‌ها را ساده در نظر می‌گیریم.

تعریف ۳.۱.۱. مکمل گراف ساده G، گرافی است با مجموعه‌ی رأس‌های $V(G)$، که دو رأس در آن مجاورند اگر و تنها اگر در G نامجاور باشند. این گراف را با G^c نشان می‌دهیم.

تعریف ۴.۱.۱. گراف سودار G از سه جزء اصلی تشکیل شده که عبارتند از مجموعه‌ی ناتهی V از رأس‌ها، یک مجموعه‌ی E از یال‌ها و یک تابع که به هر یال G، یک زوج مرتب از رأس‌های G را نسبت می‌دهد. اولین رأس زوج مرتب را دم و دومین رأس را سر می‌نامیم.

تعریف ۵.۱.۱. درجه رأس v در گراف G، تعداد یال‌های واقع بر v است و آن را با نماد $d_G(v)$ و یا به طور مختصر با $d(v)$ نمایش می‌دهیم. برای هر رأس v در گراف سودار $G=(V,E)$ دو مفهوم درجه ورودی و درجه خروجی تعریف می‌کنیم. درجه ورودی رأس v که آن را با نماد $d^-(v)$ نشان می‌دهیم تعداد یال‌هایی است که به هر رأس v وارد می‌شوند و درجه خروجی رأس v که آن را با نماد $d^+(v)$ نشان می‌دهیم تعداد یال‌هایی است که از رأس v خارج می‌شوند.

رأس با درجه‌ی صفر را رأس تنها گوییم. کمترین و بیشترین درجه‌ی رأس‌های گراف G را به ترتیب با $\delta(G)$ و $\Delta(G)$ و یا به طور مختصر با δ و Δ نمایش می‌دهیم.

تعریف ۶.۱.۱. گراف G را k-منظم گوییم اگر درجه‌ی هر رأس آن k باشد.

تعریف ۷.۱.۱. گراف $H=(V',E')$ را زیر گراف $G=(V,E)$ نامیم هر گاه یال‌های E' روی رئوس V' واقع باشند، $V'\subseteq V$ و $E'\subseteq E$.

اگر $v \in V(G)$ و $|V(G)| \geq ۲$ ، گراف $G - \{v\}$ و یا به طور خلاصه $G - v$، گراف حاصل از حذف رأس v و همه‌ی یال‌های مجاور با آن از گراف G است. اگر $e \in E(G)$، گراف $G - e$ گرافی با مجموعه‌ی رأس‌های $V(G)$ و مجموعه‌ی یال‌های $E(G) - \{e\}$ است.

تعریف ۸.۱.۱. گراف $G = (V, E)$ را گراف کامل گوییم، هرگاه هر دو رأس متمایز آن با هم مجاور باشند. اگر $|V(G)| = n$، گراف کامل G را با K_n نشان می‌دهیم. گرافی که هیچ یالی نداشته باشد را گراف تهی گوئیم.

تعریف ۹.۱.۱. یک گشت از طول k در یک گراف بی‌سوی G، یک دنباله‌ی متناوب $v_۱, e_۱, v_۲, ..., v_k, e_k, v_{k+۱}$ از رأس‌های $v_۱, v_۲, ..., v_k, v_{k+۱}$ و یال‌های $e_۱, e_۲, ..., e_k$ است، به‌طوری که برای هر $i = ۱, ۲, ..., k$، دو رأس v_i و $v_{i+۱}$، دو سر متمایز یال e_iباشند. در این تعریف می‌گوییم گشت در رأس $v_۱$شروع و در رأس $v_{k+۱}$پایان می‌یابد. در یک گراف ساده، یک گشت با دنباله‌ی رأس‌های آن مشخص می‌گردد. به گشتی که دارای یال تکراری نباشد، گذر و به گذری که رأس تکراری نداشته باشد، مسیر و به مسیری که ابتدا و انتهای یکسان داشته باشد، دور می‌گوییم. یک مسیر به طول $n - ۱$ و یک دور به طول n را به ترتیب باP_n و C_n نمایش می‌دهیم.

تعریف ۱۰.۱.۱. گرافی را که بین هر دو رأس آن مسیر وجود دارد همبند و در غیر این صورت ناهمبند گوییم. هر زیر گراف همبند ماکزیمال از یک گراف را یک مؤلفه می‌گوییم. گراف بدون دور را جنگل و جنگل همبند را درخت می‌گوییم لذا اگر $T = (V, E)$ یک گراف همبند و بدون هیچ دوری باشد، T را یک درخت می‌نامیم.

تعریف ۱۱.۱.۱. گراف سودار G را یک درخت سودار می‌نامیم اگر بدون در نظر گرفتن جهت یال‌ها یک درخت باشد. درخت سودار G را یک درخت ریشه‌دار می‌نامیم اگر رأس r از G وجود داشته باشد به طوری که درجه ورودی r مساوی ۰ و درجه ورودی سایر رئوس غیر از r همگی مساوی ۱ باشد. در این صورت r راریشه درخت G می‌نامیم(گاهی درخت‌های ریشه‌دار را درخت‌های پدری-فرزندی نیز می‌نامند).

دقت کنید که طبق تعریف فوق چون r فقط دارای چند یال خروجی است هر یک از گراف‌هایی که با قطع کردن هر یک از این یال‌ها حاصل می‌شود خود یک درخت ریشه‌دار است، یعنی مفهوم درخت ریشه‌دار یک مفهوم بازگشتی است.

تعریف ۱.۱.۱۲. اگر T یک درخت ریشه‌دار و a یک رأس آن باشد، فرزندان a رئوسی هستند که یالی از a به هر یک از آن‌ها وجود دارد. به همین ترتیب a پدر فرزندان خود است. رئوسی که دارای هیچ فرزندی نیستند را برگ‌های درخت می‌نامیم. برای هر رأس، ارتفاع آن طول بزرگ‌ترین مسیر از آن رأس به یک برگ و عمق آن طول مسیر از ریشه تا آن رأس است. در یک گراف همبند طول کوتاهترین مسیر بین دو رأس u و v را فاصله‌ی بین دو رأس گوییم و آن را با $d(u,v)$ نشان می‌دهیم. بیشترین فاصله‌ی بین رأس‌های گراف را قطر گراف نامیده و آن را با $d(G)$ و یا به طور مختصر با d نمایش می‌دهند. طول کوتاه‌ترین دور از گراف را کمر گراف می‌نامیم.

تعریف ۱.۱.۱۳. اگر $T = (V,E)$ درختی ریشه‌دار و h بالاترین مرتبه‌ای باشد که برگی از T اختیار می‌کند، در این صورت می‌گویند T دارای ارتفاع h است.

تعریف ۱.۱.۱۴. فرض کنیم G، گرافی از مرتبه‌ی n باشد. ماتریس مجاورت وابسته به گراف G، ماتریسی $n\times n$ است که با A_G نمایش داده می‌شود و درایه‌ی (i,j)ام آن، مجاورت رأس v_i و v_j را مشخص می‌کند، به این صورت که اگر v_i و v_j مجاور باشند، آن‌گاه $(A_G)_{i,j} = ۱$ و در غیر این صورت $(A_G)_{i,j} = ۰$. ماتریس مجاورت وابسته به یک گراف ساده، ماتریسی متقارن و حقیقی است، که درایه‌های روی قطر اصلی آن همگی صفر هستند. در صورتی که ابهام ایجاد نشود، این ماتریس را با A نشان می‌دهیم. چند جمله‌ای مشخصه‌ی ماتریس $A_{n\times n}$ عبارت است از چند جمله‌ای $det(xI - A)$، که I ماتریسی $n \times n$ است، به طوری که درایه‌های روی قطر اصلی آن ۱ و بقیه‌ی درایه‌های آن ۰ هستند. چند جمله‌ای مشخصه‌ی ماتریس مجاورت یک گراف را با $P_G(x)$ نشان می‌دهیم و به آن A-چندجمله‌ای مشخصه و به ریشه‌های آن A-مقدارویژه‌ی گراف می‌گوییم.

تعریف ۱.۱.۱۵. برای گراف G از مرتبه‌ی n، ماتریس قطری D، ماتریسی $n \times n$ است

که درایه‌ی (i,i)ام آن درجه‌ی رأس iام و سایر درایه ها ۰ است. ماتریس‌های $D-A$ و $D+A$ را به ترتیب **ماتریس لاپلاسین** و ماتریس لاپلاسین فاقد علامت وابسته به گراف G می‌نامیم و با L_G و Q_G و در صورتی که ابهام ایجاد نشود با L و Q نشان می‌دهیم. ماتریس لاپلاسین و لاپلاسین فاقد علامت وابسته به یک گراف ساده، ماتریس‌هایی متقارن و حقیقی‌اند. چندجمله‌ای مشخصه‌ی ماتریس‌های L و Q به ترتیب عبارتند از $det(xI-L)$ و $det(xI-Q)$ که با $L_G(x)$ و $Q_G(x)$ نشان داده می‌شوند. به این چندجمله‌ای‌ها به ترتیب L-چند جمله‌ای و Q-چندجمله‌ای و به ریشه‌های آن‌ها **L-مقدارویژه** و Q-مقدارویژه گراف می‌گوییم.

تکرار یک مقدارویژه از یک ماتریس در چندجمله‌ای مشخصه‌اش را تکرار جبری (یا بعد جبری) و بعد فضای ویژه‌ی متناظر با آن مقدارویژه را تکرار هندسی (یا بعد هندسی) آن مقدارویژه می‌نامیم.

تعریف ۱۶.۱.۱. ماتریس وقوع رأسی-یالی یا به طور مختصر ماتریس وقوع گراف G نیز ماتریسی $n\times m$ است، که درایه‌ی (i,j)ام آن ۱ است اگر رأس iام بر یال jام واقع باشد و در غیر این صورت ۰ خواهد بود. ماتریس $D_{n\times m}$ را ماتریس وقوع گراف جهت‌دار G گوییم اگر درایه‌ی (i,j)ام این ماتریس به صورت زیر تعریف شود

$$d_{i,j}=\begin{cases} ۱ & \text{اگر } v_i \text{ دم یال } e_j \text{ باشد} \\ -۱ & \text{اگر } v_i \text{ سر یال } e_j \text{ باشد} \\ ۰ & \text{در غیر این صورت} \end{cases}$$

اگر D ماتریس وقوع گراف G (با یک جهت دلخواه روی یال‌های G) باشد، آن‌گاه به سادگی (با مقایسه درایه‌های دو ماتریس در دو طرف تساوی) می‌توان دید که ماتریس لاپلاسین در تساوی $L=DD^T$ صدق می‌کند.

تعریف ۱۷.۱.۱. فرض کنیم L، ماتریس لاپلاسین گراف G باشد. با توجه به تعریف ماتریس لاپلاسین، این ماتریس یک ماتریس حقیقی و متقارن است. بنابراین مقادیرویژه‌ی آن حقیقی

هستند. فرض کنیم $\mu_1, \mu_2, ..., \mu_n$ مقادیرویژه‌ی L باشند. مجموعه‌ی مقادیرویژه‌ی L را طیف لاپلاسین (یا به‌طور مختصر L-طیف) G گوییم و آن را با $Spec_L(G)$ نشان می‌دهیم.

تعریف ۱.۱.۱۸. یک ماتریس مختلط مربعی A را هرمیتی نامند اگر و تنها اگر $A = A^*$. یادآور می‌شویم که A^* ترانهاده‌ی مزدوج ماتریس مختلط A می‌باشد یعنی $A^* = (\overline{A})^T$.

تعریف ۱.۱.۱۹. کاترپیلار که در زبان فارسی به معنای کرم پروانه می‌باشد درختی است که بدین صورت ساخته می‌شود که یک مسیر P_b را در نظر می‌گیریم و حداقل یک برگ به هر گره در این مسیر می‌افزاییم. گره‌های در مسیر P_b را، گره‌های پشتیبان و برگ‌های الحاقی را پایه‌ها می‌نامیم.

تعریف ۱.۱.۲۰. کاترپیلارهایی که فقط دارای یک گره پشتیبان و k پایه می‌باشند را ستاره می‌نامیم.

۱.۲ تاریخچه

در این پایان‌نامه، مجموع $S_k(G) = \sum_{i=1}^{k} \mu_i$ از k تا L-مقدارویژه‌ی بزرگ‌تر گراف G در نظر گرفته می‌شود. بروئر [1] [۳]، طی حدسی بیان می‌کند که با در نظر گرفتن گراف $G = (V, E)$ با n رأس و عدد صحیح $k \in \{1, ..., n\}$، مجموع $S_k(G)$ در نامساوی زیر صدق می‌کند

$$S_k(G) \leq |E| + \binom{k+1}{2},$$

برای $k = 1$، حدس او از نامساوی معروف $\mu_1(G) \leq |V(G)|$ پیروی می‌کند، او موارد $k = n$ و $k = n - 1$ را نیز به آسانی نشان داده است. هائمرس [2] نیز به همراه دیگران [۱۰]، حدس را برای $k = 2$ به اثبات رسانده‌اند. علاوه بر این، آنان اثبات کردند که اگر T یک درخت با n رأس باشد و $1 \leq k \leq n$، آن‌گاه مجموع $S_k(T)$ به صورت زیر کراندار خواهد شد

$$S_k(T) \leq (n-1) + 2k - 1, \qquad 1 \leq k \leq n \tag{۱.۱}$$

[1] Brouwer
[2] Haemers

لذا نتیجه خواهیم گرفت که حدس بروئر در حالت کلی برای درخت‌ها صحیح می‌باشد(چون $\binom{k+1}{2} = \frac{k(k+1)}{2} \geq 2k-1$)

در یک راستای مشابه، ژو [۳] [۲۰] مجموع توان‌های L-مقادیرویژه از یک گراف را در نظر گرفته است.

در این پایان‌نامه، همچنین مجموع $S_k(T) = \sum_{i=1}^{k} \mu_i$ از بزرگ‌ترین L-مقادیرویژه درخت T(یادآوری می‌کنیم که L-مقادیرویژه به مقادیرویژه‌ی ماتریس لاپلاسین گفته می‌شود) را مطالعه می‌کنیم. ما با دقتی بالاتر، کران بالا در عبارت (۱.۱) را برای هر $k > 1$ بهبود می‌بخشیم. این مهم با اثبات قضیه زیر حاصل می‌شود.

قضیه ۱.۲.۱. *فرض کنیم T یک درخت با n رأس باشد و همچنین فرض کنیم $1 \leq k \leq n$. در این صورت مجموع $S_k(T)$ از k تا L-مقدارویژه بزرگ‌تر T در نامساوی زیر صدق می‌کند*

$$S_k(T) \leq (n-1) + 2k - 1 - \frac{2k-2}{n}, \tag{۲.۱}$$

به علاوه تساوی فقط وقتی برقرار خواهد شد که $k = 1$ و T یک ستاره روی n رأس باشد.

از این گذشته، قضیه (۱.۲.۱) به ما این اجازه را می‌دهد که نشان دهیم، میان همه درخت‌های با n رأس، ستاره بالاترین انرژی لاپلاسین را دارد، که این همان حدس رادنکوویچ[۴] و گاتمن[۵] [۱۵] می‌باشد. این نتیجه، از نتایج مهم این پایان‌نامه محسوب می‌شود که در اواخر فصل چهار به آن اشاره شده است.

۳.۱ لم‌ها و قضایای مورد نیاز

قضیه ۱.۳.۱. *اگر $T = (V, E)$ یک گراف با n رأس $(n \geq 2)$ و m یال باشد آن‌گاه جملات زیر پیرامون T با یکدیگر معادل هستند*

[۳] Zhou
[۴] Radenkovic
[۵] Gutman

۱. T یک درخت است.

۲. T هیچ دوری ندارد و $n-۱$ یال دارد.

۳. T یک گراف همبند است و $n-۱$ یال دارد.

۴. اگر یک یال دیگر به گراف همبند T بیافزاییم آن‌گاه در T دور به وجود می‌آید.

۵. اگر یک یال از گراف همبند T حذف کنیم آن‌گاه T ناهمبند خواهد شد.

۶. هر دو رأس دلخواه T با یک و فقط یک مسیر به هم متصل می‌شوند.

برهان. اثبات در کتاب [۴] آمده است. □

ملاحظه ۲.۳.۱. *مجموع مقادیرویژه یک ماتریس A اثر ماتریس A نامیده می‌شود و توسط $trace(A)$ یا $Tr(A)$ نمایش داده می‌شود. اگر $A=(a_{ij})$ ماتریسی $n\times n$ با چندجمله‌ای مشخصه $\prod_i(x-\lambda_i)$ باشد آن‌گاه اثر ماتریس A مجموع عناصر قطری A می‌باشد یعنی*

$$trace(A)=\sum_i \lambda_i = a_{۱۱}+...+a_{nn}.$$

قضیه ۳.۳.۱. (*قضیه‌ی اول گرشگورین* [۶]) *فرض می‌کنیم A ماتریسی $n\times n$ به صورت $A=(a_{ij})_{n\times n}$ باشد. قرار می‌دهیم*

$$r_i=\sum_{j=۱,j\neq i}^{n} |a_{ij}| \ , \quad i=۱,\dots,n$$

آنگاه هر مقدارویژه‌ی A حداقل در یکی از نامساوی‌های زیر صدق می‌کند

$$|\lambda-a_{ii}|\leqslant r_i \ , \quad i=۱,\dots,n$$

به بیان دیگر همه‌ی مقادیرویژه A را می‌توان در اجتماع قرص‌های زیر پیدا کرد

$$\{z:|z-a_{ii}|\leq r_i, i=۱,...,n\},$$

که به آن‌ها قرص‌های گرشگورین می‌گوییم.

[۶] Gershgorin's First Theorem