بسم الله الرحمن الرحيم

مدیریت تحصیلات تکمیلی

تعهدنامه اصالت اثر

اینجانب مهدی امام رضایی متعهد می‌شوم که مطالب مندرج در این پایان نامه حاصل کار پژوهشی اینجانب است و دستاوردهای پژوهشی دیگران که در این پژوهش از آن‌ها استفاده شده است، مطابق مقررات ارجاع و در فهرست منابع و مأخذ ذکر گردیده است. این پایان نامه/ رساله قبلاً برای احراز هیچ مدرک هم سطح یا بالاتر ارایه نشده است. در صورت اثبات تخلف (در هر زمان) مدرک تحصیلی صادر شده توسط دانشگاه از اعتبار ساقط خواهد شد.

نام و نام‌خانوادگی دانشجو

امضاء

تهران- لویزان- کدپستی16788- صندوق پستی163-16785 تلفن9-22970060(داخلی2347) نمابر22970011
پست الکترونیکی sru@sru.ac.ir

دانشگاه تربیت دبیر شهید رجائی

دانشکده علوم پایه

بررسی همبندی جبری در گراف‌ها

نگارش :

مهدی امام رضایی

استاد راهنما: دکتر حمیدرضا میمنی

استاد مشاور: عبدالرضا اسکویی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته ریاضیات کاربردی

شهریور 1390

تاییدیه هیئت داوران

تقدیم به

پدر و مادر عزیزم که برایم مستحکم‌ترین تکیه‌گاه در سخت‌ترین لحظات زندگی بوده‌اند.

سپاسگزاری

مراتب تقدیر و تشکر خود را نثار استاد ارجمند جناب دکتر حمیدرضا میمنی می‌نمایم، که همچون برادری بردبار هدایت این پژوهش را بر عهده داشتند.

چکیده

امروزه نظریه گراف به عنوان یکی از شاخه‌های پرکاربرد ریاضیات و در واقع به عنوان پلی مستحکم میان ریاضیات محض و ریاضیات کاربردی شناخته می‌شود. به همین منظور دانشمندان و پژوهشگران نظریه گراف در کنار تلاش‌هایی که برای شناسایی پارامترهای گوناگون گراف‌ها صورت می دهند؛ همواره کاربرد این نتایج را در زمینه‌های گوناگون مانند فیزیک و شیمی، نظریه شبکه‌ها و ارتباطات؛ دنبال می‌کنند. از جمله موضوعاتی که در چند دهه اخیر توجه ویژه‌ای را به خود جلب کرده‌اند می‌توان به ماتریس لاپلاسین یک گراف و چند جمله‌ای مشخصه آن و ضرائب و ریشه‌های این چند جمله‌ای که مقادیر ویژه لاپلاسین نامیده می‌شوند و به طور خاص به دومین مقدار ویژه کوچک ماتریس لاپلاسین که به همبندی جبری معروف است؛ می‌توان اشاره کرد. در این نوشتار به بررسی این پارامترها در سه خانواده از گرافها پرداخته شده و برخی نتایج بدست آمده در رابطه با ضرائب چند جمله‌ای مشخصه لاپلاسین و نیز همبندی جبری، ارائه شده است.

واژه‌های کلیدی:

ماتریس لاپلاسین، ضرائب لاپلاسین، چند جمله‌ای مشخصه، مولفه پرون، ماتریس گلوگاه، گراف‌های بدون دور، گراف‌های تک دوری، گراف‌های دو دوری.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول:مقدمات و مفاهیم اولیه

فصل دوم:ضرائب لاپلاسین در گراف ها

فصل سوم:همبندی جبری در خانواده هایی از گراف ها

ادامه‌ی فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

فهرست شکل ها

عنوان صفحه

ادامه‌ی فهرست شکل ها

عنوان صفحه

پیشگفتار:

در چند دهه اخیر جبر و جبر خطی به کمک نظریه گراف آمده و ابزارهای مفیدی را برای پژوهش در زمینه های گوناگون نظریه گراف فراهم کرده اند. مخصوصا مطالعۀ گراف ها با استفاده از ماتریس هایی که به آن ها نسبت داده می شوند بسیار مورد توجه قرار گرفته است. ماتریس مجاورت و ماتریس لاپلاسین از جمله ماتریس هایی هستند که به گراف نسبت داده می شوند. بررسی این ماتریس ها و به خصوص مقادیر ویژۀ آن ها نتایج شگفت انگیزی در رابطه با ویژگی های ساختاری گراف ها در پی داشته است.

چند جمله ای مشخصۀ ماتریس لاپلاسین علاوه بر این که به لحاظ زمینه ای برای شناسایی پارامترهای لاپلاسین یک گراف ارزشمند است؛ به لحاظ کاربردی نیز برای شناسایی بهتر گراف های مولکولی بسیار مهم است. پژوهش های متعددی که درباره این چند جمله ای و کاربردهای آن در تخمین انرژی های مولکولی صورت گرفته مهر تاییدی بر اهمیت این چند جمله ای و ضرائب آن است. ثابت شده است که مقایسۀ انرژی بین گراف های مولکولی با مقایسۀ ضرائب چند جمله ای مشخصۀ لاپلاسین آن ها رابطه دارد. به همین منظور یافتن یک ترتیب مناسب برای این ضرائب در خانواده های گوناگون گراف ها به یکی از موضوعات مورد علاقه پژوهشگران تبدیل شده است.

مقادیر ویژۀ ماتریس لاپلاسین نیز در زمینه های مختلفی از ریاضیات به ویژه در ریاضیات گسسته و بهینه سازی ترکیباتی کاربرد دارد. اگرچه ماتریس مجاورت و مقادیر ویژه آن بیش تر از ماتریس لاپلاسین مورد بررسی و پژوهش قرار گرفته اند اما بنا به پژوهش های صورت گرفته مقادیر ویژه لاپلاسین، شهودی تر و بسیار مهم تر از طیف ماتریس مجاورت هستند.

بین تمام مقادیر ویژۀ لاپلاسین گراف، یکی از محبوب ترین ها دومین مقدار ویژه کوچک لاپلاسین است که توسط فیدلر، همبندی جبری نامیده شد. اهمیت آن به دلیل این واقعیت است که همبندی جبری پارامتر بسیار مناسبی برای سنجیدن چگونگی همبندی یک گراف است. به عنوان مثال این قضیه وجود دارد که یک گراف همبند است اگر و تنها اگر همبندی جبری آن مخالف صفر باشد. اخیرا همبندی جبری بیش تر مورد توجه قرار گرفته؛ به طوری که پژوهش هایی در رابطه با همبندی جبری، پیرامون کاربردهای آن در مسائل دشوار نظریه گراف مانند تشریح ساختار گراف ها، گراف های وزن دار، قدر مطلق همبندی جبری، عدد هم پیرامونی، جنس گراف و همچنین کاربردهای همبندی جبری در مسائل بهینه سازی ترکیباتی مانند مسئله برش ماکسیمال، مسئله فروشنده دوره گرد و غیره صورت گرفته است. در فصل اول به بیان مقدمات و مفاهیم اولیه پرداخته می شود که انگیزه ای برای ورود به مباحث فصل های بعد خواهد بود. در فصل دوم سه خانواده از گراف ها را از نظر مرتب سازی ضرائب لاپلاسین و تعیین بیشترین و کمترین ضرائب لاپلاسین در هر خانواده مورد

مطالعه قرار خواهیم داد. در فصل سوم نیز همان خانواده ها را به لحاظ همبندی جبری بررسی خواهیم کرد و نهایتا در فصل چهارم به بیان اجمالی برخی نتایج بدست آمده درباره همبندی جبری و ارائه کران های متنوع برای این پارامتر خواهیم پرداخت.

فصل اول

مقدمات و مفاهیم اولیه

مقدمه

در این فصل با مفاهیم ابتدایی نظریه گراف، از قبیل تعریف گراف، رأس، یال، گراف همبند، مسیر، جنگل، درخت و تعاریف اولیه گراف ها آشنا خواهیم شد. سپس با کمک این مفاهیم، ماتریس لاپلاسین یک گراف و چند جمله ای مشخصه ماتریس لاپلاسین یک گراف را تعریف کرده؛ و بخشی از ویژگی های آن را بیان خواهیم کرد.

1.1. تعاریف مقدماتی نظریه گراف

تعریف: گراف G یک مجموعه ناتهی و متناهی $V(G)$ از عناصری به نام رأس؛ و یک مجموعه $E(G)$ از زیر مجموعه‌های دو عنصری $V(G)$ است.

به هر یک از اعضای $E(G)$ یک یال گفته می‌شود. دقت کنید که ممکن است $E(G)$ تهی باشد. اگر $e=uv$ یالی از گراف G باشد، می‌گوییم u و v در G مجاورند؛ یا یال e دو رأس u و v را به هم متصل می‌کند.

تعریف: تعداد رئوس متصل به رأس v را درجه رأس v می‌نامند و آن را با $\deg(v)$ نمایش می‌دهند. در این نوشتار گاهی به منظور جلوگیری از پراکندگی و ابهام، برای نمایش رئوس و یال‌ها از اندیس استفاده شده است. به طور مثال v_1 و v_2 به ترتیب به معنی رئوس شماره 1 و2 از گراف مورد نظر هستند. به طریق مشابه e_1 و e_2 به ترتیب به معنای یال‌های شماره 1 و 2 می‌باشند.

تعریف: گرافی که درجه تمام رئوسش برابر r باشد، گراف r -منظم نامیده می‌شود.

تعریف: یک گشت در گراف G، یک دنباله متناوب از رئوس و یال‌ها به فرم $W: v_0e_1v_1e_2v_2...e_nv_n$ است، که ابتدا و انتها آن رئوس هستند و به ازای $i=1,...,n$ داریم: $e_i=v_{i-1}v_i$.

به منظور رعایت اختصار در دنباله فوق از نوشتن e_i ها می‌توان خودداری کرد.

تعریف: یک دور، یک گشت به فرم $v_0v_1....v_n$ است به طوری که $v_0=v_n$؛ و نیز رئوس $v_1,v_2,...,v_{n-1}$ متمایز باشند.

تعریف: یک گشت که رأس تکراری نداشته باشد، یک مسیر نامیده می‌شود.

تعریف: مسیر $P:v_1v_2...v_n$ را یک مسیر آویزان می‌نامیم. هرگاه $\deg(v_n)=1$ و بقیه رئوس بجز احتمالاً v_1 از درجه دو باشند. به طور خاص یال $e=uv$ را یک یال آویزان و یا یک برگ مـی‌نـامیم، هرگاه $\deg(v)=1$.

تعریف: فاصله دو رأس u و v در گراف G که آن را با نماد $d(u,v)$ نمایش می‌دهیم؛ عبارت است از طول کوتاه ترین مسیر موجود از u به v.

تعریف: فرض کنید v رأسی از گراف G باشد در این صورت:

- خروج از مرکز به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$e(v)=\max\{d(u,v)\mid u\in V(G)\}.$$

- قطر گراف به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$diam(G)=\max\{e(v)\mid v\in V(G)\}.$$

تعریف: گراف G را همبند می‌گوئیم هرگاه بـه ازای هـر دو رأس دلخـواه u و v از گـراف G، مسیری بین u و v موجود باشد. در غیر اینصورت گراف G را ناهمبند می‌گوئیم.

تعریف: یال $e=uv$ را یک یال برشی می‌گویند هرگاه با حذف آن، گراف حاصل ناهمبنـد باشـد. بـه طور مشابه رأس v را یک رأس برشی می‌نامند. هرگاه با حذف آن، گراف حاصل ناهمبند شود.

تعریف: به کمترین تعداد رئوسی که با حذف آن‌ها، گراف باقیمانده ناهمبند شود؛ همبندی رأسی گراف می‌گویند و آن را با $v(G)$ نمایش می‌دهند. به طور مشابه به کمتـرین تعـداد یـال‌هـایی کـه بـا حذف آنها، گراف ناهمبند می‌شود؛ همبندی یالی گراف می‌گویند و آن را با $e(G)$نمایش می‌دهند.

تعریف: هر گراف فاقد دور را یک جنگل می‌نامند.

تعریف: هر گراف همبند و فاقد دور را یک درخت می‌نامند.

تعریف: فرض کنید Gیک گراف باشد. زیر گراف فاقد دور از گراف G، کـه شـامل کلیـه رئـوس G باشد؛ یک جنگل فراگیر از G نامیده می‌شود. به طور مشابه زیر گراف همبند و فاقد دور از گراف G، که شامل کلیه رئوس G باشد؛ درخت فراگیر نامیده می‌شود.

تعریف: یک زیرتقسیم از گراف G، گرافی است که با اضافه کردن رئوسی از درجه دو به یال‌های G بدست می‌آید. زیر تقسیم گراف G را با $S(G)$ نمایش می‌دهیم.

2.1. ماتریس لاپلاسین یک گراف

فرض کنید که $G(V,E)$ یک گراف بدون جهت ساده با $|V|=n$ رأس و $|E|=m$ یال باشد. فرض کنید رئوس G به صورت $v_1,v_2,...,v_n$ برچسب گذاری شده باشند. ماتریس مجاورت گراف G به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$A(G)=\left[a_{ij}\right]=\begin{cases} a_{ij}=1 & v_iv_j\in E \\ a_{ij}=0 & v_iv_j\notin E \end{cases}$$

ماتریس لاپلاسین گراف G که آن را با $L(G)$ نمایش می‌دهند به صورت $L(G)=D(G)-A(G)$ تعریف می‌شود که در آن $D(G)$ یک ماتریس قطری $n\times n$ است که هر درایه روی قطر اصلی آن برابر با درجه رأس نظیرش در گراف G است. چند جمله‌ای مشخصه لاپلاسین گراف G که آن را با نماد $p(G,x)$ نمایش می‌دهیم چند جمله‌ای مشخصه ماتریس لاپلاسین گراف G است.

$$p(G,x)=\det(xI_n-L(G))=\sum_{k=0}^{n}(-1)^k c_k x^{n-k}$$

هر یک از ضرائب این چند جمله‌ای را یک ضریب لاپلاسین گراف G می‌نامند. با بهره گیری از نتیجه زیر از کلمانز و چلنوکوف[1] می‌توان ضرائب لاپلاسین گراف G $(c_k(G))$ را بر حسب ساختار زیر درخت‌های گراف G بیان کرد.

فرض کنید F یک جنگل فراگیر از G با مولفه‌های T_i باشد $(1\le i\le k)$ تعداد رئوس T_i را n_i در نظر بگیرید و قرار دهید: $\gamma(F)=\sum_{i=1}^{k}n_i$.

قضیه 1.1 [1]: ضرائب لاپلایسن $c_{n-k}(G)$ از تساوی زیر بدست می‌آیند:

$$c_{n-k}(G)=\sum_{F\in F_k}\gamma(F)$$

که در آن F_k مجموعهٔ تمام جنگل های فراگیر G است که شامل دقیقا k مولفه هستند.با استفاده از این قضیه در حالت های خاص داریم: $c_0=1$, $c_n=0$, $c_1=2m$, $c_{n-1}=n\tau(G)$ که در آن $\tau(G)$ تعداد درخت های فراگیر G است. علاوه بر این اگر G یک درخت باشد ضریب $c_{n-2}(G)$ برابر اندیس وینر آن خواهد بود. (اندیس وینر برابر است با حاصل جمع فواصل بین تمامی زوج‌های رئوس G)

$$c_{n-2}(T)=W(T)=\sum_{u,v\in V(G)} d(u,v)$$

ماتریس لاپلاسین یک گراف، یک ماتریس متقارن با مقادیر ویژهٔ نامنفی است. در واقع اگر این مقادیر ویژه را با $(1\le i\le n)\mu_i$ نمایش دهیم؛ می توانیم آن ها را به صورت زیر مرتب سازی کنیم:

$$\mu_1(G)\ge\mu_2(G)\ge\ldots\ge\mu_n(G)\ge 0$$

ماتریس لاپلاسین بدون علامت G که آن را با $Q(G)$ نمایش می دهیم به صورت $Q(G)=D(G)+A(G)$ تعریف می شود. این ماتریس نیز دارای مقادیر ویژهٔ نامنفی $\mu'_1\ge\mu'_2\ge\ldots\ge\mu'_n\ge 0$ است.

گاتمن[2و3] اخیرا مفهوم انرژی وقوع یک گراف را براساس مقادیر ویژه ماتریس لاپلاسین بی نشان پایه ریزی کرده است. طبق تعریف، انرژی وقوع یک گراف عبارت است از مجموع مجذورات مقادیر ویژهٔ ماتریس لاپلاسین بی نشان به عبارت دیگر:

$$IE(G)=\sum_{i=1}^{n}\sqrt{\mu'_i}$$

به طور مشابه انرژی شبه لاپلاسین گراف براساس مقادیر ویژه ماتریس لاپلاسین گراف تعریف می شود. در واقع:

$$LEL(G)=\sum_{i=1}^{n-1}\sqrt{\mu_i}$$

یکی از نکات قابل توجه درباره این دو انرژی این است که اگر گراف Gدو بخشی باشد آن گاه مجموعهٔ مقادیر ویژه (طیف) های $Q(G)$ و $L(G)$ یکسان خواهند بود و لذا $LEL(G)=IE(G)$.

براساس پژوهش های صورت گرفته LEL قادر است برخی از پارامترهای دسته های بزرگی از گراف های مولکولی را برآورد کند. به عنوان مثال عدد اکتان، پارامتر AF، آنتروپی، نقطه جوش، نقطه ذوب و غیره از جمله پارامترهایی هستند که از طریق LEL مورد بررسی قرار گرفته اند.

استوانوویچ[4] در پژوهش هایش رابطه ای بین $LEL(G)$ و ضرائب لاپلاسین ارائه کرد که در جایگاه خود بسیار حائز اهمیت است.

قضیه 2.1[4]: فرض کنید H,G دو گراف nراسی باشند. اگر $c_k(G)\le c_k(H)$ برا ی $k=1,2,....,n$؛ آن گاه $LEL(G)\le LEL(H)$. علاوه بر این اگر به ازا ی kای $c_k(G)<c_k(H)$آن گاه $LEL(G)<LEL(H)$.

بر پایه این قضیه یافتن گراف هایی که در خانواده های خود بیشترین (کمترین) LELرا دارند از طریق یافتن گراف هایی که در خانواده خود بیشترین (کمترین) ضرائب لاپلاسین را دارند؛ ممکن می شود.

همچنین بررسی مجموعهٔ مقادیر ویژهٔ لاپلاسین (طیف لاپلاسین) گراف ها اطلاعات خوبی از ویژگی‌های آن گراف ها بدست می دهد.

قضیه 3.1 [5]: فرض کنید G یک گراف ساده n راسی باشد. ماتریس لاپلاسین گراف Gدارای خواص زیر است:

(1) $L(G)$ دارای مقادیر ویژه حقیقی و نامنفی است.

(2) کوچک ترین مقدار ویژه صفر است و $(1,1,1,...,1)^T$ یک بردار ویژه نظیر این مقدار ویژه است.

(3) تکرر صفر به عنوان مقدار ویژهٔ $L(G)$ برابر با تعداد مولفه های همبندی Gاست.

(4) $\mu_1\le n$ و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر متمم Gناهمبند باشد.

(5) $\sum_{i=1}^{n}\mu_i=2|E(G)|=\sum_{v\in V(G)}d_v$؛ که در آن d_v درجهٔ راس vاست.

(6) اگر G دارای ماکزیمم درجهٔ $\Delta>0$ باشد آن گاه $\mu_1\ge\Delta+1$ و اگر G همبند باشد تساوی برقرار است اگر و تنها اگر $\Delta=n-1$.

در میان تمام مقادیر ویژه لاپلاسین یک گراف، دومین مقدار ویژهٔ کوچک لاپلاسین (μ_{n-1}) بیش ترین توجه را به خود جلب کرده است با استفاده از قضیه معروف ماتریس- درخت به کمک μ_{n-1} می توان همبندی یا ناهمبندی گراف را تشخیص داد.

قضیه 4.1[6] : (ماتریس- درخت)

تعداد درخت های فراگیر گراف n راسی G که با $\tau(G)$ نمایش داده می شود برابر است با:

$$\tau(G)=\frac{1}{n}\mu_1(G)...\mu_{n-1}(G)$$

که در آن $\mu_i(G)$ و $n-1$ و ....,$i=1$ مقادیر ویژه ماتریس لاپلاسین گراف Gهستند.

از قضیه ماتریس- درخت این نتیجه حاصل می شود که گراف Gهمبند است اگر و تنها اگر $\mu_{n-1}(G)\neq 0$ (درواقع $\mu_{n-1}(G)>0$). از آن جایی که این کمیت ، همبندی گراف را می سنجد لذا فیدلر[7] آن را *همبندی جبری* گراف نامید.