



دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده علوم ریاضی

در باره‌ی اندیس‌های توپولوژیک گراف لوله‌های نانو و حاصل ضرب ریشه‌ای گراف‌ها

رساله دکتری ریاضی

عباس حیدری

استاد راهنما

دکتر بیژن طائری

دانشگاه صنعتی اصفهان
دانشکده علوم ریاضی

رساله‌ی دکتری ریاضی

تحت عنوان

درباره‌ی اندیس‌های توپولوژیک لوله‌های نانو و حاصل ضرب ریشه‌ای گراف‌ها

در تاریخ ۱۳۸۷/۵/۱۳ توسط کمیته تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت.

- | | |
|--|-------------------------------|
| دکتر بیژن طائری | – استاد راهنمای رساله |
| دکتر علیرضا اشرفی | – استاد مشاور رساله |
| دکتر محمدرضا درفشه (دانشگاه تهران) | – اساتید داور خارج از دانشکده |
| دکتر علی ایرانمنش (دانشگاه تربیت مدرس (تهران)) | |
| دکتر بهناز عمومی | – اساتید داور داخل دانشکده |
| دکتر غلامرضا امیدی | |

دکتر رسول نصر اصفهانی

سرپرست تحصیلات تکمیلی دانشکده

در اینجا لازم می‌دانم از استاد گرامی خود جناب آقای دکتر طائری که در تمام مدت تحصیل در این دوره و تهیه این رساله صبورانه مشوق و حامی اینجانب بوده و زحمات زیادی را در این زمینه متقبل شده‌اند کمال تشکر و قدردانی را داشته باشم. همچنین از راهنمای‌های ارزنده جناب آقای دکتر اشرفی از دانشگاه کاشان در تهیه این رساله نیز کمال تشکر را دارم. در پایان از تمامی دوستان دوران تحصیل که با لطف و محبت خود من را در این راه کمک نموده‌اند سپاسگذاری می‌کنم. به ویژه از حمایت و لطف بی‌کران خانواده و همسرم تشکر و سپاس فراوان دارم.

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات و نوآوری‌های ناشی از تحقیق موضوع این پایان‌نامه متعلق به دانشگاه صنعتی اصفهان است.

فهرست مطالب

۲	فصل اول مقدمه
۲	۱-۱ پیشینه تاریخی
۵	۲-۱ تعاریف و مفاهیم اولیه
۱۵	فصل دوم اندیس‌های توپولوژیک گراف $TUC_4C_8(R)$
۱۶	۱-۲ اندیس وینر گراف $TUC_4C_8(R)$
۳۲	۲-۲ اندیس شولتز گراف $TUC_4C_8(R)$
۳۳	۳-۲ اندیس هایپر وینر گراف $TUC_4C_8(R)$
۳۵	۴-۲ اندیس سگد گراف $TUC_4C_8(R)$
۴۸	فصل سوم اندیس‌های توپولوژیک گراف $TUC_4C_8(S)$
۴۹	۱-۳ اندیس وینر گراف $TUC_4C_8(S)$
۵۵	۲-۳ اندیس شولتز گراف $TUC_4C_8(S)$
۵۶	۳-۳ اندیس سگد گراف $TUC_4C_8(S)$
۶۲	فصل چهارم حاصل ضرب ریشه‌ای گراف‌ها
۶۳	۱-۴ اندیس وینر حاصل ضرب ریشه‌ای گراف‌ها
۶۶	۲-۴ چندجمله‌ای مشخصه و طیف حاصل ضرب ریشه‌ای گراف‌ها
۷۸	۳-۴ حاصل ضرب ریشه‌ای گراف‌های کامل
۹۰	فصل پنجم درخت‌های بت تعمیم یافته
۹۰	۱-۵ چندجمله‌ای‌های مشخصه و طیف درخت بت تعمیم یافته

۱

۲-۵ اندیس وینر درخت‌های بت تعمیم یافته ۹۷

۱۰۰ فهرست نشانه‌ها

۱۰۱ واژه‌نامه انگلیسی به فارسی

۱۰۵ واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

۱۰۹ مراجع

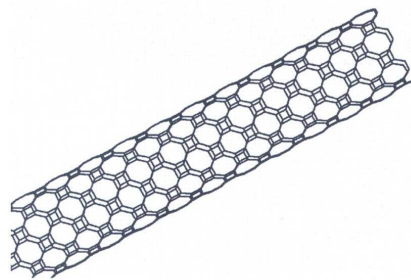
فصل ۱

مقدمه

۱-۱ پیشینه تاریخی

در سال‌های اخیر استفاده از مفاهیم ریاضی در بررسی ساختار عناصر و ترکیبات شیمیایی به منظور تعیین خواص آنها به شکل گسترده‌ای افزایش یافته است. این مفاهیم بیشتر به منظور مطالعه شبکه‌ی منتسب به یک مولکول به کار گرفته می‌شوند. شبکه‌ی مولکولی در واقع یک گراف است که رئوس آن اتم‌ها و پیوندهای موجود در این مولکول یال‌های آن گراف را تشکیل می‌دهند. بررسی تقارن‌های موجود در یک مولکول با استفاده از مباحث نظریه گروه‌ها از قدمت زیادی برخوردار است. در سال‌های اخیر مطالعه شبکه‌های مولکولی با استفاده از مباحث نظریه گراف گسترش چشمگیری داشته است. یکی از مباحث مطرح در این زمینه اندیس توپولوژیک گراف است که به عنوان توصیفگر ساختاری معرفی می‌شود. اندیس توپولوژیک یک گراف، توصیفگری عددی است که تحت یکسانی گراف‌ها پایا و مبین ویژگی خاصی از آن گراف می‌باشد. به عنوان مثال اندیس توپولوژیک یک گراف مولکولی ممکن است مشخص کننده‌ی یک خاصیت شیمیایی یا فیزیکی از آن مولکول باشد. مزیت مهم این توصیفگر نسبت به توصیفگرهای دیگر مثل توصیفگرهای هندسی و کوانتومی این است که محاسبه این توصیفگر برای شبکه‌ها با ساختار مختلف بسیار ساده‌تر است. اندیس‌های توپولوژیک عموماً بر مبنای مفهوم فاصله در گراف تعریف می‌شوند. قدیمی‌ترین اندیس توپولوژیک در سال ۱۹۴۷ توسط یک شیمیدان به نام هارولد وینر^۱ به منظور تعیین

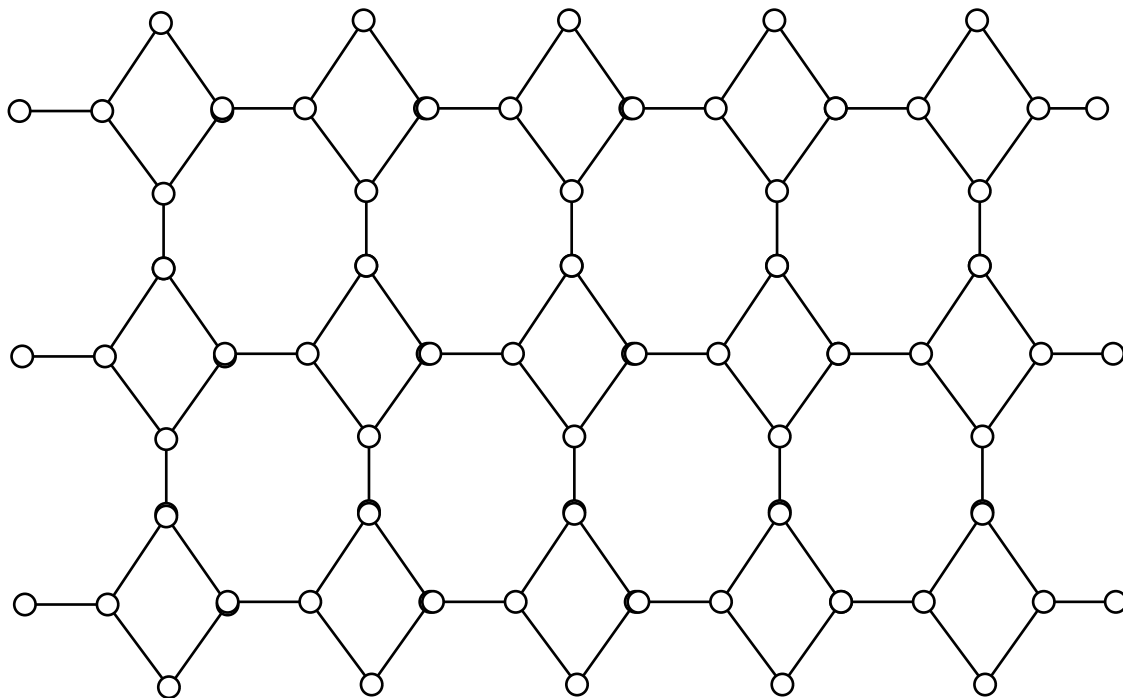
^۱ Harold Wiener

شکل ۱-۱: لوله نانو $TUC_4C_8(S)$

خواص نوعی از آلکان‌ها تعریف شد. او توانست رابطه‌ای خطی بین این اندیس و نقطه جوش این آلکان‌ها بدست آورد [۴۳، ۴۴، ۴۵]. اما تعریف دقیق این اندیس بر مبنای مفاهیم نظریه گراف در سال ۱۹۷۱ توسط هوسویا^۲ برای گراف‌های دلخواه معرفی شد [۲۷]. اندیس‌های دیگر نیز بعدها برای مطالعه خواص شیمیایی و فیزیکی مواد معرفی شدند. امروزه در علوم مختلف مثل شیمی، فیزیک، زیست‌شناسی و داروسازی کاربرد اندیس‌های توپولوژیک دیده می‌شود. از جمله ساختارهایی که به طور گسترده در این زمینه مورد بررسی قرار گرفتند گراف‌های منتسب به ساختارهای نانو می‌باشند. در سال ۱۹۹۱ لوله‌های نانو^۳ به عنوان ساختارهای چند دیواره توسط ایجیما^۴ کشف شدند [۳۳، ۳۴]. این مواد خواص مکانیکی قابل توجهی را از خود بروز دادند. مطالعات آزمایشگاهی نشان داد که آنها به مجموعه‌ی مواد سخت و ارتجاعی متعلق می‌باشند. این مشخصه‌های مکانیکی، نانو لوله‌ها را در ردیف ترکیبات پیشرفته قرار می‌دهد. ضریب سختی و استحکام کشسانی بالا در لوله‌های نانو باعث شده است که در صنایع مختلف کاربردهای زیادی داشته باشد. معروف‌ترین نوع لوله‌های نانو، گرافی است که در شبکه‌ی آنها اتم‌ها آرایش شش ضلعی دارند. این لوله‌ها با توجه به نوع آرایش اتم‌ها به سه دسته مختلف تقسیم و با نماد TUC_6 نشان داده می‌شوند. بررسی خواص مختلف ساختارهای نانو با استفاده از اندیس‌های توپولوژیک و محاسبه این اندیس‌ها در طی چند سال اخیر مورد توجه قرار گرفته است. در این رابطه می‌توان به مقالات برجسته‌ای از گوتمن^۵، دیودی^۶ [۱۲]-[۷] و اشرفی [۱، ۴۶] اشاره کرد.

در دو فصل اول این رساله اندیس‌های مطرح و پرکاربرد برای نوعی خاص از لوله‌هی نانو که در شبکه‌ی آنها اتم‌ها با آرایش چهار و هشت ضلعی مرتب شده‌اند و با نماد TUC_4C_8 نشان داده می‌شوند،

^۲ Hosoya^۳ nanotubes^۴ Iijima^۵ Gutman^۶ Diudia



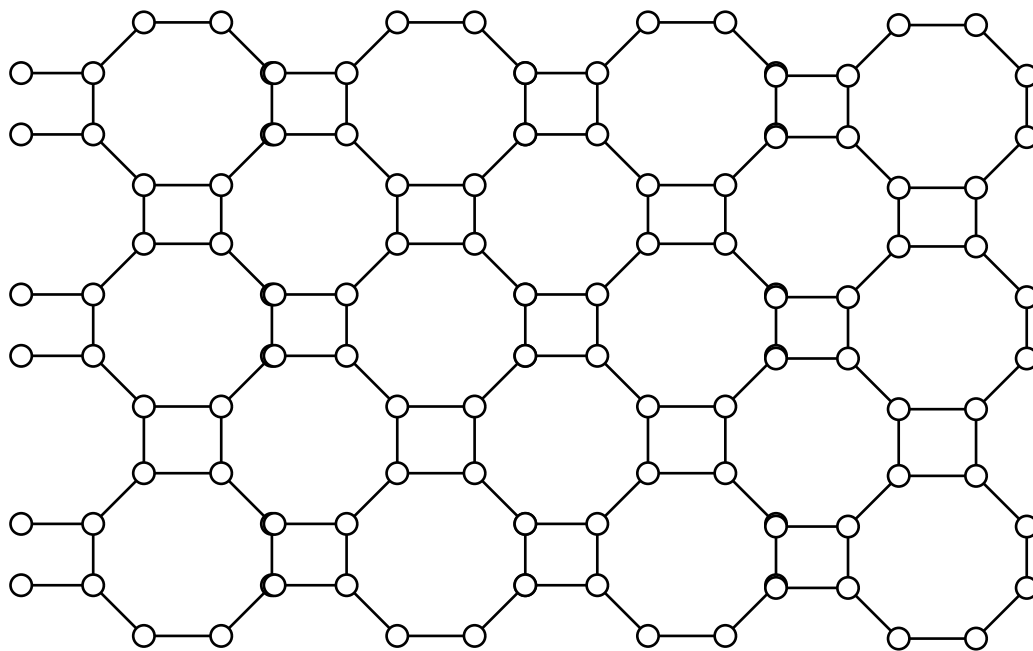
شکل ۱-۲: گراف لوله نانو $TUC_4C_8(R)$

محاسبه خواهند شد. گراف این لوله‌ها با توجه به آرایش اتم‌های آن به دو نوع مختلف با نمادهای $TUC_4C_8(S)$ و $TUC_4C_8(R)$ تقسیم می‌شوند. در شکل‌های ۱-۱ و ۱-۲ ساختار این دو گراف نشان داده شده است.

در فصل سوم حاصل ضرب ریشه‌ای گراف‌ها که توسط گودسیل^۷ و مکی^۸ در سال ۱۹۷۸ معرفی شد [۲۹]، مورد بررسی قرار خواهد گرفت. این دو نویسنده ضمن معرفی این عملگر روی گراف‌های ریشه‌دار، چندجمله‌ای مشخصه ماتریس مجاورت گراف حاصل ضرب را با استفاده از مفهوم هم‌پیوستگی گراف‌ها بررسی کردند. در این رساله با در نظر گرفتن آرایشی خاص برای ماتریس مجاورت حاصل ضرب ریشه‌ای گراف‌ها برای محاسبه چندجمله‌ای مشخصه ماتریس مجاورت این عملگر روشی جدیدی معرفی خواهد شد که برای محاسبه چندجمله‌ای مشخصه ماتریس لاپلاسی این عملگر هم قابل استفاده است. با استفاده از این بحث چندجمله‌ای مشخصه ماتریس‌های مجاورت و لاپلاسی و همچنین ریشه‌های این چندجمله‌ای‌ها برای گراف‌هایی که از ضرب ریشه‌ای گراف‌های متعارف ساخته می‌شوند را بررسی می‌کنیم.

^۷ Godsil

^۸ McKay



شکل ۱-۳: گراف لوله نانو $TUC_4C_8(S)$

در انتها اندیس وینر حاصل ضرب ریشه‌ای گراف‌ها را بررسی می‌کنیم و رابطه بین اندیس وینر گراف حاصل ضرب ریشه‌ای و گراف‌های سازنده آن را بدست می‌آوریم. همچنین با استفاده از این بحث اندیس وینر چند گراف که با مفهوم حاصل ضرب ریشه‌ای تعریف می‌شوند را محاسبه خواهیم کرد. درخت بت تعمیم یافته نمونه‌ای از این نوع گراف‌ها است. در فصل چهارم با استفاده از مفهوم حاصل ضرب ریشه‌ای، چندجمله‌ای‌های مشخصه ماتریس‌های مجاورت و لاپلاسی و همچنین اندیس وینر این درخت‌ها را محاسبه خواهیم کرد.

۲-۱ تعاریف و مفاهیم اولیه

در این فصل مفاهیم مقدماتی مورد نیاز در فصل‌های بعد معرفی می‌شوند. در ابتدا تعاریف و مفاهیم پایه‌ای نظریه گراف توضیح داده می‌شوند. سپس مفاهیم اولیه درباره اندیس‌های توپولوژیک گراف‌ها معرفی خواهند شد.

یک گراف عبارت است از یک مجموعه غیر تهی V و یک مجموعه (احتمالاً غیر تهی) E که شامل زیر مجموعه‌های دو عضوی از مجموعه V باشد. عناصر مجموعه V رأس و اعضای مجموعه E یال

گراف نامیده می‌شوند. گراف G با مجموعه رئوس V و مجموعه یال‌های E را با نماد $G = (V, E)$ نشان می‌دهیم. منظور از یال $e = (u, v)$ در گراف G اتصال دو رأس u و v از این گراف می‌باشد. این یال به فرم ساده‌تر $e = uv$ نیز نشان داده می‌شود. در این صورت u رأس ابتدا، v رأس انتهای یال uv و این دو رأس را مجاور گویند. در سراسر این رساله فرض می‌کنیم $V(G)$ و $E(G)$ به ترتیب مشخص‌کننده‌ی مجموعه رئوس و یال‌های گراف G باشند.

تعداد رئوس یک گراف را مرتبه^۹ آن گراف می‌نامند. همچنین اگر دو یال متمایز e_1 و e_2 از گراف یک رأس مشترک داشته باشند یال‌های مجاور نامیده می‌شوند. اگر اعضای مجموعه E در گراف $G = (V, E)$ را زوج‌های مرتب از اعضای V در نظر بگیریم گراف G را جهت‌دار^{۱۰} می‌نامیم. در غیر این صورت G غیر جهت‌دار^{۱۱} نامیده می‌شود.

منظور از یک طوقه^{۱۲} یالی از گراف است که رأس‌های ابتدا و انتهای آن برابر باشند. گرافی که دارای طوقه نباشد و بین هیچ دو رأس بیش از یک یال وجود نداشته باشد را یک گراف ساده گویند. می‌توان گراف غیر جهت‌دار G را با نمایش رئوس بوسیله نقاط و اتصال رئوس مجاور به وسیله یک خط راست یا منحنی نمایش داد. اگر گراف جهت‌دار باشد می‌توان مجاورت را با در نظر گرفتن ابتدا و انتهای یال مورد نظر با یک فلش نشان داد. در سراسر این پایان‌نامه تمام گراف‌ها ساده و غیرجهت‌دار در نظر گرفته می‌شوند.

تعریف ۱.۱ گراف $G' = (V', E')$ زیر گراف $G = (V, E)$ نامیده می‌شود، اگر V' زیرمجموعه V و E' زیرمجموعه E باشد.

زیرگراف $G' = (V', E')$ از گراف $G = (V, E)$ را ماکزیمال گویند اگر E' شامل تمام یال‌های G که نقاط انتهایی آن عضوی از V' است، باشد. در یک گراف تعداد رئوسی که با رأس v مجاور باشند را درجه^{۱۳} این رأس می‌نامند و با نماد $\deg(v)$ نشان داده می‌شود. گرافی که همه‌ی رئوس آن دارای درجه برابر باشند گراف منظم^{۱۴} نامیده می‌شود.

لم ۲.۱ در گراف $G = (V, E)$ روابط زیر برقرار است

$$a) \sum_{v \in V} \deg(v) = 2|E(G)|$$

$$b) d_1 + 2d_2 + 3d_3 + \dots + kd_k = 2|E(G)|$$

که در آن d_i تعداد رئوس گراف با درجه i و k بیشترین درجه ظاهر شده‌ی رئوس گراف را مشخص می‌کنند.

^۹ order

^{۱۰} directed

^{۱۱} undirected

^{۱۲} loop

^{۱۳} degree

^{۱۴} regular

منظور از یک مسیر^{۱۵} در گراف G دنباله‌ای از رئوس G به صورت $v_1, v_2, \dots, v_{k-1}, v_k$ است که به ازای هر $1 \leq i < k$ ، (v_i, v_{i+1}) یال‌هایی متمایز از گراف G باشند. این مسیر به شکل زیر نمایش داده می‌شود.

$$v_1 \rightarrow v_2 \rightarrow v_3 \rightarrow \dots \rightarrow v_{k-1} \rightarrow v_k$$

طول این مسیر برابر $k - 1$ تعریف می‌شود. کوتاهترین مسیر بین دو رأس از یک گراف مسیری است که دارای کمترین طول باشد. اگر مسیری بین دو رأس موجود نباشد آن‌گاه فاصله بین دو رأس برابر بینهایت تعریف می‌شود.

اگر یک مسیر دارای رأس‌های تکراری نباشد آن را مسیر ساده می‌نامند. طول یک مسیر ساده تعداد یال‌های آن مسیر است. یک دور^{۱۶} مسیری ساده است که رأس‌های ابتدا و انتهای آن مسیر برابر باشند. گرافی که بین هر دو رأس آن حداقل یک مسیر وجود داشته باشد را یک گراف همبند^{۱۷} می‌نامند. در غیر این صورت گراف را ناهمبند می‌نامند. در گراف ناهمبند هر زیرگراف همبند ماکزیمال مؤلفه همبند^{۱۸} آن گراف نامیده می‌شود. فرض کنیم $G = (V, E)$ یک گراف همبند باشد. به ازای هر دو رأس u و v از گراف G فاصله آنها را با $d_G(u, v)$ نشان می‌دهیم که به صورت ساده‌تر $d(u, v)$ نیز نشان داده می‌شود.

اگر u رأسی دلخواه از گراف G باشد در این صورت دوری از مرکز^{۱۹} u بیشترین فاصله‌ای است که بین u و رأسی دیگر از G وجود دارد. کمترین مقدار دوری از مرکز در بین تمام رئوس G را شعاع^{۲۰} گراف G گویند. رأس مرکزی^{۲۱} گراف رأسی از گراف است که دوری از مرکز آن برابر شعاع گراف باشد.

تعریف ۳.۱ درخت^{۲۲} گراف همبندی است که شامل دور نباشد.

تعریف ۴.۱ گراف ریشه‌دار^{۲۳} گراف G ریشه‌دار نامیده می‌شود اگر یک رأس از این گراف با برجستگی ویژه از سایر رئوس G متمایز شده باشد. این رأس را ریشه گراف G گویند.

معروف‌ترین گراف ریشه‌دار درخت ریشه‌دار است. در این درخت طول مسیر از ریشه تا هر رأس به اضافه یک را سطح^{۲۴} آن رأس گویند. بالاترین سطح درخت را ارتفاع^{۲۵} آن درخت نامیده می‌شود. در درخت

^{۱۵}path

^{۱۶}cycle

^{۱۷}connected

^{۱۸}connected component

^{۱۹}eccentricity

^{۲۰}radius

^{۲۱}central

^{۲۲}tree

^{۲۳}rooted tree

^{۲۴}level

^{۲۵}height

دلخواه رئوس از درجه یک را رأس آویخته^{۲۶} می‌نامند. اگر در یک درخت ریشه‌دار درجه همه‌ی رئوس به جز رئوس آویخته برابر باشند آن درخت را دندریمر^{۲۷} می‌نامند. در مباحث علم شیمی این درخت در نمایش گراف نوعی مولکول به نام دندریمر بکار گرفته می‌شود. این درخت با نماد $T_{k,d}$ نشان داده می‌شود که d درجه رئوس غیر آویخته و k فاصله رئوس آویخته و رأس مرکزی از این درخت را مشخص می‌کند.

تعریف ۵.۱ درخت بت تعمیم یافته^{۲۸} درختی ریشه‌دار است که درجه رئوس واقع بر یک سطح دارای درجه یکسان باشند.

تعریف ۶.۱ گراف $G = (V, E)$ دوبخشی^{۲۹} نامیده می‌شود اگر بتوان مجموعه رئوس آن را به دو مجموعه مجزای V_1 و V_2 چنان افراز نمود که هر یال از گراف دارای یک رأس در مجموعه V_1 و رأسی دیگر در مجموعه V_2 باشد.

قضیه ۷.۱ گراف G با مرتبه $n \geq 2$ ، دوبخشی است اگر و تنها اگر شامل دورهای با طول فرد نباشد. اثبات. فرض کنیم G یک گراف دوبخشی باشد. با توجه به تعریف گراف دو بخشی مجموعه رئوس G به دو زیر مجموعه مجزای V_1 و V_2 افراز می‌شوند. با توجه به اینکه برای هر یال از این گراف دو رأس آن به تنها یکی از این دو زیر مجموعه متعلق است، هر دور به شکل $v_1 v_2 v_3 \dots v_n v_1$ دارای تعدادی فرد رأس مجزا است. بنابراین طول آن یعنی n زوج است.

برعکس فرض کنیم طول هر دور در گراف G زوج باشد. بدون کاسته شدن از کلیت اثبات می‌توان G را همبند فرض کرد (در غیر این صورت یک مؤلفه همبند از G را در نظر می‌گیریم). در این صورت به ازای رأس دلخواه v_1 ، مجموعه شامل v_1 و سایر رئوس G که فاصله زوج با v_1 دارند را V_1 و $V_2 = V(G) - V_1$ را V_2 می‌نامیم. چون طول هر دور در این گراف زوج است پس هر یال G رأسی از V_1 را به رأسی در V_2 متصل می‌کند. زیرا در غیر این صورت اگر یال uv دو رأس از V_1 را به متصل کند آن‌گاه به ازای رأس دلخواه x در V_1 فاصله x با رئوس u و v زوج است. بنابراین دور شامل یال uv و مسیرهایی با کمترین طول از x تا رئوس u و v طول فرد دارد. این با فرض زوج بودن طول هر دور در G متناقض است. بنابراین G گرافی دو بخشی است. ■

تعریف ۸.۱ گراف $G = (V, E)$ و $G' = (V', E')$ را یکریخت^{۳۰} می‌نامیم، هرگاه تناظری یک به یک

^{۲۶}pendant

^{۲۷}dendrimer

^{۲۸}generalized bethe tree

^{۲۹}bipartite

^{۳۰}isomorphic

مثل $f: V \rightarrow V'$ وجود داشته باشد به گونه‌ای که (u, v) یالی از گراف G باشد اگر و تنها اگر $(f(u), f(v))$ یالی از گراف G' باشد.

تعریف ۹.۱ اگر $G = (V, E)$ گرافی از مرتبه n باشد در این صورت ماتریس مجاورت^{۳۱} گراف G با نماد $A = A(G)$ ماتریسی $n \times n$ است که به صورت زیر تعریف می‌شود

$$A(i, j) = \begin{cases} 1, & ij \in E(G) \text{ اگر} \\ 0, & ij \notin E(G) \text{ اگر.} \end{cases}$$

بنابراین ماتریس مجاورت یک گراف ماتریسی متقارن است. مجموع درایه‌های واقع در سطر i ام برابر درجه رأسی از گراف است که بر چسب i ام را دارد. همچنین مجموع تمام درآیه‌های ماتریس مجاورت هر گراف مساوی $2|E|$ است.

تعریف ۱۰.۱ اگر $G = (V, E)$ گرافی از مرتبه n باشد در این صورت ماتریس لاپلاسی^{۳۲} گراف G با نماد $L = L(G)$ ماتریسی $n \times n$ است که به صورت زیر تعریف می‌شود

$$L(i, j) = \begin{cases} \deg(i), & i = j \text{ اگر} \\ -A(G)(i, j), & i \neq j \text{ اگر.} \end{cases}$$

چند جمله‌ای مشخصه ماتریس‌های منتسب به یک گراف را چند جمله‌ای مشخصه^{۳۳} آن گراف می‌نامند. در فصل‌های بعد فقط در مورد چند جمله‌ای مشخصه ماتریس مجاورت با نماد $P_G(\lambda)$ و چند جمله‌ای مشخصه ماتریس لاپلاسی با نماد $Q_G(\lambda)$ بحث خواهد شد. همچنین مجموعه ریشه‌های چند جمله‌ای مشخصه یک گراف با تعداد تکرار آنها را طیف^{۳۴} آن گراف می‌نامند.

به عنوان مثال اگر K_{n+1} گراف کامل مرتبه $n+1$ فرض شود چند جمله‌ای مشخصه ماتریس مجاورت آن به صورت $P_{K_{n+1}}(\lambda) = (\lambda+1)^n(\lambda-n)$ است، پس طیف آن شامل -1 با تکرار n و همچنین n با تکرار یک است. اگر S_{n+1} را گراف ستاره از مرتبه $n+1$ بگیریم آن گاه چند جمله‌ای مشخصه ماتریس مجاورت آن به شکل $P_{S_{n+1}}(\lambda) = \lambda^{n-1}(\lambda^2 - n)$ است. پس طیف آن شامل $\pm\sqrt{n}$ با تکرار یک و همچنین 0 با تکرار $n-1$ است.

همچنین اگر P_n یک مسیر از مرتبه n و C_n یک دور از مرتبه n باشد آن‌گاه

$$P_{P_n}(\lambda) = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} (-1)^k \binom{n-k}{k} \lambda^{n-2k}$$

^{۳۱} adjacency matrix

^{۳۲} Laplacian matrix

^{۳۳} characteristic polynomial

^{۳۴} spectrum

$$P_{C_n}(\lambda) = -2 + \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} (-1)^k \frac{n}{n-k} \binom{n-k}{k} \lambda^{n-2k}$$

کاربرد گسترده چندجمله‌ای مشخصه ماتریس‌های منتسب به یک گراف و همچنین ریشه‌های این چند جمله‌ای‌ها در علوم مختلف موجب شده است که بررسی این چندجمله‌ای‌ها و ریشه‌های آن برای گراف‌های مختلف به یکی از مباحث مهم در نظریه جبری گراف تبدیل شود. در واقع استفاده گسترده از مباحث جبرخطی و نظریه ماتریس‌ها موجب ارتباط تنگاتنگ نظریه گراف و مباحث جبری شده است. قضیه بعد یکی از قضایای پایه‌ای در باره‌ی محاسبه چندجمله‌ای مشخصه ماتریس مجاورت گراف‌هاست. قضیه ۱۱.۱ فرض کنید G گراف حاصل از اتصال رأس x از گراف G_1 به رأس y از گراف G_2 باشد. در این صورت اگر G'_1 و G'_2 به ترتیب گراف‌های حاصل از حذف رأس x از گراف G_1 و حذف رأس y از گراف G_2 باشند، آن‌گاه

$$P_G(\lambda) = P_{G_1}(\lambda)P_{G_2}(\lambda) - P_{G'_1}(\lambda)P_{G'_2}(\lambda).$$

اثبات. به قضیه‌ی ۲.۱۲ در صفحه‌ی ۵۹ از مرجع [۶] مراجعه کنید. قضیه بعد نیز روش محاسبه چند جمله‌ای مشخصه یک گراف که از اضافه کردن رئوس جدید به گراف اصلی بدست می‌آید را بیان می‌کند.

قضیه ۱۲.۱ فرض کنید G یک گراف با مجموعه رئوس $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ و H گراف حاصل از اتصال k رأس جدید به هریک از رئوس x_i از گراف G باشد. در این صورت

$$P_H(\lambda) = \lambda^{nk} P_G\left(\lambda - \frac{k}{\lambda}\right)$$

اثبات. به قضیه ۲.۱۳ در صفحه ۶۰ از مرجع [۶] مراجعه کنید.

تعریف ۱۳.۱ گراف یالی^{۳۵} گراف $G = (V, E)$ با نماد $L(G)$ گرافی است که هر رأس آن متناظر یک یال از گراف G و دو رأس از این گراف به هم متصل می‌شوند اگر یال‌های متناظر در گراف G مجاور باشند. ارتباط تنگاتنگ مفاهیم مختلف بین گراف G و گراف $L(G)$ اهمیت گراف یالی یک گراف را برجسته‌تر می‌کند. بدست آوردن این ارتباط برای چندجمله‌ای‌های مشخصه و همچنین طیف‌های این دو گراف از سابقه زیادی برخوردار است. در ادامه به چند نکته در این مورد اشاره می‌شود.

قضیه ۱۴.۱ فرض کنید G یک گراف منظم و درجه هر رأس از آن r باشد. در این صورت اگر n تعداد رئوس و m تعداد یال‌های G باشد آن‌گاه

$$P_{L(G)}(\lambda) = (\lambda^2 + 2)^{m-n} P_G(\lambda - r + 2).$$

^{۳۵}line graph

اثبات. به قضیه ۲.۱۵ در صفحه ۶۱ از مرجع [۶] مراجعه کنید.

لم ۱۵.۱ اگر T یک درخت مرتبه n و به ازای $1 \leq i \leq n$ ، $\mu_i(T)$ و $\lambda_i(L(T))$ به ترتیب طیف‌های ماتریس مجاورت گراف T و لاپلاسی گراف یالی T با ترتیبی صعودی باشند. در این صورت

$$\mu_i(T) = \lambda_i(L(T)) + 2$$

اثبات. به مرجع [۳۰] مراجعه شود.

تعریف ۱۶.۱ فرض کنید G_1 و G_2 دو گراف دلخواه و v_1 و v_2 دو رأس از این دو گراف باشند. در این صورت به هم پیوستگی^{۳۶} G_1 و G_2 با نماد $G_1.G_2$ گراف حاصل از معادل فرض کردن دو رأس v_1 و v_2 تعریف می‌شود.

قضیه ۱۷.۱ فرض کنید $G_1.G_2$ به هم پیوستگی دو گراف G_1 و G_2 و G'_1 و G'_2 به ترتیب گراف‌های حاصل از حذف رئوس v_1 و v_2 از دو گراف G_1 و G_2 باشند. در این صورت چندجمله‌ای مشخصه گراف $G_1.G_2$ از رابطه زیر بدست می‌آید

$$P_{G_1.G_2}(\lambda) = P_{G_1}(\lambda)P_{G'_2}(\lambda) + P_{G'_1}(\lambda)P_{G_2}(\lambda) - \lambda P_{G'_1}(\lambda)P_{G'_2}(\lambda)$$

اثبات. به صفحه ۱۵۹ مرجع [۶] مراجعه شود.

تعریف ۱۸.۱ اگر $G = \{G_1, G_2, \dots, G_n\}$ دنباله‌ای از گراف‌های ریشه‌دار و H یک گراف برچسب‌دار از مرتبه n باشد. در این صورت گراف حاصل از معادل فرض کردن رأس i ام گراف H و ریشه گراف G_i به ازای $i = 1, 2, \dots, n$ را حاصل ضرب ریشه‌ای^{۳۷} گراف H توسط دنباله G گویند [۲۹].

تعریف ۱۹.۱ اندیس توپولوژیک^{۳۸} یک گراف عددی است حقیقی که به آن گراف نسبت داده می‌شود و تحت یکرختی گراف‌ها پایا است.

با توجه به تعریف بالا می‌توان برای یک گراف اندیس‌های مختلفی تعریف کرد. به عنوان مثال تعداد رئوس و یا تعداد یال‌های یک گراف را می‌توان به عنوان ساده‌ترین اندیس‌های قابل تعریف برای آن گراف در نظر گرفت. اما اهمیت اندیس‌های توپولوژیک یک گراف در کاربرد آنها در مباحث کاربردی نظریه گراف‌ها می‌باشد. مقدار اندیس توپولوژیک یک گراف مولکولی مطرح در علوم مختلف مانند شیمی و فیزیک مبین خاصیتی فیزیکی یا شیمیایی از آن مولکول است. در ادامه اندیس‌های توپولوژیک که در فصل‌های بعد مورد مطالعه قرار خواهند گرفت معرفی می‌شوند.

^{۳۶}coalescence

^{۳۷}rooted product

^{۳۸}topological index

تعریف ۲۰.۱ اندیس وینر^{۳۹} گراف همبند $G = (V, E)$ با نماد $W(G)$ به صورت زیر تعریف می شود:

$$W(G) = \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} d(u, v)$$

در واقع اندیس وینر گراف G برابر نصف مجموع فاصله‌های بین تمام رئوس گراف G است.

قضیه ۲۱.۱ فرض کنید n تعداد رئوس درخت T و $\binom{n}{2}$ تعداد انتخاب‌های ۲ از n باشد. در این صورت اگر $n \geq 2$ آن گاه

$$W(L(T)) = W(T) - \binom{n}{2}$$

اثبات. به مرجع [۵] مراجعه کنید.

قضیه ۲۲.۱ اگر $T_{k,d}$ معرف درخت دندریمر باشد آن گاه

$$W(T_{k,d}) = \frac{1}{(d-2)^3} [(d-1)^{2k} [kd^2 - 2(k+1)d^2 + d] + 2d^2(d-1)^k - d].$$

اثبات. به مرجع [۳۲] مراجعه کنید.

قضیه ۲۳.۱ اگر P_n و S_n به ترتیب گراف‌های مسیر و ستاره از مرتبه n باشند آن گاه $W(P_n) = \binom{n+1}{3}$

$$\text{و } W(S_n) = (n-1)^2$$

اثبات. به مرجع [۱۷] مراجعه کنید.

بررسی خواص مولکول‌ها با توجه به ساختار آنها موجب شد اندیس‌های دیگری نیز که مشابه اندیس وینر خاصیتی از مولکول را مشخص می‌کنند معرفی شوند. اندیس بعد مثالی از این اندیس‌ها است [۱۴].

تعریف ۲۴.۱ اندیس اندیس‌هایپر وینر^{۴۰} گراف همبند $G = (V, E)$ با نماد $WW(G)$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$WW(G) = \frac{1}{4} \sum_{\{u,v\} \in V(G)} (d(u, v) + d^2(u, v)).$$

با استفاده از این اندیس می‌توان خواص متعددی از یک ساختار شیمیایی را بررسی کرد. ضریب سختی، دمای جوش و تبخیر، همچنین دما و فشار بحرانی نمونه‌هایی از این خواص هستند. [۳۹].

^{۳۹}Wiener index

^{۴۰}Hyper Wiener index

تعریف ۲۵.۱ اندیس شولتز^{۴۱} گراف همبند $G = (V, E)$ که اندیس توپولوژیک مولکولی نیز نامیده می شود با نماد $MTI(G)$ نشان داده شده و به صورت زیر تعریف می شود:

$$MTI(G) = \sum_{u,v} \deg(u) \left(d_G(u, v) + A(u, v) \right)$$

که در آن $A(u, v)$ در آیه متناظر رئوس u و v در ماتریس مجاورت گراف G است. برای تعریف اندیس بعد به معرفی چند نماد احتیاج داریم. بنابراین ابتدا این نمادها را معرفی می کنیم. فرض کنید $e = uv$ یک یال از گراف همبند G باشد. در این صورت $N_u(e)$ را مجموعه رئوسی از گراف G در نظر می گیریم که فاصله آنها تا رأس u کمتر از فاصله آنها تا رأس v باشد. به طور مشابه $N_v(e)$ مجموعه رئوسی از گراف G در نظر می گیریم که فاصله آنها تا رأس v کمتر از فاصله آنها تا رأس u باشد. به بیانی دیگر

$$B_u(e) = \{x \mid x \in V(G), d_G(x, u) < d_G(x, v)\}$$

$$B_v(e) = \{x \mid x \in V(G), d_G(x, v) < d_G(x, u)\}.$$

حال قرار می دهیم $n_u(e) = |B_u(e)|$ و $n_v(e) = |B_v(e)|$. حال اندیس سگد گراف G را به شکل زیر تعریف می کنیم.

تعریف ۲۶.۱ اندیس سگد^{۴۲} گراف همبند $G = (V, E)$ با نماد $Sz(G)$ نمایش داده و به شکل زیر تعریف می شود:

$$Sz(G) = \sum_{e \in E(G)} n_u(e)n_v(e).$$

قضیه ۲۷.۱ اگر گراف G شامل دور نباشد اندیس وینر و سگد برای گراف G مساویند. اثبات. به مرجع [۴۳] مراجعه کنید.

اگر گراف دوبخشی باشد می توان اندیس سگد را با استفاده از رابطه ساده تری محاسبه کرد که توسط دویرن^{۴۲} و گاتمن به دست آمده است [۱۳]. فرض می کنیم به ازای رأس u از گراف G ، $d(u)$ مشخص کننده مجموع فواصل بین u و تمام رئوس گراف G باشد. در این صورت اندیس سگد گراف G طی قضیه بعد محاسبه می شود.

^{۴۱}Schultz

^{۴۲}Szeged

^{۴۳}Dobrynin

قضیه ۲۸.۱ فرض کنید $G = (V, E)$ یک گراف همبند و دوبخشی با n رأس و m یال باشد. در این صورت

$$Sz(G) = \frac{1}{4} \left(n^2 m - \sum_{uv \in E(G)} (d(u) - d(v))^2 \right)$$

اثبات. اگر G یک گراف همبند دوبخشی باشد آن‌گاه به ازای یال دلخواه $e = uv$ از گراف هیچ رأسی فاصله برابر با u و v ندارد. زیرا در غیر این صورت اگر رأس y از گراف G فاصله‌ای برابر با رئوس u و v داشته باشد آن‌گاه G یک دور با طول فرد شامل کوتاه‌ترین مسیرها بین y و دو رأس u و v و همچنین یال uv است. بنابراین قضیه ۶.۱ این موضوع با دو بخشی بودن G متناقض است. بنابراین

$$\begin{aligned} d(u) &= \sum_{x \in B_u(e)} d(u, x) + \sum_{x \in B_v(e)} d(u, x) \\ d(v) &= \sum_{x \in B_u(e)} d(v, x) + \sum_{x \in B_v(e)} d(v, x) \end{aligned}$$

از طرفی بدیهی است اگر $x \in B_u(e)$ آن‌گاه $d(v, x) = d(u, x) + 1$ همچنین اگر $x \in B_v(e)$ آن‌گاه $d(v, x) = d(u, x) - 1$ بنابراین $n_u(e) = n + (d(u) - d(v))$ و $n_v(e) = n + (d(v) - d(u))$. با توجه به تعریف اندیس سگد داریم

$$\begin{aligned} Sz(G) &= \sum_{e \in E(G)} n_u(e)n_v(e) \\ &= \sum_{e \in E(G)} \left(n + (d(u) - d(v)) \right) \left(n - (d(u) - d(v)) \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(n^2 m - \sum_{uv \in E(G)} (d(u) - d(v))^2 \right) \end{aligned}$$

■

بنابراین اثبات کامل می‌شود.

فصل ۲

اندیس‌های توپولوژیک گراف $TUC_4C_8(R)$

در این فصل سعی می‌کنیم فرمول‌هایی صریح برای محاسبه اندیس‌های توپولوژیک گراف لوله نانو $TUC_4C_8(R)$ بدست آوریم. این اندیس‌ها به ترتیب اندیس وینر، شولتز، هایپر وینر و در انتها اندیس سگد می‌باشند. هر یک از این اندیس‌ها به ترتیب در بخش‌های مختلف این فصل محاسبه می‌شوند. اندیس وینر این گراف توسط دیودی و همکارانش در سال ۲۰۰۴ مورد بررسی قرار گرفته است [۱۲]. در این فصل اندیس وینر گراف $TUC_4C_8(R)$ با روشی دیگر همچنین اندیس‌های شولتز، هایپر وینر و سگد برای این لوله نانو محاسبه خواهند شد [۲۳]-[۳۹]. در این روش بر خلاف روش قبل فاصله تمام رئوس این گراف از یکدیگر و در نتیجه ماتریس فاصله این گراف بدست می‌آید. از این موضوع می‌توان برای محاسبه اندیس‌های مختلف این گراف که تعریف آنها بر مبنای مفهوم فاصله است، استفاده کرد. اندیس سگد این گراف توسط ایرانمنش و همکاران به طور همزمان مورد بررسی قرار گرفته است [۳۵].

اگر p و q مشخص کننده تعداد ردیف‌های چهار ضلعی از رئوس این گراف باشند، در سراسر این فصل از نماد ساده‌تر $T(p, q)$ برای نمایش گراف $TUC_4C_8(R)$ استفاده خواهد شد. به منظور محاسبه اندیس‌های مختلف گراف $T(p, q)$ در این فصل به جز بخش ۴.۲ از یک برچسب‌گذاری مناسب برای رئوس این گراف استفاده می‌کنیم. این برچسب‌گذاری در شکل ۱-۲ نشان داده شده است. رئوس واقع بر هر سطر به سه نوع مختلف x_{kt} ، y_{kt} و z_{kt} تقسیم‌بندی شده‌اند. همچنین اندیس kt در این نمادگذاری برای رئوس گراف نشان دهنده‌ی این مطلب است که این رأس در سطر k ام و ستون t ام نمایش گراف واقع است. همچنین در سراسر این فصل فرض می‌کنیم p_1 جزء صحیح عدد حقیقی $\frac{p+1}{4}$ باشد. این فرض