

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده علوم پایه

گروه ریاضی

## یک دسته بندی از انرژی گراف

دانشجو : بی بی آسیه افضل شهیدی

استاد راهنما

دکتر صادق رحیمی شعرباف

استاد مشاور

دکتر نادر جعفری راد

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

## تقدیم به پدر و مادر عزیزم

که سرزمین قلبشان آن قدر وسیع است که همه رنجم را در فویش  
پنهان می سازد. آنان که توانشان رفت تا به توانایی برسم و مویشان  
سپید گشت تا رویم سپید بماند.

در برابرشان زانوی ادب بر زمین می نهیم.

## و تقدیم به خواهرانم

همراهان همیشگی ام که وجودشان برایم ارزنده است و همواره در  
قلبم جای دارند.

## **قدردانی و تشکر**

**در ابتدا از استاد بزرگوارم جناب آقای دکتر رحیمی که با راهنمایی های حکیمانه خود افق های تازه ای برای اینجانب ایجاد کردند و جناب آقای دکتر جعفری راد، مشاور دلسوزم کمال سپاسگزاری را دارم.**

**همچنین لازم می دانم از دوستانی که مرا در این پایان نامه یاری نمودند تشکر و قدردانی کنم.**

**برای تمامی این عزیزان آرزوی موفقیت و کامیابی دارم.**

## چکیده

موضوع تعیین انرژی یک مولکول همواره مورد علاقه دانشمندان علم شیمی بوده است و برای محاسبه آن از فرمول های انتگرالی استفاده می کردند. از آنجا که برای نمایش ساختار هر مولکول از گراف استفاده می شود لذا در چند دهه اخیر دانشمندان ریاضی نیز سعی کرده اند از خواص گراف ها در محاسبه انرژی مولکولی استفاده نمایند و راه حل ساده تری برای محاسبه انرژی مولکولی بیابند. کمیت محاسبه شده از این طریق را انرژی گراف نامیده اند که تقریبا هم ارز انرژی مولکول متناظرش است.

در این پایان نامه سعی شده است تا موضوعات مربوط به انرژی انواع گراف ها مورد مطالعه قرار گیرد و یک دسته بندی از آن ارائه گردد. به این منظور، در فصل اول به مفهوم طیف گراف و کران های آن پرداخته شده است. در فصل دوم رابطه طیف گراف با انرژی و بیان کران هایی که برای انرژی گراف با استفاده از روابط ساده ریاضی وجود دارد، ارائه شده است. در فصل سوم انرژی درخت ها و گراف های بدون دور بیان شده است و درخت هایی که دارای بیشترین انرژی و کمترین انرژی هستند مورد بررسی قرار گرفته شده اند. در فصل چهارم انرژی گراف های دوبخشی و کران بالا و پایین آن ها ارائه شده است. در فصل پنجم انرژی گراف های دوری و تک دوری و بیان حدود انرژی این دسته از گراف ها پرداخته شده است. در فصل ششم انرژی گراف های منتظم و خطی محاسبه شده است و در فصل هفتم نیز انرژی، برای دسته ای از گراف ها به نام گراف اسپایدر بررسی شده است و کران بالا و پایین برای آن ارائه شده است.

**کلمات کلیدی:** طیف گراف، انرژی گراف، کران بالا و پایین انرژی گراف.

## فهرست مطالب

مقدمه ..... ۱

### فصل اول : معرفی طیف گراف و تعیین کران های آن

۴

۱-۱ تعیین کران بالا برای طیف گراف ..... ۵

۲-۱ تعیین کران پایین برای طیف گراف ..... ۱۰

۳-۱ نتیجه گیری ..... ۱۴

### فصل دوم : انرژی گراف و ماتریس

۱۵

۱-۲ انرژی گراف و کران های آن ..... ۱۶

۲-۲ مشخص سازی عددی انرژی ..... ۱۹

۳-۲ انرژی ماتریس های صفر و یک ..... ۲۲

۴-۲ تعیین گراف هایی با کران پایین  $n$  ..... ۲۸

۵-۲ رابطه انرژی با رتبه و عدد رنگی ..... ۳۶

۶-۲ نتیجه گیری ..... ۳۹

## فصل سوم : انرژی گراف های بدون دور و درخت ها

۴۰

۴۲ ..... ۱-۳ درخت های دارای کمترین و بیشترین انرژی

۴۹ ..... ۲-۳ انرژی درخت های  $n$  راسی با  $k$  راس وابسته

۵۸ ..... ۳-۳ نتیجه گیری

## فصل چهارم : انرژی گراف های دو بخشی

۵۹

۶۰ ..... ۱-۴ کران بالا و پایین انرژی گراف های دو بخشی

۷۶ ..... ۲-۴ گراف های دو بخشی دارای کمترین انرژی

۷۹ ..... ۳-۴ کران پایین انرژی گراف های دو بخشی با توجه به رتبه آن ها

۸۵ ..... ۴-۴ نتیجه گیری

## فصل پنجم : انرژی گراف های دوری

۸۶

۸۷ ..... ۱-۵ انرژی گراف های تک دوری

۹۰ ..... ۱-۱-۵ گراف های تک دوری با بیشترین انرژی

۹۶ ..... ۲-۱-۵ گراف های تک دوری با کمترین انرژی

۹۹ ..... ۲-۵ نتیجه گیری

## فصل ششم : انرژی گراف های منتظم وخطی

۱۰۰

۱۰۰ ..... ۱-۶ انرژی گراف های منتظم

۱۰۱ ..... ۱-۱-۶ گراف های ب شدت منتظم با بیشترین انرژی

۱۰۷ ..... ۲-۶ انرژی گراف های خطی

۱۱۳ ..... ۳-۶ نتیجه گیری

## ۱۱۴ ..... فصل هفتم : انرژی اسپایدر گراف ها

۱۱۵ ..... ۱-۷ کران بالا وپایین انرژی اسپایدر گراف کامل

۱۱۹ ..... ۲-۷ نتیجه گیری

۱۱۹ ..... چشم انداز آینده

۱۲۱ ..... پیوست

۱۴۳ ..... مراجع

۱۴۶ ..... واژه نامه فارسی به انگلیسی

۱۵۰ ..... واژه نامه انگلیسی به فارسی



## فهرست اشکال و جداول

۳۶	۱-۲ رنگ آمیزی گراف
۳۷	۲-۲
۳۸	۳-۲ گراف $H_5$
۴۲	۱-۳
۴۳	۲-۳
۴۹	۳-۳ گراف $P_{n,k}$
۵۰	۴-۳ مسیر مستقل داخلی

۵۰	.....	۵-۳ تبدیل نوع اول
۵۵	.....	۶-۳ تبدیل نوع دوم
۷۹	.....	۱-۴ گراف $B'_{n,m}$ و $B_{n,m}$
۹۱	.....	۱-۵ گراف $H$ و $P_n^4$ و $P_n^l$
۹۲	.....	۲-۵
۹۶	.....	۳-۵ گراف $S_n^3$ و $S_n^l$
۱۱۱	.....	۱-۶
۱۱۴	.....	۱-۷ گراف اسپایدر
۱۱۷	.....	۲-۷ رنگ آمیزی گراف اسپایدر کامل
۱۲۰	.....	۱-۷ جدول انرژی اسپایدر گراف کامل



## مقدمه

فرایند تلاش برای ایجاد معادل های تقریبی ریاضی برای پدیده ها در علوم مختلف همچون فیزیک و شیمی را مدل سازی می نامند. یکی از روش های مدل سازی استفاده از نظریه گراف است. هر گراف دارای یک مجموعه از نقاط به نام راس و یک مجموعه از خطوط بین نقاط، به نام یال می باشد. همچنین می توان به هر گراف یک ماتریس به نام ماتریس مجاورت نسبت داده می شود که می توان با استفاده از مقادیر ویژه آن، خواص گراف را بررسی کرد. از کاربرد های نظریه گراف، می توان به کاربرد آن در علم شیمی اشاره کرد به این صورت که برای هر مولکول یک گراف مولکولی نسبت وجود دارد (هر راس یک اتم و پیوند هر اتم یک یال است). دانشمندان علم شیمی انرژی مولکول را با استفاده از فرمول انتگرال<sup>1</sup> کولسون محاسبه می کنند. ایوان گوتمن<sup>2</sup> اولین بار تعریف جدید برای محاسبه انرژی مولکول با استفاده از گراف مولکولی و ماتریس مجاورت آن، به شکل مجموع قدر مطلق مقادیر ویژه ماتریس مجاورت گراف ارائه داد که عبارت است از:

$$E(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|$$

که در آن  $\lambda_i$  مقدار ویژه و  $n$  بعد ماتریس مجاورت گراف  $G$  است. با تعریف جدیدی که برای انرژی مولکول ارائه شد دانشمندان ریاضی نیز علاقمند به محاسبه انرژی برای دسته های مختلف از گراف ها شدند. بدین ترتیب، تلاش هایی برای پیدا کردن کران انرژی گراف ها انجام شده است و کران های حاصل را در دو حالت ارائه گردیده است. در حالت اول کران هایی که به شکل کلی برای انرژی گراف ها بیان شده و در مورد همه دسته های گراف ها نیز صادق است و در حالت دوم کران هایی که به شکل خاص و برای دسته ای معین از گراف ها مانند درخت ها، گراف های منتظم، گراف های دوری و ... ارائه شده است.

<sup>1</sup> Culson integral

<sup>2</sup> I. Gutman, The energy of a graph, Ber. Math-statist. Sect. Forschungsz. Graz 103(1978)1-22

به این ترتیب همواره تلاش شده است تا کران های ارائه شده بهبود یابد. تاریخچه این مطالعات به شرح ذیل است:

در سال ۱۹۷۷ گوتمن با استفاده از فرمول انتگرال کولسون درخت های با کمترین و بیشترین انرژی را مشخص نمود [۲]. او در یک مقاله مروری او یک جمع بندی از نتایجی که در مورد انرژی و کران های آن تا سال ۲۰۰۱ را ارائه داد [۲۴]. همچنین دسته گراف هایی که انرژی از راس آنها عبور می کند (به این معنی که انرژی بیشتر از تعداد رئوس گراف است.) را در سال ۲۰۰۲ مشخص کرد [۱۸] و در سال ۲۰۰۷ نیز، دسته جدیدی از این نوع ارائه کرد که نتایج آن در ژورنال ایرانی و بین المللی IJMSI به چاپ رسید [۲۲]. او مقالات بسیاری نیز با همکاری دیگر دانشمندان ارائه کرده است. ای می یو<sup>۳</sup> و اکسوزنگ<sup>۴</sup> در زمینه انرژی درخت ها تحقیق کرده اند [۳]، در مورد گراف های تک دوری یاپینگ هو<sup>۵</sup> و گوتمن و مائولین وانگ<sup>۶</sup> در [۷]، [۸] و [۹] ارائه داده اند، مولتن<sup>۷</sup> کولن<sup>۸</sup> و همکاران، ژیباین زنگ<sup>۹</sup> و همکاران، رادا<sup>۱۰</sup> و تینو<sup>۱۱</sup> در زمینه گراف های دو بخشی و کران های آن تحقیق نموده اند [۱۰، ۱۱، ۱۲]، مولتن و کولن، نیکیفرو<sup>۱۲</sup> و خرقانی<sup>۱۳</sup>، تایفه-رضایی<sup>۱۴</sup> و بلاک ریشنان<sup>۱۵</sup> در مورد انرژی گراف ها و ماتریسها در [۲۳]، [۱۹]، [۲۰] مقالاتی ارائه نموده اند. رامن<sup>۱۶</sup>

<sup>3</sup> Aimei Yu

<sup>4</sup> Xuezheng Lv

<sup>5</sup> Yaoping Hou

<sup>6</sup> Maolin Wang

<sup>7</sup> Moulton

<sup>8</sup> Koolen

<sup>9</sup> Jiabin Zhang

<sup>10</sup> Rada

<sup>11</sup> Tino

<sup>12</sup> Nikiforov

<sup>13</sup> Kharaghani

<sup>14</sup> Tayfeh-Rezaie

<sup>15</sup> Balakrishnan

<sup>16</sup> Ramane

---

گوتمن و همکاران برای انرژی گراف های خطی و گراف های انرژی یکسان در [۱۶]، [۳۳]، اکبری<sup>۱۷</sup> و همکاران در مورد رابطه انرژی گراف و عدد رنگی آن در [۲۵] مطالب ارزشمندی ارائه کرده اند.

در این پایان نامه سعی شده است تا نتایج مقالات و تحقیقات ذکر شده در فوق برای دسته های مختلف گراف ها مورد بررسی قرار گیرد. مطالب این پایان نامه مورد استفاده علاقه مندان و محققان به موضوع انرژی گراف قرار گیرد.

---

<sup>17</sup> Akbari



## فصل اول

معرفی طیف گراف و تعیین کران های آن



انرژی یک گراف وابسته به طیف آن گراف است. با بررسی طیف هر گراف می توان به بعضی از خواص آن از قبیل، تعداد راس های مجزا، دو بخشی بودن و غیره پی برد. همچنین کران هایی که تا کنون برای انرژی گراف ارائه شده با توجه به کران طیفی گراف است. لذا با توجه به اهمیت طیف گراف، در این فصل ابتدا طیف گراف را تعریف می کنیم. سپس قضایا و لم های مرتبط با کران بالا و کران پایین آن را ارائه می دهیم.

اکنون اولین تعریف این قسمت را بیان می کنیم:

**تعریف ۱-۱:** اگر  $A(G)$  ماتریس مجاورت گراف  $G$  باشد آنگاه چند جمله ای مشخصه  $G$  را به صورت زیر تعریف می شود:

$$P(G, x) = \det(xI - A(G))$$

ریشه های این چند جمله ای را مقادیر ویژه ماتریس نامند.

**تعریف ۲-۱:** طیف گراف  $G$  مجموعه مقادیر ویژه ماتریس مجاورت گراف همراه با مرتبه تکرار هر یک از این مقادیر ویژه می باشد. حال اگر مقادیر ویژه را با  $\lambda_1, \dots, \lambda_k$  و مرتبه تکرار هر یک را با  $m(\lambda_1), \dots, m(\lambda_k)$ ، به ترتیب، نمایش دهیم آنگاه طیف گراف  $G$  را به شکل

$$Spec(G) = \left( \begin{array}{cccc} \lambda_1 & \lambda_2 & \dots & m(\lambda_i) \\ m(\lambda_1) & m(\lambda_2) & \dots & m(\lambda_k) \end{array} \right) \quad (1-1)$$

نمایش می دهیم [۳۴].

**مثال ۱-۱:** برای گراف کامل  $K_4$  داریم:

$$A(K_4) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad Spec(K_4) = \left( \begin{array}{cc} 3 & -1 \\ 1 & 3 \end{array} \right)$$

## ۱-۱ تعیین کران بالا برای طیف گراف

اولین لم این بخش توسط بیگز<sup>۱۸</sup> در سال ۱۹۷۴ در کتاب تئوری گراف جبری<sup>۱۹</sup> ارائه شده است [۳۴].

لم ۱-۱-۱: اگر بزرگترین مقدار ویژه گراف  $G$ ,  $\lambda_1(G)$  باشد آنگاه [۳۴]

$$\lambda_1(G) \leq \left(\frac{2m(n-1)}{n}\right)^{1/2}. \quad (۲-۱)$$

اثبات: فرض کنیم  $\lambda_1(G) \geq \lambda_2(G) \geq \dots \geq \lambda_n(G)$  مقادیر ویژه گراف  $G$  باشند که به شکل نزولی مرتب شده اند. چون  $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 0$  و  $\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 2m$  است، با در نظر گرفتن نامساوی کوشی-شوارتز<sup>۲۰</sup> برای بردارهای  $(\lambda_2, \dots, \lambda_n)$  و  $(1, 1, \dots, 1)$  به تعداد  $n - 1$  خواهیم داشت:

$$\lambda_1(G) \leq \left(\frac{2m(n-1)}{n}\right)^{1/2}$$

و حکم ثابت است. ■

اکنون کران هایی که در سال ۲۰۰۲ توسط کینکار داس<sup>۲۱</sup> و همکاران او ارائه شده است را بیان می

کنیم [۳۹].

قضیه ۱-۱-۱: اگر  $G$  گراف همبند و  $\lambda_1$  بزرگترین مقدار ویژه آن باشد آنگاه [۳۹]

$$\lambda_1(G) \leq \max \left\{ \sqrt{\frac{TT_i}{d_i}} : 1 \leq i \leq n \right\}. \quad (۳-۱)$$

که در آن داریم:

<sup>18</sup> Biggs

<sup>19</sup> Algebraic graph theory

<sup>20</sup> Cauchy-Schwartz

<sup>21</sup> Kinkar ch. Das

$$T_i = \sum_j \{d_j : v_i v_j \in E(G)\} = d_i m_i \quad (4-1)$$

$$TT_i = \sum_j \{T_j : v_i v_j \in E(G)\} = \sum_j \{d_j m_j : v_i v_j \in E(G)\} \quad (5-1)$$

و  $d_i$  درجه راس  $v_i$  و  $m_i$  میانگین درجه راس های مجاور با  $v_i$  می باشند.

اثبات: ماتریس  $D(G)^{-1}A(G)D(G)$  را در نظر بگیرید که  $D(G)$  ماتریس قطری از درجه رؤس

است. عنصر  $(i, j)$  ام از ماتریس  $D(G)^{-1}A(G)D(G)$  به شکل زیر است:

$$\begin{cases} \frac{d_j}{d_i} & \text{اگر } v_i v_j \in E \\ 0 & \text{در غیر این صورت} \end{cases}$$

اگر  $X = (x_1, \dots, x_n)^T$  بردار ویژه متناظر با مقدار ویژه  $\lambda_1$  از ماتریس  $D(G)^{-1}A(G)D(G)$

باشد. می توان فرض کرد که یک مولفه از بردار ویژه یک باشد و دیگر مولفه ها کمتر یا مساوی یک

باشند. به عبارت دیگر  $x_i = 1$  و  $x_k \leq 1$  برای هر  $k$  است. داریم:

$$\{D(G)^{-1}A(G)D(G)\}X = \lambda_1 X. \quad (6-1)$$

$i$  امین معادله از تساوی (6-1) عبارت است از:

$$\lambda_1(G)x_i = \sum_j \left\{ \frac{d_j x_j}{d_i} : v_i v_j \in E(G) \right\}, \quad (7-1)$$

به عبارت دیگر

$$\lambda_1(G) = \sum_j \left\{ \frac{d_j x_j}{d_i} : v_i v_j \in E(G) \right\}$$

است.  $j$  امین معادله تساوی از (6-1) عبارت است از:

$$\lambda_1(G)x_j = \sum_k \left\{ \frac{d_k x_k}{d_j} : v_j v_k \in E(G) \right\} \quad (8-1)$$

با ضرب طرفین تساوی (۸-۱) در  $\frac{d_j}{d_i}$  و جمع بندی روی  $j$  خواهیم داشت:

$$\lambda_1(G)^2 = \sum_j \left\{ \frac{1}{d_i} \sum_k \{d_k x_k : v_j v_k \in E(G)\} : v_i v_j \in E(G) \right\}$$

اکنون با توجه به  $x_k \leq 1$  است داریم:

$$\leq \sum_j \left\{ \frac{1}{d_i} \sum_k \{d_k : v_j v_k \in E(G)\} : v_i v_j \in E(G) \right\} \quad (۹-۱)$$

با استفاده از روابط (۴-۱) و (۵-۱) خواهیم داشت:

$$= 1/d_i \sum_j \{d_j m_j : v_i v_j \in E(G)\} = \frac{\tau \tau_i}{d_i} \quad (۱۰-۱)$$

بنابراین حکم برقرار است. ■

نتیجه ۱-۱-۱: اگر  $G$  گراف همبند و  $\lambda_1(G)$  بزرگترین مقدار ویژه آن باشد آنگاه

$$\lambda_1(G) \leq \max\{\sqrt{d_k m_k} : 1 \leq k \leq n\} \quad (۱۱-۱)$$

است [۳۹].

اثبات: اگر  $d_k m_k = \max_j \{d_j m_j : v_i v_j \in E(G)\}$  و  $v_k \in V(G)$  باشد آنگاه از معادله

۱۰-۱ داریم:

$$\lambda_1(G) \leq \sqrt{d_k m_k}$$

بنابراین نتیجه حاصل می شود. ■

قضیه ۲-۱-۱: اگر  $G$  گراف ساده و  $\lambda_1(G)$  بزرگترین مقدار ویژه آن باشد آنگاه [۳۹]

$$\lambda_1(G) \leq \max_i \left\{ \min_k \left\{ \frac{k}{2} + \sqrt{T'_{ik} + \frac{k^2}{4}} : k \geq 0, D_k > 0 \right\} : 1 \leq i \leq n \right\} \quad (12-1)$$

است که در آن  $T'_{ik} = T'_{i(k-1)} - D_k$  و  $k = 1, \dots, (d_i - 1)$  است.  $T'_{i0} = d_i m_i$  و  $D_k$  نیز تعداد همسایگی های راس  $v_i$  است که بیشتر یا مساوی  $k$  همسایگی از راس  $v_i$  است.

اثبات: اگر  $X = (x_1, \dots, x_n)^T$  بردار ویژه از مقدار ویژه  $\lambda_1(G)$  باشد. می توان فرض کرد که یک مولفه از بردار ویژه یک باشد و دیگر مولفه ها کمتر یا مساوی یک باشد. به عبارت دیگر  $x_i = 1$  و  $x_k \leq 1$  برای هر  $k$  است. داریم:

$$A(G)X = \lambda_1(G)X. \quad (13-1)$$

$\vec{i}$  امین معادله از تساوی (13-1) عبارت است از:

$$\lambda_1(G)x_i = \sum_j \{x_j : v_i v_j \in E(G)\}$$

به عبارت دیگر

$$\lambda_1(G) = \sum_j \{x_j : v_i v_j \in E(G)\}. \quad (14-1)$$

است.  $\vec{j}$  امین معادله از تساوی (13-1) عبارت است از:

$$\lambda_1(G)x_j = \sum_k \{x_k : v_i v_k \in E(G)\} \quad (15-1)$$

با جمع بندی بر دو طرف تساوی (15-1) روی  $\vec{j}$  خواهیم داشت:

$$\lambda_1(G)^2 = \sum_j \{ \sum_k \{x_k : v_i v_k \in E\} : v_i v_j \in E(G) \}.$$

$$(\lambda_1(G) - k) \lambda_1(G) = \sum_j \{ \sum_k \{x_k : v_i v_k \in E\} : v_i v_j \in E(G) \}$$

$$-k \sum_j \{x_j : v_i v_j \in E(G)\}.$$

به عبارت دیگر

$$(\lambda_1(G) - k) \lambda_1(G) \leq T'_{ik} \quad (۱۶-۱)$$

که  $k$  عدد صحیح غیر منفی و  $T'_{ik}$  به شکل زیر داده شده است:

$$T'_{i0} = d_i m_i$$

$$T'_{i1} = T'_{i0} - D_1$$

$$T'_{i2} = T'_{i1} - D_2$$

.....

$$T'_{i(d_i-1)} = T'_{i(d_i-2)} - D_{(d_i-1)}$$

و  $D_k$  تعداد همسایگی های راس  $v_i$  است که بیشتر یا مساوی  $k$  همسایگی از راس  $v_i$  است. بنابراین

$$\lambda_1(G) \leq \frac{k}{2} + \sqrt{T'_{ik} + \frac{k^2}{2}}, \quad (۱۷-۱)$$

$$\lambda_1(G) \leq \min_k \left\{ \frac{k}{2} + \sqrt{T'_{ik} + \frac{k^2}{4}} : k \geq 0, D_k > 0 \right\}$$

لذا نتیجه حاصل می شود. ■

نتیجه ۱-۱-۲: اگر  $G$  گراف ساده و  $\lambda_1(G)$  بزرگترین مقدار ویژه آن باشد آنگاه داریم [۳۹]:

$$\lambda_1(G) \leq \max\{\sqrt{d_i m_i} : 1 \leq i \leq n\}. \quad (۱۸-۱)$$

اثبات: با قرار دادن  $k = 0$  در معادله (۱۷-۱)،  $\lambda_1(G) \leq \sqrt{d_i m_i}$  حاصل می شود. بنابراین به

راحتی حکم نتیجه می شود. ■

## ۲-۱ تعیین کران پایین برای طیف گراف

لم ۱-۲-۱: اگر گراف  $G$  دارای راس وابسته باشد. راس های وابسته را به گروه هایی تقسیم می کنیم به طوری که راس های هر گروه دارای همسایگی های مشترک باشند. در هر گروه مولفه های بردار ویژه متناظر با مقدار ویژه های غیر صفر برابر می باشند [۳۹].

اثبات: اگر  $X = (x_1, \dots, x_n)^T$  بردار ویژه از مقدار ویژه  $\lambda(G)$  باشد. همچنین اگر  $v_1, \dots, v_r$  راس های وابسته از مجموعه راس  $V(G) = \{v_1, \dots, v_n\}$  با  $r < n$  باشد که مجاور با راس  $v_i$  باشند. داریم:

$$A(G)X = \lambda(G)X$$

$$\lambda(G)x_k = \sum_j \{x_j : v_k v_j \in E(G)\} \quad k = 1, \dots, n.$$

برای  $k = 1, \dots, r$  داریم :

$$\lambda(G)x_k = x_i. \quad (19-1)$$

چون  $\lambda(G)$  غیر صفر است لذا از معادله (۱۹-۱) دیده می شود که  $x_k$  با  $k = 1, \dots, r$  حقیقی هستند. ■

لم ۲-۲-۱: فرض کنیم  $d_1, d_2, \dots, d_n$  اعداد صحیح مثبت باشند و  $x_1, x_2, \dots, x_n$  اعداد حقیقی مثبت باشند. اگر  $d_i$  به  $x_i$  افزایش یابد آنگاه داریم [۳۹]:

$$\frac{d_1 x_1 + d_2 x_2 + \dots + d_n x_n}{x_1 + x_2 + \dots + x_n} \geq \frac{d_1 + d_2 + \dots + d_n}{n}. \quad (20-1)$$

تعریف ۱-۲-۱: برای هر راس  $v$ ، دوری از مرکز  $v$  راس  $v$  را با  $e(v)$  نمایش می دهیم و به شکل زیر تعریف می کنیم [۳۹]:

$$e(v) = \max\{d(u, v) : u \in V, u \neq v\}$$

لم ۳-۲-۱: فرض کنیم  $T$  درخت  $n$  راسی باشد و راس  $v \in V$  باشد که  $e(v) \leq 2$ ، آنگاه

$$\lambda_1(T) \geq \sqrt{d + m - 1} \quad (21-1)$$

که  $d$  درجه راس  $v \in V(G)$  است و  $m$  میانگین درجه راس های مجاور با  $v \in V(G)$  است [۳۹].

اثبات: فرض کنیم  $v_1, v_2, \dots, v_d$  راس های مجاور با  $v$  باشند و درجه متناظر هر یک  $d_1, d_2, \dots, d_d$  باشد. چون  $e(v) \leq 2$  است بنابراین  $v_1, v_2, \dots, v_d$  مجاور با  $(d_1 - 1), (d_2 - 1), \dots, (d_d - 1)$  راس وابسته هستند. با استفاده از لم (۱-۲-۱) می توان گفت که همه مولفه های بردار ویژه متناظر با راس های وابسته ی مجاور با  $v_i$  برابر با  $x_i$  ( $i = 1, 2, \dots, d$ ) هستند. بنابراین مولفه های ویژه راس های  $v_1, v_2, \dots, v_d$  متناظر با بزرگترین مقدار ویژه به ترتیب عبارت است از:

$$\lambda_1 x_1, \lambda_1 x_2, \dots, \lambda_1 x_d$$

برای راس  $v$  (فرض کنیم  $y$  مولفه ویژه متناظر با راس  $v$  باشد). داریم:

$$\lambda_1 y = \lambda_1 x_1 + \lambda_1 x_2 + \dots + \lambda_1 x_d, \quad y = \sum_{i=1}^d x_i \quad (22-1)$$

همچنین

$$\lambda_1^2 x_i = y + (d_i - 1)x_i \quad i = 1, 2, \dots, d$$

$$y = (\lambda_1^2 - d_i + 1)x_i \quad i = 1, 2, \dots, d \quad (23-1)$$

با جمع بندی طرفین تساوی اخیر روی  $i$  و استفاده از معادله (۲۲-۱) داریم:

$$d \sum_{i=1}^d x_i = \lambda_1^2 \sum_{i=1}^d x_i - \sum_{i=1}^d d_i x_i + \sum_{i=1}^d x_i$$



$$\lambda_1^2 = d + \frac{\sum_{i=1}^d d_i x_i}{\sum_{i=1}^d x_i} - 1. \quad (24-1)$$

از معادله (۲۳-۱)،  $d_i$  متناسب با  $x_i$  است. پس با توجه به رابطه (۲۲-۱) حکم نتیجه می شود. ■

تعریف ۱-۲-۲: رتبه  $^{23}$  و هم رتبه  $^{24}$  از گراف  $G$  عبارت است از [۳۴]:

$$r(G) = n - c, \quad s(G) = m - n + c$$

که در آن  $c$  تعداد دورهای موجود در  $G$  است.

تعریف ۱-۲-۳: فرض کنیم  $(x, y)$  نشان دهنده ضرب داخلی دو بردار ستونی  $x$  و  $y$  باشد. برای هر

ماتریس حقیقی  $n \times n$  متقارن  $X$  و هر بردار غیر صفر  $1 \times n$  ستونی  $z$  تعریف می کنیم

$(z, Xz)/(z, z)$  و آن را خارج قسمت ریلی می نامیم. همچنین برای هر  $z \neq 0$  رابطه

$$\lambda_{\max}(X) \geq R(X; z) \geq \lambda_{\min}(X)$$

برقرار است [۳۴].

قضیه ۱-۲-۱: [۳۴]

(۱) اگر  $H$  زیر گراف راسی از  $G$  باشد آنگاه

$$\lambda_{\max}(H) \leq \lambda_{\max}(G); \quad \lambda_{\min}(H) \geq \lambda_{\min}(G).$$

(۲) اگر بزرگترین و کوچکترین مقدار درجه راسی از گراف  $G$  عبارت باشد از  $k_{\max}(G)$  و

$$k_{\max}(G) \geq \lambda_{\max}(G) \geq k_{\min}(G), \text{ آنگاه}$$

اثبات: (۱) فرض کنیم راس های  $G$  برچسب گذاری شده اند. بنابراین ماتریس مجاورت  $A(G)$  دارای

زیر ماتریس  $A_0$  است که ماتریس مجاورت  $H$  است.  $z_0$  را طوری انتخاب می کنیم که

<sup>23</sup> Rank

<sup>24</sup> Co-Rank

مجاور تشکیل شده باشد که به  $\mathbf{z}_0$  وارد می شوند آنگاه داریم:  
 اگر  $\mathbf{z}$  بردار ستونی با سطرهای  $|V(G)|$  از صفرهای  $(\mathbf{z}_0, \mathbf{z}_0) = 1$  و  $A_0 \mathbf{z}_0 = \lambda_{max}(A_0) \mathbf{z}_0$

$$\lambda_{max}(A_0) = R(A_0; \mathbf{z}_0) = R(A(G); \mathbf{z}) \leq \lambda_{max}(A(G))$$

که نشان می دهد  $\lambda_{max}(H) \leq \lambda_{max}(G)$  . برای نامساوی دیگر نیز به همین روش عمل می کنیم.

(۱) اگر  $\mathbf{u}$  بردار ستونی که هر مولفه آن  $+1$  است باشد. اگر  $n = |V(G)|$  و  $k^{(i)}$  ظرفیت هر راس  $v_i$  باشد، آنگاه داریم:

$$R(A(G); \mathbf{u}) = \frac{1}{n} \sum_{i,j} a_{i,j} = 1/n \sum_i k^{(i)} \geq k_{min}(G)$$

از اینکه خارج قسمت ریلی  $R(A(G); \mathbf{u})$  حداکثر  $\lambda_{max}(A(G))$  است بنابراین

$$\lambda_{max}(G) \geq k_{min}(G).$$

حال اگر  $X$  یک بردار ویژه متناظر با مقدار ویژه  $\lambda_0 = \lambda_{max}(G)$  باشد و  $x_j$  بزرگترین مولفه مثبت از  $x$  باشد آنگاه چون  $A(G)X = \lambda_0 X$  است قرار می دهیم  $\sum x_i = \lambda_0 x_j$  پس داریم:

$$\lambda_0 x_j = (\lambda_0 X)_j = \sum x_i \leq k^{(j)} x_j \leq k_{max}(G) x_j$$

که جمع بندی روی رئوس  $v_i$  مجاور با  $v_j$  است. بنابراین  $\lambda_0 \leq k_{max}(G)$  است. ■

لم ۱-۲-۴: فرض کنیم  $G$  گرافی با عدد رنگی  $l \geq 2$  باشد. آنگاه  $G$  دارای یک زیرگراف راسی  $l$ -بحرانی به نام  $H$  است و هر راس  $H$  دارای درجه حداقل  $l - 1$  است [۳۴].

اثبات: مجموعه همه زیرگراف های راسی از  $G$  غیر تهی است و شامل گراف هایی است که بعضی دارای عدد رنگی  $l$  می باشند (مانند خود  $G$ ) و بعضی دارای عدد رنگی ای غیر از  $l$  هستند (مانند یک راسی ها). اگر  $H$  یک زیرگراف راسی با عدد رنگی  $l$  باشد و کمترین رابطه با تعداد راس ها داشته باشد.

پس  $lH$ -بحرانی است. اگر  $v \in V(G)$  آنگاه  $V(G) - v$  یک زیرگراف راسی از  $H$  است و دارای عدد رنگی  $l - 1$  است. اگر درجه  $v$  در  $H$  کمتر از  $l - 1$  باشد آنگاه می توان رنگ آمیزی را برای  $H$  توسعه داد و لذا  $\chi(H) = l$  است. بنابراین درجه  $v$  حداقل  $l - 1$  است.

قضیه ۱-۲-۲: اگر  $T$  درخت  $n$  راسی و  $\lambda_1(T)$  بزرگترین مقدار ویژه ان باشد آنگاه داریم [۳۹]:

$$\lambda_1(T) \geq \sqrt{d + m - 1}$$

که  $d$  بزرگترین درجه راس  $v \in V(G)$  است و  $m$  میانگین درجه راس های مجاور با  $v$  است.

اثبات: با استفاده از لم های (۱-۲-۱) و قضیه (۱-۲-۱) به سادگی نتیجه حاصل می شود ■

### ۱-۳ نتیجه گیری

در این فصل کران های ارائه شده به قرار زیر است:

- i.  $\lambda_1(G) \leq \left(\frac{2m(n-1)}{n}\right)^{1/2}$
- ii.  $\lambda_1(G) \leq \max_i \left\{ \min_k \left\{ \frac{k}{2} + \sqrt{T'_{ik} + \frac{k^2}{4}} : k \geq 0, D_k > 0 \right\} : 1 \leq i \leq n \right\}$
- iii.  $\lambda_1(T) \geq \sqrt{d + m - 1}$
- iv.  $\lambda_{\max}(H) \leq \lambda_{\max}(G) ; \lambda_{\min}(H) \geq \lambda_{\min}(G)$
- v.  $k_{\max}(G) \geq \lambda_{\max}(G) \geq k_{\min}(G)$

که در آن  $k$  درجه راس است.



## فصل دوم

### انرژی گراف و ماتریس

در راستای طبقه بندی انرژی در این فصل تعاریف انرژی گراف و ارتباط آن با طیف گراف را بیان می کنیم و کران های انرژی را مشخص می کنیم. به این منظور در بخش اول تعاریف و قضایای مربوط به انرژی گراف، در بخش دوم کران های بالا و پایین که تا کنون برای انرژی گراف بدست آمده است، در بخش سوم انرژی ماتریس های صفر و یک، در بخش چهارم گراف هایی که دارای کران پایین تعداد رئوس هستند و در بخش پنجم نیز رابطه بین انرژی و رتبه و عدد رنگی را، ارائه می کنیم. لذا ابتدا تعاریف و مفاهیم اولیه انرژی گراف را بیان می کنیم.

انرژی گراف در شیمی به صورت زیر تعریف می شود:

تعریف ۱-۲: برای محاسبه انرژی هیدروکربن های مزدوج متناوب از عبارت انتگرالی زیر استفاده می شود [۲]:

$$E = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \log(1 + b_1 x^2 + b_2 x^4 + \dots + b_k x^{2k}) \quad (1-2)$$

که در آن

$$P(G, x) = x^n - b_1 x^{n-2} + b_2 x^{n-4} - \dots + (-1)^k b_k x^{n-2k}$$

چند جمله ای مشخصه گراف مولکولی متناظر  $G$  است و  $n$  تعداد راس های آن است و

$$k = \begin{cases} \frac{n}{2} & n \text{ زوج باشد} \\ \frac{n-1}{2} & n \text{ فرد باشد} \end{cases}$$

همچنین  $b_i = b_i(G) \geq 0$  برای هر  $j = 1, 2, \dots, k$  است.

تعریف ۲-۲: فرمول انتگرال کولسون<sup>۲۵</sup> به شکل زیر تعریف می شود [۴]:

$$E = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} n - \frac{ix\phi'(G, ix)}{\phi(G, ix)} dx$$

و  $\phi(G, x)$  چند جمله ای مشخصه گراف  $G$  است و  $n$  تعداد رئوس گراف و  $i = \sqrt{-1}$  است. این فرمول برای محاسبه انرژی هیدروکربن های مزدوج است. این فرمول در سال ۱۹۴۰ توسط کولسون ثابت شده است.

تعریف ۳-۲: انرژی گراف را با توجه به مقادیر ویژه ماتریس مجاورت گراف به شکل زیر تعریف می کنیم:

$$E(G) = \sum_{i=0}^n |\lambda_i|$$

که در آن  $\lambda_i$  ( $1 \leq i \leq n$ ) مقدار ویژه ماتریس مجاورت گراف  $G$  است.

## ۱-۲ انرژی گراف و کران های آن

در زیر روابطی برای کران بالا و کران پایین انرژی بیان می کنیم.

قضیه ۱-۱-۲: اگر  $G$  گراف دارای  $n$  راس و  $m$  یال باشد و  $A$  ماتریس مجاورت آن باشد آنگاه داریم [۲۴]:

$$\sqrt{2m + n(n-1)|\det A|^{2/n}} \leq E(G) \leq \sqrt{2mn}. \quad (1-2)$$

اثبات: برای مقادیر ویژه گراف همواره داریم:

$$\sum_{i=1}^n (\lambda_i)^2 = 2m \quad (2-2)$$

<sup>25</sup> Colson integral

لذا داریم:

$$E(G)^2 = \left(\sum_{i=1}^n |\lambda_i|\right)^2 = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 + 2 \sum_{i < k} |\lambda_i| |\lambda_k|$$

$$= 2m + n(n-1)AM\{|\lambda_i| |\lambda_k|\}$$

که در آن  $AM\{|\lambda_i| |\lambda_k|\}$  نشان دهنده میانگین حسابی  $(n^2 - n)/2$  جمله مجزا  $|\lambda_i| |\lambda_k|$  است ( $i < k$ ). میانگین هندسی این جملات عبارت است از:

$$GM\{|\lambda_i| |\lambda_k|\} = \left(\prod_{i < k} |\lambda_i| |\lambda_k|\right)^{\frac{2}{n^2-n}} = \left(\prod_{i=1}^n |\lambda_i|^{n-1}\right)^{\frac{2}{n^2-n}}$$

$$= \left(\prod_{i=1}^n |\lambda_i|\right)^{2/n} = |\det A|^{2/n}$$

کران پایین یک دنباله است که در واقع میانگین هندسی اعداد غیر منفی است که همواره از میانگین حسابی تجاوز نمی کند.

واریانس اعداد  $|\lambda_i|$  نیز برابر است با:

$$Var\{|\lambda_i|\} = AM\{|\lambda_i|^2\} - [AM\{|\lambda_i|\}]^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 - \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\lambda_i|\right)^2 =$$

$$\frac{2m}{n} - (E(G)/n)^2$$

و چون واریانس اعداد غیر منفی همواره بزرگتر یا مساوی صفر است لذا نتیجه حاصل می شود. ■

نتیجه ۲-۱-۱: اگر  $det A \neq 0$  باشد آنگاه داریم [۲۴]:

$$E(G) \geq \sqrt{2m + n(n-1)} \geq n. \quad (3-2)$$

کران های ارائه شده در قضیه (۲-۱-۱) را می توان تنها بر حسب تعداد یال ها ( $m$ ) و یا بر حسب تعداد رئوس ( $n$ ) نیز بیان کرد. لذا در زیر قضایا و نتایج مربوط به این قسمت را بیان می کنیم:

نتیجه ۲-۱-۲: اگر گراف  $G$  دارای  $m$  یال باشد آنگاه [۲۴]:



$$2\sqrt{m} \leq E(G) \leq 2m. \quad (4-2)$$

اثبات: با توجه به معادله (۲-۲) داریم:

$$\sum_{i < k} \lambda_i \lambda_k = -m$$

پس

$$E(G)^2 = 2m + 2 \sum_{i < k} |\lambda_i| |\lambda_k| \geq 2m + 2 |\sum_{i < k} \lambda_i \lambda_k| = 2m + 2 |-m| = 4m$$

و این نتیجه می دهد که  $E \geq 2\sqrt{m}$

اگر  $G$  دارای راس تنها باشد آنگاه هر راس، یک مقدار ویژه صفر را نتیجه می دهد. ولی این رئوس تنها، نه  $E$  و نه  $m$  را تغییر نمی دهند. پس ما گراف  $G$  ای را در نظر می گیریم که راس تنها نداشته باشد و دارای  $m$  یال نیز باشد. برای هر گراف داریم  $n < 2m$ . پس

$$\sqrt{2mn} \leq \sqrt{2m(2m)} = 2m$$

■ که ترکیب آن با کران بالا در قضیه قبل نتیجه می دهد که  $E(G) \leq 2m$ .

قضیه ۲-۱-۲: اگر  $G$  گراف بدون راس مجزا و  $n$  راسی باشد آنگاه [۲۴]:

$$E(G) \geq 2\sqrt{n-1} \quad (5-2)$$

و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $G$  گراف ستاره  $n$  راسی باشد.

اثبات: (حالت ۱) اگر  $G$  همبند باشد آنگاه  $m \geq n - 1$  است و نا مساوی قضیه با استفاده از نا مساوی (۴-۲) حاصل می شود. تساوی نیز زمانی برقرار می شود که  $G$  گراف دو بخشی کامل با  $m = n - 1$  باشد که همان گراف ستاره است.

حالت ۲) اگر  $G$  نا همبند باشد. فرض کنیم  $G$  دارای  $p > 1$  مولفه باشد و  $G_1, G_2, \dots, G_p$  مولفه های آن و هر یک دارای  $n_1, n_2, \dots, n_p$  راس باشند. چون  $G$  راس تنها ندارد لذا برای همه مقادیر  $j$  داریم  $n_j \geq 2$  و  $\sqrt{n_j - 1} \geq 1$  پس  $E(G) = E(G_1) + \dots + E(G_p)$  و  $E(G_j) \geq 2\sqrt{n_j - 1}$  برای  $j = 1, 2, \dots, p$  است. اکنون داریم:

$$\begin{aligned} E(G) &\geq 2(\sqrt{n_1 - 1} + \sqrt{n_2 - 1} + \dots + \sqrt{n_p - 1}) = \\ &2\sqrt{(\sqrt{n_1 - 1} + \sqrt{n_2 - 1} + \dots + \sqrt{n_p - 1})^2} = \\ &2\sqrt{\sqrt{n_1 - 1} + \sqrt{n_2 - 1} + \dots + \sqrt{n_p - 1} + 2\sum_{j < k} \sqrt{n_j - 1}\sqrt{n_k - 1}} \geq \\ &2\sqrt{n - p + p(p - 1)} = 2\sqrt{n - 1 + (p - 1)^2} \end{aligned}$$

که در آن  $p(p - 1)/2$  جمعوند به شکل  $\sqrt{n_j - 1}\sqrt{n_k - 1}$  وجود دارد و هر یک بزرگتر یا مساوی با یک می باشند. ■

اکنون با توجه به قضیه (۲-۱-۲) می توان نتیجه گرفت که:

نتیجه ۲-۱-۳: در بین گراف های  $n$  راسی بدون راس مجزا، گراف ستاره دارای کمترین انرژی است [۲۴].

## ۲-۲ مشخص سازی عددی انرژی

در این بخش مشخص می کنیم که عدد انرژی باید دارای چه خاصیتی باشد. ابتدا اصطلاحات مورد نیاز در این قسمت را بیان می کنیم. فرض کنیم  $G_1$  و  $G_2$  دو گراف با مجموعه رئوس مجزا و مرتبه های به ترتیب  $n_1$  و  $n_2$  باشند آنگاه داریم:

۱. حاصلضرب دو گراف با  $G_1 \otimes G_2$  نشان داده می شود و عبارت است از گراف با مجموعه راس

$$V(G_1) \times V(G_2), \text{ به طوری که دو راس}$$

$$(x_1, x_2), (y_1, y_2) \in V(G_1 \times G_2)$$

مجاور هستند اگر و تنها اگر

$$(x_1, y_1) \in E(G_1) \text{ , } (x_2, y_2) \in E(G_2)$$

۲. مجموع دو گراف با  $G_1 + G_2$  نشان داده می شود و عبارت است از گراف با مجموعه راس

$$V(G_1) \times V(G_2), \text{ به طوری که دو راس}$$

$$(x_1, x_2), (y_1, y_2) \in V(G_1 \times G_2)$$

مجاور هستند اگر و تنها اگر

$$(x_1, y_1) \in E(G_1) \text{ , } x_2 = y_2 \text{ یا } (x_2, y_2) \in E(G_2) \text{ , } x_1 = y_1$$

۳. فرض کنیم  $\lambda_i^1$  که  $i = 1, 2, \dots, n_1$  و  $\lambda_j^2$  که  $j = 1, 2, \dots, n_2$  ، به ترتیب مقادیر ویژه

دوگراف  $G_2$  و  $G_1$  باشند.

اکنون با توجه به مطالب آورده شده در بالا، لم های مورد نیاز را بیان می کنیم.

لم ۱-۲-۲: مقادیر ویژه گراف  $G_1 \otimes G_2$  و  $G_1 + G_2$  به ترتیب عبارتند از  $\lambda_i^1 \lambda_j^2$  و  $\lambda_i^1 + \lambda_j^2$

است [۲۷].

اثبات: فرض کنیم  $A$  و  $B$  ماتریس های متناظر با گراف های  $G_1$  و  $G_2$  باشند. بدون کم شدن از

کلیت مسئله اثبات را برای  $A \otimes B$  (ضرب کرونگر دو ماتریس) ارائه می دهیم. اگر  $X$  و  $Y$  بردارهای

ویژه متناظر با مقادیر ویژه  $\lambda^1$  و  $\lambda^2$  به ترتیب از ماتریس های  $A$  و  $B$  باشند. پس  $AX = \lambda^1 X$  و

$BY = \lambda^2 Y$  است. برای چهار ماتریس  $P$  و  $Q$  و  $R$  و  $S$  داریم:

$$(P \otimes Q)(R \otimes S) = PR \otimes QS$$

بنابراین داریم:

$$(A \otimes B)(X \otimes Y) = AX \otimes BY = \lambda^1 X \otimes \lambda^2 Y = \lambda^1 \lambda^2 (X \otimes Y)$$

$(X \otimes Y)$  بردار غیر صفر است و  $\lambda^1 \lambda^2$  نیز مقدار ویژه از  $A \otimes B$  است. به عکس مقادیر ویژه گراف  $A \otimes B$  به شکل  $\lambda_i^1 \lambda_j^2$  است زیرا:

$$A \otimes B = (A \otimes I_{n_1})(I_{n_2} \otimes B) = (I_{n_2} \otimes B)(A \otimes I_{n_1})$$

به عبارت دیگر  $A \otimes B$  دارای خاصیت جابجایی است. لذا طیف  $I_{n_2} \otimes B$  طیف  $B$  با مرتبه تکرار  $n_2$  است. به طور مشابه طیف  $A \otimes I_{n_1}$  نیز طیف  $A$  با مرتبه تکرار  $n_1$  است. برای حالت جمع نیز به روش مشابه عمل می‌کنیم. ■

لم ۲-۲-۲: اگر یک مقدار ویژه از گرافی عدد گویا باشد آنگاه آن عدد، صحیح است [۳۵].

قضیه ۱-۲-۲: انرژی گراف نمی‌تواند ریشه مرتبه دوم عدد فرد باشد [۱۷].

اثبات: فرض کنیم  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$  مقادیر ویژه مثبت گراف  $G$  باشند. چون مجموع همه مقادیر ویژه گراف برابر صفر است لذا  $E(G) = 2 \sum_{i=1}^m \lambda_i$  است. فرض کنیم  $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_m = \lambda$  باشد. از لم (۲-۱-۲)، یک مقدار ویژه از گراف  $H$ ، یکریخت با مجموع  $m$  کپی مجزا از گراف  $G$  است. همچنین با توجه به لم (۲-۱-۲)، یک مقدار ویژه از حاصل ضرب دو کپی مجزا از گراف  $H$  است. حال فرض کنیم  $E(G) = \sqrt{q}$  که در آن  $q$  صحیح است. پس  $2\lambda = \sqrt{q}$  و به عبارت دیگر  $\lambda^2 = q/4$  است. اگر  $q$  فرد صحیح باشد آنگاه  $q/4$  یک عدد گویا غیر کامل در شرط (۲-۱-۲) است و لذا حکم ثابت است.

تعمیم این قضیه نیز به شکل زیر است:

قضیه ۲-۲-۲: فرض کنیم  $r$  و  $s$  دو عدد صحیح باشند که  $r \geq 1$  و  $0 \leq s \leq r - 1$  و فرض کنیم  $q$  عددی صحیح فرد باشد. آنگاه  $E(G)$  نمی تواند به شکل  $(2^s q)^{1/r}$  باشد [۱۷].

اثبات: اگر  $H$  گراف مشابه در وضعیت قبل باشد آنگاه  $\lambda$  یک مقدار ویژه از گراف  $H$  است. فرض کنیم  $H^*$  حاصل ضرب  $r$  کپی مجزا از  $H$  باشد. پس با استفاده از لم (۲-۱-۱)،  $\lambda^r$  مقدار ویژه ی  $H^*$  است. فرض کنیم که  $E(G) = q^{1/r}$  که  $q$  عدد صحیح است. پس  $2\lambda = q^{1/r}$  و به عبارت دیگر  $\lambda^r = q/2^r$  است. حال اگر  $q$  بخش پذیر بر  $2^r$  نباشد آنگاه  $\lambda^r$  عدد گویا غیر کامل در شرط لم (۲-۱-۲) است و حکم قضیه نتیجه می شود. ■

### ۳-۲ انرژی ماتریس های صفر و یک

در این قسمت انرژی ماتریس های دارای درایه های صفر و یک را بررسی می کنیم و حدود انرژی آنها را بیان می کنیم. سپس روش هایی برای ساخت طرح بلوکی متقارن با استفاده از ماتریس های وقوع که دارای بیشترین انرژی در بین ماتریس های صفر و یک هستند ارائه می دهیم. لذا ابتدا تعاریف مورد نیاز را بیان می کنیم.

تعریف ۳-۲-۱: برای هر عدد صحیح  $n \geq 1$ ،  $\mathbb{Z}_n$  حلقه باقیمانده به پیمانانه  $n$  است و دارای عناصر  $\{1, 2, \dots, n\}$  است. گراف  $G_n$  گرافی است که راس های آن با عناصر  $\mathbb{Z}_n$  برچسب گذاری شده اند و دو راس  $i$  و  $j$  در  $\mathbb{Z}_n$  مجاورند اگر و تنها اگر  $j - i$  در  $\mathbb{Z}_n$  باشد. اگر  $n = p$  یک عدد اول باشد آنگاه گراف  $G_p$  حاصل را پالی<sup>۲۶</sup> گراف نامیم [۲۱].

قضیه ۳-۲-۱: برای هر عدد  $\varepsilon > 0$ ،  $\delta > 0$  وجود دارد به طوری که برای هر  $n$  به اندازه کافی بزرگ، اگر  $A$  ماتریس  $n \times n$  غیر منفی با بزرگترین مولفه  $\alpha > 2\varepsilon$  و  $E(A) \geq \alpha \left(\frac{1}{2} - \delta\right) n^{3/2}$  باشد آنگاه شرایط زیر برقرار است [۱۹]:

<sup>26</sup> paley

$$(1) \quad a_{ij} > (1 - \varepsilon)\alpha \quad \text{برای حداقل } (\frac{1}{2} - \varepsilon)n^2 \text{ مولفه از } A$$

$$(2) \quad a_{ij} < \varepsilon\alpha \quad \text{برای حداقل } (\frac{1}{2} - \varepsilon)n^2 \text{ مولفه از } A$$

$$(3) \quad |\lambda_1(A) - \alpha n/2| < \varepsilon\alpha n$$

$$(4) \quad \lambda_2(A) < \varepsilon\alpha n$$

$$(5) \quad |\lambda_i(A) - \alpha n^{1/2}/2| < \alpha\varepsilon n^{1/2} \quad \text{برای هر } \varepsilon n \leq i \leq (1 - \varepsilon)n$$

اثبات: بدون کم شدن از کلیت مساله، فرض کنیم  $\alpha = 1$ . توجه کنید که

$$E(A) \leq \sqrt{n\|A\|_2^2} < \sqrt{n\|A\|_1}$$

و بنابراین  $\|A\|_1 > n$  داریم:

$$\begin{aligned} (\frac{1}{2} - \delta)n^{\frac{3}{2}} &\leq E(A) \leq \lambda_1(A) + \sqrt{(n-1)(\|A\|_2^2 - \lambda_1^2(A))} \leq \frac{\|A\|_1}{n} + \\ &\sqrt{(n-1)(\|A\|_2^2 - \|A\|_1^2/n^2)} \leq \frac{\|A\|_1}{n} + \sqrt{(n-1)(\|A\|_1 - \|A\|_1^2/n^2)} \leq \\ &\frac{n}{2}(\sqrt{n} + 1) \end{aligned} \quad (6-2)$$

لذا دیده می شود که موارد ۱ تا ۴ برای  $\delta$  کوچک و  $n$  بزرگ برقرار است. توجه کنید که

$$(\frac{1}{2} - \delta)n^{\frac{3}{2}} \leq E(A) \leq \lambda_1(A) + \lambda_2(A) + \sqrt{(n-2)(\|A\|_1 - \lambda_1^2(A) - \lambda_2^2(A))}$$

است پس شرط ۵ نیز برای  $\delta$  کوچک و  $n$  بزرگ برقرار است. ■

همچنین توجه کنید که شرایط بالا کامل می باشند زیرا اگر  $\delta$  به تنهایی برقرار باشد آنگاه داریم:

$$E(A) > \alpha(1 - 2\varepsilon)n(\frac{1}{2} - \varepsilon)n^{\frac{1}{2}} > \alpha(\frac{1}{2} - 2\varepsilon)n^{3/2}$$

قضیه ۲-۳-۲: برای هر  $\delta > 0, \varepsilon > 0$  وجود دارد به طوری که برای هر  $n$  بقدر کافی بزرگ، اگر  $A \in M_{n \times n}$  ماتریس غیر منفی با بزرگترین مولفه 1 باشد و  $0 < \varepsilon < 1/2$  باشد و انرژی آن  $E(A) \geq (\frac{1}{2} - \delta)n^{3/2}$  باشد آنگاه داریم [۱۹]:

$$E(E_n - A) \geq (\frac{1}{2} - \varepsilon)n^{3/2} \quad (۷-۲)$$

که در آن  $E_n$  ماتریس  $n \times n$  است و همه عناصر آن یک می باشند.

تعریف ۲-۳-۲: یک  $t - (v, k, \lambda)$  طرح بلوکی<sup>۲۷</sup> یک مجموعه از بلوک های  $k$  عضوی (زیر مجموعه های  $k$  عضوی)، از مجموعه دارای  $v$  عنصر است به طوری که هر  $t$  عنصر در دقیقاً  $\lambda$  بلوک واقع باشد. یک طرح را متقارن نامیم هرگاه تعداد بلوک ها ( $b$ ) برابر تعداد  $v$  باشد که به اختصار با  $BIBD$  نشان می دهیم. یک طرح بلوکی را گاهی با نماد  $(v, b, k, \lambda, t)$  نیز نمایش می دهند. ماتریس وقوع یک  $t - (v, k, \lambda)$  طرح، ماتریسی  $v \times b$  است و آن را با  $B$  نمایش می دهیم. مولفه های این ماتریس به شکل زیر تعریف می شوند:

$$B_{x,s} = \begin{cases} 0 & x \notin s \\ 1 & x \in s \end{cases}$$

که در آن هر نقطه  $x$  و هر بلوک  $s$  است.

اکنون یک  $2 - (v, k, \lambda)$  طرح را در نظر می گیریم. گراف وقوع بدست آمده از یک طرح، یک گراف با ماتریس مجاورت  $\begin{pmatrix} 0 & B \\ B^t & 0 \end{pmatrix}$  است. توجه کنید که ماتریس وقوع یک  $2 - (v, k, \lambda)$  طرح با  $0 < \lambda < k < v$  دارای مقادیر ویژه  $k$  و  $\sqrt{k - \lambda}$  و  $-\sqrt{k - \lambda}$  و  $-k$  است.

<sup>27</sup> Balanced Incomplete Block Design

قضیه ۲-۳-۳: اگر  $M$  ماتریس صفر و یک  $p \times q$  دارای  $m$  تا یک باشد و  $m \geq q \geq p$  آنگاه داریم [۲۳]:

$$E(M) \leq \frac{m}{\sqrt{pq}} + \sqrt{(p-1)\left(m - \frac{m^2}{pq}\right)} \quad (۸-۲)$$

تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $M$  ماتریس وقوع یک طرح بلوکی نا کامل متقارن باشد.

اثبات: اگر  $\lambda_1^2 \geq \lambda_2^2 \geq \dots \geq \lambda_p^2$  ( $\lambda_i \geq 0$ ) مقادیر ویژه از  $MM^t$  باشند. با استفاده از نامساوی کوشی-شوارتز داریم:

$$\begin{aligned} E(M) &= \sum_{i=1}^p \lambda_i = \lambda_1 + \sum_{i=2}^p \lambda_i \leq \lambda_1 + \sqrt{(p-1) \sum_{i=2}^p \lambda_i^2} \\ &= \lambda_1 + \sqrt{(p-1)(m - \lambda_1^2)} \end{aligned} \quad (۹-۲)$$

تابع  $f(x) = x + \sqrt{(p-1)(m - x^2)}$  روی بازه  $\sqrt{m/p} \leq x \leq \sqrt{m}$  کاهشی است. با استفاده از خارج قسمت ریلی و نامساوی کوشی-شوارتز داریم:

$$\lambda_1^2 \geq \frac{j^t M M^t j}{j^t j} \geq \frac{\sum_{i=1}^q c_i^2}{p} \geq \frac{(\sum_{i=1}^q c_i)^2}{pq} = m^2/pq \geq \frac{m}{p}. \quad (۱۰-۲)$$

که  $c_i$ ،  $i$  امین ستون  $M$  و  $j$  بردار ستونی است که تمام عناصر آن یک است. پس  $m \geq \lambda_1 \geq m/\sqrt{pq} \geq \sqrt{m/p}$  لذا نتیجه می شود که

$$E(M) \leq f(\lambda_1) \leq f\left(\frac{m}{\sqrt{pq}}\right) = \frac{m}{\sqrt{pq}} + \sqrt{(p-1)\left(m - \frac{m^2}{pq}\right)}$$



حال بررسی می کنیم که تساوی چه موقع اتفاق می افتد. برای برقراری تساوی سه شرط زیر لازم و کافی می باشند:

- i.  $M$  دارای مجموع ستونی ثابت باشد.
- ii.  $MM^t$  دارای مجموع سطری ثابت باشد.
- iii.  $MM^t$  دارای حداکثر دو مقدار ویژه مجزا باشد.

شرط  $i$  و  $ii$  با استفاده از نامساوی (۲-۱۰) بدست آمده است و شرط  $iii$  از تساوی در معادله (۲-۹) حاصل شده است. اکنون از شرط  $ii$  و  $iii$  می توان نتیجه گرفت که  $MM^t = \alpha I + \beta J$ ، برای همه مقادیر صحیح و مثبت  $\alpha$  و  $\beta$  برقرار است. در شرط  $i$  به آسانی دیده می شود که  $M$  ماتریس وقوع یک  $BIBD$  است. ■

قضیه ۲-۳-۴: اگر  $M$  ماتریس صفر و یک  $p \times q$  با  $q \geq p$  باشد آنگاه داریم [۲۳]:

$$E(G) \leq \frac{(\sqrt{p}+1)\sqrt{pq}}{2}. \quad (۲-۱۱)$$

و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $M$  ماتریس وقوع یک طرح با پارمترهای

$$\left(p, q, \frac{q(p+\sqrt{p})}{2p}, \frac{p+\sqrt{p}}{2}, \frac{q(p+2\sqrt{p})}{4p}\right)$$

باشد.

اثبات: بیشترین مقدار از کران بالا در قضیه قبل وقتی است که  $m = q(p + \sqrt{p})/2$  بنابراین

نا مساوی برقرار است. ادامه نیز مانند قبل برقرار می شود. ■

از اینکه پارمترهای یک  $\left(p, q, \frac{q(p+\sqrt{p})}{2p}, \frac{p+\sqrt{p}}{2}, \frac{q(p+2\sqrt{p})}{4p}\right)$  طرح باید صحیح باشد لذا دو

زیرکلاس برای این طرح وجود دارد:

$$BIBD(a^2, 2ab, b(a+1), (a^2+a)/2, b(a+2)/2) \quad (12-2)$$

اگر  $a$  زوج باشد و

$$BIBD(a^2, 4ab, 2b(a+1), (a^2+a)/2, b(a+2)) \quad (13-2)$$

اگر  $a$  فرد باشد. حال می توان کلاس نا متناهی با این پارامترها ارائه داد. لذا ابتدا به تعریف زیر نیاز داریم.

تعریف ۲-۳-۳: ماتریس  $m \times n$  با درایه های یک و منفی یک و  $m \leq n$  را هادامار نامیم هرگاه  $HH^t = nl$  باشد [۱۹].

تعریف ۲-۳-۴: ماتریس مربعی  $n \times n$  با درایه های  $\{1, 2, \dots, n\}$  را مربع لاتین نامیم هرگاه هر درایه  $i$  ( $i = 1, \dots, n$ ) در هر سطر و ستون فقط یک بار ظاهر شود.

با توجه به تعریف اخیر قضیه ای برای تعیین طرح های بالا ارائه می دهیم:

قضیه ۲-۳-۵: اگر ماتریس هادامار ناتمام مرتبه  $m \times n$  با  $m \leq n$  و یک ماتریس هادامار مرتبه  $m$  وجود داشته باشد، آنگاه یک طرح بلوکی با پارامترهای

$$(m^2, mn, \frac{n(m+1)}{2}, \frac{m(m+1)}{2}, \frac{n(m+4)}{4}) \quad (14-2)$$

وجود دارد [۲۳].

اثبات: فرض کنیم  $r_i$ ،  $i = 1, 2, \dots, m$ ، سطر های ماتریس هادامار مرتبه  $m \times n$  باشد و فرض کنیم تمام مولفه های  $r_1$  عدد یک باشد. فرض کنیم  $c_i$ ،  $i = 1, 2, \dots, m$ ، ستون از ماتریس هادامار مرتبه  $m$  باشد و  $c_1$  برداری با مولفه های یک باشد. اگر  $E_i = c_i r_i$ ،  $i = 1, 2, \dots, m$ ، آنگاه داریم:

$$E_1 = J \quad (1)$$

$$E_i E_j^t = 0, i \neq j \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^m E_i E_i^t = mnI \quad (3)$$

اگر  $L$  مربع لاتین با عناصر  $\{1, 2, \dots, m\}$  باشد. با قرار دادن هر  $E_i$  به جای  $i$ ، ماتریس مرتبه  $m^2 \times mn$  بدست می آید. همچنین با قرار دادن صفر به جای همه  $1$  -ها یک طرح بلوکی بدست می آید. ■

## ۴-۲ تعیین گراف هایی با کران پایین $n$

در این قسمت گراف هایی را مشخص می کنیم که نا مساوی

$$E(G) \geq n \quad (15-2)$$

در مورد آنها برقرار باشد.  $n$  تعداد رئوس گراف  $G$  است. لذا ابتدا بحث را با چند لم آغاز می کنیم.

لم ۲-۴-۱: اگر  $G$ ، گرافی غیر منفرد باشد، به عبارت دیگر مقدار ویژه صفر نداشته باشد، آنگاه رابطه

$$(15-2) \text{ برای آن برقرار است [۱۸].}$$

اثبات: با استفاده از رابطه بین میانگین حسابی و هندسی داریم:

$$\frac{1}{n} E(G) \geq \left( \prod_{i=1}^n |\lambda_i| \right)^{\frac{1}{n}} = |\det A(G)|^{1/n}.$$

دترمینان ماتریس مجاورت لزوماً یک عدد صحیح است. چون  $G$  غیر منفرد است لذا

$$|\det A(G)| \geq 1. \text{ بنابراین } |\det A(G)|^{1/n} \geq 1 \text{ و نا مساوی نتیجه می شود.} \blacksquare$$

لم ۲-۴-۲: اگر  $G$  گرافی  $n$  راسی و  $m$  یالی باشد و اگر  $m \geq \frac{n^2}{4}$ ، آنگاه نا مساوی (۱۵-۲) برقرار

است [۱۸].

اثبات: در نتیجه (۲-۱-۲) برای همه گراف ها داریم  $E(G) \geq 2\sqrt{m}$ . باتوجه به فرض داریم  $2\sqrt{m} \geq n$  و لذا نا مساوی (۱۵-۲) برقرار است. ■

لم ۲-۴-۳: اگر  $G$  گراف منتظم از درجه غیر صفر باشد آنگاه نا مساوی (۱۵-۲) برقرار است [۱۸].

اثبات: اگر  $\lambda_1$  بزرگترین مقدار ویژه باشد آنگاه  $\lambda_1 |\lambda_i| \geq \lambda_i^2$  برای  $i = 1, 2, \dots, n$  برقرار است. با جمع بندی روی همه  $i$  ها،  $E(G) \geq 2m/\lambda_1$  بدست می آید. برای گراف منتظم درجه  $r$  داریم:  $\lambda_1 = r$  و  $2m = nr$ ، لذا با جایگذاری نتیجه حاصل می شود. ■

اکنون کلاسی از گراف ها را مشخص می کنیم که در آن ها نا مساوی (۱۵-۲) برقرار است. لذا بحث را با یک تعریف آغاز می کنیم.

تعریف ۲-۴-۱: فرض کنیم  $a$  و  $b$  دو عدد صحیح مثبت و  $1 \leq a < b$  باشند. گراف  $G$  دو منتظم درجه  $a$  و  $b$  نامیم هرگاه حد اقل یک راس از درجه  $a$  و حداقل یک راس از درجه  $b$  داشته باشد و راس دیگری با درجه غیر از  $a$  یا  $b$  نداشته باشد. مجموعه همه گراف های دو منتظم از درجه  $a, b$  را با  $\Gamma_n(a, b)$  نمایش می دهیم. حال اگر  $G \in \Gamma_n(a, b)$ ، آنگاه تعداد راس های  $G$  از درجه  $a$  و  $b$  را به ترتیب با  $n_a$  و  $n_b$  نمایش می دهیم. توجه کنید اگر راس های با درجه یکسان مجاور نباشند آنگاه گراف دو منتظم را، گراف دو بخشی شبه منتظم نامیم. اگر  $G \in \Gamma_n(a, b)$  و  $G$  گراف  $n$  راسی و  $m$  یالی باشد آنگاه داریم [۱۸]:

$$n_a + n_b = n, \quad an_a + bn_b = 2m$$

تعریف ۲-۴-۲:  $M_k$ ،  $k$ -امین گشتاور طیفی است و  $M_k = \sum_{i=1}^n (\lambda_i)^k$  می باشد. توجه کنید اگر  $k$  زوج باشد آنگاه  $M_k = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^k$  است. به عنوان مثال داریم:

$$M_2 = 2m, \quad M_4 = 2 \sum_{i=1}^n (d_i)^2 - 2m + 8q$$

که در آن  $m$  تعداد یال ها،  $d_i$  درجه  $i$ -امین راس و  $q$  تعداد دور های به طول ۴ ( $C_4$ ) است.

نقطه شروع این بحث با نامساوی زیر است:

$$E(G) \geq \sqrt{\frac{(M_2)^3}{M_4}} \quad (۱۶-۲)$$

که در بخش ۴-۱ ارائه شده است. این نامساوی با توجه به روابط بالا این نامساوی به:

$$E(G) \geq 2m \sqrt{\frac{2m}{2\sum_{i=1}^n (d_i)^2 - 2m + 8q}}$$

تبدیل می شود. حال اگر  $G \in \Gamma_n(a, b)$ , آنگاه  $\sum_{i=0}^n (d_i)^2 = a^2 n_a + b^2 n_b$  است و

$$n_a = \frac{bn-2m}{b-a}, n_b = \frac{2m-an}{b-a}$$

لذا داریم:

$$E(G) \geq 2m \sqrt{\frac{2m}{(4a+4b-2)m-2abn+8q}} \quad (۱۷-۲)$$

اکنون گراف هایی در  $\Gamma_n(a, b)$  در نظر می گیریم که دو منتظم بدون دور  $C_4$  می باشند ( $q = 0$ ).

قضیه ۲-۴-۱: اگر  $G$  یک گراف دو منتظم  $n$  راسی بدون دور  $C_4$  از درجه  $a, b$  باشد آنگاه برای

$$2 \leq a < b \leq 2a - 1 \quad \text{نامساوی (۱۵-۲) برقرار است [۱۸].}$$

اثبات: اگر  $d = 2m/n$  میانگین درجه رئوس گراف و  $q = 0$  باشد، آنگاه داریم:

$$E(G) \geq 2m \sqrt{\frac{2m}{(4a+4b-2)m-2abn+8q}} = nd \sqrt{\frac{d}{(2a+2b-1)d-2ab}}$$

تابع  $f(x) = x \sqrt{\frac{x}{(2a+2b-1)x-2ab}}$  را برای  $x \in (a, b)$  تعریف می کنیم. با محاسبه مستقیم

داریم:

$$f(b) = a/\sqrt{2b-1} \quad f(a) = a/\sqrt{2a-1}$$

که  $f(a) < f(b)$  است. حال فرض کنیم  $\alpha(x) = (2a+2b-1)x - 2ab$  باشد. چون  $\alpha(a) = 2a^2 - a > 0$  و  $\alpha(b) = 2b^2 - b > 0$  برای هر  $x \in (a, b)$  است، مشتق اول  $f(x)$  عبارت است از:

$$f'(x) = x\alpha(x)^{-\frac{3}{2}}(2a+2b-1)x - 3ab = x\alpha(x)^{-\frac{3}{2}}f_0(x)$$

و چون  $x\alpha(x)^{-\frac{3}{2}}$  همواره مثبت است لذا تابع  $f(x)$  یکنوای کاهشی در بازه  $(a, b)$  است اگر  $f_0(x) > 0$  برای هر  $x \in (a, b)$  باشد.  $f_0(b) = b(2b-a-1)$  ظاهراً مقدار مثبت است. اکنون نیاز به شرطی برای  $f_0(a) \geq 0$  داریم. چون  $f_0(a) = a(2a-b-1)$  است لذا شرط لازم ایجاد می شود اگر  $2a \geq b+1$ . این نتیجه می دهد که تابع  $f(x)$  یکنوای کاهشی در بازه  $(a, b)$  است اگر و تنها اگر  $2a \geq b+1$ . پس داریم  $\frac{E(G)}{n} > f(a)$  و لذا حکم ثابت است. ■

از این قضیه نتایج زیر حاصل می شود:

(۱) گراف های دو منتظم بدون دور  $C_4$  از درجه  $a, b$  که  $2 \leq a < b \leq 2a-1$  در

نا مساوی (۱۵-۲) صدق می کنند.

(۲) همه سیستم های شش ضلعی در نا مساوی (۱۵-۲) صدق می کنند.

اکنون گراف های دو منتظم را در نظر می گیریم که دارای دور  $C_4$  هستند اما همه این دور

ها مجزا می باشند. اگر همه دور های  $C_4$  از گراف  $n$  راسی مجزا باشند آنگاه  $q \leq n/4$  است.

قضیه ۲-۴-۲: اگر  $G$  یک گراف دو منتظم  $n$  راسی از درجه  $a, b$  باشد به طوری که همه دور های  $C_4$  آن دو به دو مجزا باشند آنگاه برای  $1 \leq a < b \leq 2a - 1 + 3/a$ ، نا مساوی

$$E(G) > \frac{a\sqrt{a}}{\sqrt{2a^2 - a + 2}} n \quad (۱۸-۲)$$

برقرار است [۱۸].

اثبات: فرض کنیم همه دور های  $C_4$  گراف  $n$  راسی دو به دو مجزا باشند و  $q \leq n/4$  باشد. بنابراین با جایگذاری  $n/4$  به جای  $q$  داریم:

$$E(G)/n \geq d \sqrt{\frac{d}{(2a+2b-1)d-2(ab-1)}}$$

مانند قبل، تابع  $g(x) = x \sqrt{\frac{x}{(2a+2b-1)x-2(ab-1)}}$  را روی بازه  $(a, b)$  تعریف می کنیم. مانند عملیاتی که برای  $f(x)$  در قضیه قبل انجام دادیم برای  $g(x)$  هم انجام می دهیم. این تابع یکنوای کاهشی روی بازه  $(a, b)$  است اگر و تنها اگر  $2a^2 - a + 3 \geq ab$  باشد. لذا  $\frac{E(G)}{n} > g(a)$  و حکم ثابت است. ■

از این قضیه نتایج زیر حاصل می شود:

(۱) گراف های دو منتظم از درجه ۲، ۳، ۴، ۲ که همه دور های  $C_4$  آن ها دو به دو مجزا هستند

در نا مساوی (۱۵-۲) صدق می کنند.

(۲) گراف های دو منتظم از درجه  $a, b$  که همه دور های  $C_4$  آن ها دو به دو مجزا هستند، به

طوری که  $3 \leq a < b \leq 2a - 1 + 3/a$  در نا مساوی (۱۵-۲) صدق می کنند.

به عنوان مثال داریم:

$$. E > \sqrt{27/17} \text{ برای } a = 3 \text{ و } E > \sqrt{32/15} \text{ برای } a = 4$$

نکته ۲-۴-۱: برای  $a = 1, b \geq 2$  گراف  $G \in \Gamma_n(a, b)$  وجود دارد به طوری که (۲-۱۵) برقرار است. ساده ترین مثال ستاره  $n$  راسی است [۱۸].

این حقیقت علمی وجود دارد که گراف هایی که شامل بعضی گراف های مولکولی اند و دو منتظم نمی باشند در (۲-۱۵) صدق می کنند. به خصوص وقتی تعداد یال ها زیاد باشد.

تعریف ۲-۴-۳: گراف  $G$  را سه منتظم از درجه  $x, y, z$  و  $z$  نامیم  $(x < y < z)$  هرگاه حداقل یک راس از درجه  $x$  و حداقل یک راس از درجه  $y$  و حداقل یک راس از درجه  $z$  داشته باشد و هیچ راس دیگری از  $G$  درجه ای غیر از  $x$  یا  $y$  یا  $z$  نداشته باشد. مجموعه گراف های  $n$  راسی سه منتظم از درجه  $x, y, z$  را با  $\Theta_n(x, y, z)$  نمایش می دهیم [۲۲].

قضیه ۲-۴-۳: فرض کنیم  $G \in \Gamma_n(a, b)$  و تعداد دور های  $C_4(q)$ ، آن کمتر مساوی با  $abn/4$  باشد. آنگاه اگر  $5 \leq a < b \leq (a-1)^2/2$  برقرار است [۲۲].

اثبات: اگر  $q \leq abn/4$  آنگاه  $-2abn + 8q \leq 0$ . با استفاده از نا مساوی (۲-۱۷) داریم:

$$E(G) \geq 2m\sqrt{1/(2a+2b-1)}$$

به عبارت دیگر

$$E(G)/n \geq d\sqrt{1/(2a+2b-1)} > a\sqrt{1/(2a+2b-1)}$$

که  $d = 2m/n$  اما  $a/\sqrt{1/(2a+2b-1)} \geq 1$  اگر و تنها اگر  $b \leq (a-1)^2/2$  بنابراین  $E(G)/n \geq 1$  اگر  $5 \leq a < b \leq (a-1)^2/2$  باشد. ■



نتیجه ۲-۴-۱: اگر  $G \in \Gamma_n(a, b)$  بدون دور  $C_4$  باشد آنگاه برای  
 $5 \leq a < b \leq (a-1)^2/2$ ، نا مساوی (۲-۱۵) برقرار است [۲۲].

لذا قضیه زیر را خواهیم داشت:

قضیه ۲-۴-۴: اگر  $G$  گراف مولکولی بدون دور  $C_4$  با  $n$  راس و  $m$  یال و  $k$  راس وابسته باشد و اگر  
 $6n^3 - (9m + 2k)n^2 + 4m^3 \geq 0$ ، آنگاه نا مساوی (۲-۱۵) برقرار است [۲۲].

اثبات: اگر  $G \in \Theta_n(1, a, b)$  باشد و دارای  $m$  یال باشد آنگاه داریم:

$$k + n_a + n_b = n, \quad k + an_a + bn_b = 2m$$

که در آن  $k$  تعداد راس های درجه یک یا راس های وابسته است. برای این گراف ها  $n_a$  و  $n_b$  برابرند  
 با:

$$n_a = \frac{b(n-k) - (2m-k)}{b-a}, \quad n_b = \frac{(2m-k) - a(n-k)}{b-a}$$

همچنین اگر  $d_i$  درجه  $i$ -امین راس باشد آنگاه:

$$\sum_{i=1}^n d_i^2 = 1^2k + a^2n_a + b^2n_b = k + (2m-k)(b+a) - (n-k)ab$$

$$M_4 = (2b + 2a - 1)(2m - k) - 2ab(n - k) + k + 8q$$

اکنون با توجه به نا مساوی (۲-۱۶) داریم:

$$E(G) \geq 2m \sqrt{\frac{2m}{(2a+2b-1)(2m-k) - 2ab(n-k) + k + 8q}}$$

اگر  $G \in \Theta_n(1, 2, 3)$  گراف مولکولی بدون دور  $C_4$  باشد آنگاه  $q = 0$  و  $a = 2$  و  $b = 3$

بنابراین

$$E(G) \geq 2m \sqrt{\frac{2m}{9(2m-k)-12(-k)+k}}$$

$$E(G)/n \geq 2m/n \sqrt{\frac{m}{9m-6n+2k}} \geq 1$$

اما  $2m/n \sqrt{\frac{m}{9m-6n+2k}} \geq 1$  اگر و تنها اگر  $6n^3 - (9m + 2k)n^2 + 4m^3 \geq 0$  باشد و

لذا حکم ثابت است. ■

نتیجه ۲-۴-۲: اگر  $G$  گراف مولکولی بدون دور  $C_4$  با  $n$  راس و  $m$  یال باشد و اگر

$$4(n^3 + m^3) \geq 9mn^2, \text{ آنگاه نا مساوی (۲-۱۵) برقرار است [۲۲].}$$

اثبات:  $k \leq n$  که  $k$  تعداد راس های وابسته است. اگر  $4(n^3 + m^3) \geq 9mn^2$  آنگاه

$$0 \leq 4n^3 - 9mn^2 + 4m^3 = 6n^3 - (9m + 2n)n^2 + 4m^3 \leq 6n^3 - (9m + 2k)n^2 + 4m^3$$

لذا با توجه به قضیه قبل نا مساوی (۲-۱۵) برقرار است. ■

آخرین قضیه این قسمت عبارت است :

قضیه ۲-۴-۵: فرض کنیم  $G \in \Theta_n(x, y, z)$  گراف بدون دور  $C_4$  باشد و دارای راس وابسته

بیشتر از  $12n/13$  نباشد. اگر  $5 \leq a < b \leq (a-1)^2/2$  و اگر میانگین درجه رئوس  $G$

بیشتر از  $a$  باشد آنگاه نا مساوی (۲-۱۵) برقرار است [۲۲].

اثبات: چون  $G$  بدون دور  $C_4$  است داریم:

$$E(G) \geq 2m \sqrt{\frac{2m}{(2a+2b-1)(2m-k)-2ab(n-k)+k}}$$

$$\geq 2m/n \sqrt{\frac{2m-k}{(2a+2b-1)(2m-k)-2ab(n-k)+k}}$$

توجه کنید که  $k \leq 12n/13$  نتیجه می دهد  $k \leq 12(n-k) \leq 2ab(n-k)$  به عبارت دیگر  $-2ab(-k) + k \leq 0$  است. لذا داریم:

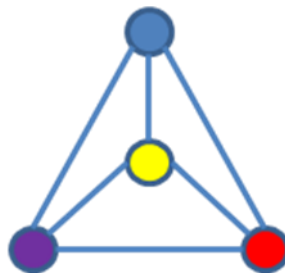
$$E(G)/n \geq d \sqrt{\frac{1}{(2a+2b-1)}} > \frac{a}{\sqrt{2b+2a-1}}$$

با توجه به قضایای قبل داریم  $d > a$ . پس  $\frac{a}{\sqrt{2b+2a-1}} \geq 1$  برقرار است اگر و تنها اگر  $(a-1)^2/2 \geq b$ . بنابراین  $E(G) \geq n$  است. ■

## ۵-۲ رابطه انرژی با عدد رنگی و رتبه

در این قسمت کران هایی برای انرژی معرفی می کنیم که با توجه به عدد رنگی و رتبه است. در این قسمت تعریف رتبه را با توجه به تعریفی که در فصل اول آورده شده بیان می کنیم.

**تعریف ۵-۲-۱:** عدد رنگی گراف  $G$ ، تعداد رنگ مورد نیاز برای رنگ آمیزی رئوس گراف  $G$  است به طوری که هیچ یک از رئوس مجاور دارای رنگ یکسان نباشند (شکل ۱-۲). عدد رنگی گراف  $G$  را با  $\chi(G)$  نمایش می دهند. در شکل (۱-۲) عدد رنگی ۴ است.



شکل ۱-۲ رنگ آمیزی گراف

تعریف ۲-۵-۲: رتبه گراف  $G$  برابر است با رتبه ماتریس مجاورت آن گراف که با  $r$  نمایش می دهیم [۲۵].

لم ۱-۵-۲: فرض کنیم  $G$  گراف دارای  $n$  راس باشد. آنگاه  $E(G) \geq r$  و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $G = \frac{r}{2}K_2 \cup (n-r)K_1$  برای هر  $r$  صحیح و مثبت باشد [۲۵].

اثبات: فرض کنیم  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$  مقادیر ویژه غیر صفر از  $G$  باشند. فرض کنیم

$$\lambda^{n-r}(\lambda^r + a_1\lambda^{r-1} + \dots + a_r)$$

چند جمله ای مشخصه  $G$  باشد و  $a_r$  عدد صحیح غیر صفر است. پس نا مساوی حسابی-هندسی نتیجه می دهد که

$$\frac{|\lambda_1| + \dots + |\lambda_r|}{r} \geq \sqrt[r]{|\lambda_1| \dots |\lambda_r|} = \sqrt[r]{|a_r|} \geq 1$$

بنابراین  $E(G) \geq r$ . اگر  $G = \frac{r}{2}K_2 \cup (n-r)K_1$  بدیهی است که  $E(G) = r$ . به عکس،

فرض کنیم  $E(G) = r$  باشد. بنابراین نا مساوی بالا برقرار است و  $|\lambda_1| = \dots = |\lambda_r| = 1$  پس

از ۱-۲-۱ داریم  $G = \frac{r}{2}K_2 \cup (n-r)K_1$  و حکم ثابت است. ■

قضیه ۱-۵-۲: یک گراف دارای دقیقا یک مقدار ویژه مثبت است اگر و تنها اگر راس های غیر تنه ای آن تشکیل یک گراف چند بخشی کامل بدهند [۳۵].

اثبات: اگر گراف  $G$  چند بخشی کامل نباشد، دارای زیر گرافی به صورت a شکل ۲-۲ دارد زیرا رابطه غیر مجاورت راس های  $G$  باید غیر تعدی باشد. اما  $x$  راس تنها در  $G$  نیست. لذا  $G$  دارای حداقل یکی از گراف های  $b$ ،  $c$  و یا  $d$  در شکل ۲-۲ به عنوان زیرگراف است. همه این گراف ها دارای دو

مقدار ویژه مثبت می باشند. لذا با توجه به قضیه ۱-۲-۱ تناقض است و لذا باید گراف  $G$  چند بخشی کامل باشد. برای حالت عکس نیز با توجه به چند جمله ای مشخصه گراف های چند بخشی کامل (۲،۵۱) در مرجع [۳۵] اثبات واضح است.



شکل ۲-۲

قضیه ۲-۵-۲: برای هر گراف همبند  $G$  صرف نظر از  $K_1$  و  $K_{1,i}$  که  $1 \leq i \leq 3$ ، داریم [۲۵]:

$$E(G) \geq 4$$

اثبات: فرض کنیم که  $G$  حد اقل چهار راسی باشد. لذا اگر  $r \geq 2$  اگر  $r = 2$  آنگاه  $K_{r,s}$  است که  $rs \geq 4$  و  $E(G) \geq 2\sqrt{rs} \geq 4$ . اگر  $r = 3$  آنگاه  $G$  دارای سه مقدار ویژه غیر صفر است و دقیقاً دارای یک مقدار ویژه مثبت است. از سوی دیگر مجموع مقادیر ویژه  $G$  صفر نیست زیرا  $\lambda_1$  بیشترین مقدار قدر مطلق را دارا است. بنابراین از قضیه (۱-۵-۲)،  $G$  گراف چند بخشی کامل است. چون رتبه گراف  $t$  بخشی کامل برابر  $t$  است،  $G$  گراف ۳-بخشی کامل است. بنابراین  $G$  دارای زیر گراف  $K_3$  است. پس  $E(G) \geq E(K_3)$ . اگر  $rank(G) \geq 4$  آنگاه از لم (۱-۵-۲) داریم

$$\blacksquare \quad E(G) \geq 4$$

فرض کنیم  $A_{n,t}$  برای  $1 \leq t \leq n-1$ ، گراف بدست آمده توسط اتصال یک راس جدید به  $t$  راس از گراف کامل  $K_n$  باشد. همچنین فرض کنیم  $B_n$  گراف حاصل از اضافه شدن دو راس وابسته به یک راس از  $K_n$  باشد. به این ترتیب  $B_n$  دارای  $n+2$  راس می باشد.

قضیه ۲-۵-۳: اگر  $G$  گراف باشد آنگاه  $E(G) < 2\chi(G)$  اگر و تنها اگر  $G$  یک اجتماع از تعدادی راس تنها و یکی از گراف های زیر باشد [۲۵]:

(۱) گراف کامل  $K_n$

(۲) گراف  $B_n$

(۳) گراف  $A_{n,t}$  برای  $n \leq 7$  به استثنای وقتی که  $(n,t) = (7,4)$  و برای  $n \geq 8$  با  $t \in \{1,2,n-1\}$ .

(۴) یک مثلث با دو راس وابسته مجاور با راس های متفاوت. (شکل (۲-۳) را ببینید).



گراف  $H_5$  شکل ۲-۳

نتیجه ۲-۵-۱: فرض کنیم  $G$  گرافی دارای  $n$  راس با  $n \geq 3$  باشد. اگر  $G$  یا  $\bar{G}$  گراف کامل نباشند و یا یکی از  $A_{3,1}, B_2, B_1, A_{k,k-1}$  نباشند آنگاه داریم [۲۵]:

$$E(G) + E(\bar{G}) \geq 2n$$

اثبات: اگر  $\bar{G}$  گراف شرح داده شده در قضیه (۲-۵-۳) نباشد آنگاه  $E(\bar{G}) \geq 2\chi(\bar{G})$  اگر  $G = H_5$  آنگاه  $E(G) + E(\bar{G}) \geq 10$  است. اگر  $G$  کامل باشد و یا یکی از گراف های  $B_2, B_1$  و  $A_{3,1}$  باشد، به آسانی دیده می شود که  $E(G) + E(\bar{G}) < 2n$  اگر  $G = A_{k,k-1}$  آنگاه  $\bar{G} = K_2 \cup (k-1)K_1$  و بنابراین  $E(A_{k,k-1}) + E(\bar{A}_{k,k-1}) < 2k + 2 = 2n$  است. برای کامل شدن اثبات کافی است نشان دهیم که برای  $B_k$  با  $k \geq 3$  و  $A_{k,t}$  با  $k \geq 4$  و  $t = 1, 2$  برقرار است.

گراف  $B_k$  دارای  $k - 2$  مقدار ویژه ی  $-1$  است و  $\lambda_n(B_k) \leq \lambda_6(B_4) < -1.8$  لذا  
 پس  $E(B_k) > 2(k - 0.2)$  است. از طرف دیگر  $K_{1,1,2}$  یک زیرگراف القایی از  $\overline{B_k}$  است. پس  
 $E(\overline{B_k}) \geq E(K_{1,1,2}) > 5$  و لذا  $E(B_k) + E(\overline{B_k}) \geq 2(k + 2)$  گراف  $A_{k,t}$  دارای  
 $k - 1$  مقدار ویژه  $-1$  است و  $\lambda_n(A_{k,1}) \leq \lambda_5(A_{4,1}) < -1.5$  پس  
 $E(A_{k,1}) > 2k - 1$  بنابراین  $\lambda_n(A_{k,2}) \leq \lambda_5(A_{4,2}) < -1.68$   
 و  $E(A_{k,2}) > 2k - 0.64$  اکنون  $E(\overline{A_{k,1}}) \geq E(K_{1,3}) > 3.4$  و  
 $E(\overline{A_{k,2}}) \geq E(K_{1,2}) > 2.8$  و لذا اثبات کامل است.

## ۲-۶ نتیجه گیری

در این فصل کران های زیر ارائه شد:

- i.  $\sqrt{2m + n(n - 1)|\det A|^{2/n}} \leq E(G) \leq \sqrt{2mn}$
- ii.  $2\sqrt{m} \leq E(G) \leq 2m$
- iii.  $E(G) \geq 2\sqrt{n - 1}$
- iv.  $E(G) \leq \frac{m}{\sqrt{pq}} + \sqrt{(p - 1)\left(m - \frac{m^2}{pq}\right)}$

که در آن  $p$  و  $q$  تعداد سطر و تعداد ستون ماتریس می باشند.

- v.  $E(G) \geq 4$

## **فصل سوم**

**انرژی گراف های بدون دور و درخت ها**



در این فصل به دنبال دسته بندی انرژی، انرژی گراف های بدون دور و درخت ها را بررسی می کنیم. مطالب این فصل، در دو قسمت بیان می شود. در قسمت اول درخت های دارای کمترین و بیشترین انرژی را در بین همه درخت ها را مشخص می کنیم و در قسمت دوم در بین همه درخت های دارای  $k$  راس وابسته درختی که دارای کمترین انرژی است را مشخص می کنیم.

ابتدا چند لم برای چند جمله ای های درخت ها بیان می کنیم:

لم ۱-۳: اگر  $G$  یک گراف باشد و  $uv$  یالی وابسته از آن، آنگاه چندجمله ای مشخصه  $G$  در رابطه زیر صدق می کند [۳۵]:

$$\phi(G) = x\phi(G - v) - \phi(G - \{u, v\}). \quad (1-3)$$

تعمیم این لم به شکل زیر است:

اگر  $G$  یک جنگل باشد و  $v$  راسی از آن، آنگاه چند جمله ای مشخصه  $G$  در رابطه زیر صدق می کند:

$$\phi(G) = x\phi(G - v) - \sum_u \phi(G - \{u, v\}) \quad (2-3)$$

که در آن مجموع روی همه راس های مجاور با  $v$  است.

لم ۲-۳: اگر  $G$  یک گراف با مولفه های  $G_1, G_2, \dots, G_t$  باشد آنگاه داریم [۳۵]:

$$\phi(G) = \prod_{i=1}^t \phi(G_i). \quad (3-3)$$

اثبات: بدون کم شدن از کلیت مساله، فرض کنیم  $G$  دارای دو مولفه  $G_1$  و  $G_2$  باشد. اگر ماتریس مجاورت  $G$  را  $A$  بنامیم و ماتریس های مجاورت  $G_1$  و  $G_2$  به ترتیب  $A_1$  و  $A_2$  باشند، آنگاه داریم:

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix}$$

$$\phi(G) = \det(\lambda I - A) = \det \begin{pmatrix} \lambda I - A_1 & 0 \\ 0 & \lambda I - A_2 \end{pmatrix}$$

$$= \det(\lambda I - A_1) \det(\lambda I - A_2) = \phi(G_1) \phi(G_2).$$

و لذا حکم ثابت است. ■

تعریف ۳-۱: برای دو گراف  $G$  و  $G'$  می نویسیم  $G \geq G'$  هرگاه  $\phi(G) \geq \phi(G')$  باشد. در حالت اکید نیز این رابطه برقرار است.

لم ۳-۳: اگر  $G$  و  $G'$  دو جنگل از مرتبه  $n$  باشند و چند جمله ای مشخصه آن ها نیز عبارت باشد از:

$$\phi(G) = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} a_k x^{n-2k} \quad \phi(G') = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} a'_k x^{n-2k}$$

آنگاه  $G \geq G'$  اگر و تنها اگر  $a_0 - a'_0 = 0$  و  $(-1)^k (a_k - a'_k) \geq 0$  برای  $k = 1, 2, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$  باشد [۳]. همچنین اگر  $G > G'$  و تنها اگر  $k$  ای  $(1 \leq k \leq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor)$  وجود داشته باشد که  $(-1)^k (a_k - a'_k) > 0$ .

اثبات: اگر  $G \geq G'$  باشد داریم  $\phi(G) \geq \phi(G')$ . در نتیجه واضح است که شرایط حکم برقرار است. به عکس اگر  $a_0 - a'_0 = 0$  و  $(-1)^k (a_k - a'_k) \geq 0$  برای  $k = 1, 2, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$  آنگاه با جایگذاری در چند جمله ای مشخصه حکم ثابت می شود. ■

توجه کنید که اگر  $G$  و  $G'$  دو جنگل باشند و تعداد  $k$ -جور سازی های گراف  $G$  را با  $m(G, k)$

نشان می دهیم آنگاه:

$$(-1)^k a_k = m(G, k) \quad (-1)^k a'_k = m(G', k) \quad (۴-۳)$$

$$m(G, 0) = m(G', 0) = 1 \quad (۵-۳)$$

بنابراین لم بالا را می توان به شکل زیر نوشت:

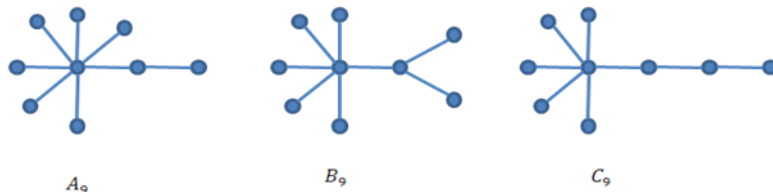
اگر  $G$  و  $G'$  دو جنگل از مرتبه  $n$  باشند آنگاه  $G \geq G'$  اگر و تنها اگر  
 $m(G, k) \geq m(G', k)$  برای هر  $k = 1, 2, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$  باشد؛ همچنین  $G > G'$  اگر و تنها اگر  $k$   
 ای  $(1 \leq k \leq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor)$  وجود داشته باشد که  $m(G, k) > m(G', k)$  باشد.

لم ۳-۴: اگر  $G$  یک جنگل از مرتبه  $n$  ( $n > 1$ ) باشد و  $G'$  یک زیر درخت فراگیر از  $G$  باشد آنگاه  
 $G \geq G'$  است [۳].

### ۳-۱-۱ درخت های دارای بیشترین و کمترین انرژی

مطالب این قسمت را با تعریف چند درخت آغاز می کنیم:

تعریف ۳-۱-۱:  $A_n$  درختی است که توسط اتصال یک راس به یک راس پایانی از گراف ستاره  $S_n$   
 بدست آمده است و  $B_n$  درختی است که توسط اتصال یک راس به راس درجه دو از  $A_{n-1}$  بدست  
 می آید و  $C_n$  درختی است که توسط اتصال یک راس از مسیر  $P_2$  به راس پایانی از گراف ستاره  
 $S_{n-2}$  بدست می آید [۲]. (شکل ۳-۵ را ببینید.)

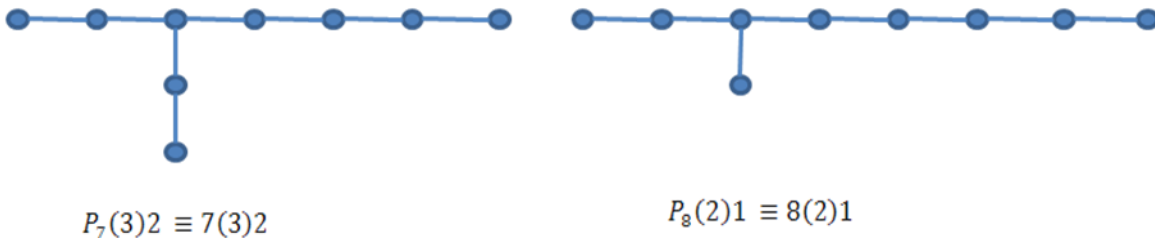


شکل ۳-۱

تعریف ۳-۱-۲: اگر  $G$  گراف دلخواه و  $v$  راس دلخواه آن باشد آنگاه  $G(v)m$  گراف به دست آمده  
 توسط اتصال راس پایانی از مسیر  $P_m$  به راس  $v$  از  $G$  است. در حالت خاص  $P_n(v)m$  توسط اتصال

راس پایانی از  $P_m$  به  $v$  امین راس از  $P_n$  به دست می آید. برای سادگی ما  $P_n(v)m$  را با  $n(v)m$  نشان می دهیم [۲].

به عنوان مثال داریم:  $P_8(2)1 \equiv 8(2)1$  و  $P_7(3)2 \equiv 7(3)2$ .



شکل ۲-۳

اگر  $T$  درخت باشد آنگاه ضرایب چندجمله ای مشخصه آن به شکل زیر است:  
 $b_j(T) = p(T, j)$  که در آن  $p(T, j)$ ، تعداد راه های انتخاب  $j$  یال غیر مجاور در  $T$  است. برای همه درخت ها داریم:  $b_1(T)$  برابر با تعداد یال های  $T$  است.

از لم (۱-۳) داریم:

$$\phi(T, x) = \phi(T - e, x) - \phi(T - (e), x) \quad (۶-۳)$$

که  $T - e$  گراف حاصل از حذف یک یال  $e$  از درخت  $T$  است و  $T - (e)$  نیز حاصل از حذف یال  $e$  و دو راس مجاور آن از درخت  $T$  است. همچنین دنباله زیر برای ضرایب چندجمله ای ویژه به شکل زیر است:

$$b_j(T) = b_j(T - e) + b_{j-1}(T - (e)). \quad (۷-۳)$$

پس دقیقاً  $p(T - e, j)$  انتخاب بدون یال  $e$  و  $p(T - (e), j - 1)$  انتخاب با یال  $e$  وجود دارد. معادله (۷-۳) را می توان برحسب راس ها نیز نوشت:

فرض کنیم  $v$  یک راس وابسته از  $T$  مجاور با راس دیگر  $w$  باشد. اگر  $e$  یال بین این دو راس باشد آنگاه داریم:

$$b_j(T) = b_j(T - v) + b_{j-1}(T - v - w) \quad (۸-۳)$$

که در آن  $T - v$  و  $T - v - w$  به ترتیب گراف های حاصل از حذف راس  $v$  و راسهای  $v$  و  $w$  از  $T$  می باشند.

قضیه ۳-۱-۱: برای هر  $T \in \mathcal{T}_n$  داریم:  $S_n < T$  [۲].

اثبات: چند جمله ای مشخصه گراف ستاره عبارت است از  $P(S_n, x) = x^n - (n-1)x^{n-2}$  اما همه درخت های دیگر از  $\mathcal{T}_n$  دارای  $b_1 = n-1$  و  $b_2 > 0$  می باشند. بنابراین  $b_j(T) > b_j(S_n)$  برای  $j = 1, 2, \dots, k$  و لذا حکم ثابت است. ■

قضیه ۳-۱-۲: برای هر  $T \in \mathcal{T}_n$  داریم:  $P_n > T$  [۲].

اثبات: به راحتی می توان بررسی کرد که نا مساوی این قضیه برای  $n = 2, 3, 4$  برقرار است. حال فرض کنیم که برای  $n = 2, 3, \dots, m-1$  درست باشد. اگر  $T_0$  درختی باشد که  $T_0 > T$  برای هر  $T$  در  $\mathcal{T}_m$  ثابت می کنیم که  $T_0 = P_m$ .

اگر  $v$  یک راس وابسته از  $T_0$  مجاور با راس  $w$  باشد آنگاه معادله (۸-۳) برقرار است. اکنون  $b_j(T_0)$  ماکسیمال است اگر  $b_j(T_0 - v)$  و  $b_{j-1}(T_0 - v - w)$  هر دو ماکسیمال باشند. لذا با توجه به فرض داریم:

$$T_0 - v - w = P_{m-2} \quad T_0 - v = P_{m-1}$$

و این تنها وقتی ممکن است که  $T_0 = P_m$ . ■

قضیه ۳-۱-۳: برای هر  $T \in \mathcal{J}_n$  داریم [۲]:

$$E(S_n) < E(T) < E(P_n). \quad (۹-۳)$$

اثبات: با توجه به دو لم قبل واضح است. ■

قضیه ۴-۱-۳: اگر  $T \in \mathcal{J}_n$  اما  $T \neq S_n, A_n, B_n, C_n$  آنگاه خواهیم داشت [۲]:

$$S_n < A_n < B_n < C_n < T \quad \& \quad (۱۰-۳)$$

$$E(S_n) < E(A_n) < E(B_n) < E(C_n) < E(T)$$

اثبات: این قسمت اثباتی مشابه با قضیه (۳-۱-۱) دارد که روی اطلاعات چند جمله ای مشخصه آن ها پایه گذاری شده است.

$$P(A_n, x) = x^n - (n-1)x^{n-2} + (n-3)x^{n-4}$$

$$P(B_n, x) = x^n - (n-1)x^{n-2} + (2n-8)x^{n-4}$$

$$P(C_n, x) = x^n - (n-1)x^{n-2} + (2n-7)x^{n-4}. \quad \blacksquare$$

قضیه ۵-۱-۳: فرض کنیم  $n(+)m$  گرافی باشد که مولفه های آن تنها  $P_n$  و  $P_m$  باشد. آنگاه برای هر  $i = 1, 2, \dots, n$  داریم [۲]:

$$1(+)n - 1 < i(+)n - i < 2(+)n - 2 < 0(+)n \equiv P_n \quad (۱۱-۳)$$

اثبات: اثبات را به استقرا ارائه می کنیم. نا مساوی بالا به آسانی برای  $n = 6, 7$  درست است. فرض

کنیم برای هر  $n = 6, 7, \dots, m-1$  نا مساوی (۱۱-۳) برقرار باشد. نشان می دهیم برای  $n = m$

نیز برقرار است. از معادله (۸-۳) برای هر  $i$  دلخواه داریم:

$$b_i(P_m) = b_j(i(+)m - i) + b_{j-1}(i - 1(+)m - i - 1)$$

از اینکه  $b_j(P_m)$  مستقل از  $i$  است،  $b_j(i(+)m - i)$  مینیمال خواهد بود اگر  $b_{j-1}(i - 1(+)m - i - 1)$  ماکسیمال باشد. با توجه به قضیه (۳-۱-۲) این وقتی اتفاق می افتد که  $i - 1 = 0$ . بنابراین  $i(+)m - i < 1(+)m - 1$ . به علاوه برای  $i \neq 0$  و  $i \neq n$ ،  $b_j(i(+)m - i)$  ماکسیمال است اگر  $b_{j-1}(i - 1(+)m - i - 1)$  مینیمال باشد. لذا با توجه به فرض استقرا، زمانی رخ می دهد که  $i - 1 = 1$ . بنابراین  $i(+)m - i > 2(+)m - 2$  است. ■

قضیه ۳-۱-۶: اگر  $t$  عدد صحیح باشد آنگاه داریم [۲]:

(۱) اگر  $n = 4t$  آنگاه:

$$n - 1(2)1 < n - 1(4)1 < \dots < n - 1(k)1 < n - 1(k - 1)1 < n - 1(k - 3)1 < \dots < n - 1(3)1 < n - 1(1)1 \equiv P_n$$

(۲) اگر  $n = 4t + 2$  آنگاه:

$$n - 1(2)1 < n - 1(4)1 < \dots < n - 1(k - 1)1 < n - 1(k)1 < n - 1(k - 2)1 < \dots < n - 1(3)1 < n - 1(1)1 \equiv P_n$$

(۳) اگر  $n = 4t + 1$  آنگاه:

$$n - 1(2)1 < n - 1(4)1 < \dots < n - 1(k)1 < n - 1(k + 1)1 < n - 1(k - 1)1 < \dots < n - 1(3)1 < n - 1(1)1 \equiv P_n$$

(۴) اگر  $n = 4t + 3$  آنگاه:

$$n-1(2)1 < n-1(4)1 < \dots < n-1(k+1)1 < n-1(k)1 < n-1(k-2)1 < \dots < n-1(3)1 < n-1(1)1 \equiv P_n$$

که در آن

$$k = \begin{cases} \frac{n}{2} & n \text{ زوج باشد} \\ \frac{n-1}{2} & n \text{ فرد باشد} \end{cases}$$

می باشد.

اثبات: با به کاربردن معادله (۸-۳) داریم:

$$b_j(n-1(i)1) = b_j(P_{n-1}) + b_{j-1}(i-1(+)n-i-1)$$

از اینکه  $b_j(P_{n-1})$  مستقل از  $i$  است،  $b_j(n-1(i)1)$  مینیمال خواهد بود اگر  $b_{j-1}(i-1(+)n-i-1)$  مینیمال باشد، که زمانی است که  $i-1=1$  باشد. پس  $n-1(2)1 < n-1(i)1$  به طور مشابه  $b_j(n-1(i)1)$  ماکسیمال است اگر  $b_{j-1}(i-1(+)n-i-1)$  ماکسیمال باشد، که زمانی رخ می دهد که  $i-1=2$  باشد. پس اگر  $i \neq 1$  آنگاه  $n-1(3)1 > n-1(i)1$  است. دیگر عبارات این قضیه به همین روش اثبات می شود. ■

در زیر رابطه دیگری بین انرژی دو درخت ارائه می دهیم:

قضیه ۷-۱-۳: اگر  $H$  و  $G$  دو درخت  $n$  راسی باشند و  $g$  و  $h$  راس های دلخواه از آن دو باشند. اگر

$$G > H \text{ و } G(g)1 > H(h)1 \text{ آنگاه برای هر } i \text{ دلخواه داریم [۲]:}$$

$$G(g)i > H(h)i \quad (۱۲-۳)$$



اثبات: داریم

$$b_j(G(g)i) = b_j(G(g)i - 1) + b_{j-1}(G(g)i - 2)$$

$$b_j(H(h)i) = b_j(H(h)i - 1) + b_{j-1}(H(h)i - 2)$$

پس از

$$b_j(G(g)i - 1) \geq b_j(H(h)i - 1)$$

و

$$b_{j-1}(G(g)i - 2) \geq b_{j-1}(H(h)i - 2)$$

نتیجه می شود که  $b_j(G(g)i) \geq b_j(H(h)i)$  و حکم ثابت است. ■

اکنون درخت دارای انرژی ماکسیمال دومین (قبل از  $P_n$ ) را معرفی می کنیم.

قضیه ۳-۱-۸: برای هر  $i \neq 1, n$  داریم:  $n - 1(i)1 < n - 2(3)2$ . [۲]

اثبات: با توجه به قضیه (۳-۱-۳)، کافی است نشان دهیم که  $n - 1(3)1 < n - 2(3)2$  است.

$$b_j(n - 2(3)2) = b_j(n - 2(3)1) + b_{j-1}(P_{n-2})$$

$$b_j(n - 1(3)1) = b_j(n - 2(3)1) + b_{j-1}(n - 3(3)1)$$

و لذا  $b_{j-1}(P_{n-2}) \geq b_{j-1}(n - 3(3)1)$  است اثبات کامل است. ■

قضیه ۳-۱-۹: اگر  $T \in \mathcal{T}_n$  ولی  $T \neq P_n$  آنگاه  $n - 2(3)2 > T$  است [۲].

اثبات: برای  $n = 6, 7$  نا مساوی بالا برقرار است. فرض کنیم این نا مساوی برای

$n = 6, 7, \dots, m - 1$  برقرار باشد و اگر  $T_0$  درختی باشد که  $T_0 > T$  برای هر  $T \in \mathcal{T}_n$  و

$T \neq P_n$ ، آنگاه نشان می دهیم که  $T_0 = n - 2(3)2$  است. اگر  $v$  یک راس وابسته از  $T_0$  مجاور با  $w$  باشد آنگاه

$$b_j(T_0) = b_j(T_0 - v) + b_{j-1}(T_0 - v - w)$$

است. از اینکه

$$b_j(n - 2(3)2) = b_j(n - 3(3)2) + b_{j-1}(n - 4(3)2)$$

برقرار است، نا مساوی  $b_j(T_0) \geq b_j(n - 2(3)2)$  برآورده می شود اگر  $T_0 = n - 2(3)2$  یا  $T_0 - v = P_{n-1}$  یا  $T_0 - v - w = P_{n-2}$  باشد. اگر  $T_0 - v = P_{n-1}$ ، باید  $T_0 = n - 1(i)1$  باشد و با توجه به قضیه قبل، نتیجه می شود که  $T_0 < n - 2(3)2$ . اگر  $T_0 - v - w = P_{n-2}$ ، آنگاه باید  $T_0 = n - 2(i)2$  باشد. از دنباله قضیه (۳-۱-۸) داریم  $n - 2(3)2 > n - 2(i)2$  و بنابراین  $T_0 = n - 2(3)2$  است. ■

### ۲-۳ انرزی درخت های $n$ راسی با $k$ راس وابسته

در این قسمت انرزی درخت هایی به جز گراف مسیر و گراف ستاره را تعیین می کنیم که در آنها به تعداد  $k$  راس وابسته وجود داشته باشد که منظور از راس وابسته، راسی است که درجه آن یک باشد. مجموعه همه درخت های  $n$  راسی با  $k$  راس وابسته را با  $J_{n,k}$  نمایش می دهیم.

فرض کنیم  $P_{n,k}$  گراف حاصل از اتصال  $k-1$  راس وابسته به راس درجه یک از مسیر  $P_{n-k+1}$  باشد. در زیر نشان می دهیم این گراف کمترین انرزی را در بین درخت های  $J_{n,k}$  دارد.



شکل ۳-۳ گراف  $P_{n,k}$

لم ۳-۲-۱: فرض کنیم  $T$  و  $T'$  دو درخت از مرتبه  $n$  باشند. و  $uv$  ( $u'v'$ ) یال وابسته ای از  $T$  ( $T'$ ) و  $u$  ( $u'$ ) راس وابسته از  $T$  ( $T'$ ) باشد. فرض کنیم:

$$T_1 = T - u \quad T_2 = T - \{u, v\}$$

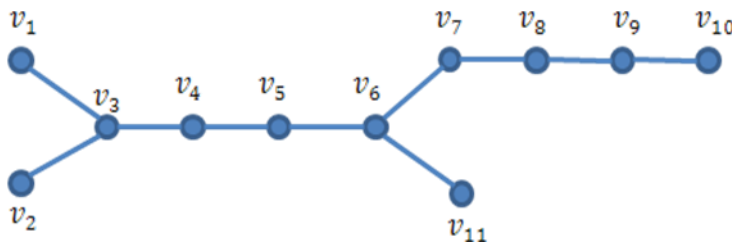
$$T'_1 = T' - u \quad T'_2 = T' - \{u', v'\}$$

اگر  $T_1 \geq T'_1$  و  $T_2 > T'_2$ ، یا  $T_1 > T'_1$  و  $T_2 \geq T'_2$  باشد آنگاه داریم:  $T > T'$  [۳].

فرض کنیم  $P = v_0 v_1 \dots v_k$ ،  $k \geq 1$ ، یک مسیر از درخت  $T$  باشد و اگر درجه  $v_0$  و  $v_k$  بزرگتر از ۳ و درجه دیگر راس ها برابر ۲ باشد آنگاه  $P$  رامسیر داخلی  $T$  نامیم. در این تعریف اگر  $k = 1$  آنگاه مسیر را وابسته یا یال وابسته نامیم.

تعداد راس ها با درجه بیش از دو را با  $s(T)$  و تعداد مسیرهای وابسته با طول بیش از یک را با

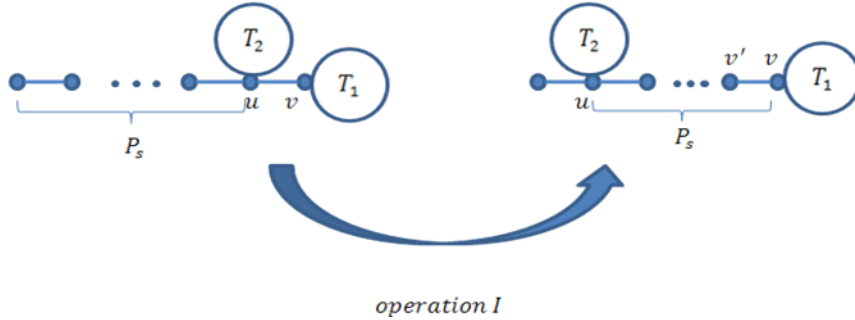
$p(T)$  نمایش می دهیم.



شکل ۳-۴ مسیر مستقل داخلی

تعریف ۳-۲-۱: در درخت  $T$  فرض کنیم  $P_s$  مسیر  $s$  راسی با ریشه  $u$  باشد و  $T_1$  و  $T_2$  دو زیر درخت با ریشه های به ترتیب  $v$  و  $u$  باشند و  $T_1, T_2 \not\cong P_1$ . درخت  $T'$  از درخت  $T$  توسط جا به

جا کردن مسیر  $P_s$  با یک یال وابسته و جا به جا کردن یال  $uv$  با مسیر  $P_s$  بدست می آید. این تبدیل را تبدیل نوع اول<sup>۲۸</sup> نامیم (شکل ۵-۳).



شکل ۵-۳ تبدیل نوع اول

حال برای درختی که توسط تبدیل نوع اول بدست می آید چند لم بیان می کنیم:

لم ۳-۲-۲: اگر  $T'$  از درخت  $T$  با تبدیل نوع اول بدست آمده باشد آنگاه داریم [۳۷]:

$$\sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} m(T', k) < \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} m(T, k). \quad (۱۳-۳)$$

اثبات: فرض کنیم  $z(G) = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} m(G, k)$  باشد. اگر  $A_l$  و  $B_l$  درخت های شکل (۴-۳) بدون درخت  $T_1$  باشند. داریم:

$$\begin{aligned} z(T) &= z(T - uv) + z(T - \{u, v\}) \\ &= z(T_1).z(A_s) + z(T_1 - v).z(T_2 - u).z(P_{s-1}) \\ &.= z(T_1).z(A_{s-1}) + z(T_1).z(A_{s-2}) + z(T_1 - v).z(T_2 - u).z(P_{s-1}) \\ z(T') &= z(T' - v'v) + z(T' - \{v', v\}) \\ &= z(T_1).z(B_{s-1}) + z(T_1 - v).z(B_{s-2}) \end{aligned}$$

<sup>28</sup> Operation I

$$= z(T_1).z(A_{s-1}) + z(T_1).z(T_2 - u).z(P_{s-2}) + z(T_1 - v).z(A_{s-2}) + z(T_1 - v).z(T_2 - u).z(P_{s-3})$$

چون  $z(P_0) = 1$  و  $z(P_1) = 1$  و  $z(P_n) = z(P_{n-1}) + z(P_{n-2})$  برای هر  $n \geq 2$ ، لذا داریم:

$$.z(T) - z(T') = (z(T_1) - z(T_1 - v))(z(A_{s-2}) - z(T_2 - u)z(P_{s-2}))$$

توجه کنید که  $T_1, T_2 \not\cong P_1$  می باشند. چون  $z(A_{s-2}) - z(T_2 - u)z(P_{s-2}) > 0$  و  $z(T_1) - z(T_1 - v) > 0$  است  $m(G, k)$  همواره عدد مثبت است و لذا مجموع اعداد مثبت نیز، مثبت می باشد. بنابراین  $z(T) - z(T') > 0$  است و لذا حکم ثابت است. ■

لم ۳-۲-۳: اگر  $T'$  از درخت  $T$  با تبدیل نوع اول به دست آمده باشد آنگاه  $E(T') < E(T)$  است [۳].

اثبات: اگر  $A_l$  و  $B_l$  دو درخت که در شکل آورده شده در بالا باشند. توسط لم (۳-۳) و (۱-۳) داریم:

$$\begin{aligned} \phi(T) &= \phi(T - uv) - \phi(T - \{u, v\}) \\ &= \phi(T_1). \phi(A_s) - \phi(T_1 - v). \phi(T_2 - u). \phi(P_{s-1}) \\ &= x. \phi(T_1). \phi(A_{s-1}) - \phi(T_1). \phi(A_{s-2}) - \phi(T_1 - v). \phi(T_2 - u). \phi(P_{s-1}) \\ \phi(T') &= \phi(T - v'v) - \phi(T - \{v', v\}) \\ &= \phi(T_1). \phi(B_{s-1}) - \phi(T_1 - v). \phi(B_{s-2}) \\ &= x. \phi(T_1). \phi(A_{s-1}) - \phi(T_1). \phi(T_2 - u). \phi(P_{s-1}) - x. \phi(T_1 - v). \phi(A_{s-2}) \\ &+ \phi(T_1 - v). \phi(T_2 - u). \phi(P_{s-3}). \end{aligned}$$

چون  $T_1, T_2 \not\cong P_1$  و  $\phi(P_0) = 1$  و  $\phi(P_1) = x$  و  $\phi(P_n) = x\phi(P_{n-1}) - \phi(P_{n-2})$  برای  $n \geq 2$  است، داریم:

$$\begin{aligned} & \phi(T) - \phi(T') \\ &= (\phi(T_1)x\phi(T_1 - v)(\phi(T_2 - u) \cdot \phi(P_{s-2}) - \phi(A_{s-2})) \\ &= -(\sum_{vv_i \in E(T_1)} \phi(T_1 - \{v, v_i\})) \cdot (\sum_{uu_i \in E(T_2)} \phi(T_2 - \{u, u_i\})) \cdot \phi(P_{s-3}) \end{aligned}$$

فرض کنیم  $\phi(T) - \phi(T') = \varphi(x) \cdot \varphi'(x) \cdot \varphi''(x)$  باشد که در آن داریم:

$$\varphi(x) = -\sum_{vv_i \in E(T_1)} \phi(T_1 - \{v, v_i\}) = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n_1}{2} \rfloor} \varphi_k x^{n_1-2k}$$

$$\varphi'(x) = -\sum_{uu_i \in E(T_2)} \phi(T_2 - \{u, u_i\}) = \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{n_2}{2} \rfloor} \varphi_j' x^{n_2-2j}$$

$$\varphi''(x) = -\phi(P_{s-3}) = \sum_{l=0}^{\lfloor \frac{s-1}{2} \rfloor} \varphi_l'' x^{s-1-2l}$$

$n_1$  و  $n_2$  مرتبه  $T_1$  و  $T_2$  به ترتیب می باشند. چون  $T_1 - \{v, v_i\}$  و  $T_2 - \{u, u_i\}$  و  $P_{s-3}$  ( $s \geq 3$ ) جنگل می باشند، داریم:

$$\varphi_0 = \varphi_0' = \varphi_0'' = 0, (-1)^k \varphi_k \geq 0, (-1)^j \varphi_j' \geq 0, (-1)^l \varphi_l'' \geq 0$$

برای  $1 \leq k \leq \lfloor \frac{n_1}{2} \rfloor$  و  $1 \leq j \leq \lfloor \frac{n_2}{2} \rfloor$  و  $1 \leq l \leq \lfloor \frac{s-1}{2} \rfloor$  اکنون با استفاده از لم (۳-۳) و

$$(۳-۲-۲) \quad T' \leq T$$

همچنین توجه کنید که:

$$\phi(T) = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} (-1)^k m(T, k) x^{n-2k}$$

$$\phi(T') = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} (-1)^k m(T', k) x^{n-2k}$$

و برای هر  $k$  ( $1 \leq k \leq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ ) داریم:  $m(T', k) \leq m(T, k)$ . پس توسط لم (۳-۱-۲) داریم:

$$\sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} m(T', k) < \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} m(T, k)$$

بنابراین،  $k$  ای که ( $1 \leq k \leq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ ) و  $m(T', k) < m(T, k)$  باشد، وجود دارد. لذا از لم

(۳-۱-۱) داریم  $T' < T$  و بنابراین  $E(T') < E(T)$  و حکم ثابت است. ■

اکنون با توجه به مطالب بالا داریم:

لم ۳-۲-۴: اگر  $T \in \mathcal{J}_{n,k}$  که ( $3 \leq k \leq n-2$ ) و  $T \not\cong P_{n,k}$  و  $p(T) = 0$  آنگاه [۳]:

(۱) اگر  $s(T) = 1$  می توان با استفاده از تبدیل نوع اول درخت  $T'$  را به دست آورد که  $E(T') < E(T)$  و  $p(T') = 1$  باشد. به آسانی دیده می شود که  $T'$  یکرخت با  $P_{n,k}$  است.

(۲) اگر  $s(T) \geq 2$  می توان با استفاده از تبدیل نوع اول درخت  $T'$  را به دست آورد که  $E(T') < E(T)$  و  $s(T) = s(T')$  و  $p(T') = 0$  باشد.

هرگاه  $T \in \mathcal{J}_{n,k}$  که ( $3 \leq k \leq n-2$ ) و  $T \not\cong P_{n,k}$  و  $p(T) = 0$  باشد همواره می توان دو راس  $u_1$  و  $v_1$  را پیدا کرد به طوری که:

$$d(u_1, v_1) = \max\{d(u, v) : u, v \in V(T)\} \quad (۳-۱۴)$$

فرض کنیم  $uu_1, vv_1 \in E(T)$  که  $E(T)$  مجموعه یال  $T$  است باشند آنگاه:

$$N_T(u) = \{u_1, u_2, \dots, u_s, w\} \quad (s \geq 2),$$

$$N_T(v) = \{v_1, v_2, \dots, t, w'\} \quad (t \geq 2),$$

که همه راس های وابسته از  $T$  هستند و درجه دو راس  $w$  و  $w'$  بزرگتر مساوی دو می باشد. توجه

کنید که  $w' = w$  هرگاه  $d(u_1, v_1) = 3$  باشد [۳].

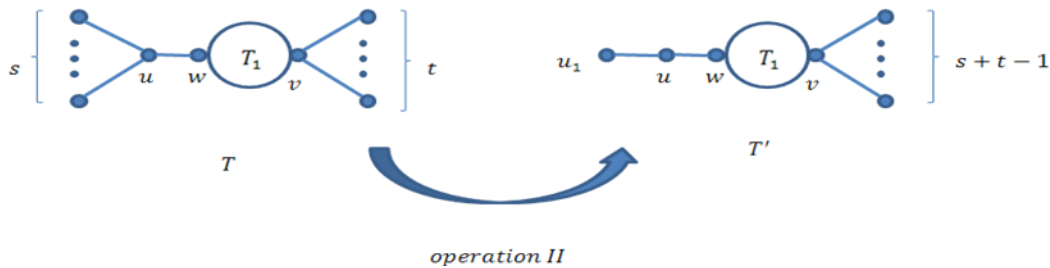
تعریف ۲-۲-۳: اگر  $T' = T - \{uu_2, \dots, uu_s\} + \{vu_2, \dots, vu_s\}$  و یا

$T' = T - \{vv_2, \dots, vv_t\} + \{uv_2, \dots, uv_t\}$  آنگاه این فرایند را تبدیل نوع دوم<sup>۲۹</sup> نامیم.

به آسانی دیده می شود که [۳]:

$$T' \in \mathcal{J}_{n,k}, p(T') = 1, s(T') = s(T) - 1$$

است (شکل ۶-۳).



شکل ۶-۳ تبدیل نوع دوم

لم ۵-۲-۳: اگر  $T'$  از درخت  $T$  با تبدیل نوع دوم بدست آمده باشد آنگاه  $E(T') < E(T)$  [۳].

اثبات: فرض کنیم  $u_1$  و  $v_1$  دو راس وابسته باشند که

$$d(u_1, v_1) = \max\{d(u, v) : u, v \in V(T)\}$$

<sup>29</sup> Operation II



اگر  $d(u_1, v_1) \geq 4$  باشد بدون کم شدن از کلیت مسئله، فرض کنیم  $u_1 u, v_1 v, uw \in E(T)$  و  $d_T(w) \geq 2$  باشد. آنگاه  $w \neq v$  و  $T' = T - \{uu_2, \dots, uu_s\} + \{vu_2, \dots, vu_s\}$  لذا  $T'$  و  $T$  می توانند درخت های شکل (۳-۶) باشند. اگر  $A = \sum_{v' v \in E(T_1)} \phi(T_1 - \{v', v\})$  و  $B = \sum_{v' v \in E(T_1 - w)} \phi(T_1 - \{v', v, w\})$  آنگاه توسط لم (۳-۳) و (۲-۳) داریم:

$$\begin{aligned} \phi(T) &= \phi(T - uw) - \phi(T - \{u, w\}) \\ &= x^{s+t-2} [(x^2 - s)(x^2 - t)\phi(T_1 - v) - x(x^2 - s)A - x(x^2 - t)\phi(T_1 - \{w, v\}) + x^2 B] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \phi(T') &= \phi(T' - uw) - \phi(T' - \{u, w\}) \\ &= x^{s+t-2} [(x^2 - s - t + 1)(x^2 - 1)\phi(T_1 - v) - x(x^2 - 1)A - x(x^2 - s - t + 1)\phi(T_1 - \{w, v\}) + x^2 B] \end{aligned}$$

است. به آسانی دیده می شود که:

$$\begin{aligned} \phi(T) - \phi(T') &= (s - 1)x^{s+t-2} [(t - 1)\phi(T_1 - v)x\phi(T_1 - \{w, v\}) + xA] \\ &.= (s - 1)x^{s+t-2} [(t - 1)\phi(T_1 - v)x\phi(T_1 - \{w, v\} \cup \{w\}) + xA] \end{aligned}$$

می باشد. اکنون

$$(t - 1)\phi(T_1 - v)x\phi(T_1 - \{w, v\} \cup \{w\}) = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n_1-1}{2} \rfloor} \varphi_k x^{n_1-1-2k}$$

$$xA = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n_1-1}{2} \rfloor} \varphi'_k x^{n_1-1-2k}$$

که در آن  $n_1$  مرتبه  $T_1$  است را در نظر می گیریم. بنابراین

$$\begin{aligned}\phi(T) - \phi(T') &= \sum_{l=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} (a_l - a'_l) x^{n-2l} = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n_1-1}{2} \rfloor} (s-1)(\varphi_k + \\ &\varphi'_k) x^{n_1+s+t-3-2k} \\ &= \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n_1-1}{2} \rfloor} (s-1)(\varphi_k + \varphi'_k) x^{n-2(2+k)}\end{aligned}$$

برای  $2 \leq l \leq \lfloor \frac{n_1-1}{2} \rfloor + 2$  داریم:

$$\begin{aligned}(-1)^l(a_l - a'_l) &= (-1)^{k+2}(a_{k+2} - a'_{k+2}) = (-1)^{k+2}(s-1)(\varphi_k + \\ &\varphi'_k) = (-1)^k(s-1)(\varphi_k + \varphi'_k)\end{aligned}$$

$T_1 - \{w, v\} \cup \{w\}$  از اینکه  $a_l - a'_l = 0$  برای دیگر  $l$  ها داریم  $(0 \leq k \leq \lfloor \frac{n_1-1}{2} \rfloor)$

زیر گراف فراگیر از  $T_1 - v$  است و  $t \geq 2$  و با استفاده از لم های (۳-۳) و (۴-۳) داریم:

$$(-1)^k \varphi_k \geq 0 \quad 0 \leq k \leq \lfloor \frac{n_1-1}{2} \rfloor$$

و وجود دارد  $k$  ای که  $1 \leq k \leq \lfloor \frac{n_1-1}{2} \rfloor$  و  $(-1)^k \varphi_k > 0$ . همچنین

$$(-1)^k \varphi'_k \geq 0 \quad 0 \leq k \leq \lfloor \frac{n_1-1}{2} \rfloor$$

بنابراین  $a_0 - a'_0 = 0$  و  $(-1)^l(a_l - a'_l) \geq 0$  برای  $1 \leq l \leq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$  و وجود دارد  $l$  ای که

$$(-1)^l(a_l - a'_l) > 0. \text{ حال با توجه به لم (۳-۲-۱) داریم } T > T' \text{ و لذا } E(T) > E(T')$$

اگر  $d(u_1, v_1) = 3$  آنگاه

$$\phi(T) - \phi(T') = (s-1)(t-1)x^{s+t-2} = (s-1)(t-1)x^{n-4}$$

لذا برای  $s, t \geq 2$  توسط لم (۳-۲-۱) داریم  $T > T'$  و آنگاه  $E(T) > E(T')$  است. ■

قضیه ۳-۲-۱: اگر  $T \in \mathcal{T}_{n,k}$  آنگاه  $E(T) \geq E(P_{n,k})$  است. تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $T$  یکرخت با  $P_{n,k}$  باشد [۳].

اثبات: چون  $T_{n,2} = \{P_n\}$ ,  $P_n \cong P_{n,2}$  و  $T_{n,n-1} = \{S_n\}$ ,  $S_n \cong P_{n,n-1}$  می توان فرض کرد  $3 \leq k \leq n-2$ . لذا کافی است نشان دهیم  $E(T) > E(P_{n,k})$  برای هر  $T \in \mathcal{T}_{n,k}$  که غیر یکرخت با  $P_{n,k}$  است. برای هر  $T \in \mathcal{T}_{n,k}$  ( $3 \leq k \leq n-2$ ) و  $T \not\cong P_{n,k}$  می دانیم که  $1 \leq s(T) \leq n-k$  لذا به استقرا روی  $s(T)$  حکم را ثابت می کنیم. اگر  $s(T) = 1$  آنگاه  $T \not\cong S_n, P_n, P_{n,k}$ . با استفاده از لم (۳-۲-۴) قسمت دوم داریم  $E(T) > E(P_{n,k})$ . فرض کنیم نتیجه برای هر درخت  $T'$  با  $s(T') = s-1$  برقرار باشد.  $s(T) \geq 2$  در نظر می گیریم. اگر  $p(T) \neq 0$  آنگاه با استفاده از قسمت دوم لم (۳-۱-۷) می توان درخت  $T_1 \in \mathcal{T}_{n,k}$  را طوری در نظر گرفت که  $p(T_1) = 0$  و  $s(T_1) = s$  و  $E(T) > E(T_1)$ . اکنون از لم (۳-۲-۵) می توان درخت  $T_2 \in \mathcal{T}_{n,k}$  از  $T_1$  به گونه ای در نظر گرفت که  $p(T_2) = 1$  و  $s(T_2) = s-1$  و  $E(T) > E(T_2)$ . بنابراین  $E(T) > E(T_1) > E(T_2)$  و لذا از فرض استقرا داریم:

$$E(T) > E(T_1) > E(T_2) > E(P_{n,k})$$

پس اگر  $T \in \mathcal{T}_{n,k}$  آنگاه  $E(T) \geq E(P_{n,k})$  و تساوی اگر و تنها اگر زمانی برقرار است که  $T$  یکرخت با  $P_{n,k}$  باشد. ■

لم ۳-۲-۶: برای هر  $3 \leq k \leq n-1$  داریم  $E(P_{n,k}) < E(P_{n,k-1})$ . [۳]

اثبات: با توجه به لم (۳-۱) داریم:

$$\begin{aligned} \phi(P_{n,k}) &= x\phi(P_{n-1,k-1}) - x^{k-2}\phi(P_{n-k}) \\ &= x\phi(P_{n-1,k-1}) - \phi(P_{n-k} \cup (k-2)K_1) \end{aligned}$$

$$\phi(P_{n,k-1}) = x\phi(P_{n-1,k-1}) - \phi(P_{n-2,k-1})$$

حال از اینکه  $P_{n-k} \cup (k-2)K_1$  یک زیر گراف فراگیر سره از  $P_{n-2,k-1}$  است و از لم (۳-۲-۱) داریم:

$$P_{n-k} \cup (k-2)K_1 < P_{n-2,k-1}$$

لذا با توجه به لم (۳-۲-۳) داریم  $P_{n,k} < P_{n,k-1}$ . بنابراین برای  $3 \leq k \leq n-1$  داریم  $E(P_{n,k}) < E(P_{n,k-1})$  و حکم ثابت است. ■

### ۳-۳ نتیجه گیری

این فصل درخت های دارای کمترین انرژی و بیشترین انرژی را مشخص کردیم. به این ترتیب، اگر درخت  $n$  راسی را با  $T_n$  نمایش دهیم، آنگاه داریم:

$$S_n \leq T_n \leq P_n$$

که  $S_n$  گراف ستاره  $n$  راسی است و  $P_n$  نیز گراف مسیر  $n$  راسی می باشد. همچنین در بین دیگر درخت ها به غیر این موارد گراف  $P_{n,k}$  است که  $n$  راسی و دارای  $k$  راس وابسته است، دارای کمترین انرژی است.



## فصل چهارم

انرژی گراف های دو بخشی

مطالب این فصل نیز در راستای دسته بندی انرژی، در چهار قسمت ارائه می شود. در قسمت اول کران بالا و پایین انرژی گراف های دو بخشی را مشخص می کنیم و در قسمت دوم در بین همه گراف های دو بخشی گرافی که دارای کمترین انرژی است را معرفی می کنیم. در قسمت سوم کران پایین را برای این گراف ها با توجه به رتبه آنها ارائه می کنیم.

اگر  $\phi(G, x)$  چندجمله ای مشخصه  $G$  باشد و گراف  $G$  دو بخشی باشد آنگاه داریم:

$$\phi(G, x) = \sum_{i=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} a_{2i} \lambda^{n-2i} = \sum_{i=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} (-1)^i b_{2i} \lambda^{n-2i} \quad (1-4)$$

که  $b_{2i}(G) = (-1)^i a_{2i}$  و  $b_{2i}(G) \geq 0$  برای همه  $i = 1, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$  است. به این ترتیب همواره  $b_0(G) = 1$  و  $b_2(G)$  برابر تعداد یال های  $G$  است.

برای این نوع گراف ها فرمول انتگرال کولسون که در تعریف (۲-۲) آورده شده، به شکل زیر است:

$$E(G) = 2/\pi \int_0^{+\infty} \frac{1}{x^2} \ln [1 + \sum_{i=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} b_{2i} x^{2i}] dx \quad (2-4)$$

حال فرض کنیم  $G_1$  و  $G_2$  دو گراف دو بخشی باشند و  $b_{2i}(G_1) \leq b_{2i}(G_2)$  نیز برای همه  $i = 1, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$  برقرار باشد آنگاه گوییم  $G_1$  کوچکتر از  $G_2$  است ( $G_1 \leq G_2$ ). وقتی نا مساوی اکید باشد باز هم این نتیجه برقرار است [۱۰].

## ۴-۱ کران بالا و پایین انرژی گراف های دو بخشی

این بحث را با در نظر گرفتن تعریف طرح بلوکی (BIBD) که در (۲-۳-۲) آورده شده آغاز می کنیم. گراف وقوع از یک طرح بلوکی، یک گراف دو بخشی است. به این ترتیب که راس های گراف نقاط طرح و یال های آن، بلوک های طرح می باشند، کرانی برای انرژی گراف های دو بخشی به شکل زیر است:

قضیه ۴-۱-۱: فرض کنیم  $G$  گراف دو بخشی با بخش های دارای اندازه  $p$  و  $q$  باشد. اگر  $G$  دارای  $m$  یال باشد و  $m \geq q \geq p$  آنگاه

$$E(G) \leq \frac{2m}{\sqrt{pq}} + 2\sqrt{(p-1)\left(m - \frac{m^2}{pq}\right)} \quad (۳-۴)$$

و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $G$  گراف وقوع یک طرح بلوکی باشد [۲۳].

اثبات: اگر  $A = \begin{pmatrix} 0 & M \\ M & 0 \end{pmatrix}$  ماتریس مجاورت  $G$  و  $M$  ماتریس  $p \times q$  با درایه های صفر و یک باشد آنگاه

$$AA^t = \begin{pmatrix} MM^t & 0 \\ 0 & M^tM \end{pmatrix}$$

است. از اینکه  $MM^t$  و  $M^tM$  دارای مقادیر ویژه غیر صفر می باشند نتیجه می شود که

$$E(G) = E(A) = 2E(M)$$

و بنابراین نا مساوی (۳-۴) نتیجه ای از قضیه (۲-۳-۴) در فصل دوم است. ■

قضیه ۴-۱-۲: اگر  $G$  گراف دو بخشی باشد به طوری که بخش های آن دارای اندازه  $p$  و  $q$  باشد. آنگاه داریم:



$$E(G) \leq (\sqrt{p} + 1)\sqrt{pq} \quad (4-4)$$

و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $G$  گراف وقوع از طرح بلوکی با پارامترهای زیر باشد [۲۳]:

$$(p, q, \frac{q(p+\sqrt{p})}{2p}, \frac{p+\sqrt{p}}{2}, \frac{q(p+2\sqrt{p})}{4p})$$

اثبات: این قضیه با توجه به قضیه قبل و قضیه (۲-۳-۴) در فصل دوم به راحتی نتیجه می شود ■

قضیه ۴-۱-۳: اگر  $n \leq 2m$  و  $G$  گراف دو بخشی با  $n > 2$  راس و  $m$  یال باشد آنگاه نا مساوی

زیر برقرار است [۱۰]:

$$E(G) \leq 2\left(\frac{2m}{n}\right) + \sqrt{(n-2)[2m - 2\left(\frac{2m}{n}\right)^2]} \quad (5-4)$$

تساوی برقرار است اگر و تنها اگر حداقل یکی از عبارات زیر برقرار باشد:

$$G = mk_2 \text{ و } n = 2m \quad (1)$$

$$G = k_{t,t} \text{ و } m = t^2 \text{ و } n = 2t \quad (2)$$

$$n = 2v \text{ و } 2\sqrt{m} < n < 2m \text{ و } G \text{ گراف مجاورت ۲-طرح با پارامتر } k = 2m/n \text{ و} \quad (3)$$

$$\lambda = \frac{k(k-1)}{v-1} \text{ باشد.}$$

اثبات: فرض کنیم  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$  مقادیر ویژه از گراف  $G$  باشند (چون ماتریس مجاورت

حقیقی و متقارن است لذا مقادیر ویژه نیز حقیقی هستند). اکنون داریم:

$$\lambda_1 \geq 2m/n$$

از اینکه تساوی

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 2m$$

همواره برقرار است و  $\lambda_1 = -\lambda_n$  در همه گراف های دو بخشی وجود دارد لذا داریم:

$$\sum_{i=2}^{n-1} \lambda_i^2 = 2m - 2\lambda_1^2.$$

اکنون با استفاده از نا مساوی کوشی-شوارتز برای بردار های  $(|\lambda_2|, \dots, |\lambda_{n-1}|)$  و  $(1, \dots, 1)$  با  $n - 2$  مولفه، نا مساوی زیر حاصل می شود:

$$\sum_{i=2}^{n-1} |\lambda_i| \leq \sqrt{(n-2)(2m - 2\lambda_1^2)}$$

بنابراین باید داشته باشیم:

$$E(G) \leq 2\lambda_1 + \sqrt{(n-2)(2m - 2\lambda_1^2)} \quad (6-4)$$

حال تابع  $F(x) = 2x + \sqrt{(n-2)(2m - 2x^2)}$  را در نظر می گیریم. این تابع روی بازه

لذا  $\sqrt{2m/n} < x \leq \sqrt{m}$  کاهشی است. نظر به اینکه  $2m \geq n$  است،

باید برقرار باشد و بنابراین خواهیم داشت:  $F(\lambda_1) \leq F(\frac{2m}{n})$ . به

این ترتیب نا مساوی (5-4) نتیجه می شود. به طور معکوس اگر تساوی در (6-4) برقرار باشد

آنگاه با توجه به بحث قبل روی تابع  $F(x)$ ،  $\lambda_1 = 2m/n$  است. این نشان می دهد که  $G$  گراف

منتظم از درجه  $2m/n$  است. اکنون از این که تساوی باید در نا مساوی کوشی-شوارتز داده شده در

بالا برقرار باشد، داریم:

$$|\lambda_i| = \sqrt{(2m - 2(\frac{2m}{n})^2)/(n-2)}$$

برای  $2 \leq i \leq n - 1$ . بنابراین برای گراف  $G$  سه حالت داریم:

(۱) یا  $G$  دارای دو مقدار ویژه با قدر مطلق یکسان است که در اینصورت  $G$  برابر با  $mK^2$  است.

(۲) یا  $G$  دارای سه مقدار ویژه متمایز است. به عبارت دیگر  $|\lambda_i| = 0$  برای  $2 \leq i \leq n-1$

$$G = K_{\sqrt{m}, \sqrt{m}} \text{ و } n = 2m$$

(۳) یا  $G$  دارای چهار مقدار ویژه متمایز است که در این مورد  $G$  همبند است و

$$2m/n > \sqrt{(2m - 2 \binom{2m}{n}) / (n-2)}$$

برقرار است و لذا  $G$  گراف وقوع از یک ۲-طرح متقارن با پارامتر های  $(v, \frac{2m}{n}, \lambda)$  است. ■

تذکره ۴-۱-۱: در موردی که  $2m \leq n$ ، اگر  $G$  گراف  $n$  راسی و  $m$  یالی باشد آنگاه  $E(G) \leq 2m$

است و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $G$  دارای یال مجزا و راس تنها باشد [۱۰].

خانواده های نامتناهی از  $2 - (v, k, \lambda)$  طرح متقارن وجود دارد. به عنوان مثال طرح متقارن با

$$\lambda = 1$$

دقیقا یک صفحه تصویری است.

تعریف ۴-۱-۱: صفحه تصویری ساختاری شامل مجموعه ای به نام نقاط و مجموعه دیگری به نام

خطوط و رابطه ای به نام رابطه وقوع است به طوری که اصول زیر را داشته باشد:

(۱) از هر دو نقطه تنها یک خط بگذرد.

(۲) هر دو خط تنها در دقیقا یک نقطه مشترک باشند.

(۳) چهار نقطه وجود دارد که هیچ سه تای آنها هم خط نیستند.

(۴) چهار خط وجود دارد که هیچ سه تای آنها از یک نقطه نمی گذرد.

حال کرانی برای انرژی گراف های دو بخشی برحسب تعداد راس آنها ارائه می دهیم:

قضیه ۴-۱-۴: اگر  $G$  گراف دو بخشی دارای  $n > 2$  راس باشد آنگاه

$$E(G) \leq \frac{n}{\sqrt{8}}(\sqrt{n} + 2) \quad (۷-۴)$$

برقرار است. تساوی برقرار است اگر و تنها اگر زمانی که  $n = 2v$  و  $G$  گراف وقوع از یک ۲-طرح با پارامترهای  $(v, \frac{v+\sqrt{v}}{2}, \frac{v+2\sqrt{v}}{4})$  باشد [۱۰].

اثبات: فرض کنیم  $G$  گراف  $n$  راسی و  $m$  یالی باشد. اگر  $2m > n$  آنگاه با استفاده از محاسبات

ساده، دیده می شود که سمت چپ نا مساوی (۴-۴) زمانی که  $m = \frac{n^2+n\sqrt{2n}}{8}$  باشد، ماکسیمم

است. لذا با جانشین کردن این مقدار در نا مساوی (۴-۴) جواب حاصل می شود. توجه کنید که

برقرار است اگر  $n > 2$  باشد. بنابراین تساوی در این قضیه برقرار می شود  $m = \frac{n^2+n\sqrt{2n}}{8} < \frac{n^2}{4}$

■ اگر و تنها اگر  $n = 2v$  و  $G$  گراف وقوع از یک ۲-طرح با پارامترهای  $(v, \frac{v+\sqrt{v}}{2}, \frac{v+2\sqrt{v}}{4})$  باشد.

حال با توجه به این قضیه می توان خانواده نا متناهی از گراف های دو بخشی با بیشترین انرژی

عرضه کرد به این ترتیب که:

اگر  $A$  ماتریس مجاورت یک گراف با بیشترین انرژی باشد، آنگاه  $A$  ماتریس وقوع

۲-طرح است و با استفاده از قضیه (۴-۱-۴) داریم:  $(\begin{matrix} 0 & A \\ A & 0 \end{matrix})$  ماتریس

مجاورت یک گراف دو بخشی با بیشترین انرژی است.

حال اگر  $G$  گراف دو بخشی با  $2N$  راس باشد آنگاه مقادیر ویژه آن عبارت است از  $\pm\mu_1, \dots, \pm\mu_N$

است که  $\mu_1 \geq \dots \geq \mu_N \geq 0$ . درحقیقت انرژی  $G$  نیز به صورت زیر محاسبه می شود:

$$E(G) = 2(\mu_1 + \dots + \mu_N)$$

با توجه به تعریف (۲-۴-۲)، گشتاور طیف  $k$  ام  $G$  برای گراف های دو بخشی به شکل زیر است:

$$M_k = 2 \sum_{i=1}^N \mu_i^k$$

در این قسمت گشتاورهای  $M_2$  و  $M_4$  به کار برده می شوند و با  $m$  و  $q$  به ترتیب نشان داده می شوند (این دو مقدار حقیقی و مثبت می باشند). توجه کنید که  $m^2 \geq q$ . همچنین با توجه به نا مساوی کوشی-شوارتز،  $m^2 \leq Nq$  برقرار است.

فرض کنیم  $M$  زیر مجموعه فشرده از  $\mathbb{R}^N$  باشد. تعریف می کنیم  $Q = Nq - m^2$ .

لم ۴-۱-۱: [۱۲]

(۱) اگر  $M \neq \emptyset$  آنگاه  $Q \geq 0$  است. تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $M$  مجموعه همه نقاط

به شکل  $\sqrt{\frac{m}{N}}(\epsilon_1, \dots, \epsilon_N)$  باشد که  $\epsilon_i = \pm 1$  برای هر  $i$  است.

(۲) اگر  $M \neq \emptyset$  آنگاه  $m^2 \geq q$  است. تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $M$  شامل همه نقاط به

شکل  $\pm\sqrt{m}e_i (i = 1, 2, \dots, N)$  باشد که بردارهای مرکزی پایه از  $\mathbb{R}^N$

هستند.

(۳) اگر  $1 < m^2/q < N$  عدد صحیح نباشد آنگاه  $M$  یک زیر میدان<sup>۳۰</sup> از  $\mathbb{R}^N$  با بعد دو است.

(۴) اگر  $j := m^2/q$  عدد صحیح باشد و  $1 < j < N$  آنگاه  $M/F$  یک زیر میدان از  $\mathbb{R}^N$  با

بعد دو است که  $F$  مجموعه ای متناهی از همه نقاط  $(x_1, \dots, x_N)$  است که

$\{x_1^2, \dots, x_N^2\}/\{0\}$  مجموعه منفرد  $\{m/j\}$  است.

اثبات: (۱) اگر  $(x_1, \dots, x_N) \in M$  آنگاه با استفاده از نا مساوی کوشی-شوارتز برای بردارهای

$(1, \dots, 1)$  و  $(x_1^2, \dots, x_N^2)$  خواهیم داشت  $Q := Nq - m^2 \geq 0$  و تساوی برقرار است اگر و

تنها اگر  $x_1^2 = \dots = x_N^2$  باشد.

(۲) همواره رابطه  $q \leq q + 2 \sum_{1 \leq k < l \leq N} x_k^2 x_l^2 = m^2$  برای  $(x_1, \dots, x_N) \in M$  برقرار است.

<sup>30</sup> Submanifold

(۳) تعریف می کنیم  $j = [m^2/q]$  به آسانی دیده می شود که دستگاه

$$\begin{cases} \xi^2 + j\eta^2 = m \\ \xi^2 + j\eta^4 = q \end{cases}$$

دارای جواب  $(\xi, \eta)$  است که  $\xi > \eta > 0$  است. فرض کنیم  $\bar{x} := (x_1, \dots, x_N)$  که  $x_1 = \xi$  و  $x_i = \eta$  برای  $2 \leq i \leq j+1$  و در غیر اینصورت  $x_i = 0$  باشد. واضح است که  $\bar{x} \in M$  و بنابراین  $M$  غیرتهی است. حال اگر  $x = (x_1, \dots, x_N) \in M$  باشد آنگاه  $x$  و  $x^3 := (x_1^3, \dots, x_N^3)$  مستقل خطی هستند. در غیر اینصورت  $a \in \mathbb{R}$  وجود دارد که  $x_i^3 = ax_i$  برای هر  $i$  باشد. تعریف می کنیم  $j$  را به عنوان کاردینال  $\{i: x_i^2 = a\}$  لذا  $ja^2 = q$  و  $ja = m$  است. بنابراین  $j = \frac{m^2}{q}$  عدد صحیح است و این شرط سه را ثابت می کند.

(۴) نقطه  $\bar{x}$  که در قسمت سه تعریف شد متعلق به  $M$  است و  $\bar{x}$  و  $\bar{x}^3$  مستقل خطی اند. از سوی دیگر، اگر  $x \in M$  آنگاه  $\bar{x}$  و  $\bar{x}^3$  وابسته اند اگر و تنها اگر  $\{x_1^2, \dots, x_N^2\}/\{0\}$  یک مجموعه منفرد باشد. لذا اثبات به آسانی نتیجه می شود. ■

اکنون فرض کنیم  $q \leq m^2 \leq qN$  باشد. بنابراین  $M$  غیرتهی است. تعریف می کنیم  $M^+$  را به عنوان مجموعه ای از همه نقاط  $M$  که دارای مختص های غیرمنفی اند باشد. تابع مشتق پذیر  $S: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$  را با ضابطه  $S(x_1, \dots, x_N) = x_1 + \dots + x_N$  در نظر بگیرید. اگر  $(x_1, \dots, x_N) \in M$  آنگاه  $(|x_1|, \dots, |x_N|) \in M$  است لذا نتیجه می گیریم که  $\max(S|M) = \max(S|M^+)$ . به هر حال با توجه به لم قبل می توان به آسانی نتیجه گرفت که:

نتیجه ۴-۱-۲: [۱۲]

$$(۱) \max(S|M) = \min(S|M^+) = \sqrt{mN} \text{ آنگاه } \frac{m^2}{q} = N$$

$$(۲) \max(S|M) = \min(S|M^+) = \sqrt{m} \text{ آنگاه } m^2 = q$$

(۳) اگر  $q < m^2 < Nq$  آنگاه  $\max(S|M) > \min(S|M^+)$

لم ۴-۱-۲: اگر  $\frac{m^2}{q}$  صحیح نباشد آنگاه [۱۲]

$$\sqrt{N} \max(S|M) = \left[ m + \sqrt{(N-1)Q} \right]^{1/2} + (N-1) \left[ m - \sqrt{\frac{Q}{N-1}} \right]^{1/2}$$

به علاوه، اگر  $S(z) = \max(S|M)$  برای بعضی از  $z = (z_1, \dots, z_N) \in M$  باشد، آنگاه  $z_i > 0$  برای هر  $i$  است و  $\{z_1, \dots, z_N\}$  یک مجموعه دو نقطه ای می باشد و  $\{i: z_i = x_*\}$  دارای یک زیر میدان است. به این ترتیب مجموعه  $\{i: z_i = x_*\}$  منفرد است.

اثبات: فرض کنیم  $z = (z_1, \dots, z_N) \in M$  ثابت باشد به طوری که  $\max(S|M) = S(z)$  چون  $(|z_1|, \dots, |z_N|) \in M$ ، نتیجه می گیریم که  $z_i \geq 0$  برای هر  $i$  است. با استفاده از قانون ضرب لاگرانژ، دو ثابت  $\alpha$  و  $\beta$  یافت می شود که

$$1 = 2\alpha z_i + 4\beta z_i^3, \quad 1 \leq i \leq N$$

ادعا ۱:  $\beta \neq 0$  باشد. در غیر این صورت  $z_1 = \dots = z_N$  و بنابراین  $\frac{m^2}{q} = N$  که تناقض است.

پس هر  $z_i$  یک جواب معادله درجه سه  $4\beta y^3 + 2\alpha y - 1 = 0$  است. پس  $z_i > 0$  برای هر  $i$  است.

ادعا ۲: معادله درجه سه  $4\beta y^3 + 2\alpha y - 1 = 0$  دقیقاً دو جواب مثبت دارد. برای نشان دادن این مطلب، ابتدا توجه کنید که مجموع همه جواب های این معادله برابر صفر است. بنابراین این معادله حداکثر دو جواب مثبت دارد. اگر این معادله دارای یک جواب مثبت باشد آنگاه

$z_1 = \dots = z_N$  و بنابراین  $\frac{m^2}{q} = N$  که تناقض است.

اگر  $x_* > y_*$  جواب های مثبت این معادله باشند و اگر  $s_*$  و  $t_*$  به ترتیب کاردینال مجموعه های  $\{i: z_i = y_*\}$  و  $\{i: z_i = x_*\}$  باشند. بنابراین  $s_* + t_* = N$  و

$$s_* x_*^4 + t_* y_*^4 = q \cdot s_* x_*^2 + t_* y_*^2 = m$$

چون  $x_* > y_* > 0$ ، لذا داریم:

$$y_*^2 = \frac{m - \sqrt{Qs_*/t_*}}{N} x_*^2 = \frac{m + \sqrt{Qt_*/s_*}}{N}$$

و  $m > \sqrt{\frac{Qs_*}{t_*}}$ ، که هم ارز با  $s_* < \frac{m^2}{q}$  است. برای همه  $0 < s < \frac{m^2}{q} < N$  حقیقی، اعداد

حقیقی مثبت  $X(s) > Y(s)$  توسط روابط زیر یافت می شود:

$$Y(s)^2 = \frac{m + \sqrt{Qs/(N-s)}}{N} \quad X(s)^2 = \frac{m + \sqrt{Q(N-s)/s}}{N}$$

فرض کنیم  $1 \leq j < m^2/q$  عدد صحیح باشد. آنگاه نقطه  $\xi(j) := (x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^N$  را که برای هر  $1 \leq i \leq j$   $x_i = X(j)$  و برای هر  $j < i \leq N$   $x_i = Y(j)$  تعریف می کنیم.  $\xi(j)$  متعلق به  $M$  و  $z = \xi(s_*)$  است. اگر  $f(s) = sX(s) + (N-s)Y(s)$  باشد و  $S(\xi(j)) = f(j)$  محاسبه مستقیم داریم:

$$f'(s) = X(s) - Y(s) - \frac{N\sqrt{Q}}{4\sqrt{Qs(N-s)}} \frac{X(s)+Y(s)}{X(s)Y(s)}$$

بنابراین

$$\sqrt{s(N-s)}[X(s) + Y(s)]f'(s) = N\sqrt{Q}\left[1 - \frac{[X(s)+Y(s)]^2}{4X(s)Y(s)}\right]$$

در نتیجه  $f'(s) < 0$  و لذا  $X(s) \neq Y(s)$  در نهایت نقطه  $\xi(1)$  متعلق به  $M$  است و



$$.f(1) = S(\xi(1)) \leq S(z) = f(s_*) \leq f(1)$$

پس  $s_* = 1$  و  $S(z) = f(1)$  و لذا اثبات کامل است. ■

لم ۴-۱-۳: نا مساوی زیر برقرار است:

$$\min(S|M^+) \geq m\sqrt{m/q} \quad (۸-۴)$$

علاوه بر این، اگر  $S(v) = \min(S|M^+)$  برای بعضی از  $v = (v_1, \dots, v_N) \in M^+$  آنگاه

$$\{i: v_i \neq 0\} \text{ مجموعه منفرد است. در این مورد } m^2/q \text{ عدد کاردینال } \{v_1^2, \dots, v_N^2\} \setminus \{0\}$$

است [۱۲].

اثبات:  $u = (u_1, \dots, u_N) \in M^+$  را ثابت در نظر می گیریم به طوری که

$S(u) = \min(S|M^+)$  باشد. چون  $u_\sigma := (u_{\sigma(1)}, \dots, u_{\sigma(N)}) \in M^+$  برای همه جایگشت

های  $\sigma$  از  $\{1, \dots, N\}$  و  $S(u) = S(u_\sigma)$  می توان فرض کرد که  $u_1 \geq \dots \geq u_N$  اکنون

تعریف می کنیم  $j = N$  اگر  $u_N > 0$  و  $j = \min \{i: u_{i+1} = 0\}$  اگر  $u_N = 0$  باشد. پس

$$\begin{cases} u_i > 0 & 1 \leq i \leq j \\ u_i = 0 & i > j \end{cases}$$

اگر  $L$  زیر مجموعه  $\mathbb{R}^j$  تعریف شده به وسیله معادله

$$,y_1^2 + \dots + y_j^2 = m , y_1^4 + \dots + y_j^4 = q$$

باشد و  $T: \mathbb{R}^j \rightarrow \mathbb{R}$  را با معادله  $T(y_1, \dots, y_j) = y_1 + \dots + y_j$  تعریف می کنیم. چون

$\bar{u} := (u_1, \dots, u_j) \in L^+$  است، پس داریم:

$$L^+ \rightarrow M^+ , \quad (y_1, \dots, y_j) \rightarrow (y_1, \dots, y_j, 0, \dots, 0)$$

لذا نتیجه می گیریم که  $\min(T|L^+) = T(\bar{u}) = S(u) = \min(S|M^+)$  است و  $L^+$  زیرمجموعه  $L$  شامل همه نقاط دارای مختص های غیرمنفی است. اکنون دو حالت در نظر می گیریم:

حالت (۱) بردار های  $(u_1, \dots, u_j)$  و  $(u_1^3, \dots, u_j^3)$  وابسته خطی باشند. در این مورد  $u_1^2 = \dots = u_j^2$  است، چون  $u_i > 0$  برای  $1 \leq i \leq j$  است. درحقیقت  $qj = m^2$  و

$$\min(S|M^+) = j\sqrt{m/j} = \sqrt{jm} = m\sqrt{m/q}$$

حالت (۲) بردار های  $(u_1, \dots, u_j)$  و  $(u_1^3, \dots, u_j^3)$  مستقل خطی باشند. در این مورد،  $L$  یک میدان<sup>۳۱</sup> مشتق پذیر پیوسته در حدود  $u$  است و چون این نقطه برای  $L^+$  درونی است،  $T$  دارای مینیمم محلی  $(u_1, \dots, u_j)$  است. با توجه به لم (۴-۱-۲) برای  $(T, \bar{u})$ ، نتیجه می گیریم که  $\{u_1, \dots, u_j\}$  مجموعه دو نقطه ای  $\{v_*, w_*\}$  است که  $v_* > w_*$  و

$$s_* v_*^2 + t_* w_*^2 = m, \quad s_* v_*^4 + t_* w_*^4 = q$$

که  $s_*$  و  $t_*$  صحیح مثبت می باشند که  $s_* + t_* = j$  است. در حقیقت داریم:

$$v_*^2 = \frac{m + \sqrt{Q_j t_* / s_*}}{j}, \quad w_*^2 = \frac{m - \sqrt{Q_j s_* / t_*}}{j}$$

که  $Q_j := qj - m^2$ . توجه کنید که چون بردار های  $(u_1, \dots, u_j)$  و  $(u_1^3, \dots, u_j^3)$  مستقل خطی می باشند،  $Q_j > 0$  است. برای هر  $0 < s \leq m^2/q$  حقیقی اعداد حقیقی غیرمنفی  $V(s)$  و  $W(s)$  را به شکل زیر تعریف می کنیم:

$$V(s)^2 = \frac{m + \sqrt{Q_j(j-s)/s}}{j}, \quad W(s)^2 = \frac{m - \sqrt{Q_j s/(j-s)}}{j}$$

<sup>31</sup> Manifold

توجه کنید که  $V(s) > 0$  برای  $0 < s < m^2/q$  و  $W(s) = 0$  اگر و تنها اگر  $s = m^2/q$ . حال، با توجه به لم (۴-۱-۲)، نتیجه می گیریم که اگر  $s < m^2/q$  عدد صحیح باشد آنگاه نقطه

$$(V(s), \dots, V(s), W(s), \dots, W(s))$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_s \qquad \underbrace{\hspace{10em}}_{j-s}$

متعلق به  $L^+$  است. به طور مشابه، اگر  $f(s) = sV(s) + (j-s)W(s)$  تعریف کنیم آنگاه ثابت می شود که  $f'(s) < 0$  و لذا  $f\left(\frac{m^2}{q}\right) = m\sqrt{m/q}$  و  $\min(T|L^+) = f(s_*) > f\left(\frac{m^2}{q}\right)$ . توجه کنید که شرط  $w_* > 0$ ، شرط  $s_* < m^2/q$  را نتیجه می دهد. بنابراین اثبات کامل است. ■

تذکره ۴-۱-۳: لم بالا را می توان به شکل زیر نیز تعبیر کرد. اعداد حقیقی  $x_1, \dots, x_N$  داده شده است. داریم [۱۲]:

$$(x_1^2 + \dots + x_N^2)^3 \leq (|x_1| + \dots + |x_N|)^2 (x_1^4 + \dots + x_N^4) \quad (۹-۴)$$

تساوی برقرار است اگر  $\{x_1^2 + \dots + x_N^2\} \setminus \{0\}$  مجموعه منفرد باشد. در این مورد، اگر  $x_i \neq 0$  برای بعضی از  $i$  ها آنگاه  $(x_1^2 + \dots + x_N^2)^2 / (x_1^4 + \dots + x_N^4)$  عدد کاردینال مجموعه  $\{i: x_i \neq 0\}$  است.

اکنون نشان می دهیم که شرط " $m^2/q$  عدد صحیح نیست" را می توان از فرض لم (۴-۱-۲) حذف کرد.

قضیه ۴-۱-۵: فرض کنیم  $q < m^2 < Nq$  آنگاه استنتاج لم (۴-۱-۲) برقرار است [۱۲].

اثبات:  $z = (z_1, \dots, z_N) \in M$  که  $S(z) = \max(S|M)$  ثابت در نظر می گیریم.

ادعا:  $z$  و  $z^3$  مستقل خطی اند. برای نشان دادن این مطلب، به برهان خلف فرض کنیم  $a \in \mathbb{R}$  که  $z_i^3 = az_i$  برای هر  $i$  وجود داشته باشد. اگر  $j$  نشان دهنده کاردینال مجموعه  $\{i: z_i^2 = a\}$  باشد آنگاه با استفاده از لم (۳-۱-۴) و تذکر (۲-۱-۴) داریم:

$$\max(S|M) = S(z) = j\sqrt{a} = m\sqrt{m/q} \leq \min(S|M^+) < \max(S|M^+)$$

و این ادعا را ثابت می کند. لذا با توجه به این ادعا  $M$  یک میدان در حدود  $z$  است. ■

قضیه ۴-۱-۶: اگر  $A$  ماتریس هرمیتی ( $A = A^t$ ) مرتبه  $N$  باشد و  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$  مقادیر ویژه آن باشند آنگاه

$$E \leq \sqrt{Nm} \quad (۱۰-۴)$$

که  $m = \sum_{i=1}^N |\lambda_i|^2$  است [۲۶].

اثبات:

$$\begin{aligned} E^2 &= \left(\sum_{i=1}^N |\lambda_i|\right)^2 = N \sum_{i=1}^N |\lambda_i|^2 - \sum_{j < i} (|\lambda_j| - |\lambda_i|)^2 \\ &\leq N \sum_{i=1}^N |\lambda_i|^2 = Nm \end{aligned}$$

لذا اثبات کامل است. ■

قضیه ۴-۱-۷: فرض کنیم  $G$  یک گراف دو بخشی با  $2N$  راس باشد در این صورت

$$(۱) \quad m^2 = Nq \text{ است اگر و تنها اگر } G = NK_2 \text{ باشد.}$$

$$(۲) \quad m^2 = q \text{ اگر و تنها اگر } G \text{ مجموع مستقیم } h \text{ راس تنها و یک کپی از گراف کامل دو}$$

بخشی  $K_{r,s}$  که  $rs = m$  و  $h + r + s = 2N$  باشد.

$$(۳) \quad \text{اگر } 1 < m^2/q < N \text{ آنگاه } E(G) \leq \varepsilon(G) \text{ که}$$

$$\varepsilon(G) = 2/\sqrt{N} \left[ \left( m + \sqrt{(N-1)Q} \right)^{1/2} + (N-1) \left( m - \sqrt{\frac{Q}{N-1}} \right)^{1/2} \right]$$

و  $Q := Nq - m^2$ . تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $G$  گراف یک طرح بلوکی متقارن باشد. به طور معکوس اگر تساوی برقرار باشد و  $G$  منتظم باشد آنگاه  $G$  گراف یک طرح بلوکی متقارن باشد [۱۲].

**اثبات: (۱)** فرض کنیم  $m^2 = Nq$  باشد. با استفاده از قسمت (۱) لم (۴-۱-۱)،  $\mu_i = \sqrt{m/N}$  برای هر  $i = 1, \dots, N$  است. بنابراین نتیجه می گیریم که  $G = NK_2$  است.

**(۲)** اگر  $m^2 = q$  آنگاه با توجه به قسمت (۲) لم (۴-۱-۱)،  $\mu_1 = \sqrt{m}$  و  $\mu_i = 0$  برای هر  $i \geq 2$  است.

**(۳)** فرض کنیم  $q < m^2 < Nq$  باشد، آنگاه به وسیله قضیه قبل داریم:

$$\sqrt{NS}(\mu) \leq \sqrt{N} \max(S|M) = \left( m + \sqrt{(N-1)Q} \right)^{1/2} + (N-1) \left( m - \sqrt{\frac{Q}{N-1}} \right)^{1/2}$$

چون  $E(G) = 2S(\mu)$  لذا فوراً نتیجه می شود که  $E(G) \leq \varepsilon(G)$  اگر  $E(G) = \varepsilon(G)$  و  $G$  منتظم باشد آنگاه  $S(\mu) = \max(S|M)$  لذا با توجه به قضیه قبل،  $G$  دارای دقیقاً دو مقدار ویژه است:  $\mu_1$  دارای مرتبه تکرار یک است و  $\mu_2 = \dots = \mu_N$  دارای مرتبه تکرار  $N-1$  می باشند. پس  $G$  گراف یک طرح بلوکی متقارن است. به عکس، فرض کنیم  $G$  گراف یک طرح بلوکی متقارن است. پس  $l < k < N$  وجود دارد که  $l(N-1) = k(k-1)$ . مقادیر ویژه مثبت  $G$ ،  $k$  با مرتبه تکرار یک و  $\sqrt{k-l}$  با مرتبه تکرار  $N-1$  می باشند. در حقیقت،

$$q = k^4 + (N - 1)(k - l)^2 m = k^2 + (N - 1)(k - l) = Nk$$

است و با استفاده از محاسبه داریم:  $Q = (N - 1)N^2 l^2$ . اکنون به آسانی دیده می شود که

$$E(G) = \varepsilon(G) \text{ و اثبات کامل است.} \blacksquare$$

قضیه ۴-۱-۸:  $G$  دارای یک مقدار ویژه است اگر و تنها اگر  $G$  گراف کاملاً غیر همبند باشد.  $G$

دارای دو مقدار ویژه  $\lambda_1 > \lambda_2$  با مرتبه تکرار  $m_1$  و  $m_2$  است اگر و تنها اگر  $G$  مجموع  $m_1$  گراف

کامل از مرتبه  $1 + \lambda_1$  باشد. در این مورد  $\lambda_2 = -1$  و  $m_2 = m_1 \lambda_1$  است [۳۵].

قضیه ۵-۱-۹: اگر  $G$  گراف دو بخشی با مقادیر ویژه  $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3$  و مرتبه تکرار  $m_1$  و  $m_2$  و

$m_3$  باشد آنگاه  $\lambda_3 = -\lambda_1$ ،  $\lambda_2 = 0$  و  $m_3 = m_1$ . همچنین  $G$  مجموع  $m_1$  گراف کامل

دو بخشی  $K_{r_i, s_i}$  با  $r_i s_i = \lambda_1^2$  ( $i = 1, \dots, m_1$ ) و  $m_2 - \sum_{i=1}^{m_1} (r_i + s_i - 2)$  راس مجزا

است [۳۵].

قضیه ۴-۱-۱۰: اگر  $G$  گراف دو بخشی با  $2N$  راس باشد. آنگاه

$$E(G) \geq 2m\sqrt{m/q}$$

است و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $G = NK_2$  یا  $G$  مجموعه ای از راس های تنها با گراف

های دو بخشی کامل  $K_{r_1, s_1}$  و  $\dots$  و  $K_{r_j, s_j}$  که  $r_1 s_1 = \dots = r_j s_j$  است، باشد [۱۲].

اثبات: از لم (۴-۱-۳) داریم:

$$E(G) = 2S(\mu) \geq 2\min(S|M^+) \geq 2m\sqrt{m/q}. \quad (۱۱-۴)$$

اگر  $E(G) = 2m\sqrt{m/q}$  آنگاه واضح است که  $S(\mu) = \min(S|M^+)$  بنابراین وجود دارد  $1 \leq j \leq N$  ای که  $\mu_1 = \dots = \mu_j$  و  $\mu_i = 0$  برای هر  $i > j$  باشد. لذا با توجه به قضیه

(۴-۱-۸) و (۴-۱-۹) نتیجه حاصل می شود. ■

به آسانی دیده می شود که کران آورده شده در این دو قضیه بهتر از کرانی است که در قضیه (۴-۱-۶) ارائه شده است.

فرض کنیم  $G$  دارای  $n = 2N + 1$  راس باشد. مقادیر ویژه آن را می توان  $\pm\mu_1, \dots, \pm\mu_N, 0$  با  $\mu_1 \geq \dots \geq \mu_N \geq 0$  در نظر گرفت.

قضیه ۴-۱-۱۱: اگر  $G$  گراف دو بخشی با  $n = 2N + 1$  راس باشد آنگاه [۱۲]

(۱)  $Q \geq 0$  و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $G$  مجموعه یک راس تنها با  $NK_2$  باشد.

(۲) نا مساوی قسمت (۳) قضیه (۴-۱-۷) درست باقی می ماند هرگاه  $q < m^2 < Nq$  و تساوی برقرار می شود هرگاه  $G$  شامل یک راس تنها و یک کپی از گراف یک طرح بلوکی متقارن باشد.

اثبات: با استفاده از نا مساوی کوشی- شوارتز داریم  $Q \geq 0$  و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $\mu_1 = \dots = \mu_N = \pm\sqrt{m/N}$  مقادیر ویژه  $G$  با مرتبه تکرار  $N$  هستند و  $\mu = 0$  یک مقدار ویژه با مرتبه تکرار یک است. اکنون از قضیه (۴-۱-۹) نتیجه می شود که  $G$  مجموع  $N$  گراف کامل دوبخشی  $K_{r_i, s_i}$  که  $r_i s_i = m/N$  برای هر  $i = 1, \dots, N$  و  $h$  راس تنها که

$$h = 1 + 2N - [(r_1 + s_1) + \dots + (r_N + s_N)]$$

است. چون  $r_i, s_i \geq 0$  نتیجه می گیریم که  $h \leq 1$  است. حال به آسانی دیده می شود که  $h = 1$  و اثبات قسمت اول کامل است. اثبات قسمت دوم نیز مانند قضیه (۴-۱-۷) است. ■

قضیه ۴-۱-۱۲: اگر  $G$  گراف دو بخشی با  $2N + 1$  راس باشد. پس نا مساوی قضیه (۴-۱-۱۰) درست باقی می ماند. علاوه بر این، تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $G$  مجموع راس های تنها و گراف های کامل دو بخشی  $K_{r_1, s_1}, \dots, K_{r_j, s_j}$  که  $r_1 s_1 = \dots = r_j s_j$  است، باشد [۱۲].

در قضیه (۴-۱-۱۰) کرانی برای انرژی گراف های دو بخشی ارائه کرده ایم. در این قسمت آن کران را با کران های بدست آمده در این قسمت مقایسه می کنیم.

قضیه ۴-۱-۱۳: اگر  $N^3 q \leq m^4$  آنگاه  $E(G) \leq E_*(N, m)$  که [۱۲]

$$E_*(N, m) = \frac{2m}{N} + 2\sqrt{(N-1)\left[m - \left(\frac{m}{N}\right)^2\right]}. \quad (۱۲-۴)$$

اثبات: فرض کنیم  $E_0(N, m, q) = \left(\frac{\sqrt{N}}{2}\right) \varepsilon(G)$  باشد. اگر از  $E_0$  نسبت به  $q$  مشتق بگیریم، دیده می شود که این تابع نسبت به  $q$  یکنوای کاهشی است. از طرف دیگر

$$m = \mu_1^2 + \sum_{i>1} \mu_i^2 \leq \mu_1^2 + \sqrt{(N-1)\sum_{i>1} \mu_i^4} = \mu_1^2 + \sqrt{(N-1)(q - \mu_1^4)}$$

است. تابع  $f(x) = x^2 + \sqrt{(N-1)(q - x^4)}$  روی بازه  $\left[\sqrt[4]{\frac{q}{N}}, \sqrt[4]{q}\right]$  کاهشی است و چون

$$N^3 q \leq m^4 \text{ است، } \sqrt[4]{q/N} \leq m/N \leq \mu_1 \leq \sqrt[4]{q} \text{ می باشد. پس}$$

$$m \leq (m/N)^2 + \sqrt{(N-1)\left[q - \left(\frac{m}{N}\right)^4\right]}$$

است و لذا  $q_0 := \frac{[m - (\frac{m}{N})^2]^2}{N-1} + (m/N)^4 \leq q$  بدست می آید. با محاسبه مستقیم نتیجه

می شود که

$$2N^{-\frac{1}{2}} E_0(N, m, q_0) = E_*(N, m)$$



است و لذا حکم نتیجه می شود. ■

تذکر ۴-۱-۴: شرط  $N^3 q \leq m^4$ ، شرط محدود کننده نیست. برای مثال می توان برای سیستم های شش ضلعی و خانواده بزرگ از گراف های کامل دو بخشی تحقیق کرد [۱۲].

#### ۴-۲ کران پایین انرژی گراف های دو بخشی با توجه به رتبه آنها

همچنین می توان کمترین انرژی را برای این نوع گراف ها با توجه به رتبه (تعریف ۲-۵-۲) آن ها بیان کرد:

قضیه ۴-۲-۱: اگر  $G$  گراف همبند دو بخشی با رتبه  $r$  باشد آنگاه داریم [۲۵]:

$$E(G) \geq \sqrt{(r+1)^2 - 5}. \quad (۱۳-۴)$$

اثبات: اگر  $\lambda_1, \dots, \lambda_s$  مقادیر ویژه مثبت از  $G$  باشند و  $s = r/2$  آنگاه

$$E^2(G) = (2 \sum_{i=1}^s \lambda_i)^2 = 4(\sum_{i=1}^s \lambda_i^2 + \sum_{i \neq j} \lambda_i \lambda_j) = 4(m + s(s-1)a)$$

که در آن  $a$  میانگین حسابی  $\{\lambda_i \lambda_j\}_{i \neq j}$  است. میانگین هندسی  $\{\lambda_i \lambda_j\}_{i \neq j}$  عبارت است از:

$$(\prod_{i \neq j} \lambda_i \lambda_j)^{s(s-1)} = k^{1/s}$$

که  $k = \lambda_1^2 \dots \lambda_s^2$  است. چون  $G$  همبند است،  $m \geq r - 1$  است. توجه کنید که  $k \geq 1$  است. بنابراین داریم:

$$E(G) \geq \sqrt{4m + r(r-2)\sqrt[k^2]{k^2}} \geq \sqrt{(r+1)^2 - 5}$$

و لذا اثبات کامل است. ■

قضیه ۴-۲-۲: برای هر گراف دو بخشی با  $n = v + v$  راس و ماتریس مجاورت  $A$  داریم:

$$\det A = (-1)^v \sum_{U \subseteq G} (-1)^{r(U)} 2^{c(U)} \quad (14-4)$$

است که در آن  $r(U) = r$  تعداد دور های به طول  $4s$  با  $s = 1, 2, \dots$  است و  $c(U)$  تعداد دور های از هر نوع در  $U$  است.  $U$  نیز زیر گراف فراگیر از  $G$  است [۳۵].

اثبات: ابتدا باید نشان دهیم که  $(-1)^{2v+p(U)} = (-1)^{v+r(U)}$  است. به عبارت دیگر  $p(U) \equiv v + r(U)$  به پیمانه ۲ است. اگر  $q = q(U)$  تعداد کل دور های به طول  $4s + 2$  با  $s = 1, 2, \dots$  و تعداد گراف های  $K_2$  در  $U$  باشد. فرض کنیم  $4t_i + 2$  با  $i = 0, 1, \dots, q$  تعداد راس های این دور ها یا تعداد گراف های  $K_2$  باشد. اگر  $4s_i$  با  $i = 1, \dots, r$  طول دور ها در  $U$  باشند آنگاه

$$\sum_{i=1}^q (4t_i + 2) + \sum_{i=1}^r 4s_i = 2v$$

$$2 \sum_{i=1}^q t_i + q + 2 \sum_{i=1}^r s_i = v$$

$$.q \equiv v \pmod{2}$$

از  $p(U) = q(U) + r(U)$  نتیجه حاصل می شود. ■

قضیه ۴-۲-۳: فرض کنیم  $G$  یک گراف دو بخشی با حداقل چهار راس باشد. اگر  $G$  رتبه کامل نباشد آنگاه داریم [۲۵]:

$$E(G) \geq 1 + \text{rank}(G). \quad (15-4)$$

اثبات: بدون کم شدن از کلیت مسئله، فرض کنیم  $G$  همبند است. از اثبات قضیه (۴-۲-۱) داریم:

$$\lambda_1, \dots, \lambda_s \text{ و } k = \lambda_1^2 \dots \lambda_s^2 \text{ است و } E(G) \geq \sqrt{4m + r(r-2)^r k^2}$$

مقادیر ویژه مثبت از  $G$  می باشند. اگر  $G$  درخت باشد آنگاه توسط قضیه ۱،۸ در [۳۵]،  $G$  هیچ جورسازی کاملی ندارد.  $k \geq 2$  است و بنابراین

$$E(G) \geq \sqrt{4(n-1) + r(r-2)} \sqrt[4]{4}$$

است. توجه کنید  $G$  رتبه کامل نیست. بنابراین داریم  $E(G) \geq \sqrt{4r + r(r-2)} \sqrt[4]{4}$  اگر  $r \geq 3$  آنگاه

$$\sqrt[4]{4} > \exp\left(\frac{1}{r}\right) > 1 + \frac{1}{r} \geq 1 + 1/r(r-2)$$

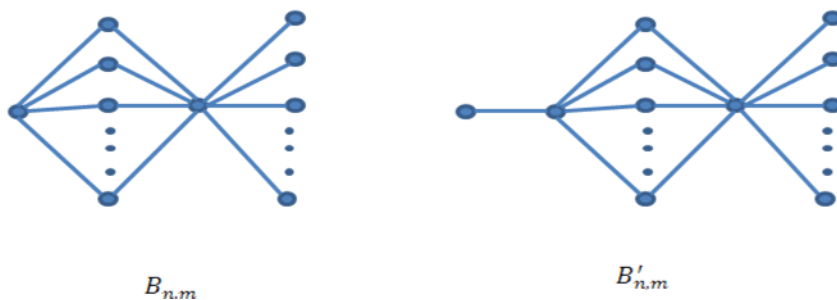
پس اگر  $r \geq 3$  باشد آنگاه

$$E(G) \geq \sqrt{4r + r(r-2)} + 1 = r + 1$$

اگر  $r = 2$  آنگاه توسط قضیه (۴-۲-۱) اثبات کامل است. اما اگر  $G$  درخت نباشد آنگاه چون  $G$  رتبه کامل نیست پس  $m \geq n \geq r + 1$  و لذا اثبات کامل است. ■

### ۳-۴ گراف های دوبخشی با کمترین انرژی

اگر یک گراف دارای  $n$  راس باشد آنگاه گراف را  $n$ -گراف نامیم و اگر دارای  $n$  راس و  $m$  یال باشد آنگاه آن را  $(n, m)$ -گراف نامیم. فرض کنیم  $B_{n,m}$  یک  $(n, m)$ -گراف دو بخشی به شکل زیر باشد:



شکل ۱-۴ گراف  $B'_{n,m}$  و  $B_{n,m}$

$B'_{n,m}$  گراف حاصل از اتصال یک یال وابسته به دومین راس با درجه حداکثر به گراف  $B_{n-1,m-1}$  باشد [۱۱].

لم ۴-۳-۱:  $b_4(G) = m(G, 2) - 2q(G)$  که در آن  $q(G)$  نشان دهنده تعداد دور های به طول ۴ یا دور های  $C_4$  در  $G$  است [۲۹].

لم ۴-۳-۲: اگر  $uv$  یال برشی در  $G$  باشد آنگاه [۱۱]

$$b_4(G) = b_4(G - uv) + e(G - u - v). \quad (۱۶-۴)$$

در واقع اگر  $uv$  یک یال وابسته با راس وابسته  $v$  باشد آنگاه

$$b_4(G) = b_4(G - v) + e(G - u - v). \quad (۱۷-۴)$$

اثبات: از اینکه  $uv$  یال برشی است داریم  $q(G) = q(G - uv)$ . حال باتوجه به لم قبل داریم:

$$b_4(G - uv) = m(G - uv, 2) - 2q(G - uv)$$

$$b_4(G) = m(G, 2) - 2q(G)$$

$$= m(G - uv, 2) + m(G - u - v, 1) - 2q(G)$$

$$= b_4(G - uv) + e(G - u - v). \quad \blacksquare$$

قضیه ۴-۳-۱:  $B_{n,m}$  دارای کمترین انرژی در بین همه  $(n, m)$ -گراف های دو بخشی برای  $n \leq m \leq 2(n-2)$  است [۱۱].

اثبات: اگر  $G(m, n)$ -گراف همبند دو بخشی باشد. لذا  $\Delta(G) \leq n-2$  است. چون  $b_2(G) = m$  و  $b_0(G) = 1$  داریم برای  $i \neq 0, 2, 4$   $b_i(B_{n,m}) = 0$

پس کافی است ثابت کنیم  $b_4(G) \geq b_4(B_{n,m})$ . اثبات را به استقرا روی  $n$  انجام می دهیم. چون برای  $n = 7$  نتیجه درست است، لذا فرض کنیم  $n \geq 8$  است و نتیجه برای کمتر از  $n$  درست باشد. حالت (۱) یک یال وابسته  $uv$  در  $G$  با راس وابسته  $v$  وجود داشته باشد. آنگاه با توجه به لم (۴-۱-۲) داریم:

$$b_4(G) = b_4(G - v) + e(G - u - v)$$

حال چون  $\Delta(G) \leq n-2$  پس داریم:

$$e(G - u - v) \geq m - \Delta(G) \geq m - n + 2 = e(S_{m-n+3})$$

پس با توجه به فرض استقرا داریم:  $b_4(G - v) \geq b_4(B_{n-1, m-1})$ . از طرفی داریم:

$$b_4(B_{n,m}) = b_4(B_{n-1, m-1}) + e(S_{m-n+3})$$

پس نتیجه می شود که  $b_4(G) \geq b_4(B_{n,m})$

حالت (۲) اگر هیچ راس وابسته ای در  $G$  نباشد آنگاه دو ادعا ارائه می دهیم و اثبات می کنیم:

ادعا ۱: اگر  $G$  یک  $(n, m)$ -گراف همبند دو بخشی و  $n \leq m \leq 2(n-2)$  باشد آنگاه

$$q(G) \leq \binom{m-n+2}{2}$$

است و نتیجه برای مقادیر کمتر از  $m$  نیز درست است.

اثبات ادعا ۱: به استقرا روی  $m$ . نتیجه برای  $m = n$  واضح است.

فرض کنیم  $n \leq m \leq 2(n-2)$  و نتیجه برای کمتر از  $m$  برقرار است. فرض کنیم  $e$  یک یال از دوری در  $G$  باشد. پس  $G$  شامل حداکثر  $m - n + 1$  دور  $C_4$  شامل یال  $e$  است. فرض کنیم  $a \geq 2$  که  $m - n + a$  دور  $C_4$  شامل یال  $e = uv$  وجود داشته باشد. اگر  $U$  مجموعه راس های مجاور  $u$  به غیر از  $v$  باشد و  $V$  مجموعه راس های مجاور با  $v$  به غیر از  $u$  باشد. لذا فقط  $m - n + a$  یال بین  $U$  و  $V$  وجود دارد. اگر  $X$  زیر مجموعه ای از  $U$  باشد که هر راس آن مجاور با بعضی از  $m - n + a$  یال ها باشد و  $Y$  زیر مجموعه از  $V$  باشد که هر راس آن مجاور با بعضی از  $m - n + a$  یال ها باشد. فرض کنیم  $|X| = x$  و  $|Y| = y$  اگر  $G_0$  یک زیر گراف از  $G$  با مجموعه راس  $V(G_0) = u \cup v \cup X \cup Y$  باشد آنگاه حداکثر  $m - n + a + x + y + 1$  یال و دقیقا  $x + y + 2$  راس در  $G_0$  وجود دارد. تعداد یال های باقیمانده نباید کمتر از راس های باقیمانده متصل به  $G_0$  باشد پس:

$$m - (m - n + a + x + y + 1) \geq n - (x + y + 2) \quad (18-4)$$

با ساده کردن داریم:  $(a \geq 2) \quad n - a - 1 \geq n - 2$ .

توجه کنید که نا مساوی (۱۸-۴) وقتی که هیچ راسی باقی نماند نیز برقرار است. اکنون، اگر  $q_G(e)$  نشان دهنده تعداد دور های  $C_4$  در  $G$  باشد آنگاه داریم:

$$\begin{aligned} q(G) &= q_G(e) + q(G - e) \leq m - n + 1 + \binom{m-1-n+2}{2} \\ &= \binom{m-n+2}{2} \end{aligned}$$

که  $q(G - e) \leq \binom{m-1-n+2}{2}$  پس فرض استقرا ثابت است. دنباله غیر کاهشی  $(d)_G = (d_1, d_2, \dots, d_n)$  از اعداد مثبت صحیح، گرافیکی نامیده می شود هرگاه یک گراف ساده با این دنباله درجات وجود داشته باشد.

ادعا ۲: اگر  $G$  یک  $(m, n)$ -گراف همبند دو بخشی باشد. اگر  $G$  هیچ راس وابسته ای نداشته باشد آنگاه

$$\sum_{v \in V(B_{n,m})} \binom{d(v)}{2} \geq \sum_{v \in V(G)} \binom{d(v)}{2}$$

اثبات ادعا ۲: فرض کنیم

$$(d)_G = (d_1, d_2, \dots, d_{i-1}, d_i, \dots, d_j, d_{j+1}, \dots, d_n)$$

$$(d)' = (d_1, d_2, \dots, d_i, d_i + 1, \dots, d_j + 1, d_j - 1, \dots, d_n)$$

که  $d_i \geq d_j$  حال با نوشتن  $(d)'$  به شکل

$$(d)' = (d'_1, d'_2, \dots, d'_{i-1}, d'_i, \dots, d'_j, d'_{j+1}, \dots, d'_n)$$

می توان به دست آورد که  $\sum_{t=1}^n \binom{d'_t}{2} > \sum_{t=1}^n \binom{d_t}{2}$  و لذا داریم:

$$\sum_{t=1}^n \binom{d'_t}{2} - \sum_{t=1}^n \binom{d_t}{2} =$$

$$\binom{d_i + 1}{2} + \binom{d_j - 1}{2} - \left( \binom{d_i}{2} + \binom{d_j}{2} \right) = d_i - d_j + 2 > 0$$

توجه کنید که  $d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_n \geq 2$  و  $d_1 + d_2 + \dots + d_n = 2m$  تکرار این

فرایند دنباله زیر را به دست می دهد:

$$(d'') = (d_1'', d_2'', d_3, \dots, d_{m-n+4}, 1, 1, \dots, 1)$$

تعداد یک ها برابر با  $2n - m - 4$  است. که در آن  $d_1'' \leq n - 2$ . اگر  $d_1'' = n - 2$  باشد آنگاه  $d_2'' \geq d_2$  و اگر  $d_1'' < n - 2$  آنگاه  $d_2'' = d_2$  با ادامه این فرایند داریم:

$$(d)_{B_{n,m}} = (n - 2, m - n + 2, 2, 2, \dots, 2, 1, 1, \dots, 1)$$

در اینجا تعداد یک ها  $2n - m - 4$  و تعداد دو ها برابر با  $m - n + 2$  است و دارای بیشترین مقدار  $\sum_{v \in V(G)} \binom{d(v)}{2}$  است. اثبات این ادعا کامل است.

حال برای یک گراف ساده  $G$  داریم  $m(G, 2) = \binom{m}{2} - \sum_{v \in V(G)} \binom{d(v)}{2}$  با توجه به لم

(۱-۳-۴) داریم:  $b_4(G) = \binom{m}{2} - \sum_{v \in V(G)} \binom{d(v)}{2} - 2q(G)$  با کنار هم قرار دادن

مطالب بالا اثبات کامل می شود. ■

با توجه به مطالب بالا چند جمله ای مشخصه گراف  $B_{n,m}$  به شکل زیر بدست می آید:

$$\phi(B_{n,m}, x) = x^{n-4} [x^4 - mx^2 + (m - n + 2)(2n - m - 4)] \quad (۱۹-۴)$$

نتیجه ۱-۳-۴: اگر  $G$  یک  $(n, m)$ -گراف همبند دو بخشی باشد و  $n \leq m \leq 2n - 4$  آنگاه داریم [۱۱]:

$$E(G) \geq 2\sqrt{m + 2\sqrt{(m - n + 2)(2n - m - 4)}} \quad (۲۰-۴)$$

تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $G \cong B_{n,m}$  باشد.

قضیه ۲-۳-۴: اگر  $B'_{n,m}$  ( $n \leq m \leq 2n - 5$ ) یک  $(n, m)$ -گراف همبند دو بخشی باشد

آنگاه دارای کمترین انرژی در مرتبه دوم بعد از  $B_{n,m}$  است [۱۱].



اثبات: چون  $b_0(B'_{n,m}) = 1$  و  $b_2(B'_{n,m}) = m$  و

$b_4(B'_{n,m}) = (m - n + 3)(2n - m - 4)$  و  $b_i(B'_{n,m}) = 0$  برای دیگر مقادیر صحیح

و مثبت  $i$ ، لذا شبیه به اثبات قضیه ۱-۳-۴ نتیجه حاصل می شود.

چند جمله ای مشخصه گراف  $B'_{n,m}$  نیز به شکل زیر بیان می شود:

$$\phi(B'_{n,m}, x) = x^{n-4} [x^4 - mx^2 + [(m - n + 3)(2n - m - 4) - 1]]$$

لذا مانند قبل می توان کران دیگری برای گراف های دو بخشی ارائه داد. نتیجه زیر این مطلب را بیان می کند.

نتیجه ۲-۳-۴: اگر  $G$  یک  $(n, m)$ -گراف همبند دو بخشی باشد و  $n \leq m \leq 2n - 5$  و اگر

$G \not\cong B_{n,m}$ ، آنگاه داریم:

$$E(G) \geq 2\sqrt{m + 2\sqrt{(m - n + 3)(2n - m - 4) - 1}} \quad (۲۱-۴)$$

و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر  $G \cong B'_{n,m}$  [۱۱].

#### ۴-۴ نتیجه گیری

در این فصل کران های زیر ارائه شد:

(۱) کران بالای انرژی

$$i. \quad E(G) \leq \frac{2m}{\sqrt{pq}} + 2\sqrt{(p-1)\left(m - \frac{m^2}{pq}\right)}$$

دارای بخش هایی با اندازه  $p$  و  $q$  و  $m$  یال است.

$$ii. \quad E(G) \leq (\sqrt{p} + 1)\sqrt{pq}$$

$$\text{iii. } E(G) \leq 2 \left( \frac{2m}{n} \right) + \sqrt{(n-2) \left[ 2m - 2 \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right]}$$

$$\text{iv. } E(G) \leq \frac{n}{\sqrt{8}} (\sqrt{n} + 2)$$

(۲) کران پایین انرژی

$$\text{i. } E(G) \geq 2m \sqrt{m/q}$$

$$\text{ii. } E(G) \geq \sqrt{(r+1)^2 - 5}$$

$$\text{iii. } E(G) \geq 1 + \text{rank}(G)$$

(۳) گراف  $B_{n,m}$  که در شکل ۴-۱ آورده شده است دارای کمترین انرژی در بین همه گراف های

دو بخشی است.

## فصل پنجم

### انرژی گراف های دوری

در این فصل در ادامه دسته بندی انرژی، به بررسی انرژی گراف های دوری می پردازیم. در مورد کران انرژی این گراف ها تنها یک کران ارائه می دهیم و سپس در بخش اول کران های انرژی را برای گراف های تک دوری بیان می کنیم.

برای عدد صحیح  $n \geq 1$  فرض کنیم  $\mathbb{Z}_n$  حلقه باقیمانده به پیمانه  $n$  باشد و فرض کنیم  $\{1, \dots, n\}$  مجموعه عناصر  $\mathbb{Z}_n$  باشد. زیر مجموعه  $l \subseteq \{1, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor\}$  داده شده است. گراف دوری  $G_n(l)$ ، گرافی است دارای  $n$  راس، به طوری که راس ها با عناصر  $\mathbb{Z}_n$  بر چسب گذاری شده است و راس های  $i, j \in \mathbb{Z}_n$  مرتبط اند اگر و تنها اگر  $j - i \in l$  باشد [۲۱].

همچنین مکمل  $G_n(l)$  را نیز با  $\overline{G_n(l)}$  نشان می دهیم که گراف دوری است و به شکل زیر تعریف می کنیم:

$$\overline{G_n(l)} = G_n(R) \quad R = \{1, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor\} - l$$

حال فرض کنیم  $e(z) = \exp(2\pi iz)$  باشد که  $i = \sqrt{-1}$ . آنگاه به آسانی دیده می شود که برای  $l \subseteq \{1, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor\}$ ، مقادیر ویژه گراف  $G_n(l)$  عبارتند از:

$$\lambda_j(l) = \sum_{s \in (l \cup -l)} e(js - n) \quad , \quad j = 0, 1, \dots, n-1.$$

فرض کنیم  $p$  عدد اول باشد. مجموعه باقیمانده مربعی به پیمانه  $p$  در مجموعه  $\{1, \dots, (p-1)/2\}$  را با  $z_p$  نشان می دهیم. داریم:

قضیه ۵-۱: برای هر عدد اول  $p \equiv 1 \pmod{4}$  داریم [۲۱]:

$$E(G_p(z_p)) \geq \frac{(p-1)(p^{\frac{1}{2}}+1)}{2}. \quad (۱-۵)$$

اثبات: چون  $1 \equiv (mod 4) p \equiv 1$  باقیمانده مربعی به پیمانۀ  $p$  است،  $z_p \cup -z_p$  مجموعه ای از همه  $(p-1)/2$  باقیمانده مربعی به پیمانۀ  $p$  است. بنابراین

$$\lambda_0(z_p) = (p-1)/2$$

حاصل می شود. همچنین برای  $j = 1, \dots, p-1$  داریم:

$$|\lambda_j(z_p)| = \sum_{s \in z_p \cup -z_p} e(js/p) = 1/2 \sum_{u=1}^{p-1} e(ju^2/p)$$

برای هر باقیمانده مربعی  $s$  که  $s \equiv u^2 (mod p)$ ، تساوی اخیر دارای دقیقاً دو جواب است:

$$\sum_{u=1}^{p-1} e(ju^2/p) = \sum_{u=0}^{p-1} e(ju^2/p) - 1 = \begin{cases} p^{1/2} - 1 & \text{if } j \in z_p \\ -p^{1/2} - 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

برای  $j = 1, \dots, p-1$  است. بنابراین

$$j = 1, \dots, p-1 |\lambda_j(z_p)| = \begin{cases} p^{1/2} - 1 & \text{if } j \in z_p \\ -p^{1/2} - 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

حاصل می شود و لذا با محاسبه ساده نتیجه حاصل می شود. ■

## ۱-۵ گراف های تک دوری

فرض کنیم  $C(n, l)$  مجموعه همه گراف های تک دوری باشد که از اضافه شدن دور  $C_1$  به  $n-l$  راس وابسته به دست می آید [۷]. توجه کنید که:

$$G(n, n) = C(n, n) = \{C_n\} \quad G(n, n-1) = C(n, n-1) = \{P_n^{n-1}\}$$

فرض کنیم برای هر گراف  $G$  با  $n$  راس داشته باشیم:

$$b_i = b_i(G) = |a_i(G)|, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

لم ۱-۱-۵: اگر  $G$  گراف تک دوری با دوری به اندازه  $l$  باشد آنگاه برای هر  $k \geq 0$  داریم:

$$(-1)^k a_{2k} \geq 0 \quad (۲-۵)$$

همچنین اگر  $l = 2r + 1$  و  $r$  عددی فرد باشد آنگاه  $(-1)^k a_{2k+1} \geq 0$  است [۸].

اثبات: اگر  $l$  زوج باشد آنگاه  $G$  گراف دو بخشی است و  $a_{2k} = (-1)^k b_{2k}$  و  $a_{2k+1} = 0$  برای هر  $k \geq 0$ ، بنابراین لم برقرار است. فرض کنیم  $l$  فرد و  $l = 2r + 1$  باشد. اگر آنگاه هر گراف ساچز<sup>۳۲</sup> از  $G$  با  $i$  راس باید شامل  $k$  جورسازی باشد و  $a_{2k} = (-1)^k m(G; k)$ . اگر  $i = 2k + 1$  آنگاه وقتی  $2k + 1 < l$  است، داریم  $a_{2k+1} = 0$ ؛ و هر گراف ساچز از  $G$  با  $2k + 1$  راس باید شامل دور  $C_l$  که  $2k + 1 \geq l$  باشد. بنابراین  $a_{2k} = (-1)^{k-r+1} m(G - C_l; k - r)$  و حکم ثابت است. ■

لم ۲-۱-۵: [۷]

(۱) فرض کنیم  $G \in G(n, l)$  که  $l \not\equiv 0 \pmod{4}$  باشد. اگر  $uv$  یالی از  $G$  متعلق به دور  $C_1$  آنگاه داریم:

$$b_i(G) = b_i(G - uv) + b_{i-2}(G - u - v) + 2b_{i-l}(G - C_l)$$

(۲) فرض کنیم  $G \in G(n, l)$  و  $uv$  یال وابسته از  $G$  با راس وابسته  $v$  باشد. آنگاه داریم:

$$b_i(G) = b_i(G - v) + b_{i-2}(G - v - u)$$

اثبات: (۱) چندجمله ای مشخصه هر گراف در رابطه زیر صدق می کند [۳۵]:

<sup>32</sup> Sachs

$$\phi(G; \lambda) = \phi(G - uv; \lambda) - \phi(G - u - v; \lambda) - 2 \sum_z \phi(G - z; \lambda)$$

که جمع بستن روی همه دور هایی مثل  $Z$  است که شامل یال  $uv$  هستند. بنابراین

$$b_i(G) = |a_i(G)| = |a_i(G - uv) - a_{i-2}(G - u - v) - 2a_{i-1}(G - C_l)|$$

$$= |a_i(G - uv)| + |a_{i-2}(G - u - v)| + 2|2a_{i-1}(G - C_l)|$$

$$.= b_i(G - uv) + b_{i-2}(G - u - v) + 2b_{i-1}(G - C_l)$$

(۲) این قسمت از معادله زیر نتیجه می شود:

$$\phi(G; \lambda) = \phi(G - uv; \lambda) - \phi(G - u - v; \lambda) \quad \blacksquare$$

لم ۳-۱-۵: اگر  $G_1$  و  $G_2$  دو گراف تک دوری باشند و اگر  $G_1 \geq G_2$  باشد آنگاه [۷]:

$$E(G_1) \geq E(G_2)$$

وقتی نا مساوی ها اکید باشند نیز این نتیجه برقرار است.

اثبات: با استفاده از لم (۱-۲-۵) و فرمول

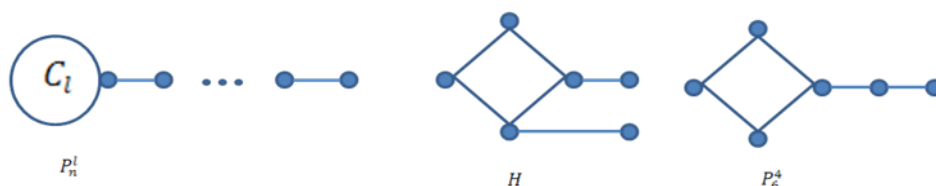
$$E(G) = 1/2\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x^2} \ln [(\sum_{j=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} b_{2j+1} x^{2j})^2 + (\sum_{j=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} b_{2j+1} x^{2j+1})^2] \quad (۳-۵)$$

برای گراف های تک دوری ،  $E(G)$  تابع یکنوای افزایشی از  $b_i$  است. پس اگر  $G_1$  و  $G_2$  دو گراف تک

دوری با  $b_i(G_1) \geq b_i(G_2)$  باشند آنگاه  $E(G_1) \geq E(G_2)$  است.  $\blacksquare$

### ۵-۱-۱ گراف های تک دوری با بیشترین انرژی

فرض کنیم  $P_n^l$  گراف تک دوری حاصل از ارتباط یک راس از  $C_l$  با یک راس پایانی از  $P_{n-1}$  باشد.



شکل ۵-۱ گراف  $P_n^l$  و  $P_n^4$  و  $H$

در سال ۱۹۹۹ حدس زیر برای گراف های تک دوری با بیشترین انرژی ارائه شد [۳۰]:

حدس ۵-۱-۱-۱: در بین همه گراف های تک دوری با  $n$  راس گراف  $C_n$  دارای بیشترین انرژی است اگر  $n \leq 7$  و  $n = 9, 10, 11, 13, 15$  برای دیگر مقادیر  $n$  گراف تک دوری دارای بیشترین انرژی گراف  $P_n^6$  است [۳۰].

در این قسمت طی چند لم ثابت می کنیم که گراف  $P_n^6$  دارای بیشترین انرژی در بین همه گراف های تک دوری است.

لم ۵-۱-۱-۱: فرض کنیم  $G \in G(n, l)$  که  $l \not\equiv 0 \pmod{4}$  باشد. اگر  $G \neq P_n^l$  آنگاه  $G < P_n^l$  است [۷].

اثبات: به استقرا روی  $n - l$  لم را ثابت می کنیم.

حالت (۱) اگر  $l$  فرد باشد. در حالت بدیهی لم برای  $n - l = 0$  و  $n - l = 1$  برقرار است زیرا  $G(n, l)$  دارای تنها یک عنصر است. اگر  $p \geq 2$  باشد و فرض کنیم نتیجه برای  $n - l < p$



درست باشد.  $n - l = p$  را در نظر می گیریم. چون  $G$  تک دوری است و دوری برای  $n > l$  وجود ندارد پس  $G$  باید دارای یک یال وابسته  $uv$  با راس وابسته  $v$  باشد.  $G \neq P_n^l$  و  $n \geq l + 2$  است لذا می توان یال  $uv$  را چنان اختیار کرد که  $G - v \neq P_{n-1}^l$ . با استفاده از لم (۲-۲-۵) داریم:

$$b_i(G) = b_i(G - v) + b_{i-2}(G - v - u)$$

$$b_i(P_n^l) = b_i(P_{n-1}^l) + b_{i-2}(P_{n-2}^l)$$

اکنون با استفاده از فرض استقرا داریم  $G - v < P_{n-1}^l$ . اگر  $G - u - v$  شامل دور  $C_l$  باشد آنگاه با توجه به فرض استقرا داریم:  $G - v - u < P_{n-2}^l$ ، بنابراین لم، از دو معادله اخیر و فرض استقرا ثابت می شود. (به آسانی دیده می شود که این رابطه حتی اگر  $G - v - u$  نا همبند باشد باز هم رابطه برقرار است.) اگر  $G - u - v$  شامل دور  $C_l$  نباشد آنگاه بدون دور است. پس  $b_{i-2}(G - u - v) = 0$  هرگاه  $i$  فرد باشد درحالی که  $i = 2k$  و

$$b_{2k-2}(G - u - v) = m(G - u - v, k - 1) \leq m(P_{n-2}, k - 1)$$

$$.< m(P_{n-2}^l, k - 1) = b_{2k-2}(P_{n-2}^l)$$

پس از فرض استقرا و معادله اخیر لم حاصل می شود.

حالت ۲) اگر  $l$  زوج باشد آنگاه  $l = 4r + 2$  است. در این مورد همه عناصر  $G(n, l)$  گراف های دو بخشی اند و  $b_i(G) = 0$  وقتی که  $i$  فرد باشد. ظاهرا لم وقتی  $n - l = 0, 1$  است برقرار می باشد. اگر  $p \geq 2$  باشد و فرض کنیم نتیجه برای  $n - l < p$  درست باشد.  $n - l = p$  در نظر می گیریم. چون  $n > l$  است،  $G$  تک دوری است و دور دیگری ندارد، پس  $G$  باید دارای یک یال وابسته  $uv$  با راس وابسته  $v$  باشد. چون  $G \neq P_n^l$  و  $n \geq l + 2$  است لذا می توان یال  $uv$  را چنان اختیار کرد که  $G - v \neq P_{n-1}^l$ . با استفاده از لم (۲-۱-۵) داریم:

$$b_{2k}(G) = b_{2k}(G - v) + b_{2k-2}(G - v - u)$$

$$b_{2k}(P_n^l) = b_{2k}(P_{n-1}^l) + b_{2k-2}(P_{n-2}^l)$$

اکنون با استفاده از فرض استقرا داریم  $G - v < P_{n-1}^l$  اگر  $G - u - v$  شامل دور  $C_l$  باشد آنگاه با توجه به فرض استقرا داریم:  $G - v - u < P_{n-2}^l$ ، بنابراین لم از دو معادله اخیر و فرض استقرا ثابت می شود. (به آسانی دیده می شود که این رابطه حتی اگر  $G - v - u$  نا همبند باشد باز هم رابطه برقرار است.) اگر  $G - u - v$  شامل دور  $C_l$  نباشد آنگاه بدون دور است. پس  $b_{i-2}(G - u - v) = 0$  هرگاه  $i$  فرد باشد در حالی که  $i = 2k$  و

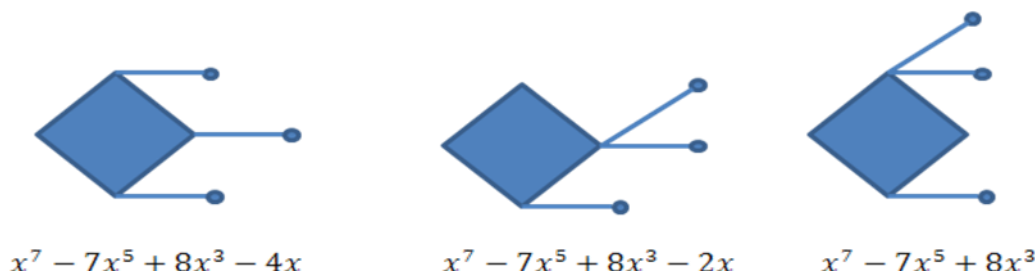
$$\begin{aligned} b_{2k-2}(G - u - v) &= m(G - u - v, k - 1) \leq m(P_{n-2}, k - 1) < \\ m(P_{n-2}^l, k - 1) &\leq m(P_{n-2}^l, k - 1) + 2m\left(P_{n-l-2}, k - 1 - \frac{l}{2}\right) = \\ b_{2k-2}(P_{n-2}^l) & \end{aligned}$$

است. پس از فرض استقرا و معادله اخیر لم حاصل می شود و لذا اثبات لم کامل است. ■

مشابه به لم (۱-۱-۵) لم زیر را داریم:

لم ۱-۱-۲: فرض کنیم  $l = 4r$  و  $G \in G(n, l)$  اما  $G \notin C(n, l)$ . آنگاه  $G < P_n^l$  است [۷].

توجه کنید که در لم بالا شرط  $G \notin C(n, l)$  ضروری است. به عنوان مثال اگر گراف  $H$  یکی از گراف های شکل (۲-۵) باشد آنگاه  $H \notin P_6^4$  اما  $E(H) > E(P_6^4)$  است.



شکل ۲-۵

از ترکیب لم (۳-۱-۵) با لم (۲-۱-۵)، قضیه زیر حاصل می شود:

قضیه ۱-۱-۵: فرض کنیم  $G \in G(n, l)$  و  $n > l$  باشد. اگر  $G$  بیشترین انرژی را در  $G(n, l)$  داشته باشد آنگاه  $G$  یا  $P_n^l$  است و یا وقتی  $l = 4r$  گرافی از نوع  $C(n, l)$  است [۷].

در این قسمت چند لم برای گراف های تک دوری دو بخشی که دارای بیشترین انرژی می باشند بیان می کنیم.

لم ۳-۱-۵: فرض کنیم  $4k + 3$  یا  $4k + 2$  یا  $4k + 1$  یا  $n = 4k$  باشد. آنگاه داریم [۳۱]:

$$P_n \geq P_2 \cup P_{n-2} \geq \dots \geq P_4 \cup P_{n-4} \geq P_{2k} \cup P_{n-2k} \geq P_{2k+1} \cup P_{n-2k-1} \geq \dots \geq P_3 \cup P_{n-3} \geq P_1 \cup P_{n-1}$$

(۴-۵)

لم ۴-۱-۵: فرض کنیم  $n \geq 6$  باشد آنگاه  $P_n^4 < P_n^6$  است [۷].

اثبات: به استقرا روی  $n$  قضیه را ثابت می کنیم. با محاسبه مستقیم می توان چک کرد که این لم برای  $n = 6$  و  $n = 7$  برقرار است. در واقع چند جمله ای مشخصه در این مورد به شکل زیر است:

$$\phi(P_6^4; \lambda) = \lambda^6 - 6\lambda^4 + 6\lambda^2$$

$$\phi(P_6^6; \lambda) = \lambda^6 - 6\lambda^4 + 9\lambda^2 - 4,$$

$$\phi(P_7^4; \lambda) = \lambda^7 - 7\lambda^5 + 11\lambda^3 - 2\lambda$$

$$\phi(P_7^6; \lambda) = \lambda^7 - 7\lambda^5 + 13\lambda^3 - 7\lambda,$$

حال فرض کنیم  $n \geq 8$  و لم برای گراف های با  $n - 1$  و  $n - 2$  راس درست باشد، به عبارت

دیگر

$$, b_{2k}(P_{n-2}^4) \leq b_{2k}(P_{n-2}^6) b_{2k}(P_{n-1}^4) \leq b_{2k}(P_{n-1}^6)$$

پس با استفاده از لم (۲-۲-۵) داریم:

$$, b_{2k}(P_n^4) = b_{2k}(P_{n-1}^4) + b_{2k-2}(P_{n-2}^4)$$

$$, b_{2k}(P_n^6) = b_{2k}(P_{n-1}^6) + b_{2k-2}(P_{n-2}^6)$$

و لذا نتیجه واضح است. ■

لم ۴-۱-۱-۵: فرض کنیم  $n \geq 6$  و  $G \in C(n, 4)$  باشد. آنگاه  $G < P_n^6$  است [۷].

اثبات: از استقرا روی  $n$  استفاده می کنیم. با محاسبه مستقیم می توان چک کرد که این لم برای  $n = 6$  و  $n = 7$  برقرار است. حال فرض کنیم  $n \geq 8$  و لم برای گراف های با  $n - 1$  و  $n - 2$  راس درست باشد.. اگر  $uv$  یال وابسته از  $G$  با راس وابسته  $v$  باشد. از لم (۲-۱-۵) داریم:

$$, b_{2k}(G) = b_{2k}(G - v) + b_{2k-2}(G - u - v)$$

$$, b_{2k}(P_n^6) = b_{2k}(P_{n-1}^6) + b_{2k-2}(P_{n-2}^6)$$

از اینکه  $G - u - v$  الزاما بدون دور است، داریم:

$$b_{2k-2}(G - u - v) = m(G - u - v, k - 1) \leq m(P_{n-2}, k - 1)$$

$$.< b_{2k-2}(P_{n-2}^6)$$

به آسانی دیده می شود که:

$$b_{2k}(P_n^l) = \begin{cases} m(P_n^l, k) & 2k < l \\ m(P_n^l, k) - 2m(P_{n-l}, k - \frac{l}{2}) & 2k \geq l, l = 4r \\ m(P_n^l, k) + 2m(P_{n-l}, k - \frac{l}{2}) & 2k \geq l, l = 4r + 2 \end{cases} \quad (۵-۵)$$

و بنابراین وقتی  $n = l + 1$  و  $n = l + 2$  خواهیم داشت:  $b_{2k}(P_n^l) \leq m(P_n^l, k) + 2$ .

لم ۵-۱-۱-۵: فرض کنیم  $l \geq 8$  عدد زوج باشد. آنگاه  $P_{l+1}^l < P_{l+1}^6$  است [۷].

اثبات: برای  $k \geq 3$  توسط لم (۵-۱-۲) و (۵-۱-۳) داریم:

$$\begin{aligned} b_{2k}(P_{l+1}^6) &= m(P_{l+1}^6, k) + 2m(P_{l+5}, k - 3) \\ &= m(P_{l+1}, k) + m(P_4 \cup P_{l-5}, k - 1) + 2m(P_{l-5}, k - 3) \\ &\geq m(P_{l+1}, k) + m(P_1 \cup P_{l-2}, k - 1) + 2m(P_{l-5}, k - 3) \\ &= m(P_{l+1}, k) + 2m(P_{l-5}, k - 3) \\ &\geq m(P_{l+1}, k) \pm 2m(P_1, k - l/2) \\ &= b_{2k}(P_{l+1}^l) \end{aligned}$$

باید توجه کرد که  $m(P_1, k - l/2)$  برابر صفر نیست تنها وقتی که  $k - \frac{l}{2} = 0$  است. به طور

مشابه داریم:

$$b_4(P_{l+1}^6) = b_4(P_{l+1}^l)$$

لذا حکم برقرار است. ■

لم ۶-۱-۱-۵: فرض کنیم  $l \geq 8$  عدد زوج باشد و  $n > l$ ، آنگاه  $P_n^l < P_n^6$  است [۷].

اثبات: به استقرا روی  $n$  لم را ثابت می کنیم. با توجه به دو لم قبل این عبارت برای  $n = l + 1$  و

$n = l + 2$  درست است. فرض کنیم  $n > l + 2$  و این لم برای  $n - 1$  و  $n - 2$  برقرار باشد.

داریم:

$$b_{2k}(P_n^l) = b_{2k}(P_{n-1}^l) + b_{2k-2}(P_{n-2}^l)$$

$$b_{2k}(P_n^6) = b_{2k}(P_{n-1}^6) + b_{2k-2}(P_{n-2}^6). \quad \blacksquare$$

لم ۵-۱-۱-۷: اگر  $l \geq 8$  و زوج باشد و  $n > l$  و  $G \in C(n, l)$  آنگاه  $G < P_n^6$  است [۷].

اثبات: از استقرا روی  $n - l$  استفاده می کنیم. با توجه به لم (۵-۱-۱-۵) این عبارت برای  $n - l = 1$  درست است. اگر  $p \geq 2$  باشد و فرض کنیم عبارت برای  $n - l < p$  درست باشد.  $n - l = p$  را در نظر بگیرید. حال اگر  $uv$  یال وابسته از  $G$  با راس وابسته  $v$  باشد آنگاه با توجه به لم (۲-۱-۵) داریم:

$$b_{2k}(G) = b_{2k}(G - v) + b_{2k-2}(G - u - v)$$

$$b_{2k}(P_n^6) = b_{2k}(P_{n-1}^6) + b_{2k-2}(P_{n-2}^6)$$

چون  $G - u - v$  بدون دور است لذا

$$b_{2k-2}(G - u - v) = m(G - u - v, k - 1) \leq m(P_{n-2}, k - 1)$$

$$< b_{2k-2}(P_{n-2}^6)$$

است، پس حکم کامل است.  $\blacksquare$

لذا نتیجه می گیریم که در بین گراف های کلاس  $G(n, l)$  گراف  $P_n^6$  دارای بیشترین انرژی است.

### ۵-۱-۲ گراف های تک دوری با کمترین انرژی

فرض کنیم  $S_n^l$  گراف حاصل از ستاره  $n$  راسی و اضافه شدن یک یال باشد به طوری که تشکیل دوری به طول  $l$  را بدهد. در زیر قضایا را می آوریم که بیان می کنند  $S_n^3$  دارای کمترین انرژی در بین همه گراف های تک دوری (در کلاس  $G(n, l)$ ) است.



شکل ۳-۵ گراف  $S_n^3$  و  $S_n^l$

لم ۵-۱-۲-۱: اگر  $G \in G(n, l)$  و  $uv$  یال وابسته با راس وابسته  $v$  از  $G$  باشد آنگاه [۱۰]

$$b_i(G) = b_i(G - v) + b_{i-2}(G - u - v)$$

اثبات: چون  $v$  راس وابسته از  $G$  است لذا

$$\phi(; x) = \phi(G - v; x) - \phi(G - v - u; x)$$

بنابراین

$$b_i(G) = |a_i(G)| = |a_i(G - v) + a_{i-2}(G - v - u)|$$

$$= |a_i(G - v)| + |a_{i-2}(G - v - u)| = b_i(G - v) + b_{i-2}(G - v - u). \quad \blacksquare$$

قضیه ۵-۱-۲-۱: اگر  $G \in G(n, l)$  و  $G \neq S_n^l$  باشد آنگاه  $G > S_n^l$  است [۱۰].

اثبات: به استقرا روی  $n$  قضیه را ثابت می کنیم. اگر  $n - l = 0$  آنگاه قضیه درست است. فرض

کنیم  $p \geq 1$  و قضیه برای  $n - 1 < p$  درست باشد.  $n - 1 = p$  را در نظر بگیرید. چون  $G$  تک

دوری است و  $n > l$ ، لذا  $G$  یک دور تنها نیست. بنابراین دارای یک راس وابسته  $v$  است و  $v$  مجاور

با راس منحصر به فرد  $u$  است. با توجه به لم قبل داریم:

$$b_i(G) = b_i(G - v) + b_{i-2}(G - u - v)$$

$$b_i(S_n^l) = b_i(S_{n-1}^l) + b_{i-2}(P_{l-1})$$

از فرض استقرا داریم:

$$b_i(G - v) \geq b_i(S_{n-1}^l)$$

برای هر  $i \geq 0$  پس

$$b_{i-2}(P_{l-1}) = \begin{cases} 0, & i \text{ فرد باشد} \\ m(P_{l-1}, \frac{i-2}{2}), & i \text{ زوج باشد و } i \leq l+1 \\ 0, & i \text{ زوج باشد و } i > l+1 \end{cases}$$

$G - u - v$  شامل مسیر  $P_{l-1}$  به عنوان یک زیرگراف است، اگر  $i$  فرد باشد و  $i > l+1$  آنگاه

$$b_{i-2}(G - u - v) \geq b_{i-2}(P_{l-1})$$

و اگر  $i$  زوج باشد و  $i \leq l+1$  آنگاه

$$b_{i-2}(G - u - v) = m(G - u - v, (i-2)/2) \geq m(P_{l-1}, (i-2)/2)$$

بنابراین  $b_{i-2}(G - u - v) \geq b_{i-2}(P_{l-1})$  برای هر  $i \geq 0$  است. پس  $b_i(G) \geq b_i(S_n^l)$

است. به آسانی دیده می شود که اگر  $G \neq S_n^l$  آنگاه

$$b_2(G - u - v) > l - 2 = b_2(P_{l-1}) \text{ بنابراین } b_4(G) > b_4(S_n^l) \text{ و قضیه برقرار است.}$$

قضیه ۵-۲-۲: اگر  $n \geq l \geq 5$  باشد آنگاه  $S_n^4 < S_n^l$  است [۱۰].

اثبات: از استقرا روی  $n - l$  استفاده می کنیم. به آسانی به دست می آید که

$$\phi(S_n^4; x) = x^{n-4} [x^4 - nx^2 + 2(n-4)]$$



بنابراین  $b_4(S_n^4) = 2(n-4)$  و  $b_i(G) = 0$  برای هر  $i \neq 0, 2, 4$ . اگر  $n-l = 0$  آنگاه  $b_4(C_n) = n/2(n-3)$  و  $G = C_n$  پس  $b_4(C_n) > b_4(S_n^4)$  برای هر  $n \geq 5$  و قضیه برقرار است.

فرض کنیم  $p \geq 1$  و قضیه برای  $n-l < p$  درست باشد.  $n-l = p$  اختیار می کنیم. لذا از لم (۱-۲-۱-۵) داریم:

$$b_4(S_n^l) = b_4(S_{n-1}^l) + b_2(P_{l-1}) = b_4(S_{n-1}^l) + l - 2 \geq 2(n-1-4) + l - 2 > 2(n-4)$$

.

قضیه ۳-۲-۲-۵: اگر  $G$  گراف تک دوری با  $n \geq 6$  راس باشد و  $G \neq S_n^3$  آنگاه  $E(S_n^3) < E(G)$  است [۱۰].

اثبات: با توجه به دو قضیه قبل کافی است ثابت کنیم  $E(S_n^3) < E(S_n^4)$  برای  $n \geq 6$  است. به آسانی به دست می آید که

$$\phi(S_n^3; x) = x^{n-4} [x^4 - nx^2 + 2x + (n-3)]$$

لذا با استفاده از عبارت (۲-۱-۵) در لم (۳-۱-۵) داریم:

$$E(S_n^4) - E(S_n^3) = 1/\pi \int_0^{+\infty} 1/x^2 \ln \frac{[1+nx^2+2(n-4)x^4]^2}{[1+nx^2+(n-3)x^4]^2+(2x^3)^2} dx$$

قرار دهید

$$f(x) = [1 + nx^2 + 2(n-4)x^4]^2 - [1 + nx^2 + (n-3)x^4]^2 - 4x^6$$

آنگاه

$$f(x) = 2(n-5)x^4 + 2[n(n-5) - 2]x^6 + (n-5)^2x^8$$

$$+2(n-5)(n-3)x^8 > 0$$

برای  $n \geq 6$  است. بنابراین  $E(S_n^3) < E(S_n^4)$  برای  $n \geq 6$  است. ■

فرض کنیم  $P_n^l$  گراف تک دوری حاصل از اتصال راسی از دور  $C_l$  به یک راس پایانی از مسیر  $P_{n-l}$  باشد. نگاه حدس زیر را بیان می کنیم:

## ۲-۵ نتیجه گیری

در بین گراف های تک دوری گراف  $P_n^6$  دارای بیشترین انرژی و گراف  $S_n^3$  دارای کمترین انرژی می باشند.

## فصل ششم

انرژی گراف های منتظم و خطی

در این فصل به بررسی انرژی گراف های منتظم و گراف های خطی می پردازیم. به این ترتیب، در بخش اول گراف های به شدت منتظم را معرفی می کنیم و انرژی آن ها را بررسی می کنیم. در بخش دوم گراف های خطی و انرژی آن ها را تعیین می کنیم.

## ۶-۱ انرژی گراف های منتظم:

**تعریف ۶-۱-۱:** گراف  $G$  را به شدت منتظم با پارامترهای  $(n, k, \lambda, \mu)$  نامیم هرگاه منتظم درجه  $k$  باشد، هر جفت راس مجاور آن در  $\lambda$  همسایگی مشترک باشند و هر جفت راس غیر مجاور مجزا در  $\mu$  همسایگی مجاور باشد. گراف های کامل در این دسته قرار نمی گیرند. حال اگر  $A$  ماتریس مجاورت گراف باشد آنگاه داریم:

$$A^2 = kI + \lambda A + \mu(J - A - I) \quad (۶-۱)$$

که در آن  $I$  ماتریس همانی و  $J$  ماتریسی که همه مولفه های آن یک است می باشند [۱۵].

فرض کنیم گراف به شدت منتظم  $G$  با  $\lambda = \mu$  داده شده است. یک  $(v, k, \lambda) - 2$  طرح را از ماتریس مجاورت گراف می سازیم به این صورت که مجموعه نقاط، مجموعه راس  $G$  باشد و یک بلوک برای هر سطر از ماتریس  $G$  تعریف می کنیم. عناصر هر بلوک، شماره ستونی است که در سطر دارای عدد ۱ است.

## ۱-۱-۶ گراف های به شدت منتظم با بیشترین انرژی

ابتدا شبیه به کرانی که برای گراف های دو بخشی در فصل چهار بیان کردیم، برای گراف های به شدت منتظم، مقدار دقیق انرژی را در قالب دو قضیه ارائه می دهیم. این دو قضیه توسط کولن<sup>۳۳</sup> و مولتن<sup>۳۴</sup> بیان شده است [۲۳].

قضیه ۱-۱-۶-۱: اگر  $2m \geq n$  باشد و  $G$  گراف دارای  $n$  راس و  $m$  یال باشد آنگاه

$$E(G) \leq \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1) \left[ 2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right]} \quad (۲-۶)$$

برقرار است. تساوی اتفاق می افتد اگر و تنها اگر  $G$ ، گراف  $K_2$  یا  $\frac{n}{2} K_2$  یا یک گراف غیر کامل

همبند به شدت منتظم با دو مقدار ویژه غیر بدیهی با مقادیر واضح  $\sqrt{(n-1) \left[ 2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right]}$  باشد [۳۲].

اثبات: فرض کنیم  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$  مقادیر ویژه گراف  $G$  باشند. می دانیم که  $\lambda_1 \geq \frac{2m}{n}$  است. پس چون تساوی

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 2m$$

همواره برقرار است، داریم:

$$\sum_{i=2}^n \lambda_i^2 = 2m - \lambda_1^2.$$

اکنون با استفاده از نا مساوی کوشی-شوارتز برای بردار های  $(|\lambda_2|, \dots, |\lambda_n|)$  و  $(1, \dots, 1)$  با  $n-1$  مولفه، نا مساوی زیر حاصل می شود:

<sup>33</sup> Koolen

<sup>34</sup> Moulton

$$\sum_{i=2}^n |\lambda_i| \leq \sqrt{(n-1)(2m - \lambda_1^2)}$$

بنابراین باید داشته باشیم:

$$E(G) \leq \lambda_1 + \sqrt{(n-1)(2m - \lambda_1^2)} \quad (3-6)$$

حال تابع  $F(x) = x + \sqrt{(n-1)(2m - x^2)}$  را در نظر بگیرید. این تابع روی بازه  $\sqrt{2m/n} < x \leq \sqrt{m}$  کاهشی است. چون  $2m \geq n$  است، لذا  $\sqrt{2m/n} < 2m/n \leq \lambda_1$  باید برقرار باشد و بنابراین خواهیم داشت:  $F(\lambda_1) \leq F(\frac{2m}{n})$ . به این ترتیب نا مساوی (۲-۶) نتیجه می شود.

حال اگر تساوی در (۲-۶) اتفاق افتد، مقادیر ویژه با قدر مطلق یکسان برای  $\frac{n}{2}K_2$ ،  $\pm 1$  هستند که هر دو به تعداد  $\frac{n}{2}$  می باشند و مقادیر ویژه  $K_n$  نیز  $n-1$  به تعداد یکی و  $-1$  به تعداد  $n-1$  می باشند. به راحتی می توان امتحان کرد که اگر  $G$  یکی از گراف های اخیر باشد نا مساوی (۲-۶) برای آن برقرار است.

به عکس، اگر نا مساوی (۲-۶) برقرار باشد آنگاه با استفاده از بحث قبلی برای تابع  $F(x)$  دیده می شود که  $\lambda_1 = \frac{2m}{n}$  برقرار است. این نشان می دهد که  $G$  منتظم با درجه  $\frac{2m}{n}$  است. پس تساوی باید در نا مساوی کوشی-شوارتز بالا برقرار باشد لذا داریم:

$$|\lambda_i| = \sqrt{(2m - (\frac{2m}{n})^2)/(n-1)} \quad 1 \leq i \leq n$$

بنابراین،  $G$  دارای دو مقدار ویژه با قدر مطلق برابر است که در این مورد  $G$  باید  $\frac{n}{2}K_2$  باشد، یا  $G$  دارای دو مقدار ویژه با قدر مطلق مجزا است که در این صورت  $G$  باید  $K_n$  باشد، یا دارای سه مقدار

ویژه با قدر مطلق مجزا برابر با  $\frac{2m}{n}$  یا  $\sqrt{(2m - (\frac{2m}{n})^2)/(n-1)}$  است که در این مورد  $G$

گراف همبند غیر کامل به شدت منتظم است.

قضیه ۶-۱-۱-۲: انرژی گراف  $n$  راسی حداکثر  $n(1 + \sqrt{n})/2$  است. تساوی برقرار است اگر و

تنها اگر گراف به شدت منتظم با پارامترهای  $(n, \frac{(n+\sqrt{n})}{2}, \frac{(n+2\sqrt{n})}{4}, \frac{(n+2\sqrt{n})}{4})$  باشد [۳۲].

اثبات: فرض کنیم گراف  $G$  دارای  $n$  راس و  $m$  یال باشد. اگر  $2m \geq n$  آنگاه با استفاده از

محاسبات عادی، دیده می شود که سمت چپ نا مساوی (۶-۲) - با در نظر گرفتن تابعی از  $m$  -

بیشترین می شود هرگاه

$$m = \frac{n^2 + n\sqrt{n}}{4} \quad (۴-۶)$$

باشد. لذا شرط این قضیه با قرار دادن مقدار (۴-۶) در نا مساوی (۶-۲) بدست می آید. به این ترتیب

قضیه قبل و نا مساوی (۶-۲) در این قضیه برقرار است اگر و تنها اگر  $G$  گراف به شدت منتظم با

پارامترهای  $(n, \frac{(n+\sqrt{n})}{2}, \frac{(n+2\sqrt{n})}{4}, \frac{(n+2\sqrt{n})}{4})$  است. اگر  $2m \leq n$  آنگاه  $E(G) \leq n$  است. ■

در این قسمت بیان می کنیم که یک گراف به شدت منتظم با پارامترهای بالا، گرافی با بیشترین

انرژی است. در تعریف (۲-۳-۲) گفتیم که ماتریس مربعی مرتبه  $n$  با درایه های  $\pm 1$  را هادامار گوئیم

هرگاه  $HH^t = nI$  باشد. به عنوان مثال ماتریس های زیر هادامار مرتبه ۴ می باشند:

$$H_+ = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & - \\ 1 & 1 & - & 1 \\ 1 & - & 1 & 1 \\ - & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad H_- = \begin{bmatrix} 1 & - & - & - \\ - & 1 & - & - \\ - & - & 1 & - \\ - & - & - & 1 \end{bmatrix}$$

برای ماتریس های هادامار ثابت شده است که  $n$  باید ۱ یا ۲ یا مضربی از ۴ باشد. یک ماتریس

هادامار را گرافیکی نامیم هر گاه متقارن و دارای قطر ثابت باشد. همچنین یک ماتریس هادامار منتظم

است هرگاه مجموع سطری و ستونی آن ثابت باشد ( $H1 = H^t1 = l1$ ). مثال های اخیر، هر دو منتظم و گرافیکی هستند [۱۵].

توجه کنید که  $HH^t = nI$  و  $H1 = H^t1 = l1$  نتیجه می دهد  $l^21 = n1$  و بنابراین  $l^2 = n$  است. (۱ در روابط بالا برداری است که همه عناصر آن یک باشد).

تعریف ۱-۱-۶: فرض کنیم  $H$  ماتریس هادامار منتظم و گرافیکی با مجموع سطری  $l$  و قطر  $\delta$  باشد.  $H$  را از نوع  $+1$  یا مثبت نامیم هرگاه  $\delta l > 0$  و از نوع  $-1$  یا منفی نامیم هرگاه  $\delta l < 0$  باشد. اگر  $H$  از نوع  $\delta l = \varepsilon\sqrt{n}$  باشد و  $G$  گراف حاصل از  $H$ ، منتظم درجه

$$\frac{(n-\delta l)}{2} = (n - \varepsilon\sqrt{n})/2$$

باشد و  $J - \delta H = 2A$  نتیجه می دهد که:

$$A^2 = \frac{n-\delta l}{2}I + \frac{n-2\delta l}{4}(J - I)$$

بنابراین  $G$  گراف به شدت منتظم با پارامترهای زیر است:

$$(n, (n - \varepsilon\sqrt{n})/2, (n - 2\varepsilon\sqrt{n})/4, (n - 2\varepsilon\sqrt{n})/4) \quad (۵-۶)$$

به عکس اگر  $A$  ماتریس مجاورت گراف به شدت منتظم با پارامترهای بالا باشد آنگاه  $J - 2A$  ماتریس هادامار گرافیکی منتظم است. بنابراین ماتریس هادامار گرافیکی منتظم از نوع منفی دارای بیشترین انرژی است [۱۵].

نکته ۱-۱-۶: در مثال بالا  $H_+$  از نوع مثبت است و گراف متناظر آن  $2K_2$  است و  $H_-$  از نوع منفی است و گراف متناظر آن  $K_4$  است [۱۵].



تعریف ۶-۱-۱-۲: اگر  $H_1$  و  $H_2$  ماتریس هادامار مرتبه  $n_1$  و  $n_2$  به ترتیب باشند آنگاه ضرب کرونکر<sup>۳۵</sup> آنها،  $H_1 \otimes H_2$  ماتریس هادامار مرتبه  $n_1 n_2$  است [۱۵].

لم ۶-۱-۱-۱: اگر یک ماتریس هادامار گرافیکی منتظم مرتبه  $n$  از نوع مثبت یا منفی وجود داشته باشد آنگاه ماتریس هادامار گرافیکی منتظم مرتبه  $4n$  از هر دو نوع وجود دارد [۱۵].

در حقیقت می توان ماتریس های هادامار گرافیکی منتظم مرتبه  $4^k$  برای هر  $k$  صحیح از هر نوع ساخت. بنابراین گراف های به شدت منتظم با پارامترهای ۵-۶ برای  $\varepsilon = 1$  و  $\varepsilon = -1$  وجود دارد. پس می توان نتیجه گرفت که گراف با بیشترین انرژی برای هر مرتبه  $n = 4^k$  وجود دارد [۱۵].

تعریف ۶-۱-۱-۳: ماتریس هادامار  $H$  مرتبه  $n = l^2$  را نوع بوش<sup>۳۶</sup> نامیم هرگاه  $H$  به بلوک های  $l \times l$  تقسیم شود به طوری که همه بلوک های قطری، ماتریس با درایه های یک باشند و بلوک های غیرقطری، مجموع سطری و ستونی صفر داشته باشند. به عنوان مثال  $H_+$  از نوع بوش است اما  $H_-$  نیست. به آسانی دیده می شود که ماتریس هادامار نوع بوش متقارن، ماتریس گرافیکی منتظم نوع مثبت است [۱۵].

از ترکیب لم اخیر با این تعریف قضیه زیر نتیجه می شود:

قضیه ۶-۱-۱-۳: ماتریس های هادامار گرافیکی منتظم از نوع منفی و بیشترین انرژی گراف های مرتبه  $n = 4^{k+1} m^4$  برای همه مقادیر صحیح مثبت  $k$  و  $m$  وجود دارد [۱۵].

قضیه ۶-۱-۱-۴: اگر  $n$  مرتبه ای از یک ماتریس باشد آنگاه ماتریس هادامار گرافیکی منتظم نوع منفی و گراف با بیشترین انرژی از مرتبه  $n^2$  وجود دارد [۱۵].

<sup>35</sup> Croneker

<sup>36</sup> Bush

اثبات: اگر  $H$  ماتریس هادامار مرتبه  $n$  باشد که ستون اول آن  $\mathbf{1}$  باشد. قرار می دهیم  $H = [c_0, \dots, c_{n-1}]$  و تعریف می کنیم  $C_i = c_i c_i^T$  برای  $i = 1, \dots, n-1$  و قرار می دهیم  $C_0 = -J$  پس به آسانی دیده می شود که

$$1. \quad C_i \text{ برای } i = 1, \dots, n-1 \text{ متقارن با قطر ثابت } 1 \text{ است.}$$

$$2. \quad C_i \mathbf{1} = C_i^T \mathbf{1} \text{ برای } i = 1, \dots, n-1 \text{ است.}$$

$$3. \quad C_i C_j = 0 \text{ برای } i \neq j \text{ و } 0 \leq i, j \leq n-1 \text{ است.}$$

$$4. \quad \sum_{i=0}^{n-1} C_i^2 = n \sum_{i=0}^{n-1} c_i c_i^T = n H H^T = n^2 I \text{ است.}$$

حال مربع لاتین  $L$  (تعریف ۲-۳-۴) با عناصر  $0, \dots, n-1$  و قطر ثابت  $n-1$  را در نظر بگیرید.

به عنوان مثال:  $L_{i,j} = (i+j) \bmod (n-1)$  باشد اگر  $i \neq j$  و  $i \neq 0$  و  $j \neq 0$  و  $L_{i,i} = n-1$  نگاه  $i \neq 0$  اگر  $L_{i,0} = L_{0,i} = 2i \bmod (n-1)$  باشد و  $L_{i,i} = n-1$  برای  $i, j = 0, \dots, n-1$  است. ماتریس  $\tilde{H}$  مرتبه  $n^2 \times n^2$  را توسط جا به جا کردن هر مولفه  $i$  از  $L$  با  $C_i$  می سازیم. لذا خواص ۳ و ۴ بالا نشان می دهد که  $\tilde{H}$  ماتریس هادامار است. خاصیت ۱ نتیجه می دهد که  $\tilde{H}$  ماتریس گرافیکی با قطر  $\mathbf{1}$  است و خاصیت ۲ نیز نشان می دهد که  $\tilde{H}$  دارای مجموع سطری  $-n$  است. پس  $\tilde{H}$  ماتریس گرافیکی منتظم از نوع منفی است. ■

حدس مشهور هادامار بیان می کند که ماتریس های هادامار مرتبه  $n = 4m$  برای همه اعداد صحیح مثبت  $m$  وجود دارد. این برای بسیاری از مقادیر  $m$  تایید شده است. کوچکترین مورد باز آن  $m = 167$  است [۱۵].

نتیجه ۶-۱-۱-۱: ماتریس های هادامار گرافیکی منتظم نوع منفی و گراف با بیشترین انرژی از مرتبه  $n = 4^{k+1}m^2$  برای همه مقادیر صحیح مثبت  $k$  وجود دارد، اگر یکی از شرایط زیر برقرار باشد [۱۵]:

(۱)  $4m - 1$  توانی از عدد اول باشد.

(۲)  $2m - 1$  توانی از عدد اول باشد.

(۳)  $m$  مربع کامل باشد.

(۴)  $m < 176$ .

به این ترتیب اگر  $A$  ماتریس مجاورت یک گراف با بیشتری انرژی باشد آنگاه آن، ماتریس وقوع یک  $(p, \frac{p+\sqrt{p}}{2}, \frac{p+2\sqrt{p}}{4}) - 2$  طرح است و لذا با توجه به قضیه بالا  $\begin{pmatrix} 0 & A \\ A & 0 \end{pmatrix}$  ماتریس مجاورت گراف دو بخشی با بیشترین انرژی است.

## ۶-۲ انرژی گراف های خطی :

تعریف ۶-۲-۱: گراف خطی  $L(G)$  از گراف  $G$  توسط قرار دادن یال های  $G$  به عنوان راس های  $L(G)$  به دست می آید که اتصال دو راس در  $L(G)$  متناظر با یال های در  $G$  که در راس مشترک می باشند [۱۷].

گراف خطی تکراری از  $G$  به شکل زیر است:

$$L^2(G) = L(L(G)), \dots, L^k(G) = L(L^{k-1}(G)) \quad (۶-۶)$$

همچنین  $G \equiv L^0(G)$  است.

تعریف ۶-۲-۲: گراف خطی از گراف منتظم مرتبه  $n_0$  و درجه  $r_0$ ، گرافی منتظم از مرتبه

$$n_1 = \frac{1}{2} r_0 n_0 \quad \text{و درجه } r_1 = 2r_0 - 2 \text{ است. لذا برای } L^k(G) \text{ داریم [۱۶]:}$$

$$n_k = \frac{1}{2} r_{k-1} n_{k-1} \quad r_k = 2r_{k-1} - 2 \quad (۷-۶)$$

$n_{k-1}$  و  $r_{k-1}$  مربوط به  $L^{k-1}(G)$  می باشند. بنابراین داریم:

$$r_k = 2^k r_0 - 2^{k+1} + 2 \quad (۸-۶)$$

$$n_k = \frac{n_0}{2^k} \prod_{i=0}^{k-1} r_i = \frac{n_0}{2^k} \prod_{i=0}^{k-1} (2^i r_0 - 2^{i+1} + 2) \quad (۹-۶)$$

تعریف ۳-۲-۶: ماتریس وقوع از یک گراف را به شکل زیر تعریف می کنیم:

$$d_{ij} = \begin{cases} +1 & \text{اگر } v_i \text{ راس پایانی } e_j \text{ باشد} \\ 0 & \text{این غیر این صورت} \end{cases}$$

قضیه ۶-۲-۱: اگر  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  مقادیر ویژه گراف منتظم  $G$  از مرتبه  $n$  و درجه  $r$  باشد آنگاه

مقادیر ویژه گراف خطی آن به شکل زیر می باشد [۳۵]:

$$\begin{cases} \lambda_i + r - 2 & i = 1, 2, \dots, n \\ -2 & \text{به تعداد } \frac{n(r-n)}{2} \end{cases} \quad (۱۰-۶)$$

و مقادیر ویژه گراف  $L^2(G)$  عبارت است از:

$$\begin{cases} \lambda_i + 3r - 6 & i = 1, 2, \dots, n \\ 2r - 6 & \text{به تعداد } \frac{n(r-n)}{2} \\ -2 & \text{به تعداد } \frac{nr(r-n)}{2} \end{cases} \quad (۱۱-۶)$$

اثبات: ماتریس درجه  $D$ ، ماتریسی قطری است که عناصر قطر آن را درجه هر راس تشکیل می دهند. اگر  $R$  ماتریس وقوع باشد آنگاه داریم:

$$A(G) = RR^T - D$$

$$A(L(G)) = RR^T - 2I$$

اکنون با توجه به اینکه اگر  $A$  ماتریس  $m \times n$  باشد و  $\phi_X(\lambda)$  چند جمله ای مشخصه ماتریس مربعی  $X$ ، آنگاه  $\lambda^m \phi_{AA^T}(\lambda) = \lambda^n \phi_{A^T A}(\lambda)$  است. پس

$$|\lambda I - A(L(G)) - 2I| = \lambda^{m-n} \cdot |\lambda I - A - D|$$

به عبارت دیگر

$$\phi_{L(G)}(\lambda - 2) = \lambda^{m-n} \cdot |\lambda I - A - D|$$

که نتیجه می دهد:

$$\phi_{L(G)}(\lambda) = (\lambda + 2)^{m-n} \phi_G(\lambda - r + 2)$$

ولذا حکم ثابت است. ■

قضیه ۲-۲-۶: اگر  $G$  گراف منتظم از مرتبه  $n$  و درجه  $r \geq 3$  باشد آنگاه  $L^2(G)$  دارای دقیقاً  $nr(r-2)/2$  مقدار ویژه منفی است که همه برابر با  $-2$  می باشند [۱۶].

اثبات: همه مقادیر ویژه ی یک گراف منتظم درجه  $r$  متعلق به بازه  $[-r, +r]$  است. بنابراین اگر  $r \geq 3$  باشد آنگاه  $\lambda_i + 3r - 6 \geq 0$  است. همچنین  $2r_0 - 6 \geq 0$  و لذا عبارت (۶-۱۱) برقرار است. ■

نتیجه ۱-۲-۶: اگر  $G$  گراف منتظم از درجه  $r$  باشد آنگاه همه مقادیر ویژه منفی  $L^k(G)$  برابر با  $-2$  است [۱۶].

نکته ۱-۲-۶: اگر  $G$  گراف منتظم درجه  $r = 1$  باشد آنگاه  $L(G)$  شامل راس تنها است و  $L^2(G)$  نیز گراف بدون راس است. اگر  $G$  گراف منتظم درجه  $r = 2$  باشد آنگاه  $G$  با  $L(G)$  یکریخت است و لذا  $G$  با  $L^k(G)$  یکریخت، برای همه  $k \geq 1$  است.

اکنون در این قسمت انرژی گراف خطی از گراف منتظم را بررسی می کنیم:

قضیه ۳-۲-۶: اگر  $G$  گراف منتظم از مرتبه  $n$  و درجه  $r \geq 3$  باشد آنگاه [۱۶]

$$E(L^2(G)) = 2nr(r-2) \quad (۱۲-۶)$$

اثبات: با استفاده از قضیه قبل و عبارت (۱۱-۶)، انرژی  $L^2(G)$  به شکل زیر محاسبه می شود:

$$\begin{aligned} E(L^2(G)) &= \sum_{i=1}^n ((\lambda_i + 3r - 6) + \frac{1}{2n(r-2)} \times (2r - 6) + 1/2nr(r-2) \times \\ &|-2|) \\ &= \sum_{i=1}^n \lambda_i + 2nr(r-2). \end{aligned}$$

مجموع مقادیر ویژه هر گراف برابر صفر است و لذا حکم ثابت است. ■

شکل دیگر قضیه (۲-۱-۶) به شکل زیر است:

قضیه ۴-۲-۶: اگر  $G$  گراف منتظم از مرتبه  $n_0$  و درجه  $r_0 \geq 3$  باشد و  $k$ -امین گراف خطی از  $G$  دارای درجه  $r_k$  و  $n_k$  راس باشد آنگاه داریم [۱۶]:

$$E(L^2(G)) = 2n_1(r_1 - 2) = 2n_0r_0(r_0 - 2) \quad (۱۳-۶)$$

و تعمیم آن نیز به شکل زیر است:

$$E(L^{k+1}(G)) = 2n_k(r_k - 2) \quad k \geq 1 \quad (14-6)$$

نتیجه ۲-۲-۶: با توجه به روابط بالا داریم [۱۶]:

$$E(L^{k+1}(G)) = 2n_0(r_0 - 2) \prod_{i=0}^{k-1} (2^i r_0 - 2^{i+1} + 2) \quad k \geq 1 \quad (15-6)$$

لذا دیده می شود که انرژی هر گراف خطی تکراری از یک گراف منتظم همواره به  $(n_0, r_0)$  وابسته است. پس برای انرژی  $L^k(G)$  با توجه به نتیجه قبل داریم:

نتیجه ۳-۲-۶: با توجه به قضیه ۴-۱-۶، برای هر  $k \geq 2$  داریم [۱۶]:

$$E(L^k(G)) = 4(n_k - n_{k-1}) = 4n_k \frac{r_k - 2}{r_k + 2}. \quad (16-6)$$

حال در این قسمت به مقایسه ای برای گراف های منتظم و گراف خطی آن ها می پردازیم.

لم ۱-۲-۶: فرض کنیم  $G_1$  و  $G_2$  دو گراف منتظم با مرتبه و تعداد یال مشابه باشند. آنگاه برای هر  $k \geq 1$  روابط زیر برقرار است [۱۶]:

$$L^k(G_2) \text{ و } L^k(G_1) \text{ هم مرتبه اند و دارای تعداد مشابه یال می} \quad (1)$$

باشند.

$$L^k(G_2) \text{ و } L^k(G_1) \text{ هم طیف}^{۳۷} \text{ اند اگر و تنها اگر } G_2 \text{ و } G_1 \text{ هم} \quad (2)$$

طیف باشند.

اثبات: با توجه به تعریف (۲-۲-۶) عبارت اول نتیجه می شود و تعداد یال  $L^k(G)$  برابر با تعداد راس

$L^{k+1}(G)$  است. عبارت دوم نیز از به همین صورت نتیجه می شوند. ■

ترکیب لم اخیر با تذکر (۲-۲-۶) قضیه زیر را بدست می دهد:

قضیه ۵-۲-۶: فرض کنیم  $G_1$  و  $G_2$  دو گراف غیر هم طیف<sup>۳۸</sup> منتظم با مرتبه و درجه  $r \geq 3$  مشابه باشند. آنگاه برای هر  $k \geq 2$ ، گراف های خطی  $L^k(G_1)$  و  $L^k(G_2)$  تشکیل یک جفت گراف غیر هم طیف با انرژی و مرتبه یکسان و تعداد یال مشابه می دهند. اگر  $G_1$  و  $G_2$  همبند باشند آنگاه  $L^k(G_1)$  و  $L^k(G_2)$  نیز همبند می باشند [۱۶].

تعریف ۳-۲-۶: اگر برای دو گراف  $G_1$  و  $G_2$ ، تساوی  $E(G_1) = E(G_2)$  برقرار باشد آنگاه این دو گراف را انرژی یکسان<sup>۳۹</sup> نامیم. به عنوان مثال دو گراف زیر را ببینید [۳۲]:



شکل ۱-۶

این دو دارای طیف های متفاوت اند ولی دارای انرژی یکسان ۴ می باشند.

قضیه ۶-۲-۶: فرض کنیم  $G_1$  و  $G_2$  دو گراف منتظم،  $n$  راسی و درجه هر دو  $r \geq 3$  باشد آنگاه  $L^2(G_1)$  و  $L^2(G_2)$  گراف هایی با انرژی یکسان می باشند [۳۳].

اثبات: با توجه به قضیه (۳-۲-۶) نتیجه به سادگی حاصل می شود. ■

این قضیه را می توان تعمیم داد:

قضیه ۷-۲-۶: فرض کنیم  $G_1$  و  $G_2$  دو گراف منتظم،  $n$  راسی و درجه هر دو  $r \geq 3$  باشد آنگاه  $L^k(G_1)$  و  $L^k(G_2)$  برای هر  $k \geq 2$ ، دارای انرژی یکسان می باشند [۳۳].

<sup>38</sup> Non-cospectral

<sup>39</sup> Equienergetic



اثبات: به استقرا روی  $k$  داریم: قضیه برای  $k = 2$  درست است، لذا فرض کنیم  $k \geq 3$  باشد.  $L^{k-2}(G_1)$  و  $L^{k-2}(G_2)$  دارای تعداد راس برابر و درجه یکسان هستند. پس با توجه به قضیه قبل داریم:

$$L^k(G_1) = L^2(L^{k-2}(G_1)) \quad \text{و} \quad L^k(G_2) = L^2(L^{k-2}(G_2))$$

انرژی یکسان دارند. ■

نتیجه ۶-۲-۴: فرض کنیم  $G_1$  و  $G_2$  دو گراف همبند، غیر هم طیف، منتظم،  $n$  راسی و درجه هر دو  $r \geq 3$  باشند آنگاه برای هر  $k \geq 2$   $L^k(G_1)$  و  $L^k(G_2)$  منتظم، همبند، غیر هم طیف و انرژی یکسان می باشند و همچنین دارای تعداد مشابه راس و یال هستند [۳۳].

اثبات: گراف خطی از یک گراف بدون راس مجزا همبند است اگر و تنها اگر خود گراف همبند باشد. بنابراین اگر  $G$  همبند باشد آنگاه  $L^k(G)$  همبند است. اگر  $G_1$  و  $G_2$  هم طیف نباشند آنگاه  $L^1(G_1)$  و  $L^1(G_2)$  نیز هم طیف نیستند و بنابراین  $L^k(G_1)$  و  $L^k(G_2)$  نیز، هم طیف نیستند. از طرفی از قضیه (۶-۲-۷)  $L^k(G_1)$  و  $L^k(G_2)$  دارای تعداد راس یکسان هستند و تعداد یال  $L^k(G)$  برابر با تعداد راس  $L^{k+1}(G)$  است و لذا  $L^1(G_1)$  و  $L^1(G_2)$  دارای تعداد مشابه یال می باشند. ■

### ۶-۳ نتیجه گیری

گراف های به شدت منتظم دارای بیشترین انرژی در بین همه انواع گراف ها می باشند. در مورد انرژی گراف های خطی، با توجه به مطالب بخش آخر این فصل دیده می شود که مقدار دقیق انرژی این گراف ها تعیین شد.



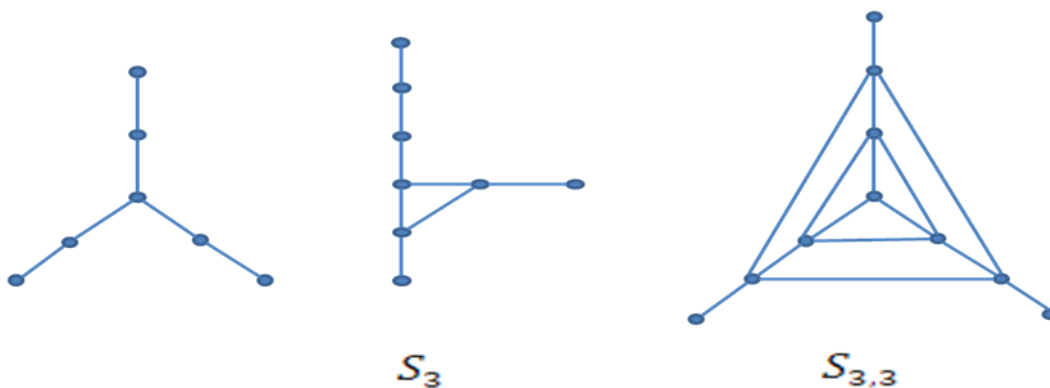
## فصل هفتم

### انرژی گراف های اسپایدر

در این فصل به بررسی انرژی برای دسته ای از گراف ها به نام اسپایدر ها می پردازیم و کرانی برای انرژی آنها ارائه می دهیم. لذا بحث را با تعریف گراف اسپایدر آغاز می کنیم.

**تعریف ۷-۱:** یک اسپایدر درختی با حداکثر یک راس با درجه بیش از دو است که مرکز اسپایدر نامیده می شود. (اگر هیچ راسی از درجه بیش از دو وجود نداشته باشد آنگاه هر راس یک مرکز است). یک پا از یک اسپایدر، مسیری از مرکز به یک راس وابسته است. بنابراین یک گراف ستاره با  $k + 1$  راس، یک اسپایدر  $k$  پایی است که طول هر پای آن یک است. اگر  $m \geq 3$  یک عدد صحیح باشد. گراف اسپایدر  $S_m$ ، گراف اسپایدر  $T$  با  $m$  پای  $P_1, \dots, P_m$  است که طول هر پای آن حداقل دو است و راس  $x$  و  $y$  از دو پای متفاوت  $P_i$  و  $P_j$  مجاورند اگر  $|i - j| \in \{1, m - 1\}$  باشند و  $d(x, o) = d(y, o)$  که  $o$  مرکز اسپایدر است [۳۶].

اکنون کلاسی از گراف اسپایدر ها به نام گراف اسپایدر کامل را در نظر می گیریم که عبارت است از اسپایدر  $S_m$  که هر دو راس  $x$  و  $y$  از دو پای متفاوت  $P_i$  و  $P_j$  با  $|i - j| \in \{1, m - 1\}$  مجاور باشند. گراف اسپایدر کامل را با  $S_{m,n}$  نمایش می دهیم که در آن  $m$  تعداد پاها و  $n$  طول پاها را نشان می دهد [۳۶]. (شکل (۷-۱) را ببینید).



شکل ۷-۱ اسپایدر گراف

در این فصل بحث را روی اسپایدر گراف کامل متمرکز می کنیم.

۱-۷ کران پایین و بالا برای انرژی  $S_{m,n}$ 

در این قسمت با توجه به مطالب بخش (۲-۴) کران پایینی برای انرژی گراف اسپایدر کامل ارائه می دهیم. با توجه به شکل  $S_{m,n}$  دیده می شود که در این گراف راس ها دارای درجه یک یا چهار یا  $n$  می باشند. گراف  $G$  را سه منتظم از درجه  $x, y, z$  نامیم  $(x < y < z)$  هرگاه حداقل یک راس از درجه  $x$  و حداقل یک راس از درجه  $y$  و حداقل یک راس از درجه  $z$  داشته باشد و هیچ راس دیگری از  $G$  درجه ای غیر از  $x$  یا  $y$  یا  $z$  نداشته باشد (تعریف ۲-۴-۲) لذا می توان این گراف ها را سه منتظم از درجه  $(1,4,m)$  و  $m = 4, \dots$  نامید. در حالتی که  $m = 3$  است گراف  $S_{3,n}$  را می توان، گراف سه منتظم درجه  $(1,3,4)$  در نظر گرفت.

اکنون کران پایین انرژی این گراف ها را ارائه می دهیم. این کران مشابه کران های بخش (۲-۴) است که توسط آقای گوتمن<sup>۴۰</sup> ارائه شده است.

قضیه ۱-۱-۷: اگر  $G$  گراف اسپایدر کامل با  $N$  راس و  $M$  یال باشد آنگاه  $E(G) \geq N$  است.

اثبات: با توجه به جدول (۱-۷) در صفحه ۱۲۰ داریم:

$$M = n(2m + 1), \quad N = nm + n + 1. \quad (1-7)$$

مانند اثبات قضیه (۲-۴-۴) برای هر گراف  $G \in \Theta_n(1, a, b)$  داریم:

$$k + n_a + n_b = N, \quad 1.k + a.n_a + b.n_b = 2M$$

حال با توجه به ساختار گراف اسپایدر کامل، تعداد راس های وابسته برابر با  $m$  و تعداد راس های از درجه  $b = m$  برابر یک است و راس های درجه  $a = 4$  نیز برابر  $N - m - 1$  است. همچنین تعداد دور های به طول چهار برابر با  $mn - m$  است، پس نتیجه می شود که:

<sup>40</sup> Gutman

$$\sum_{i=1}^N d_i^2 = 1^2 \cdot k + a^2 \cdot n_a + b^2 \cdot n_b = m + 16(N - m - 1) + m^2$$

$$M_4 = 2 \sum_{i=1}^N d_i^2 + k + 8q$$

که در آن  $q$  تعداد دور های به طول ۴ ( $C_4$ ) است و  $k$  تعداد راس های وابسته می باشد.

$$M_4 = M + 31N + m^2 - 30m - 31$$

است. لذا با استفاده از نامساوی (۲-۴-۲) داریم:

$$E(G) \geq \sqrt{\frac{8M}{M_4}} = 2M \sqrt{\frac{2M}{M+31N+m^2-30m-31}}$$

$$\frac{E(G)}{N} \geq \frac{2M}{N} \sqrt{\frac{2M}{M+31N+m^2-30m-31}}$$

$$\text{اما } \frac{2M}{N} \sqrt{\frac{2M}{M+31N+m^2-30m-31}} \geq 1 \text{ اگر و تنها اگر}$$

$$8M^3 + N^2(30m + 31 - M - m^2) - 31N^3 \geq 0$$

باشد که با توجه به جدول (۱-۷) همواره برقرار است. ■

اکنون، کران بالا را با استفاده از عدد رنگی این گراف ها ارائه می دهیم. لذا ابتدا قضیه رنگ را بیان

می کنیم:

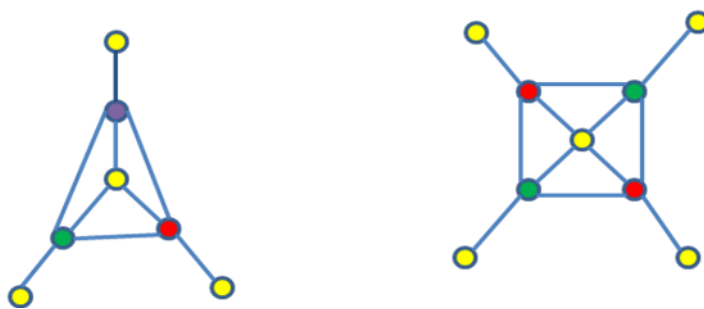
قضیه ۷-۱-۲: برای هر  $S_{m,n}$  داریم [۳۶]:

$$\chi(S_{m,n}) = \begin{cases} 3 & \text{اگر } m \text{ زوج باشد} \\ 4 & \text{اگر } m \text{ فرد باشد} \end{cases} \quad (۲-۷)$$

اثبات: چون  $S_{m,n}$  دارای مثلث است لذا  $\chi(S_{m,n}) \geq 3$  است. همچنین اگر  $m$  فرد باشد آنگاه نزدیکترین دور به مرکز، دور فرد است و بنابراین عدد رنگی در این حالت سه است. اما مرکز مجاور با راس های دیگری نیز هست. بنابراین  $\chi(S_{m,n}) \geq 4$  فرض کنیم  $V(P_i) = \{o, v_{i1}, \dots, v_{in}\}$  باشد و  $C$  نزدیکترین دور به مرکز باشد.

اگر  $m$  زوج باشد آنگاه تابع دو-رنگ  $f: V(C) \rightarrow T = \{1,2\}$  را در نظر می گیریم. مرکز را با ۳ رنگ می کنیم. برای هر راس  $x$  در پای  $P_i$ ، اگر  $d(x, v_{i1})$  زوج باشد آنگاه  $x$  را با رنگ  $v_{i1}$  رنگ می کنیم و اگر  $d(x, v_{i1})$  فرد باشد آنگاه  $x$  را با رنگ  $v_{(i+1)1}$  رنگ می کنیم. بنابراین  $\chi(S_{m,n}) = 3$

اگر  $m$  فرد باشد آنگاه تابع سه-رنگ  $f: V(G) \rightarrow T = \{1,2,3\}$  را در نظر می گیریم. مرکز را با ۴ رنگ می کنیم. برای هر راس  $x$  در پای  $P_i$ ، اگر  $d(x, v_{i1})$  زوج باشد آنگاه  $x$  را با رنگ  $v_{i1}$  رنگ می کنیم و اگر  $d(x, v_{i1})$  فرد باشد آنگاه  $x$  را با رنگ  $v_{(i+1)1}$  رنگ می کنیم. بنابراین  $\chi(S_{m,n}) = 4$  (شکل ۷-۲ را ببینید). ■



شکل ۷-۲ رنگ آمیزی اسپایدر گراف کامل

لم ۷-۱-۱: اگر بزرگترین مقدار ویژه گراف  $G$  را  $\lambda_1$  بنامیم آنگاه برای هر گراف  $G$  داریم [۳۴]:

$$\chi(G) - 1 \leq \lambda_1. \quad (۷-۳)$$

اثبات: با استفاده از لم (۲-۲-۱)، زیر گراف راسی  $H$  از گراف  $G$  وجود دارد با این خاصیت که  $\chi(G) = \chi(H)$  و  $k_{min}(H) \geq \chi(G) - 1$  است. بنابر این با توجه به قضیه داریم:

$$\chi(G) \leq 1 + k_{min}(H) \leq 1 + \lambda_1(H) \leq 1 + \lambda_1(G). \blacksquare$$

قضیه ۳-۱-۷: اگر  $S_{m,n}$  گراف اسپایدر کامل با  $N$  راس و  $M$  یال باشد آنگاه

$$E(S_{m,n}) \leq \begin{cases} 2 + \sqrt{(N-1)(2M-4)} & m \text{ زوج باشد} \\ 3 + \sqrt{(N-1)(2M-9)} & m \text{ فرد باشد} \end{cases}. \quad (۴-۷)$$

اثبات: فرض کنیم  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_N$  مقادیر ویژه  $S_{m,n}$  باشند. با استفاده از لم (۱-۱-۷) داریم:

$$\lambda_1 + 1 \geq \chi(S_{m,n})$$

بنابراین

$$\lambda_1 \geq \begin{cases} 2 & m \text{ زوج باشد} \\ 3 & m \text{ فرد باشد} \end{cases}.$$

چون  $\sum_{i=1}^N \lambda_i^2 = 2M$  است لذا با یک جا به جایی ساده داریم:  $\sum_{i=2}^N \lambda_i^2 = 2M - \lambda_1^2$ . اکنون با به کار بردن نامساوی کوشی-شوارتز برای بردارهای  $(|\lambda_2|, \dots, |\lambda_N|)$  و  $(1, \dots, 1)$  با  $N-1$  مولفه، خواهیم داشت:

$$\sum_{i=2}^N |\lambda_i| \leq \sqrt{(N-1)(2M - \lambda_1^2)} \quad (۶-۷)$$

بنابراین داریم:

$$E(S_{m,n}) \leq |\lambda_1| + \sqrt{(N-1)(2M - \lambda_1^2)}. \quad (۷-۷)$$



اکنون تابع  $F(x) = x + \sqrt{(N-1)(2M-x^2)}$  را در نظر می گیریم. این تابع روی بازه  $\sqrt{2} \leq x \leq \sqrt{2m}$  و  $\sqrt{3} \leq x \leq \sqrt{2m}$  یکنوای کاهشی است. همچنین  $\sqrt{2} \leq 2 \leq \lambda_1$  اگر  $m$  زوج باشد و  $\sqrt{3} \leq 3 \leq \lambda_1$  اگر  $m$  فرد باشد، برقرار است. لذا از لم (۱-۲-۱)،  $\lambda_1$  متعلق به بازه  $[\sqrt{2}, \sqrt{2m}]$  یا  $[\sqrt{3}, \sqrt{2m}]$  است. پس  $F(\lambda_1) \leq F(2)$  اگر  $m$  زوج باشد و  $F(\lambda_1) \leq F(3)$

اگر  $m$  فرد باشد و به این ترتیب اثبات قضیه کامل می شود.

### ۲-۷ نتیجه گیری

در این فصل کران انرژی را برای دسته ای از گراف ها تعیین کردیم که تا کنون بحثی در مورد آن صورت نگرفته است. کران های بدست آمده به شرح زیر است:

$$\begin{aligned} \text{I. } & E(G) \geq N \\ \text{II. } & E(S_{m,n}) \leq \begin{cases} 2 + \sqrt{(N-1)(2M-4)} & m \text{ زوج باشد} \\ 3 + \sqrt{(N-1)(2M-9)} & m \text{ فرد باشد} \end{cases} \end{aligned}$$

### ۳-۷ چشم انداز آینده

در این پایان نامه سعی شد تا کران های بالا و پایینی که برای انواع گراف ها وجود دارد بیان شود. در این راستا، ریاضیدانان می کوشند تا کران های بدست آمده را بهبود بخشند تا به مقدار واقعی نزدیک شوند. همچنین تا کنون روشی برای مقایسه انرژی دو گراف دلخواه ارائه نشده است و می توان برای هر دسته روشی بیان کرد. به علاوه در مورد گراف های دارای دور کران بالا و کران پایین وجود ندارد که می تواند زمینه کار برای علاقه مندان باشد.

$n$		۱	۲	۳	۴	۵	۶	۷
$m$								

۳	E(G) N M	۸,۹۴۴۳ ۷ ۹	۱۴,۲۲۸۳ ۱۰ ۱۵	۱۸,۶۶۹۱ ۱۳ ۲۱	۲۴,۰۹۹۵ ۱۶ ۲۷	۲۸,۹۴۸۹ ۱۹ ۳۳	۳۳,۴۹۷۷ ۲۲ ۳۹	۳۸,۶۸۲۶ ۲۵ ۴۵
۴	E(G) N M	۱۱,۷۲۷ ۴ ۹ ۱۲	۱۸,۱۰۸۹ ۱۳ ۲۰	۲۵,۵۵۸۶ ۱۷ ۲۸	۳۱,۵۸۱۸ ۲۱ ۳۶	۳۸,۶۳۹۲ ۲۵ ۴۴	۴۴,۷۷۵۲ ۲۹ ۵۲	۵۱,۷۰۱۵ ۳۳ ۶۰
۵	E(G) N M	۱۴,۶۲۳۲ ۱۱ ۱۵	۲۳,۱۵۸۹ ۱۶ ۲۵	۳۱,۳۴۴۷ ۲۱ ۳۵	۳۹,۴۷۴۴ ۲۶ ۴۵	۴۶,۹۵۸۳ ۳۱ ۵۵	۵۵,۶۹۶۴ ۳۶ ۶۵	۶۳,۷۴۹۴ ۴۱ ۷۵
۶	E(G) N M	۱۷,۴۲۹۶ ۱۳ ۱۸	۲۷,۶۷۹۰ ۱۹ ۳۰	۳۶,۴۶۳۰ ۲۵ ۴۲	۴۷,۲۹۶۰ ۳۱ ۵۴	۵۶,۹۸۶۹ ۳۷ ۶۶	۶۶,۰۷۲۶ ۴۳ ۷۸	۷۶,۴۵۱۸ ۴۹ ۹۰
۷	E(G) N M	۲۰,۱۹۵ ۷ ۱۵ ۲۱	۳۱,۹۵۹۰ ۲۲ ۳۵	۴۳,۳۵۱۱ ۲۹ ۴۹	۵۴,۶۹۹۷ ۳۶ ۶۳	۶۶,۰۳۸۵ ۴۳ ۷۷	۷۷,۴۲۴۷ ۵۰ ۹۱	۸۸,۱۰۹۰ ۵۷ ۱۰۵
۸	E(G) N M	۲۲,۹۵۰ ۹ ۱۷ ۲۴	۳۶,۰۴۴۱ ۲۵ ۴۰	۴۹,۴۷۳۰ ۳۳ ۵۶	۶۱,۲۷۷۱ ۴۱ ۷۲	۷۵,۴۴۱۴ ۴۹ ۸۸	۸۸,۱۳۷۵ ۵۷ ۱۰۴	۱۰۱,۳۱۵۱ ۶۵ ۱۲۰
۹	E(G) N M	۲۵,۶۹۲۹ ۱۹ ۳۰	۴۰,۶۷۴۷ ۳۱ ۵۰	۵۵,۱۰۱۲ ۳۷ ۶۳	۶۹,۸۶۵۴ ۴۶ ۸۱	۸۴,۵۴۳۵ ۵۵ ۹۹	۹۸,۹۰۶۶ ۶۴ ۱۱۷	۱۱۳,۶۰۹۹ ۷۳ ۱۳۵

جدول ۱-۷ انرژی، تعداد راس و یال گراف اسپایدر کامل

**پيوستن**



## برنامه محاسبه طیف و انرژی اسپایدر گراف کامل

این برنامه دارای ورودی  $m$  و  $n$  است که عبارت از تعداد پاها و طول پاها، به ترتیب، می باشد. خروجی آن دارای دو قسمت است. قسمت اول دارای، تعداد راس و تعداد یال، بعد ماتریس مجاورت، ماتریس مجاورت، مقادیر ویژه ماتریس مجاورت و انرژی گراف است. در قسمت دوم ماتریس لاپلاسیان، بعد آن، مقادیر ویژه ماتریس لاپلاسیان و انرژی آن وجود دارد. در این پایان نامه تنها قسمت اول این برنامه استفاده شده است. این برنامه در محیط نرم افزار Matlab قابل اجرا می باشد.

```

clc
%% Input:Enter Your Spider Graf Parameter(for example spider m=5 &
n=2)

m=10;
n=10;

%% Spider Graph Procedur
p=m*(n+1)+1;
q=m*(2*n+1);
M = zeros([p,p]);
L = zeros([p,p]);
d=0;
a1=0;
b1=0;
a2=0;
b2=0;
if (m>2 && n>0)
for i=2:1:m+1;
    M(1,i)=1;
    M(i,1)=1;
end
for i=2:1:p-m;
    M(i,i+m)=1;
    M(i+m,i)=1;
    if ( mod (i,m) ~= 1)
        M(i,i+1)=1;
        M(i+1,i)=1;
    else
        M(i,i-m+1)=1;
        M(i-m+1,i)=1;
    end
end

end
[E1]=svd(M);
for i=1:1:p;
    a1=a1+E1(i);
    b1=b1+E1(i)^2;
end
%% Laplacian Procedur
for i=1:1:p;

```

```

    for j=1:1:p;
        if M(i,j)==1;
            L(i,j)=-1;
        end
        d=d+M(i,j);
    end
    X(i)=d;
    d=0;
end
for i=1:1:p;
    L(i,i)=X(i);
    d=d+L(i,i)^2;
end
[E2]=eig(L);
for i=1:1:p;
    a2=a2+abs(E2(i)-(2*q)/p);
    b2=b2+E2(i)^2;
end

end
%% Output
SectionOne='
*****
*****'
YourMatrix='Spider'
m
n
VertexCounts=p
EdgeCounts =q
MatrixDimonsion=p
AdjacencyMatrix=M
EigenValues=eig(M)
Energy=a1
SquerSumsofEigenValues=b1
%Polynomial=poly(M)
%Determinant=det(M)

SectionTow='
*****
*****'
MatrixDimonsion=p
AdjacencyMatrix=L
EigenValues=eig(L)
Energy=a2
SquerSumsofVertexDegree=d
SquerSumsofEigenValues=b2
%Polynomial=poly(L)
%Determinant=det(L)
else
    clc
    Note='It is not a SPIDER GRAGH Parameters.Pleas Enter m>=3 and
n>=1'
end

```

Spider Graph

Laplacian Matrix

حال، چند مورد از اجرای این برنامه را در زیر ارائه می دهیم:

YourMatrix =Spider  $S_{3,1}$

m = 3

n = 1

VertexCounts = 7

EdgeCounts = 9

MatrixDimonsion = 7

AdjacencyMatrix =

```

0 1 1 1 0 0 0
1 0 1 1 1 0 0
1 1 0 1 0 1 0
1 1 1 0 0 0 1
0 1 0 0 0 0 0
0 0 1 0 0 0 0
0 0 0 1 0 0 0

```

EigenValues =

-1.6180, -1.6180, -1.2361, -0.0000, 0.6180, 0.6180, 3.2361

Energy = 8.9443

---

YourMatrix =Spider  $S_{8,7}$

m = 8

n = 7

VertexCounts = 65

EdgeCounts = 120



MatrixDimonsion = 65

AdjacencyMatrix =

Columns 1 through 10

```
0 1 1 1 1 1 1 1 1 0
1 0 1 0 0 0 0 0 1 1
1 1 0 1 0 0 0 0 0 0
1 0 1 0 1 0 0 0 0 0
1 0 0 1 0 1 0 0 0 0
1 0 0 0 1 0 1 0 0 0
1 0 0 0 0 1 0 1 0 0
1 0 0 0 0 0 1 0 1 0
1 1 0 0 0 0 0 1 0 0
0 1 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 1 0 0 0 0 0 0 1
0 0 0 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 1 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 1 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 1 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 1 1
0 0 0 0 0 0 0 0 0 1
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
```

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

---

0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Columns 11 through 20

0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	1	0	0	0	0

---

0 0 0 0 0 0 1 0 0 0  
1 0 0 0 0 0 1 1 0 0  
0 1 0 0 0 0 0 0 1 0  
1 0 1 0 0 0 0 0 0 1  
0 1 0 1 0 0 0 0 0 0  
0 0 1 0 1 0 0 0 0 0  
0 0 0 1 0 1 0 0 0 0  
0 0 0 0 1 0 1 0 0 0  
0 0 0 0 0 1 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 1 0  
1 0 0 0 0 0 0 1 0 1  
0 1 0 0 0 0 0 0 1 0  
0 0 1 0 0 0 0 0 0 1  
0 0 0 1 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 1 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 1 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 1 1 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 1 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 1 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 1  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

---

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Columns 21 through 30

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
1 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 1 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 1 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 1 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 1 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 1 1 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 1 0 0 0  
1 0 0 0 0 0 0 1 0 0  
0 1 0 0 0 0 0 0 1 0

---

1 0 1 0 0 0 0 0 0 1  
0 1 0 1 0 0 0 0 0 0  
0 0 1 0 1 0 0 0 0 0  
0 0 0 1 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 1 0 0 0  
0 0 0 0 0 1 0 1 0 0  
0 0 0 0 0 0 1 0 1 0  
1 0 0 0 0 0 0 1 0 1  
0 1 0 0 0 0 0 0 1 0  
0 0 1 0 0 0 0 0 0 1  
0 0 0 1 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 1 1 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 1 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 1 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 1 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 1 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 1  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

---

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Columns 31 through 40

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0



---

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
1 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 1 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 1 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 1 1 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 1 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 1 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 1 0 0 0  
1 0 0 0 0 0 0 1 0 0  
0 1 0 0 0 0 0 0 1 0  
1 0 1 0 0 0 0 0 0 1  
0 1 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 1 0 0 0 0 0

---

0 0 0 1 0 1 0 0 0 0  
0 0 0 0 1 0 1 0 0 0  
0 0 0 0 0 1 0 1 0 0  
0 0 0 0 0 0 1 0 1 0  
1 0 0 0 0 0 0 1 0 1  
0 1 0 0 0 0 0 0 1 0  
0 0 1 1 0 0 0 0 0 1  
0 0 0 1 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 1 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 1 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 1 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 1 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 1 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 1  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

---

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Columns 41 through 50

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
1 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
1 1 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 1 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 1 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 1 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 1 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 1 0 0 0  
1 0 0 0 0 0 0 1 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 1 0  
0 0 1 0 0 0 0 0 1 1  
0 1 0 1 0 0 0 0 0 0  
0 0 1 0 1 0 0 0 0 0  
0 0 0 1 0 1 0 0 0 0  
0 0 0 0 1 0 1 0 0 0  
0 0 0 0 0 1 0 1 0 0

---

0	0	0	0	0	0	1	0	1	0
1	1	0	0	0	0	0	1	0	0
0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	0	0	0	0	0	1
0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	1	1
0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Columns 51 through 60

0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0



---

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
1 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 1 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 1 0 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 1 0 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 1 0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 1 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 1 0 0 0  
1 0 0 0 0 0 1 1 0 0  
0 1 0 0 0 0 0 0 1 0  
1 0 1 0 0 0 0 0 0 1  
0 1 0 1 0 0 0 0 0 0  
0 0 1 0 1 0 0 0 0 0  
0 0 0 1 0 1 0 0 0 0  
0 0 0 0 1 0 1 0 0 0  
0 0 0 0 0 1 0 0 0 0  
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
1 0 0 0 0 0 0 0 0 0  
0 1 0 0 0 0 0 0 0 0

---

0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	1	0	0	0

Columns 61 through 65

0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0





---

0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0  
1 0 0 0 0  
0 1 0 0 0  
0 0 1 0 0  
0 0 0 1 0  
0 0 0 0 1  
0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0  
0 0 0 0 0

EigenValues = -3.8595, -3.4570, -3.2764, -3.2764, -2.8815, -2.8815, -2.8472, -2.2830, -2.2830, -2.1129, -2.0896, -1.8794, -1.8794, -1.5617, -1.5617, -1.5321, -1.5321, -1.3548, -1.0000, -1.0000, -0.8151, -0.8151, -0.7057, -0.7057, -0.6789, -0.4999, 0.3572, -0.3572, -0.3473, -0.3473, -0.1896, -0.1446, -0.1446, 0.1446, 0.1446, 0.2494, 0.3473, 0.3473, 0.3572, 0.3572, 0.5000, 0.7057, 0.7057, 0.8151, 0.8151,

0.8535, 1.0000, 1.0000, 1.5321, 1.5321, 1.5617, 1.5617, 1.6399, 1.8794, 1.8794,  
2.2830, 2.2830, 2.4719, 2.8815, 2.8815, 3.2232, 3.2764, 3.2764, 3.7765, 4.3752

Energy = 101.3151

مراجعے



## مراجع

- [1]. J. Ou. (2006) "Acyclic molecules with second maximal energy" **Applied Mathematics Letters**.
- [2]. I.Gutman. (1977) "Acyclic Systems With External Huckel  $\pi$ -Electron Energy" **Theoret. Chem.Acta (Berl.)** 45, 79-87.
- [3]. A. Yu, Xuezheng Lv. (2006) "Minimum energy on trees with k pendent vertices" **Linear Algebra and its App**, 418, 625-633.
- [4]. F. Zhang, H. Li. (2002) "on acyclic conjugated molecules with minimal energies" **discrete applied mathematics**, 92, 71-84.
- [5]. I.Gutman, D.Vidovic, B.Furtula. (2002) "Coulson function and Hosoya index" **Chemical Physics Letters**, 335, 378-382.
- [6]. M.Fischermann, I.Gutman, A.Hoffmann, D.Rautenbach. (2002) "External chemical Trees" **Z.Naturforsch**, 57a, 49-52
- [7]. Y. Hou, I Gutman, Ching-Wah Woo. (2002) "Unicyclic graphs with maximal energy" **Linear Algebra and its App**, 365, 27-36.
- [8]. Y. Hou. (2001) "Unicyclic graphs with minimal energy" **Mathematical chemistry**, 29, No. 3.
- [9]. Y. Hou, M. Wang. (2007) "Unicyclic graphs with given number of pendent vertices and minimal energy" **Linear Algebra and its Applications**, 426, 478-489.
- [10]. H.Koolen, V. Moulton. (2003) "Maximal energy Bipartite graph" **Graph and Combinatorics**, 19, 131-135.
- [11]. X. Li, J. Zhang, L. Wang. (2008) "on bipartite graphs with minimal energy" **Discrete App Mathematics**.
- [12]. J. Rada, A. Tino. (2004) "Upper and lower bounds for the energy of bipartite graphs" **J. Math. Appl**, 289, 446-455.
- [13]. Y. Hou. (2002) "on acyclic systems with minimal hosoya index" **discrete applied mathematics**, 119, 251-257.
- [14]. S. R. Blackburn, I. E. Shparlinski. (2008) "on the average energy of circulant graphs" **Linear Algebra and Appl** , 428, 1956-1963.

- [15]. W. H. Haemers. (2008) "Strongly regular graphs with maximal energy" **linear algebra and its applications**, 429, 2719-2723.
- [16]. H.S. Ramane, H. B. Walikar, S. B. Rao, B. D. Acharya, P. R. Hampiholi, S. R. Jog, I. Gutman. (2005) "Spectra and energies of iterated line graphs of regular graphs, **applied mathematics letters**, 18, 679-682.
- [17]. S. Pirzada, I. Gutman. (2008) "energy of graph is never the root of an odd integer" **Applicable Analysis and discrete mathematics**, 2, 118-121.
- [18]. I. Gutman. (2002) "on graphs whose energy exceeds the number of vertices" **Linear algebra and its applications**.
- [19]. V. Nikiforov. (2007) "Graphs and matrices with maximal energy" **J. math. Anal. Appl.**, 327, 735-738.
- [20]. V. Nikiforov. (2007) "The energy of graphs and matrices" **J. math. Anal. Appl.**, 326, 1472-1475.
- [21]. I. Shparlinski. (2006) "on the energy of some circulant graphs" **linear algebra and its Applications**, 414, 378-382.
- [22]. I. Gutman. , (2007) "more graphs whose energy exceeds the number of vertices" **IJMSI**, 2, 57-62.
- [23]. H. kharaghani, B. Tayfeh-Rezaie. (2008) "On the energy of (0, 1)-matrices" **Linear algebra and its applications**, 429, 2046-2051.
- [24]. I. Gutman. (2001) "The energy of a graph: old and new results" **Algebraic combinatorics and applications**, Springer-verlag, Berlin, 196-211.
- [25]. S. Akbari, E. Ghorbani, S. Zare. (2009) "Some relations between rank, chromatic number and energy of graphs" **Discr. Math**, 309, 601-605.
- [26]. B. McClelland. (1971) "properties of latent roots of a matrix: The estimation of  $\pi$ -electron energies" **J. chem. Phys**, 54, 640-643.
- [27]. R. Balakrishnan. (2004) "The energy of a graph" **Linear Algebra and its Application**, 387, 287-295.
- [28]. A. Yu. (2007) "The Merrifield- Simmons indices and Hosoya indices of trees with  $k$  pendent vertices" **Jornal of mathematical chemistry**, 41, 33-43.
- [29]. L. L. Pelikan. (1973), **J.: Period. Math. Hung**, 3, 175.
- [30]. G. Caporossi, D. Cvetkovic, I. Gutman, B. Hansen. (1999) "Variable neighborhood search for external graphs" **J. Chem. Inf. Comput. Sci**, 39, 984-996.

- 
- [31]. I. Gutman, O. E. Polansky, (1986) "Mathematical concept in organic chemistry" **springer, berlin**.
- [32]. J. H. Koolen, V. Moulton. (2001) "Maximal energy graphs" **Adv. in Appl. Math**, 26, 47-52.
- [33]. H. S. ramane, H. B. walikar, S. B. rao , B.D.acharya , P.R.hampiholi , S.R.jog , I.gutman. (2004) "equienergetic graphs" **Kagujevac J. math**, 26, 5-13.
- [34]. N. Biggs. (1974) "Algebraic graph theory" **Cambridge university press**.
- [35]. D. M. Cvetkovic, M. Doob, H. Sachs, (1995) "spectra of graphs theory and applications" **Johann Ambrosius Barth, Heidelberg**.
- [36]. S.Rahimh Sharebaf, vertex. (2009) "edge and coloring in spider graphs" **applied mathematical sciences**, 3, 877-881.
- [37]. A. Yu, X. Lv. (2007) "The marrifield-simmons indices and Hosoya indices of trees with  $k$  pendant vertices" **journal of mathematical chemistry**, 41, 33-43.
- [38]. H. Li. (1999) "on minimal energy ordering o acyclic conjugated molecules" **journal of mathematical chemistry**, 25, 145-169.
- [39]. K. CH. Das, P. Kumar. (2003) "Bounds on the greatest eigenvalue of graphs" **indianJ, pure appl. Math**, 34, 917-925.



**واژه نامه**



## واژه نامه فارسی به انگلیسی

energy of graph ..... انرژی گراف

quadrangle-free ..... بدون دور  $C_4$

maximal energy ..... بیشترین انرژی

function ..... تابع

equality ..... تساوی

algebraic ..... جبری

product ..... حاصل ضرب

degree ..... درجه

cycle ..... دور

vertex ..... راس

adjacent vertex ..... راس مجاور

pendent vertex ..... راس وابسته

rank of graph ..... رتبه گراف

subgraph ..... زیر گراف

induced subgraph ..... زیر گراف القایی

submanifold ..... زیر میدان

hexagonal system	سیستم شش ضلعی
Croncer product	ضرب کرونگر
projective planes	صفحه تصویری
block design	طرح بلوکی
spectrum of graph	طیف گراف
chromatic number	عدد رنگی
operation	عمل
non-cospectral	غیر هم طیف
Lagrang's multiplier rule	قانون ضرب لاگرانژ
bound	کران
upper bound	کران بالا
lower bound	کران پایین
minimal energy	کمترین انرژی
graph	گراف
Spider graph	گراف اسپایدر
strongly regular graph	گراف به شدت منتظم
paley graph	گراف پالی

unicyclic graph	گراف تک دوری
bipartite graph	گراف دو بخشی
non-singular graph	گراف غیر منفرد
complete graph	گراف کامل
biregular graph	گراف دو منتظم
Suchs graph	گراف ساچز
triangular graph	گراف سه منتظم
regular graph	گراف منتظم
Equienergetic graphs	گراف های انرژی یکسان
spectral moment	گشتاور طیفی
Bush matrix	ماتریس بوش
degree matrix	ماتریس درجه
adjacency matrix	ماتریس مجاورت
incidence matrix	ماتریس وقوع
hadamar matrix	ماتریس هادامار
latin square	مربع لاتین
path	مسیر

regular ..... منتظم

manifold ..... میدان

Cauchy-Schwarz inequality ..... نامساوی کوشی-شوارتز

cospectral ..... هم طیف

edge ..... یال

pendent edge ..... یال وابسته

## واژه نامه انگلیسی به فارسی

adjacency matrix	.....	ماتریس مجاورت
adjacent vertex	.....	راس مجاور
algebraic	.....	جبری
bipartite graph	.....	گراف دو بخشی
biregular graph	.....	گراف دو منتظم
block design	.....	طرح بلوکی
bound	.....	کران
Bush matrix	.....	ماتریس بوش
Cauchy-Schwarz inequality	.....	نامساوی کوشی-شوارتز
chromatic number	.....	عدد رنگی
complete graph	.....	گراف کامل
cospectral	.....	هم طیف
croneer product	.....	ضرب کرونکر
cycle	.....	دور
degree	.....	درجه
edge	.....	یال
energy of graph	.....	انرژی گراف
equality	.....	تساوی

Equienergetic graphs	گراف های انرژی یکسان
function	تابع
graph	گراف
hadamar matrix	ماتریس هادامار
hexagonal system	سیستم شش ضلعی
incidence matrix	ماتریس وقوع
induced subgraph	زیر گراف القایی
Lagrang's multiplier rule	قانون ضرب لاگرانژ
latin square	مربع لاتین
lower bound	کران پایین
manifold	میدان
maximal energy	بیشترین انرژی
minimal energy	کمترین انرژی
non-cospectral	غیر هم طیف
non-singular graph	گراف غیر منفرد
operation	عمل
Paley graph	گراف پالی
pendent edge	بال وابسته
pendent vertex	راس وابسته
product	حاصل ضرب



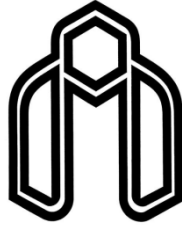
projective planes	صفحه تصویری
quadrangle-free	بدون دور $C_4$
rank of graph	رتبه گراف
regular	منتظم
regular graph	گراف منتظم
spectral moment	گشتاور طیفی
spectrum of graph	طیف گراف
Spider graph	گراف اسپایدر
strongly regular graph	گراف به شدت منتظم
subgraph	زیر گراف
submanifold	زیر میدان
Suchs graph	گراف ساچز
triangular graph	گراف سه منتظم
unicyclic graph	گراف تک دوری
upper bound	کران بالا
vertex	راس

## **Abstract**

Determining of the energy of a molecule has always been interesting to chemistry scientists and they have always used integrals to calculate them. Since graphs have been used to display the structure of molecules, mathematical scientists have tried to use graph properties to calculate molecule energy and find a simpler way to determine it. The calculated quantity is called graph energy which is almost equal to the energy of molecule.

In the thesis we have tried to study the subjects related to the energy of different graphs and explain a classification for that. Thus, in the first chapter graph spectral and its bound have been considered. In the second chapter the relation between the graph spectral and energy and the bounds for graph energy with the simple mathematical relations have been introduced. In the third chapter the energy of trees and acyclic graphs have been explained and energy the trees with the maximal and minimal energies have been verified. In the fourth chapter the energy of bipartite graphs and their lower and upper bound have been introduced. In the fifth chapter the energy of cyclic and unicyclic graphs and their energy limits have been verified. In the sixth chapter the energy of regular and linear graphs have been explained and in the seventh chapter the energy of a classification of graphs so called spider graphs has been verified and their lower and upper bound have been verified.

**Key words:** spectral graph, energy of graph, lower and upper bound.



**Shahrood University of Technology**

**Faculty math**

# **A classification of energy graph**

**Bi bi Asieh Afzal shahidi**

**Supervisors:**

**Dr. sadegh rahimi sharebaf**

**January 2010**