

حاشا
الرحمن الرحيم



دانشکده علوم ریاضی

پایان نامه کارشناسی ارشد گراف و ترکیبیات

مفهوم انرژی گراف و وابستگی آن بر ساختار شبکه

نگارنده: علی اصغر شکوهی نیک

استادان راهنما

دکتر عبدالله آل هوز
دکتر میثم علیشاهی

استاد مشاور
دکتر ابراهیم هاشمی

مهرماه ۱۳۹۸

پایان نامه‌ی خود را تقدیم می‌کنم به همسر
عزیز و فرزندان دلبندم که بدون شک اگر
تشویق و همراهی آنان نبود در این راه
موفق نمی‌شدم.

سپاس‌گزاری

تشکر می‌کنم از اساتید ارجمندم جناب آقای دکتر آل‌هوز به عنوان استاد راهنمای اول و جناب آقای دکتر علیشاهی به عنوان استاد راهنمای دوم و جناب آقای دکتر هاشمی به عنوان مشاور که زحمات قابل توجهی را در این زمینه متحمل شدند.

علی اصغر شکوهی نیک

مهرماه ۱۳۹۸

تعهد نامه

اینجانب **علی اصغر شکوهی نیک** دانشجوی کارشناسی ارشد رشته ریاضی کاربردی دانشگاه صنعتی شاهرود، نویسنده پایان نامه با عنوان **مفهوم انرژی گراف و وابستگی آن بر ساختار شبکه** تحت راهنمایی دکتر **عبدالله آل هوز** و دکتر **میثم علیشاهی** متعهد می شوم:

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش های دیگر پژوهش گران، به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب این پایان نامه، تا کنون توسط خود، یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارایه نشده است.
- حقوق معنوی این اثر، به دانشگاه صنعتی شاهرود تعلق دارد، و مقالات مستخرج با نام “ دانشگاه صنعتی شاهرود “ یا “ Shahrood University of Technology “ به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آوردن نتایج اصلی پایان نامه تاثیرگذار بوده اند، در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در تمام مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافت های آنها) استفاده شده است، ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در تمام مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته (یا استفاده شده است)، اصل رازداری و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

علی اصغر شکوهی نیک

مهرماه ۱۳۹۸

مالکیت نتایج و حق نشر

- تمام حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزارها و تجهیزات ساخته شده) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی، در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در این پایان نامه بدون ذکر منبع مجاز نمی باشد.

چکیده

پیدایش مفهوم انرژی یک گراف ابتدا با مطالعه هیدروکربن‌های مزدوج در علم شیمی بوده و سپس برای تخمین انرژی π - الکترون مولکول‌ها مورد استفاده قرار گرفت. انرژی یک گراف به صورت مجموع قدر مطلق مقادیر ویژه ماتریس مجاورت متناظر با گراف G تعریف می‌شود. در این پایان‌نامه، ابتدا یک تفسیر ساختاری از مفهوم انرژی گراف با استفاده از توابع ماتریسی ارائه می‌دهیم. به خصوص، ثابت می‌کنیم که انرژی گراف برابر با مجموع اثر (رد) توان‌های زوج ماتریس مجاورت گراف می‌باشد که به روشی خاص وزن‌دار شده‌اند. با استفاده از این نمایش جدید، کران‌هایی جدید برای انرژی گراف به دست می‌آوریم. همچنین، بررسی می‌کنیم که برای شبکه‌های منظم و شبکه‌های تَنک (کم‌چگال) با اندازه آزاد، انرژی گراف چگونه به ساختار توپولوژیکی زمینه‌ی آن وابسته می‌باشد. به علاوه، طیف و انرژی برخی رده‌هایی از گراف‌ها را محاسبه می‌کنیم. همچنین برخی از کلاس‌های گراف‌های هم‌انرژی، فراانرژی و فروانرژی را مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

کلمات کلیدی: انرژی، طیف، مولکول‌های مزدوج، توابع ماتریسی، ساختار توپولوژیکی، شبکه‌های تَنک (کم‌چگال) با اندازه آزاد، گراف هم‌انرژی، گراف فراانرژی، گراف فروانرژی.

فهرست مطالب

ردیف	لیست تصاویر
۱	۱ تعاریف و مفاهیم اولیه
۱	۱.۱ مقدمه
۱	۲.۱ تعاریف و مفاهیم لازم از نظریه گراف
۳	۳.۱ تعاریف و مفاهیم لازم از جبر خطی و نظریه ماتریس‌ها
۶	۴.۱ تعاریف و مفاهیم لازم از نظریه طیفی گراف و انرژی گراف
۹	۲ نگرشی جدید به مفهوم انرژی (مجاورت) گراف‌ها
۹	۱.۲ مقدمه
۹	۲.۲ معنای انرژی گراف چیست؟
۱۳	۳.۲ تعمیم‌های بیشتر
۱۶	۴.۲ نتایج عددی و نتیجه‌گیری
۱۹	۳ وابستگی انرژی گراف بر ساختار شبکه
۱۹	۱.۳ مقدمه
۲۱	۲.۳ طیف گراف برای برخی گراف‌های منتظم
۲۲	۳.۳ برخی نتایج در شبکه‌های پراکنده با مقیاس آزاد
۲۴	۴.۳ نتیجه‌گیری
۲۹	۴ بررسی برخی از گراف‌های هم‌انرژی، فراانرژی و فروانرژی
۳۰	۱.۴ گراف‌های فراانرژی و فروانرژی
۳۷	مراجع
۴۱	واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

لیست تصاویر

۱.۳	ساختار توپولوژیک برخی از گراف‌های منتظم که توسط تمامی رئوس قرار گرفته در یک حلقه و تمامی یال‌های تشکیل شده توسط نزدیکترین اتصالات ایجاد شده است.	۲۱
۲.۳	(a) وابستگی انرژی گراف \mathcal{E} به درجه k برای مقادیر مختلف N را نشان می‌دهد. (b) نشان دهنده یک همبستگی کم‌توان بین \mathcal{E} و k هنگامی که k کوچک است، می‌باشد.	۲۴
۳.۳	انرژی گراف نرمال شده به عنوان تابعی از میانگین درجه‌ی $\langle k \rangle$ برای موارد $\gamma = 2/5$ (مربع‌ها) و $\gamma = 6/10$ (دایره‌ها) با $N = 1000$ را نشان می‌دهد. خط ثابت یک خط مناسب کم‌توان است برای موردی که γ برابر با $2/5$ می‌باشد.	۲۵
۴.۳	نشان دهنده توزیع انرژی گراف نرمال شده وابسته به γ برای چند مقدار مشخص از N .	۲۵
۵.۳	تصویر الحاقی بیانگر توزیع انرژی گراف قبل از نرمال شدن آن است.	۲۵
۵.۳	تغییر نسبی $\delta\mathcal{E}$ به عنوان تابعی از D برای سیستم‌های با اندازه متفاوت و میانگین درجه $\langle k \rangle$	۲۶
۶.۳	(a) نشان دهنده توزیع توان β در معادله (۹.۳) با تغییر N برای میانگین درجه $\langle k \rangle$. (b) نشان دهنده وابستگی دیگر پارامتر γ در معادله (۹.۳) به N است. همان‌طور که روی شکل قابل مشاهده است، به سختی ارتباطی میان پارامتر γ و N وجود دارد.	۲۶
۷.۳	توزیع انرژی گراف در تغییر اندازه سیستم N با میانگین درجه $\langle k \rangle = 4$ را نشان می‌دهد. مربع‌ها با $\gamma = 2/5$ ، هم‌چنین دایره‌ها و مثلث‌ها به ترتیب با $\gamma = 6/10$ و $\gamma = 8/10$ مطابقت دارند.	۲۷
۱.۴	نمودار گراف‌های $Spl_2(C_4)$ و $D_3(C_4)$	۳۰
۲.۴	نمودار گراف‌های K_6 و $S'(K_6)$	۳۳
۳.۴	مقایسه‌ی انرژی گراف‌های K_{2n} و $S'(K_n)$ برای تعداد رئوس مختلف	۳۵
۴.۴	نمودار گراف‌های $K_{1,4}$ و $D_2(K_{1,4})$	۳۵
۵.۴	نمودار تغییرات انرژی گراف $D_2(K_{1,n})$ بر حسب مرتبه‌ی گراف.	۳۶

فصل ۱

تعاریف و مفاهیم اولیه

۱.۱ مقدمه

در این فصل تعاریف و مفاهیم لازم که در فصل‌های آتی لازم است به اختصار بیان می‌کنیم. مطالب این فصل برگرفته از مراجع [۱] و [۲] می‌باشد.

۲.۱ تعاریف و مفاهیم لازم از نظریه گراف

تعریف ۱.۲.۱. گراف G ، یک سه‌تایی مرتب $(V(G), E(G), \phi(G))$ است که تشکیل شده از یک مجموعه ناتهی $V(G)$ از رأس‌ها و یک مجموعه $E(G)$ شامل یال‌ها و یک تابع وقوع $\phi(G)$ که به هر یال G یک زوج نامرتب از رأس‌های G را نسبت می‌دهد. اگر e یک یال u و v دو رأس باشند، به طوری که $\phi(G)(e) = uv$ ، در این صورت گفته می‌شود که e رأس‌های u و v را به یکدیگر وصل کرده است و رأس‌های u و v دو سر یال e نامیده می‌شوند. $V(G)$ را مجموعه رأس‌ها و $E(G)$ را مجموعه یال‌های گراف G می‌نامند.

تعریف ۲.۲.۱. دو رأس u و v را مجاور گویند اگر یالی بین آن‌ها وجود داشته باشد و هم‌چنین دو یال متمایز از G مجاورند اگر حداقل یک رأس مشترک داشته باشند.

تعریف ۳.۲.۱. تعداد رئوس گراف G را مرتبه‌ی گراف و تعداد یال‌های آن را اندازه‌ی گراف G

می نامند.

تعریف ۴.۲.۱. ماکزیمم درجه‌ی رئوس یک گراف را با $\Delta(G)$ یا Δ و مینیمم درجه‌ی رئوس را با $\delta(G)$ یا δ نمایش می‌دهند.

تعریف ۵.۲.۱. گراف ساده‌ای که در آن هر جفت از رأس‌های متمایز به وسیله‌ی یک یال به هم متصل باشند، گراف کامل نامیده می‌شود و با نماد K_n نمایش داده می‌شود.

تعریف ۶.۲.۱. گرافی که مجموعه‌ی رأس‌های آن را بتوان به دو زیر مجموعه‌ی X و Y به طوری افراز کرد که هر یال دارای یک انتها در X و یک انتها در Y باشد، گراف دوبخشی می‌نامند.

تعریف ۷.۲.۱. گراف دوبخشی کامل، یک گراف دوبخشی ساده با افراز (X, Y) است که در آن هر رأس X به هر رأس Y متصل است و آن را با $K_{m,n}$ نشان می‌دهند.

تعریف ۸.۲.۱. گراف G را که درجه‌ی همه‌ی رئوس آن r باشد، گراف r -منتظم می‌نامند.

تعریف ۹.۲.۱. در هر گراف با مجموعه رئوس $V(G)$ و یال‌های $E(G)$ و درجه رأسی $d(v)$ داریم:

$$\sum_{i=1}^n d(v_i) = 2|E(G)|. \quad (1.1)$$

تعریف ۱۰.۲.۱. اگر یال‌های یک گشت، متمایز باشند آن را گذر می‌نامند.

تعریف ۱۱.۲.۱. گذری که همه‌ی رأس‌های آن متمایز باشند یک مسیر^۱ نامیده می‌شود. گراف مسیر از مرتبه‌ی n را با نماد P_n نمایش می‌دهیم.

تعریف ۱۲.۲.۱. دور^۲، مسیر بسته‌ای حداقل به طول یک است که در آن رأس ابتدایی و انتهایی بر یکدیگر منطبق هستند و هیچ رأس دیگری ندارد. گراف دور از مرتبه‌ی n را با نماد C_n نمایش می‌دهیم.

تعریف ۱۳.۲.۱. گرافی که از یک دور، با افزودن یک رأس جدید و یال‌هایی که این رأس را به تمام رأس‌های دور متصل می‌کند تشکیل می‌شود را گراف چرخ^۳ می‌نامند. گراف چرخ از مرتبه‌ی n را با نماد W_n نمایش می‌دهیم.

تعریف ۱۴.۲.۱. گرافی که بین هر دو رأس آن حداقل یک مسیر وجود داشته باشد، گراف همبند^۴ نامیده می‌شود.

تعریف ۱۵.۲.۱. دو گراف $G = (V, E)$ و $G' = (V', E')$ را یکرخت^۵ گوییم هرگاه تابع یک‌به‌یک و پوشایی مانند $f : V(G) \rightarrow V(G')$ موجود باشد که اگر $uv \in E(G)$ آن‌گاه داشته باشیم $f(u)f(v) \in E(G')$. دو گراف یکرخت G و G' را با نماد $G \cong G'$ نشان می‌دهیم.

^۱Path
^۲Cycle

^۳Wheel graph
^۴Connected graph

^۵Isomorphic

تعریف ۱۶.۲.۱. فرض کنید G گرافی از مرتبه n باشد. مکمل (متمم) گراف G را با \bar{G} نشان می‌دهیم و به این صورت تعریف می‌کنیم: اولاً $V(\bar{G}) = V(G)$ و ثانیاً هر دو رأس u و v در \bar{G} مجاور هستند اگر و تنها اگر در G مجاور نباشند. توجه کنید که مکمل گراف کامل، گراف تهی است و مکمل گراف کامل دوبخشی، اجتماع دو گراف کامل است.

تعریف ۱۷.۲.۱. به هر گراف G از مرتبه n به قسمی که یک رأس از درجه $n-1$ داشته باشد و $n-1$ رأس دیگر آن از درجه یک باشند، گراف ستاره^۶ می‌گویند. گراف ستاره از مرتبه n را با نماد S_n نمایش می‌دهیم.

۳.۱ تعاریف و مفاهیم لازم از جبر خطی و نظریه ماتریس ها

تعریف ۱.۳.۱. ماتریس قطری از مرتبه n ، یک ماتریس $n \times n$ است که هر مولفه روی قطر اصلی آن غیرصفر بوده و دیگر مولفه‌های آن صفر باشند و به صورت

$$A = \text{diag}(a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}) \quad (2.1)$$

نمایش داده می‌شود.

تعریف ۲.۳.۱. اثر^۷ یک ماتریس مربعی $n \times n$ برابر است با حاصل جمع درایه‌های قطر اصلی آن، یا به عبارت دیگر:

$$\text{tr}(A) = a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn} = \sum_{i=1}^n a_{ii} \quad (3.1)$$

و a_{ii} درایه واقع بر سطر و ستون i ام ماتریس A می‌باشد.

تعریف ۳.۳.۱. فرض کنید G یک گراف ساده از مرتبه n باشد که مجموعه رئوس آن به صورت $V(G) = v_1, v_2, \dots, v_n$ باشد. ماتریس مجاورت $A(G)$ یک ماتریس $n \times n$ است، اگر رئوس v_i و v_j در گراف G به هم متصل باشند آن‌گاه درایه ij ماتریس A یک بوده و در غیر این صورت صفر است، به عبارتی داریم:

$$A(G) = (a_{ij}), a_{ij} = \begin{cases} 1 & v_i \sim v_j \\ 0 & o.w. \end{cases}$$

مثال ۱.۳.۱. ماتریس مجاورت گراف چرخ از مرتبه n به صورت زیر است:

$$A(W_n) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & \dots & 1 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

^۶Star graph

^۷Trace

تعریف ۴.۳.۱. فرض کنید A یک ماتریس مربعی از مرتبه n باشد، عدد (نه لزوماً حقیقی) λ یک مقدار ویژه^۸ از A نامیده می‌شود اگر یک بردار $v \neq 0$ موجود باشد به طوری که $Av = \lambda v$ ، بردار v را یک بردار ویژه^۹ از A وابسته به مقدار ویژه λ می‌نامند. چند جمله‌ای مشخصه ماتریس مجاورت A به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\phi(G, \lambda) = \det(\lambda I - A(G)). \quad (۴.۱)$$

ریشه‌های چند جمله‌ای مشخصه $\phi(G, \lambda)$ همان مقادیر ویژه‌ی ماتریس A می‌باشند.

تعریف ۵.۳.۱. یک ماتریس مربعی A از مرتبه n روی اعداد حقیقی، متقارن نامیده می‌شود هرگاه ترانزپوذهی ماتریس A با خود A برابر باشد، یعنی $A^T = A$.

قضیه ۱.۳.۱. [۲۴] اگر A ماتریس متقارن حقیقی از مرتبه n باشد، آن‌گاه A دارای n مقدار ویژه حقیقی و یک مجموعه‌ی متعامد متشکل از بردارهای ویژه است. این قضیه نشان می‌دهد که ماتریس مجاورت مربعی $A(G)$ که از مرتبه n است دارای n مقدار ویژه حقیقی (با احتساب تکرار) است.

لم ۱.۳.۱. [۲۴] فرض کنید A یک ماتریس مربعی از مرتبه‌ی n با مقادیر ویژه‌ی $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n$ باشد، در این صورت داریم:

$$\text{tr}(A) = \sum_{i=1}^n \lambda_i, \quad (۵.۱)$$

$$\det(A) = \prod_{i=1}^n \lambda_i. \quad (۶.۱)$$

فرض کنید G یک گراف از مرتبه n و اندازه m باشد و $A(G)$ ماتریس مجاورت گراف G باشد. در این صورت چون $\text{tr}(A(G)) = 0$ می‌باشد، لذا داریم:

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = 0 \quad (۷.۱)$$

و

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 2m. \quad (۸.۱)$$

لم ۲.۳.۱. [۲۴] نامساوی کوشی-شوارتز: فرض کنید (a_1, a_2, \dots, a_p) و (b_1, b_2, \dots, b_p) دو بردار از مرتبه p باشند، در این صورت داریم:

$$\left(\sum_{i=1}^p a_i b_i \right)^2 \leq \left(\sum_{i=1}^p a_i^2 \right) \left(\sum_{i=1}^p b_i^2 \right). \quad (۹.۱)$$

^۸Eigenvalue

^۹Eigenvector

تعاریف و مفاهیم لازم از جبر خطی و نظریه ماتریس ها ۵

قضیه ۲.۳.۱. [۳۰] فرض کنید a_i و b_i اعداد حقیقی مثبت باشند که $1 \leq i \leq n$ است. در این صورت داریم:

$$\sum_{i=1}^n a_i^2 \sum_{i=1}^n b_i^2 \leq \frac{1}{4} \left(\sqrt{\frac{M_1 M_2}{m_1 m_2}} + \sqrt{\frac{m_1 m_2}{M_1 M_2}} \right)^2 \left(\sum_{i=1}^n a_i b_i \right)^2, \quad (10.1)$$

که در آن $m_1 = \min_{1 \leq i \leq n}(a_i)$, $M_2 = \max_{1 \leq i \leq n}(b_i)$, $M_1 = \max_{1 \leq i \leq n}(a_i)$ و $m_2 = \min_{1 \leq i \leq n}(b_i)$

قضیه ۳.۳.۱. [۱۹] فرض کنید a_i و b_i اعداد حقیقی نامنفی باشند که $1 \leq i \leq n$ است. در این صورت داریم:

$$\sum_{i=1}^n a_i^2 \sum_{i=1}^n b_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n a_i b_i \right)^2 \leq \frac{n^2}{4} (M_1 M_2 - m_1 m_2)^2, \quad (11.1)$$

جایی که M_i و m_i همان مقادیر تعریف شده در قضیه‌ی قبل هستند.

قضیه ۴.۳.۱. [۱۹] فرض کنید a_i و b_i اعداد حقیقی مثبت هستند که $1 \leq i \leq n$ است. در این صورت داریم:

$$\left| n \sum_{i=1}^n a_i b_i - \sum_{i=1}^n a_i \sum_{i=1}^n b_i \right| \leq \alpha(n)(A - a)(B - b) \quad (12.1)$$

جایی که a و b و A و B مقادیر ثابتی هستند و به ازای هر i که $1 \leq i \leq n$ است داریم:
 $\alpha(n) = n \left[\frac{n}{4} \right] \left(1 - \frac{1}{n} \left[\frac{n}{4} \right] \right)$, به علاوه $b \leq b_i \leq B$, $a \leq a_i \leq A$.

قضیه ۵.۳.۱. [۱۹] فرض کنید a_i و b_i اعداد حقیقی نامنفی هستند، جایی که $1 \leq i \leq n$. در این صورت داریم:

$$\sum_{i=1}^n b_i + rR \sum_{i=1}^n a_i^2 \leq (r + R) \sum_{i=1}^n a_i b_i, \quad (13.1)$$

جایی که r و R اعداد ثابت هستند و برای هر $1 \leq i \leq n$ داریم: $ra_i \leq b_i \leq Ra_i$.

لم ۳.۳.۱. [۲۴] فرض کنید B یک ماتریس متقارن $p \times p$ باشد و B_k یک زیر ماتریس $k \times k$ از آن باشد که با حذف $(p - k)$ سطر و ستون B به دست آمده است. در این صورت داریم:

$$\lambda_{p-i+1}(B) \leq \lambda_{k-i+1}(B_k) \leq \lambda_{k-i+1}(B), \quad (14.1)$$

جایی که $i = 1, 2, 3, \dots, n$ و همچنین $\lambda_i(B)$ مقدار ویژه‌ی i ام از B (مقادیر ویژه به صورت نزولی مرتب شده باشند) می‌باشد.

لم ۴.۳.۱. [۲۴] فرض کنید x_1, x_2, \dots, x_N اعداد نامنفی باشند و α و β به ترتیب میانگین حسابی و میانگین هندسی این اعداد باشند و به صورت زیر تعریف شوند:

$$\alpha = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (15.1)$$

و

$$\beta = \left(\prod_{i=1}^N x_i \right)^{\frac{1}{N}}, \quad (16.1)$$

آن گاه داریم:

$$\frac{1}{N(N-1)} \sum_{i < j} (\sqrt{x_i} - \sqrt{x_j})^2 \leq \alpha - \beta \leq \frac{1}{N} \sum_{i < j} (\sqrt{x_i} - \sqrt{x_j})^2. \quad (17.1)$$

تساوی برقرار است هرگاه داشته باشیم $x_1 = x_2 = \dots = x_N$.

قضیه ۶.۳.۱. [۳۰] فرض کنید a_1, a_2, \dots, a_n و b_1, b_2, \dots, b_n اعداد حقیقی نامنفی باشند. اگر $p > 1$ باشد آن گاه داریم:

$$\left(\sum_{i=1}^n (a_i + b_i)^p \right)^{\frac{1}{p}} \leq \left(\sum_{i=1}^n a_i^p \right)^{\frac{1}{p}} + \left(\sum_{i=1}^n b_i^p \right)^{\frac{1}{p}}. \quad (18.1)$$

قضیه ۷.۳.۱. [۳۰] فرض کنید a_1, a_2, \dots, a_n اعداد حقیقی نامنفی باشند، در این صورت داریم:

$$n \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n a_i - \left(\prod_{i=1}^n a_i \right)^{\frac{1}{n}} \right] \leq n \sum_{i=1}^n a_i - \left(\sum_{i=1}^n \sqrt{a_i} \right)^2 \leq n(n-1) \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n a_i - \left(\prod_{i=1}^n a_i \right)^{\frac{1}{n}} \right]. \quad (19.1)$$

۴.۱ تعاریف و مفاهیم لازم از نظریه طیفی گراف و انرژی گراف

تعریف ۱.۴.۱. طیف^{۱۰} گراف G ، مجموعه مقادیر ویژهی ماتریس مجاورت گراف G با احتساب چندگانگی آن‌ها می‌باشد. طیف گراف G با نماد $Spec(G)$ نشان داده می‌شود. بزرگ‌ترین مقدار ویژهی گراف، شعاع طیفی^{۱۱} گراف نامیده می‌شود و با نماد $S(G)$ نمایش داده می‌شود.

تعریف ۲.۴.۱. [۱۹] فرض کنید G گرافی ساده از مرتبه n باشد. انرژی گراف G که با $\mathcal{E}(G)$ نشان داده می‌شود به صورت مجموع قدرمطلق مقادیر ویژهی آن تعریف می‌شود، یعنی داریم:

^{۱۰}Spectrum

^{۱۱}Spectral radius

$$\mathcal{E}(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|. \quad (20.1)$$

قضیه ۱.۴.۱ [۷] (پرون-فروبنیوس) فرض کنید A و B ماتریس‌هایی $n \times n$ نامنفی تحویل‌ناپذیر متقارن با درایه‌های حقیقی باشند، آن‌گاه داریم:

الف) شعاع طیفی $\rho(A)$ یک مقدار ویژه ساده از A می‌باشد. اگر X یک بردار ویژه برای $\rho(A)$ باشد، در این صورت هیچ مولفه‌ای از X صفر نبوده و همه‌ی مولفه‌های آن دارای علامت یکسان می‌باشند.

ب) به‌علاوه اگر ماتریس $A - B$ نامنفی باشد، آن‌گاه $\rho(B) \leq \rho(A)$ و تساوی برقرار است اگر و تنها اگر $A = B$.

تعریف ۳.۴.۱ فرض کنید G_1 و G_2 دو گراف از مرتبه‌ی n باشد در این صورت گراف‌های G_1 و G_2 هم‌انرژی^{۱۲} نامیده می‌شوند، هرگاه $\mathcal{E}(G_1) = \mathcal{E}(G_2)$ باشد.

تعریف ۴.۴.۱ [۲۱] گرافی که انرژی آن از انرژی گراف کامل بیشتر باشد، گراف فراانرژی^{۱۳} نامیده می‌شود.

تعریف ۵.۴.۱ [۲۱] فرض کنید G گرافی از مرتبه n باشد. اگر $\mathcal{E}(G) < n$ باشد، آن‌گاه گراف G گراف فروانرژی^{۱۴} نامیده می‌شود.

^{۱۲}Equienergetic
^{۱۳}Hyperenergetic

^{۱۴}Hypoenergetic

فصل ۲

نگرشی جدید به مفهوم انرژی (مجاورت) گرافها

۱.۲ مقدمه

در این فصل، قصد داریم به تفسیر ساختاری مفهوم انرژی گرافها پرداخته و تأثیر گشت‌های زوج و فرد و همچنین تأثیر زیرگرافها را بررسی کرده و ثابت کنیم که انرژی (مجاورت) هر گراف (اعم از دوبخشی یا غیر دوبخشی) مجموع وزن دار ترانهاده توان‌های زوج ماتریس مجاورت می‌باشد. با استفاده از این موضوع کران‌هایی برای انرژی گراف به دست می‌آوریم و تأثیر زیرگراف‌های آن گراف در مقدار انرژی را بررسی می‌کنیم. برای برخی گراف‌های ساده‌ی خاص مانند دورها و فولرن‌ها، کران‌های جدید برای انرژی آن‌ها به دست می‌آوریم و کران‌های موجود قبلی را بهبود می‌بخشیم.

۲.۲ معنای انرژی گراف چیست؟

مفهوم انرژی گرافها از مطالعات هیدروکربن‌های مزدوج شده با استفاده از روش اتصال پیوند که در شیمی به روش اوربیتال مولکولی HMO معروف است، ایجاد و تعریف شده است. (برای مثال مراجع [۵، ۸] را ببینید). در این زمینه انرژی کل گراف مزدوج شده M به صورت زیر

تعریف می‌شود،

$$\mathcal{E}(M) = 2 \sum_{j:\lambda_j > 0} \lambda_j = \sum_{j=1}^n |\lambda_j|,$$

که تساوی آخر نتیجه‌ی این واقعیت است که مولکول‌های مزدوج شده می‌توانند با گراف‌های دوبخشی نشان داده شوند و در واقع مقادیر ویژه ماتریس مجاورت متقارن است. در این جا $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ مقادیر ویژه ماتریس مجاورت از گراف (مولکولی)، یا به عبارتی دیگر گراف ساده، همبند و غیرجهت دار هستند. این مفهوم توسط ایوان گاتمن^۱ برای هر گرافی، نه لزوماً گراف دوبخشی، تعمیم یافت که آن را انرژی گراف نامید. بنابراین برای هر گراف ساده و غیر جهت دار $G = (V, E)$ انرژی گراف به صورت زیر تعریف می‌شود،

$$\mathcal{E}(G) = \sum_{j=1}^n |\lambda_j|.$$

در این فصل گراف‌های ساده، غیر جهت‌دار، همبند، بدون یال چندگانه و بدون طوقه را بررسی خواهیم کرد. ماتریس مجاورت A از گراف G ماتریسی مربعی، متقارن و با تجزیه‌ی

$$A = VAV^T$$

می‌باشد، به طوری که $V = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n)$ ماتریس بردارهای ویژه‌ی متعامد ψ_j متناظر با مقادیر ویژه‌ی λ_j می‌باشد و هم‌چنین $\Lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ است. اگر f تابعی عددی (اسکالر) روی مقادیر ویژه A باشد، در این صورت می‌توانیم تابع $f(A)$ را روی ماتریس A به صورت زیر تعریف کنیم:

$$f(A) = Vf(\Lambda)V^T \quad (۱.۲)$$

جایی که $f(\Lambda) = (f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n))$. برای مثال، برای هر ماتریس متقارن مثبت A می‌توانیم ریشه دوم آن را به صورت $S = \sqrt{A} = V\sqrt{\Lambda}V^T$ تعریف کنیم. این خاصیت تنها برای ماتریس‌های متقارن نیمه‌معین مثبت با ویژگی $A = S^2$ برقرار است. توجه داریم که اگر f به صورت بسط سری توانی به فرم

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$$

تعریف شده باشد، به طوری که سری روی صفحه‌ی باز شامل λ_j هم‌گرا شود، در این صورت معادله‌ی بالا معادل است با:

$$f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k A^k. \quad (۲.۲)$$

برای اطلاعات بیشتر در مورد توابع ماتریس‌ها، خواننده به منبع [۱۸] مراجعه کند. نتیجه اصلی این پایان نامه این است که انرژی گراف (مرتبط با ماتریس مجاورت) می‌تواند توسط مجموع توان‌های زوج از ماتریس مجاورت به دست آید. در ابتدا، توجه داریم که:

$$\mathcal{E}(G) = \text{tr}|A| \quad (۳.۲)$$

به طوری که $|A| = V|A|V^T$ بر قدر مطلق تابع ماتریس A دلالت می کند. بنابراین نتایج زیر را داریم.

قضیه ۱.۲.۲. [۱۰] انرژی یک گراف توسط معادله‌ی زیر حاصل می شود،

$$\mathcal{E}(G) = \lambda_1 \operatorname{tr} \sum_{i=0}^{\infty} \binom{\frac{1}{\lambda_1}}{k} \sum_{t=0}^k (-1)^{k-t} \binom{k}{t} \left(\frac{A}{\lambda_1}\right)^{2t}. \quad (4.2)$$

برهان. با بیان مجدد این نکته آغاز می کنیم که هر ماتریس متقارن مثبت دارای یک ریشه دوم مثبت یکتایی است. بنابراین داریم:

$$|A| = \sqrt{A^2} \quad (5.2)$$

اکنون ریشه دوم را در یک سری توانی از A^2 بسط می دهیم. فرض کنیم $\lambda_1 > 0$ بیشترین مقدار ویژه‌ی A باشد. توجه می کنیم که چون G همبند است. λ_1 ساده است. پس $\frac{A}{\lambda_1}$ دارای شعاع طیفی ۱ و ماتریس $B = (\lambda_1^{-1}A)^2 - I$ دارای مقادیر ویژه در بازه‌ی $[-1, 0]$ است. بنابراین B یک ماتریس نیم‌معین منفی و شعاع طیفی آن بیشتر از ۱ است. پس داریم،

$$|A| = \sqrt{A^2} = \lambda_1 \sqrt{\left(\frac{A}{\lambda_1}\right)^2} = \lambda_1 \sqrt{I + \left(\left(\frac{A}{\lambda_1}\right)^2 - I\right)} = \lambda_1 (I + B)^{\frac{1}{2}}. \quad (6.2)$$

اکنون مورد خاصی از قضیه‌ی دو جمله‌ای زیر را بیان می کنیم:

$$\sqrt{1+x} = (1+x)^{\frac{1}{2}} = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\frac{1}{2}}{k} x^k \quad (7.2)$$

که برای همه‌ی $x \in (-1, 1)$ سری هم‌گرا می شود و هم‌چنین

$$\binom{a}{k} := \frac{a(a-1)\dots(a-k+1)}{k!} \quad (8.2)$$

برای هر α که در اینجا $\alpha = \frac{1}{2}$ می باشد. بنابراین می توان نوشت،

$$|A| = \lambda_1 \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\frac{1}{2}}{k} B^k = \lambda_1 \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\frac{1}{2}}{k} \left(\left(\frac{A}{\lambda_1}\right)^2 - I\right)^k \quad (9.2)$$

□

که به سادگی نتیجه مطلوب را حاصل می شود.

اگر چند مورد اول بسط را برای $\mathcal{E}(G)$ در نظر بگیریم داریم:

$$\mathcal{E}(G) = \operatorname{tr}|A| = \lambda_1 \operatorname{tr} \left[I + \frac{1}{2} \left(\frac{A^2}{\lambda_1^2} - I\right) - \frac{1}{2 \times 4} \left(\frac{A^2}{\lambda_1^2} - I\right)^2 + \frac{1 \times 3}{2 \times 4 \times 6} \left(\frac{A^2}{\lambda_1^2} - I\right)^3 \dots \right] \quad (10.2)$$

که به وضوح اشاره بر این دارد که انرژی یک گراف تنها روی توان‌های زوج ماتریس مجاورت از گراف متناظر با آن بستگی دارد. به عبارتی دیگر،

$$\mathcal{E}(G) = \operatorname{tr}|A| = \lambda_1 \left[\sum_{k=0}^{\infty} \binom{2k}{k} \frac{(-1)^{k+1}}{2^{2k} (2k-1)} \operatorname{tr} \left(\frac{A^2}{\lambda_1^2} - I\right)^k \right]. \quad (11.2)$$

باید توجه کرد که هر جایی که صفر مقدار ویژه‌ی A است، ماتریس B دارای شعاع طیفی ۱ است که هم‌گرایی بسط سری دوجمله‌ای را کند می‌کند. برعکس، اگر A دارای مقادیر ویژه‌ی صفر یا کوچک تر از یک نباشد می‌توان هم‌گرایی سریع‌تری را انتظار داشت. برای مثال، هم‌گرایی کند را برای C_4 (که برای آن صفر یک مقدار ویژه بود) و اما برای C_3 و C_5 با سرعت بیشتری مشاهده نمودیم که این تفاوت در هم‌گرایی سیستم‌های دارای صفر به عنوان مقدار ویژه‌ی A یعنی زمانی که پوچی گراف $\eta(G)$ بزرگتر از صفر است با گراف‌هایی که دارای پوچی صفر هستند، در تفاوت‌های مهم شیمیایی است. در یک مولکول دارای پوچی مخالف با صفر، تمام الکترون‌ها نمی‌توانند به روشی مزدوج ترکیب شوند و در ساختار مولکول الکترون‌های تکی وجود دارد که ویژگی‌های مغناطیسی به مولکول می‌دهند. اکنون بی‌بردییم که برای بیان انرژی این سیستم‌ها برحسب سری‌های توانی به نسبت سیستم‌های مولکولی با پوچی صفر به تعداد بیشتری دوره نیاز داریم. این تفاوت از نظر فیزیکی این گونه درک خواهد شد که هر عبارت از بسط را در نظر بگیرید، یک لحظه‌ی طیفی از B ، بیان‌کننده چرخش الکترون‌ها در مولکول است. به عنوان مثال، درایه‌های غیر قطری B جهش و حرکت الکترون‌ها بین جفت‌های واقع در نزدیک‌ترین همسایه‌های اتم را بیان می‌کند، به طور مشابه در B^2 جهش الکترون‌ها بین اتم‌های جدا شده توسط دو اتصال را نشان می‌دهد و برای انرژی‌های بالاتر B نشان‌دهنده جهش‌های بلند الکترون‌ها میان اتم‌ها در یک مولکول است. درباره عبارت‌های قطری از توان‌های ماتریس B نیز همین موضوع می‌تواند بیان شود، که الکترون‌ها در حال جهش بین اتم‌ها هستند سپس به مکان اولیه خود باز می‌گردند. برای این که مولکول پایدار بماند نیاز است که الکترون‌ها به طور حداکثری غیر مستقر شوند. سپس لازم است که الکترون‌ها تا حد امکان به نزدیک‌ترین، دومین، سومین و ... اتم‌های مجاور در حرکت باشند که باعث می‌شود مرتبه‌های بالاتر مانند B^2 ، B^3 و ... در بسط سری‌های تیلور از انرژی بررسی شوند. بر طبق نتایج حاصل شده، در یک مولکول پایدار مزدوج شده مانند C_6 ، با در نظر گرفتن تنها چند عبارت از بسط بیانگر این است که مولکول با غیر مستقر سازی نسبتاً کم الکترون‌ها پایدار است. برای C_4 که نمونه یک مولکول ناپایدار است، نیاز است که از طریق کل مولکول با چرخش‌های بزرگ از الکترون‌ها به پایداری قطعی برسد که نیازمند بررسی تعداد زیادی از عبارت‌های بسط سری تیلور از انرژی می‌باشد. به طور کلی، پوچی گراف دوری به صورت زیر است، (مرجع [۴] را ببینید)

$$\eta(c_n) \begin{cases} 2, & \text{if } n \equiv 0 \pmod{4} \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (12.2)$$

بنابراین، برای مولکول‌های تک دور مزدوج شده دارای $4n$ اتم مانند C_4 ، C_8 و ... تعداد عبارت‌های بسط سری تیلور برای محاسبه انرژی بیشتر از مولکول‌های پایدار شناخته شده با تعداد اتم $4n+2$ مانند C_6 ، C_{10} و ... می‌باشد.

۳.۲ تعمیم‌های بیشتر

اکنون با استفاده از مفاهیم ذکر شده، تعدادی کران بالا و پایین برای انرژی یک گراف ارائه می‌دهیم. در واقع هدف ما بررسی انرژی گراف با استفاده از مفهوم ساختاری و مولکولی آن است. یادآوری می‌کنیم،

$$B = \left(\frac{A^2}{\lambda_1^2} - I \right) \quad (13.2)$$

که B یک ماتریس نیم‌معین منفی (با مقادیر ویژه متعلق به بازه $[-1, 0]$) است. همچنین

$$B_{ii} = \left(\frac{A^2}{\lambda_1^2} - I \right)_{ii} = \frac{k_i}{\lambda_1^2} - 1 \quad (14.2)$$

به طوری که k_i درجه رأس‌های متناظر می‌باشد. به وضوح درایه‌های قطری همگی غیر مثبت هستند. اکنون نتیجه زیر را اثبات می‌کنیم.

لم ۱.۳.۲. [۱۰] فرض کنید G یک گراف با n رأس و m یال باشد. در این صورت همواره داریم،

$$\mathcal{E}(G) \leq \left(\frac{\lambda_1}{2} \right) n + \left(\frac{1}{\lambda_1} \right) m. \quad (15.2)$$

برهان. به آسانی دیده می‌شود که

$$\mathcal{E}(G) \leq \lambda_1 \operatorname{tr} I = \lambda_1 n. \quad (16.2)$$

همچنین داریم،

$$\mathcal{E}(G) = \lambda_1 \left[\operatorname{tr} I + \frac{1}{2} \operatorname{tr} \left(\frac{A^2}{\lambda_1^2} - I \right) - \left(\frac{1}{4} \operatorname{tr} \left(\frac{A^2}{\lambda_1^2} - I \right)^2 - \frac{1}{16} \operatorname{tr} \left(\frac{A^2}{\lambda_1^2} - I \right)^3 + \dots \right) \right] \quad (17.2)$$

که نتیجه می‌دهد،

$$\mathcal{E}(G) \leq \lambda_1 \left[\operatorname{tr} I + \frac{1}{2} \operatorname{tr} \left(\frac{A^2}{\lambda_1^2} - I \right) \right] = \lambda_1 n + \left(\frac{1}{2\lambda_1} \right) \sum_{i=1}^n K_i - \left(\frac{\lambda_1}{2} \right) n. \quad (18.2)$$

□ اکنون با استفاده از (۱۴.۲) نشان می‌دهیم که نتیجه مطلوب حاصل می‌شود.

توجه داریم که به آسانی نتیجه زیر اثبات می‌شود،

$$\mathcal{E}(G) \leq \sqrt{2mn} \leq \left(\frac{\lambda_1}{2} \right) n + \left(\frac{1}{\lambda_1} \right) m \quad (19.2)$$

که کران اول آن به کران McClelland معروف است. (مرجع [۲۶] را ببینید). کران Mc-Celland بعدها توسط کولن^۲، مولتون^۳ و گاتمن که به کران KMG معروف است به صورت زیر بهبود یافت [۲۰]

$$\mathcal{E}(G) \leq \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1) \left(2m - \frac{4m^2}{n^2} \right)}. \quad (20.2)$$

اکنون ما می‌توانیم با تقریب‌های مناسب در اثبات گزاره‌ی فوق کران‌های بهتری را نتیجه بگیریم.

لم ۲.۳.۲. [۱۰] فرض کنید که G یک گراف با n رأس m یال، مسیر سه راسی P_3 و دور C_4 باشد. آن‌گاه همواره داریم،

$$\mathcal{E}(G) \leq \left(\frac{3\lambda_1}{\lambda}\right)n + \left(\frac{6\lambda_1^2 - 1}{4\lambda_1^3}\right)m - \left(\frac{1}{2\lambda_1^3}\right)P_3 - \left(\frac{1}{\lambda_1^3}\right)C_4. \quad (21.2)$$

برهان. به آسانی دیده می‌شود

$$tr(B^2) = tr\left(\frac{A^2}{\lambda_1^2} - I\right)^2 = \frac{1}{\lambda_1^4}trA^4 - \frac{2}{\lambda_1^2}trA^2 + trI. \quad (22.2)$$

اکنون می‌توانیم اثر A^4 و A^2 را با استفاده از زیرگراف‌های مربوط به آن‌ها به دست آوریم. واضح است که:

$$trA^4 = 2m + 4P_3 + 8C_4 \quad (23.2)$$

و همچنین

$$trA^2 = 2m. \quad (24.2)$$

بنابراین با استفاده از این دو رابطه و جای‌گذاری آن‌ها در $\frac{\lambda_1}{\lambda}tr(B^2)$ ، نتیجه می‌گیریم،

$$\frac{\lambda_1}{\lambda}tr(B^2) = \left(\frac{\lambda_1}{\lambda}\right)n + \left(\frac{1 - 2\lambda_1^2}{4\lambda_1^3}\right)m + \left(\frac{1}{2\lambda_1^3}\right)P_3 + \left(\frac{1}{\lambda_1^3}\right)C_4. \quad (25.2)$$

در نهایت با جای‌گذاری در رابطه‌ی

$$\mathcal{E}(G) \leq \left(\frac{\lambda_1}{2}\right)n + \left(\frac{1}{\lambda_1}\right)m - \frac{\lambda_1}{\lambda}tr(B^2) \quad (26.2)$$

نتیجه مطلوب حاصل می‌شود. \square

یک ویژگی مهم این حد این است که به وضوح با شهود شیمیایی مطابقت دارد. برای مثال، مشخص است که دوره‌های C_4 مزدوج شده ناپایدار در یک مولکول منجر به افزایش انرژی مولکول می‌شوند. بنابراین هر دو عبارت‌های P_3 و C_4 باعث افزایش انرژی کل یک مولکول می‌شوند.

اکنون کران‌های حاصل شده در گزاره‌های قبل را با تقریب مناسب و مشابه‌ای بهبود می‌دهیم.

قضیه ۱.۳.۲. [۱۰] فرض کنید G یک گراف باشد. در این صورت همواره داریم،

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(G) \leq & \left(\frac{5\lambda_1^2}{16}\right)n + \left(\frac{15\lambda_1^4 - 5\lambda_1^2 + 1}{8\lambda_1^5}\right)m - \left(\frac{5\lambda_1^2 - 3}{4\lambda_1^5}\right)P_3 - \left(\frac{5\lambda_1^2 - 6}{2\lambda_1^5}\right)C_4 \\ & + \left(\frac{3}{2\lambda_1^5}\right)C_3 + \left(\frac{3}{8\lambda_1^5}\right)P_4 + \left(\frac{3}{4\lambda_1^5}\right)S_{1,3} + \left(\frac{9}{4\lambda_1^5}\right)D_4 + \left(\frac{3}{4\lambda_1^5}\right)F \quad (27.2) \\ & + \left(\frac{3}{2\lambda_1^5}\right)H + \left(\frac{3}{4\lambda_1^5}\right)C_6. \end{aligned}$$

برهان. به آسانی دیده می‌شود که،

$$tr(B^3) = tr\left(\frac{A^2}{\lambda_1^2} - 1\right)^3 = \frac{1}{\lambda_1^6} tr A^6 - \frac{3}{\lambda_1^4} tr A^4 + \frac{3}{\lambda_1^2} tr A^2 - tr I. \quad (28.2)$$

عبارت $tr A^6$ بر حسب زیرگراف‌هایش به صورت زیر بیان شده است، (مرجع [۹] را ببینید)

$$tr A^6 = 2m + 12P_3 + 24C_3 + 48C_4 + 12S_{1,3} + 6P_4 + 36D_4 + 12F + 24H + 12C_6 \quad (29.2)$$

بنابراین با جایگذاری این دو فرمول در عبارت $\frac{\lambda_1}{16} tr(B^3)$ نتیجه می‌گیریم،

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_1}{16} tr(B^3) &= \left(\frac{1 - 3\lambda_1^2 + 3\lambda_1^4}{8\lambda_1^5}\right) m + \left(\frac{3 - 3\lambda_1^2}{4\lambda_1^5}\right) P_3 + \left(\frac{6 - 3\lambda_1^2}{2\lambda_1^5}\right) C_4 \\ &\quad \left(\frac{3}{2\lambda_1^5}\right) C_3 + \left(\frac{3}{8\lambda_1^5}\right) P_4 + \left(\frac{3}{4\lambda_1^5}\right) S_{1,3} + \left(\frac{9}{4\lambda_1^5}\right) D_4 \\ &\quad + \left(\frac{3}{4\lambda_1^5}\right) F + \left(\frac{3}{2\lambda_1^5}\right) H + \left(\frac{3}{4\lambda_1^5}\right) C_6 - \frac{\lambda_1}{16} n. \end{aligned} \quad (30.2)$$

در نهایت با استفاده از معادله‌ی زیر نتیجه مطلوب حاصل می‌شود،

$$\mathcal{E}(G) \leq \left(\frac{3\lambda_1}{8}\right) n + \left(\frac{6\lambda_1^2 - 1}{4\lambda_1^3}\right) m - \left(\frac{1}{2\lambda_1^3}\right) P_3 - \left(\frac{1}{\lambda_1^3}\right) C_4 + \frac{\lambda_1}{16} tr(B^3). \quad (31.2)$$

□

این نتایج به وضوح مشخص می‌کند که زیرگراف‌هایی مانند C_6 در تقلیل و کاهش انرژی یک گراف سهیم‌اند. در سیستم‌های مولکولی از این حقیقت که مولکول‌های بنزنی پایدار هستند نتایج معروفی حاصل می‌شود. اگر چه نتایج دیگری از قطعه‌هایی که در پایداری سیستم‌های مولکولی مزدوج شده کمک می‌کنند، حاصل می‌شود، مانند سیستم مورد بررسی شده به روش HMO که این نتیجه را می‌دهد که قطعه P_4 که متناظر با قطعه بوتادین می‌باشد، به عنوان یک قطعه پایدار به راحتی قابل تشخیص است. دیگر اجزا در این جا به روش غیر قابل پیش بینی ظاهر می‌شوند مانند C_3 ، D_4 ، F و H .

یکی از نتایج مهم یافته‌های این پایان نامه این است که می‌توانیم، کران‌هایی برای رابطه‌ی بین هر یک از زیر گراف‌های گراف و انرژی کل گراف به دست آوریم. برای مثال، فرض کنیم که ما علاقه‌مند به این هستیم تا بدانیم که چگونه زیرگراف C_8 به $\mathcal{E}(G)$ مرتبط است. پس می‌توان به این صورت انجام داد. در ابتدا اولین لحظه (زمان) طیفی ماتریس B که در آن C_8 مرتبط می‌شود را مشخص می‌کنیم. به عبارتی دیگر C_8 در اولین زمان در عبارت $tr \frac{A^8}{\lambda_1^8}$ از B^4 ظاهر می‌شود. بنابراین، گیریم $\eta_G(C_8)$ ارتباط دور هشت رأسی به انرژی کل گراف G و $\eta_8(C_8)$ ارتباط C_8 به هشتمین لحظه‌ای طیفی $A = A(C_8)$ باشد، به عبارتی دیگر

$$\eta_8(C_8) = tr A^8 - tr A^2 - tr A^4 - tr A^6 = 256 - 16 - 48 - 160 = 32.$$

بنابراین

$$\eta_G(C_8) \leq \lambda_1 \binom{2.4}{4} \frac{(-1)^{4+1}}{2^{2.4}(2.4-1)} \left(\frac{\eta_8(C_8)}{\lambda_1^8}\right) = -\left(\frac{5}{4\lambda_1^7}\right). \quad (32.2)$$

علامت منفی نشان می‌دهد که یک دور هشت رأسی، انرژی گراف را افزایش می‌دهد. در مورد رفتار مولکول‌های تحت طرح HMO مشخص شده که دوره‌های با تعداد $4n$ اتم، مولکول را ناپایدار می‌کند که منطبق با نتیجه به‌دست آمده است. در این‌جا ما تنها ارتباط $tr \frac{A}{\lambda^k}$ با زیر گراف C_8 را بررسی کرده‌ایم. با این‌حال، این زیر گراف به لحظه‌های بالاتر $\frac{tr A^{10}}{\lambda^{10}}, \frac{tr A^{12}}{\lambda^{12}}, \dots$ نیز مرتبط می‌شود. بنابراین، این کران می‌تواند با استفاده از لحظه‌های بالاتر C_8 بهبود و اصلاح شود که ما در اینجا از ذکر آن‌ها صرف نظر می‌کنیم.

مقادیر انرژی $\mathcal{E}(G)$ و تخمین آن‌ها با استفاده از کران McClelland $(\sqrt{2mn})$ ، کران KMG و نیز کران‌های به‌دست آورده ما برای دوره‌های C_n با تعداد رأس‌های مختلف.

n	$\mathcal{E}(G)$	$\sqrt{2mn}$	KMG	Eq. (۱۵.۲)	Eq. (۲۱.۲)	Eq. (۲۷.۲)
۳	۴/۰۰۰	۴/۲۴۳	۴/۰۰۰	۴/۵	۴/۲۱۹	۴/۱۱۳
۴	۴/۰۰۰	۵/۶۵۷	۵/۴۶۴	۶	۵/۵۰۰	۵/۲۵۰
۴	۶/۴۷۲	۷/۰۷۱	۶/۸۹۹	۷/۵	۷/۰۳۱	۶/۸۳۶
۶	۸/۰۰۰	۸/۴۸۵	۸/۳۲۵	۹	۸/۴۳۸	۸/۲۲۷
۷	۸/۹۸۸	۹/۸۹۹	۹/۷۴۶	۱۰/۵	۹/۸۴۴	۹/۵۷۰
۸	۹/۶۵۷	۱۱/۳۱۴	۱۱/۱۶۵	۱۲	۱۱/۲۵۰	۱۰/۹۳۸
۹	۱۱/۵۱۷	۱۲/۷۲۸	۱۲/۵۸۳	۱۳/۵	۱۲/۶۵۶	۱۲/۳۰۵
۱۰	۱۲/۹۴۴	۱۴/۱۴۲	۱۴/۰۰۰	۱۵	۱۴/۰۶۲	۱۳/۶۷۲

۴.۲ نتایج عددی و نتیجه‌گیری

در این بخش، ما تعدادی نتایج عددی را روی کران‌های مختلف به‌دست آمده برای گراف‌های ساده و پراهمیت شیمیایی ارائه می‌دهیم. هدف از این کران‌ها دستیابی به تخمین‌های مناسب برای انرژی گراف نمی‌باشد. در واقع، محاسبه‌ی مستقیم انرژی برای این گراف‌ها راحت‌تر از محاسبه کران‌هاست. هدف ما این است تا نشان دهیم که چگونه ارتباط زیرگراف‌های خاص با کران‌ها، آن‌ها را اصلاح و بهبود می‌دهد و همچنین تفسیری ساختاری از انرژی گراف برای چنین گراف‌هایی عرضه می‌کند. در تمامی موارد ما حدود را با یکی از حدود McClelland مقایسه می‌کنیم که ساده است و به گونه‌ای قابل توجه نزدیک به انرژی گراف می‌باشد. ابتدا مجموعه‌ای از دوره‌های C_n برای $3 \leq n \leq 10$ را مطالعه می‌کنیم. در جدول ۱ مقادیر انرژی و نتایج مرتبط به آن را با کران McClelland و KMG ارائه شده است. همان‌طور که دیده می‌شود حتی برای چنین گراف‌های ساده‌ای، تقریب مناسب نیاز به عبارت $tr A^6$ دارد تا از کران‌های McClelland و KMG بهتر شود. در این نوع گراف‌ها، چند زیرگراف مرتبط با معادله (۲۷.۲) مانند $S_{1,3}$ ، D_4 ، F و H ظاهر نشده و برخی از آنان مانند C_3 ، C_4 و C_6 تنها در گراف‌های خاص پدیدار می‌شوند. بدین ترتیب، جهت بهبود کران نسبت به دو کران دیگر

از ارتباط با n, m و P_3 و ارتباط جدید P_4 استفاده می‌شود. باید خاطر نشان شود که معادله (۲۷.۲) نشان دهنده‌ی یک کران بهتر نسبت به کران به‌دست آمده از KMG برای این نوع گراف‌ها می‌باشد.

به عنوان مثال دوم مجموعه‌ای از گراف‌های فولرن^۴ را که دارای تعداد رئوس از ۲۰ تا ۵۴۰ است را مورد مطالعه قرار داده شده که نتایج در جدول ۲ آمده است. مجدداً در اینجا، برای بهبود کران حاصل شده نسبت به کران McClelland لازم است تا از عبارت trA^4 فراتر رویم. در اینجا عبارت‌های اصلی برای بهبود کران توسط $n, m, P_3, P_4, S_{1,3}$ و C_6 ایجاد شده است. توجه کنید که ارتباطات C_5 تنها پس از بررسی trA^1 اتخاذ شده که در اینجا مطالعه نشده است. سپس شایان ذکر است که انرژی فولرن توسط معادله‌ی بعدی مشخص شده که در آن از این حقیقت استفاده می‌کنیم که فولرن‌ها گراف‌های مکعبی‌اند، به عبارتی دیگر $\lambda_1 = 3$:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(G) \leq & \left(\frac{15}{16}\right)n + \left(\frac{1171}{1944}\right)m - \left(\frac{7}{162}\right)P_3 + \left(\frac{1}{648}\right)P_4 + \left(\frac{1}{324}\right)S_{1,3} \\ & + \left(\frac{1}{324}\right)C_6. \end{aligned} \quad (33.2)$$

کران (۲۷.۲) مناسب‌تر از کران McClelland برای فولرن‌هاست، اما برای KMG شرایط پیچیده‌تر است. برای فولرن‌های کوچک تا تعداد تقریباً $n = 76$ ، کران KMG برآوردهای بهتری را از انرژی گراف به نسبت کران‌ها در (۲۷.۲) می‌دهد. با این حال، برای فولرن‌های متوسط و بزرگتر کران‌ها برآورد بهتری از $\mathcal{E}(G)$ است. شایان ذکر است که مزیت اصلی روش پیشنهاد شده این است که برای بهبود کران‌های متناظر به‌طور مداوم در سری توانی عبارت‌های بیشتری را اضافه می‌کنیم.

نتیجه‌ی اصلی این پایان‌نامه این است که انرژی گراف عبارت است از مجموع اثرهای توان‌های زوج از ماتریس مجاورت یک گراف. از مزیت‌های اصلی این پایان‌نامه این می‌باشد که روش‌های جدیدی برای انرژی گراف‌ها قابل طراحی است به‌طوری که در آن‌ها ارتباط خاص زیرگراف‌ها قابل دست‌یابی باشد. این مسئله در شیمی بسیار حائز اهمیت است. در جایی که به منظور درک خاصیت‌های مولکولی، خاصیت عبارت‌های ساختاری، نقشی مهم و طلائی دارد. در نهایت، امیدواریم که نتایج جدید بیان شده در این جا باعث شود تا خواص و ویژگی‌های انرژی گراف در انواع ویژه‌ای از گراف‌ها به درستی درک شود.

مقادیر انرژی $\mathcal{E}(G)$ و تخمین آن‌ها با استفاده از کران McClelland $(\sqrt{2mn})$ ، کران KMG و نیز کران‌های به‌دست آورده ما برای فولرن‌ها با تعداد رأس‌های مختلف.

^۴Fullerene

n	$\mathcal{E}(G)$	$\sqrt{2mn}$	KMG	Eq. (۱۵.۲)	Eq. (۲۱.۲)	Eq. (۲۷.۲)
۲۰	۲۹.۴۱۶	۳۴.۶۴۱	۳۴.۱۲۹	۴۰	۳۶.۱۱۱	۳۴.۴۷۵۳
۲۴	۳۶.۰۲۲	۵۶۹.۴۱	۴۱.۰۶۶	۴۸	۴۳.۳۳۰.	۴۱.۴۱۶
۲۶	۷۴۲.۳۹	۰۳۳۳.۴۵	۵۳۳.۴۴	۵۲	۹۴۴.۴۶	۸۲۷.۴۴
۲۸	۱۰۷.۴۳	۴۹۷.۴۸	۰۰۰.۴۸	۵۶	۵۵۵.۵۰	۲۷۸.۴۸
۳۰	۷۰۴.۴۵	۹۶۲.۵۱	۴۶۶.۵۱	۶۰	۱۶۷.۵۴	۷۲۸.۵۱
۳۲	۱۵۰.۴۹	۴۲۵.۵۵	۹۳۳.۵۴	۶۴	۷۷۸.۵۷	۱۷۹.۵۵
۵۰	۵۷۹.۷۷	۶۰۲.۸۶	۱۲۰.۸۶	۱۰۰	۰۰۰.۶۵	۰۸۰.۶۲
۶۰	۱۶۲.۹۳	۹۲۳.۱۰۳	۴۴۴.۱۰۳	۱۲۰	۳۳۳.۱۰۸	۴۸۸.۱۰۳
۷۶	۳۲۶.۱۱۸	۶۳۶.۱۳۱	۱۶۰.۱۳۱	۱۲۵	۲۲۲.۱۳۷	۰۹۳.۱۳۱
۸۰	۶۱۷.۱۲۱	۱.۱۳۵	۰۸۹.۱۳۸	۱۵۶	۸۳۳.۱۴۰	۵۴۳.۱۳۴
۱۸۰	۰۶۶.۲۸۲	۷۶۹.۳۱۱	۳۰۰.۳۱۱	۳۶۰	۰۰۰.۳۲۵	۵۲۵.۳۱۰
۲۴۰	۵۳۵.۳۷۶	۶۹۲.۴۱۵	۲۲۴.۴۱۵	۴۸۰	۳۳۳.۴۳۳	۰۴۳.۴۱۴
۳۲۰	۸۳۱.۵۰۲	۲۵۶.۵۵۴	۷۸۹.۵۵۳	۶۴۰	۷۷۸.۵۷۷	۰۶۷.۵۵۲
۵۴۰	۹۲۴.۸۴۸	۳۰۷.۹۳۵	۸۴۲.۹۳۴	۱۰۸۰	۰۰۰.۹۷۵	۶۳۶.۹۳۱

فصل ۳

وابستگی انرژی گراف بر ساختار شبکه

۱.۳ مقدمه

در این فصل هدف ما بررسی این است که چگونه انرژی یک گراف برای شبکه‌های با مقیاس آزاد و منتظم، وابسته به ساختار توپولوژیک خود می‌باشد. در ابتدا، طیف و انرژی‌های چند گراف ساده‌ی منتظم به دقت محاسبه شده و برای مقادیر ویژه‌ی ماتریس مجاورت گراف‌های منتظم با درجه‌ی k که $k = 2^a$ ($a = 1, 2, 3, \dots$) مقادیری دقیق بیان شده است. هم‌چنین دریافت شده که گرافی با مقدار k حدودی $\approx 8N$ دارای بیشترین انرژی در گراف‌های منتظم با اندازه‌ی یکسان و روش محاسبه یکسان می‌باشد. علاوه بر این‌ها، انرژی شبکه‌های پراکنده با مقیاس و اندازه‌ی آزاد دارای درجه متوسط متفاوت $\langle k \rangle$ و توان توزیعی درجه‌ای χ را بررسی می‌کنیم. هنگامی که γ مشخص شده است، انرژی یک تابع از $\langle k \rangle$ با توان عددی ≈ 5 می‌باشد. هنگامی که $\langle k \rangle$ ثابت باشد، انرژی با γ متناسب است در غیر این صورت، درمی‌یابیم که انرژی تابعی کم‌توان از واریانس دنباله‌ای از درجات نمایی است که تا حدی بستگی به اندازه‌ی شبکه دارد. جالب است، هنگامی که هر دوی $\langle k \rangle$ و γ مشخص شده‌اند، یک ارتباط خطی مربوط به ارتباط میان انرژی و اندازه سیستم وجود خواهد داشت. مطالب این فصل برگرفته از مرجع [۴۰] است.

یادآوری می‌کنیم که انرژی گراف، که به عنوان مجموع قدر مطلق مقادیر ویژه‌ی ماتریس مجاورت تعریف شده است، از شیمی ناشی می‌شود که از آن برای تخمینی برای انرژی π الکترون

از مولکول‌ها استفاده می‌شود [۱۳]. این تعریف ابتدا در سال‌های ۱۹۷۰ ظاهر شد [۱۱] و بعداً در کتاب [۱۲] پیشنهاد شد. تحقیقات مربوط به انرژی گراف به سال‌های ۱۹۳۰ بر می‌گردد یعنی زمانی که دانشمند آلمانی اریچ هاچل^۱، روشی را پیشنهاد داد تا به طور تقریبی معادله شرودینگر^۲ از طبقه‌ی مولکول‌های آلی حل شود [۳۱، ۳۷، ۵]. وی به یک رابطه برای انرژی کلی تمامی π الکترون‌ها دست یافت. بر طبق این بیانیه ایوان گاتمن^۳ برآورد کرد که انرژی برابر است با دو برابر مجموع مقادیر ویژه‌ی مثبت. او با بررسی تقارن مقادیر ویژه‌ی هر گراف، بیان انرژی گراف را به مجموع قدر مطلق تمام مقادیر ویژه تغییر داد که تنها تعریفی صوری بود و دارای معنای فیزیکی روشنی نبود.

برای رده‌بندی گراف‌ها بر طبق انرژی، یک گراف متناهی و غیرجهت دار G با N رأس یک گراف پیرانرژی نامیده می‌شود هرگاه انرژی آن از $2(N-1)$ بزرگ‌تر باشد [۱۴] که با انرژی یک گراف کامل روی رئوس N متناظر است. اگر انرژی گراف همبند G کمتر از N باشد (که مربوط می‌شود به گراف ایجاد شده توسط $\frac{N}{2}$ یال‌های جدا شده یا $\frac{N}{4}$ مربع‌های جدا)، آن‌گاه گراف را یک گراف کم‌انرژی می‌نامند [۱۵]. دیگر گرانی که به گراف کم‌انرژی عنوان می‌شود، گراف قویا کم‌انرژی معرفی می‌شود به طوری که انرژی آن از $(N-1)$ کمتر است [۳۲]. جالب توجه این است که در مقایسه با تمامی گراف‌های همبند با رئوس یکسان، گراف ستاره با n رأس دارای کمترین انرژی $2\sqrt{N-1}$ است.

تاکنون تحقیقات در مورد انرژی گراف و همچنین در تعیین کران‌هایی از انرژی برای برخی گراف‌های خاص ادامه داشته است. برای مثال کولن^۴ و مولتون^۵ ثابت کردند که انرژی گراف G روی رئوس N بیش از $\frac{N}{4}(1+\sqrt{N})$ نبوده است [۲۱]. هنگامی که هر دوی N و یال‌های m از گرانی مشخص شده باشند، انرژی گراف کمتر یا مساوی $\sqrt{2mN}$ خواهد بود [۲۶]. دیگر کران‌های انرژی گراف در ارجاعات آمده است [۱۶، ۲۲، ۲۸، ۳۸، ۳۹، ۱۷، ۲۵]. با این حال، اگر چه برخی از کران‌های انرژی برای گراف‌هایی به خوبی توسعه یافته‌اند، اما با توجه به ارتباط میان انرژی و ساختار گراف‌ها، تعداد نسبتاً کمی شناخته شده‌اند.

در این فصل هدف ما کشف وابستگی انرژی گراف روی ساختار اصلی گراف است. در بخش بعدی، به طور دقیق طیف و انرژی‌های برخی از گراف‌های ساده و k -منتظم را بررسی و محاسبه می‌کنیم و رابطه‌ی میان انرژی و درجه‌ی k برای گراف‌های منتظم نیز در این فصل مورد مطالعه قرار می‌گیرد. همچنین برخی از توضیحات برای انرژی گراف با توجه به پارامترهای توپولوژیکی شبکه‌های پراکنده با مقیاس آزاد آمده است.

^۱Erich Huckel
^۲Schrodinger

^۳I. Gutman
^۴Koolen

^۵Moulton

۲.۳ طیف گراف برای برخی گراف‌های منتظم

در ابتدا به بررسی چند گراف ساده و منتظم می‌پردازیم که با تمامی رأس‌های قرار گرفته در یک حلقه و تمامی یال‌های شکل گرفته توسط نزدیکترین اتصالات مجاور ایجاد شده است. در این فصل، به سختی طیف مقدار ویژه‌ی ماتریس مجاورت را برای برخی گراف‌های منتظم با درجه‌ی رأس k محاسبه کردیم. در ابتدا، برای گراف‌های منتظم با $k = 2$ (شکل ۱.۳ (a)) را مشاهده کنید) مقادیر ویژه‌ی ماتریس مجاورت توسط معادله زیر بیان شده است،

$$\{\lambda_i\}_0^{N-1} = 2 \cos \left[\frac{2\pi i}{N} \right] \quad (1.3)$$

که N تعداد رأس‌هاست بنابراین، برطبق تعریف انرژی گراف می‌توانیم انرژی \mathcal{E} را به دست آوریم:

$$\mathcal{E} = \sum_{i=0}^{N-1} 2 \left| \cos \left[\frac{2\pi i}{N} \right] \right| = \frac{4N}{\pi}. \quad (2.3)$$

برای گراف منتظم با $k = 4$ (شکل ۱.۳ (b)) را مشاهده کنید) مقادیر ویژه برابر است با:

$$\{\lambda_i\}_0^{N-1} = 4 \cos \left[\frac{\pi i}{N} \right] \cos \left[\frac{2\pi i}{N} \right], \quad (3.3)$$

و انرژی گراف $\frac{3\sqrt{3}N}{\pi}$ می‌باشد. برای موردهای $k = 6$ و $k = 8$ که ساختار توپولوژیک آن‌ها در شکل ۱.۳ (c) و شکل ۱.۳ (d) نشان داده شده‌اند، مقادیر ویژه برابر با:

$$\{\lambda_i\}_0^{N-1} = 2 \cos \left[\frac{6\pi i}{N} \right] + 4 \cos \left[\frac{\pi i}{N} \right] \cos \left[\frac{3\pi i}{N} \right], \quad (4.3)$$

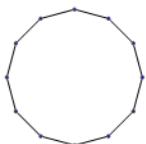
و

$$\{\lambda_i\}_0^{N-1} = 8 \cos \left[\frac{\pi i}{N} \right] \cos \left[\frac{2\pi i}{N} \right] \cos \left[\frac{5\pi i}{N} \right]. \quad (5.3)$$

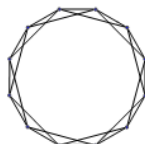
همچنین انرژی‌های گراف متناظر به ترتیب $\frac{32\sqrt{3}-6\sqrt{3}}{6\pi}$ و $\frac{(5 \sin[\frac{\pi}{6}] + 25 \sin[\frac{5\pi}{6}] - 8)N}{3\pi}$ می‌باشند. بنابراین برای گراف‌های منتظم با $k = 2a$ ، که a یک عدد صحیح است، به یک معادله‌ی دقیق برای مقادیر ویژه‌ی ماتریس مجاورت می‌رسیم یعنی:

$$\{\lambda_i\}_0^{N-1} = k \cos \left[\frac{\pi i}{N} \right] \cos \left[\frac{2\pi i}{N} \right] \cos \left[\frac{4\pi i}{N} \right] \cos \left[\frac{8\pi i}{N} \right] \dots \cos \left[\frac{(\frac{k}{2} + 1)\pi i}{N} \right], \quad (6.3)$$

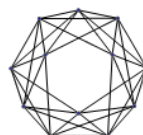
که در آن تعداد تابع $\cos[\dots]$ برابر با a است.



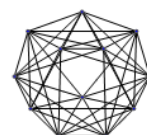
(a) $k = 2$



(b) $k = 4$



(c) $k = 6$



(d) $k = 8$

شکل ۱.۳: ساختار توپولوژیک برخی از گراف‌های منتظم که توسط تمامی رئوس قرار گرفته در یک حلقه و تمامی یال‌های تشکیل شده توسط نزدیکترین اتصالات ایجاد شده است.

در سال ۱۹۷۸ ایوان گاتمن^۶، حدسی را مطرح کرد تا بتواند این مسئله را تشریح کند که یک گراف کامل دارای ماکزیمم انرژی می‌باشد [۱۱]. با این حال، خیلی زود این حدس و توسط مثال‌های نقض، رد شد [۶]. در این فصل، بررسی می‌کنیم برای آن دسته گراف‌های منتظم با روش تولیدی یکسان، انرژی کدام یک از گراف‌ها در اول طبقه بندی قرار می‌گیرند. شکل ۲.۳ (a) توزیع انرژی گراف \mathcal{E} را در تغییر k برای مقادیر مختلف N نشان می‌دهد. توجه می‌کنیم که در منحنی تغییر انرژی گراف برای هر N یک پیک^۷ وجود دارد. زمانی که شبکه بسیار پراکنده است، انرژی گراف \mathcal{E} با افزایش k به‌طور یکنواخت بالا می‌رود. با افزایش کمی شدت، انرژی \mathcal{E} با k متناسب خواهد شد اما با کمی نوسان همراه است. با این حال، هنگامی که شبکه شدیداً متراکم می‌شود، انرژی به شدت افت می‌کند و مقدار k که متناظر با بیشترین انرژی گراف است، حدود $0.8N$ می‌شود. شکل ۲.۳ (b) نتایج نرمال شده برای گراف سمت چپ را نمایش می‌دهد. این شکل نشان می‌دهد که در حالی که شبکه‌ی منتظم بسیار پراکنده است، انرژی گراف نرمال شده از تابع کم‌توان k پیروی می‌کند که توسط $\mathcal{E}/\mathcal{E}(k=2) = 0.977k^{0.214}$ بیان می‌شود و دو پارامتر در این تابع تقریباً مستقل از اندازه سیستم هستند. به‌طور ویژه شایان ذکر است که انرژی گراف متناظر با گراف کامل ($k = N - 1$) یا زیر گراف کامل ($k = N - 2$) معادل با $2k$ است.

۳.۳ برخی نتایج در شبکه‌های پراکنده با مقیاس آزاد

همبستگی میان انرژی و میانگین درجه، توسط $\langle k \rangle$ بیان شده، در اول این بخش تشریح و در شکل ۳.۳ به نمایش گذاشته شده است، که انرژی نرمال شده را به عنوان تابعی از $\langle k \rangle$ برای دو موقعیت γ با $2/5$ و $6/10$ (γ توان درجه‌ی توزیع شبکه‌ی مورد نظر است) نمایش می‌دهد. خط رابط یک تابع کم‌توان را میان \mathcal{E} و $\langle k \rangle$ بیان می‌کند که می‌تواند به‌صورت زیر بیان شود،

$$\mathcal{E}/\mathcal{E}(\langle k \rangle = 3) = 0.570 \langle k \rangle^{0.502}, \quad (7.3)$$

که در این معادله، سه پارامتر تقریباً مستقل از مقدار γ است و این تا زمانی که مقدار $\langle k \rangle$ پایین باشد. علاوه بر این، تاثیر توان درجه γ روی انرژی گراف نیز مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است. طرح‌های بیان‌گر توزیع انرژی گراف نرمال شده برای اندازه‌های مختلف شبکه در شکل ۴.۳ نشان داده شده است که دیدگاهی شهودی را برای درک روابط نسبی میان γ و \mathcal{E} بیان می‌کند و این تا زمانی است که γ خیلی بزرگ نباشد. زمانی که مقدار γ به ۷ برسد، به‌خصوص برای سیستم‌های کوچکتر، کف انرژی (پایین‌ترین مقدار) در توزیع انرژی به وضوح پدیدار می‌شود. کف با شبکه‌هایی با یک ساختار منتظم در تطابق است. به‌طور بدیهی برای سیستم‌های بزرگ، مقدار γ در یک شبکه با ساختار منتظم بزرگ‌تر خواهد بود. به‌طور کلی، وابستگی انرژی گراف بر توان γ با افزایش مقدار N بیشتر خواهد شد.

^۶Ivan Gutman

^۷peak

به بیان دیگر، همبستگی میان انرژی گراف و توزیع درجات می‌تواند با ارتباط میان آن و واریانس دنباله درجات تفسیر شود. واریانس با نماد D و به صورت تعریف شده است:

$$D = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (k_i - \langle k \rangle)^2, \quad (۸.۳)$$

جایی که k_i به معنی درجه i ام عامل است.

برای تحلیل تاثیر واریانس دنباله درجات بر تغییرپذیری انرژی گراف، تغییر نسبی انرژی گراف را پیشنهاد می‌کنیم که با نماد $\delta\mathcal{E}$ نشان داده می‌شود. $\delta\mathcal{E}$ به صورت $(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{max})/\mathcal{E}_{max}$ تعریف شده، که \mathcal{E}_{max} نشان دهنده انرژی گراف با شرایطی که D نزدیک به صفر باشد، است و با یک توزیع یکنواخت درجه مطابقت دارد. شکل ۵.۳ نشان می‌دهد که چگونه تغییر نسبی انرژی گراف به واریانس درجات برای مقادیر مختلف N وابسته است. این تصویر از توزیع انرژی بیانگر یک همبستگی کم‌توان بین $\delta\mathcal{E}$ و D است که توسط تابع زیر قابل نمایش می‌باشد:

$$\mathcal{E}\delta = -\gamma D^\beta. \quad (۹.۳)$$

شکل ۶.۳ وابستگی پارامترهای γ و β را در معادله‌ی (۹.۳) بر اندازه سیستم N نشان می‌دهد. در این جا خط اتصال انرژی ضعیف، به ارتباط میان پارامترهای β و N بستگی دارد که توسط $\beta = 1.251 N^{-0.75}$ قابل بیان است. مطابق با شکل ۶.۳ (b) قابل توجه است که پارامتر γ با افزایش N تقریباً هیچ تغییری نمی‌کند و دارای یک مقدار ثابت نزدیک ۰/۱۳ است. پس می‌توانیم به راحتی نتیجه بگیریم که وابستگی تغییرپذیری انرژی گراف روی واریانس دنباله درجات با افزایش N خواهد شد.

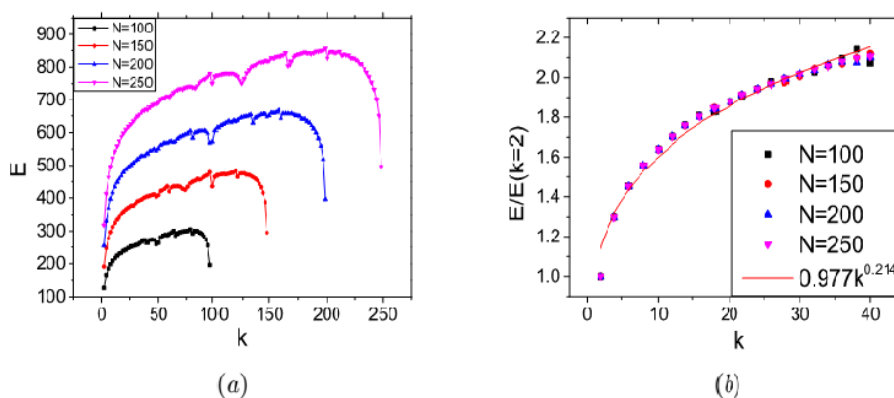
درباره‌ی ارتباط خطی میان انرژی گراف و اندازه‌ی سیستم برای گراف‌های منتظم (تمامی رأس‌ها در یک حلقه جای گرفته‌اند و تمامی یال‌ها توسط نزدیکترین اتصالات ایجاد شده‌اند) با درجه مشخص k از دیدگاه تئوری اطلاعاتی پیدا کرده‌ایم. به‌طور مشابه، توزیع انرژی گراف را روی N با میانگین درجه مشخص شده $\langle k \rangle$ و توان درجه γ مطالعه می‌کنیم. (شکل ۷.۳). را ببینید. این تصویر بیان می‌کند که انرژی نیز به‌طور خطی با N برای هر مقدار γ افزایش می‌یابد. یعنی:

$$\mathcal{E} \propto \alpha N, \quad (۱۰.۳)$$

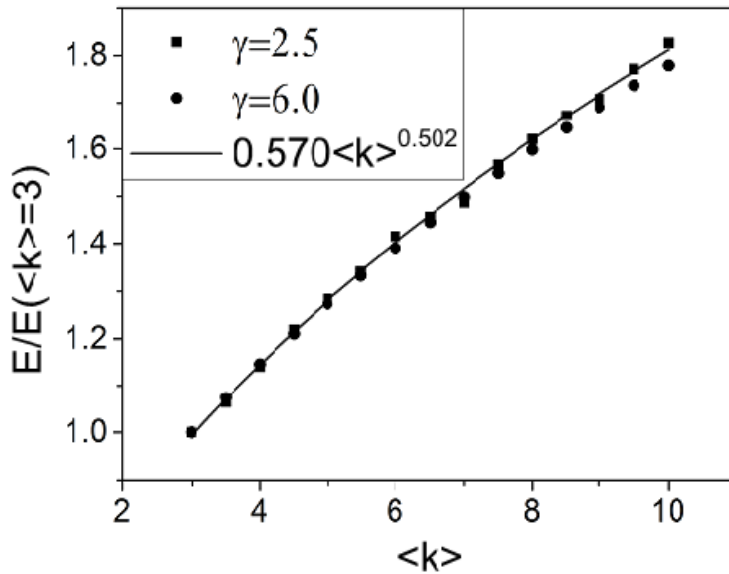
و α با γ افزایش می‌یابد هنگامی که بر طبق شکل ۷.۳، γ کوچک است. این یک هم‌پوشی (اشتراک) نتایج تحت شرایط $\gamma = 6/0$ و $\gamma = 8/0$ بر حسب توزیع یکنواخت درجه است (یعنی شبکه‌ی متناظر، منتظم است) و زمانی رخ می‌دهد که γ به $6/0$ برسد. با افزایش مقدار γ از ۶ به بالا، ساختار شبکه به سختی تغییر می‌کند.

۴.۳ نتیجه گیری

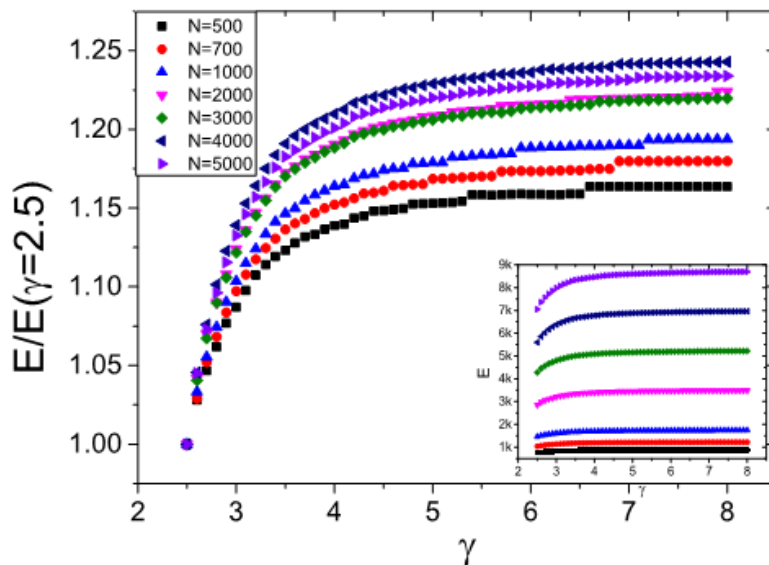
ابتدا به طور دقیق انرژی گراف‌های منتظم برای رأس‌های با درجه k کم را محاسبه کردیم و یک فرمول دقیق برای مقادیر ویژه‌ی گراف‌های منتظم با $k = 2^a$ ($a = 1, 2, 3, \dots$) نتیجه گرفته شد. همچنین دریافتیم که گراف با مقدار k حدود $0.8N$ دارای بیشترین انرژی برای گراف‌های منتظم با مقدار N مشخص است (گراف‌ها طوری ایجاد شده‌اند که تمامی رأس‌ها روی یک حلقه و تمامی یال‌ها روی نزدیکترین اتصالات مجاور واقع شده‌اند). در نتیجه، وابستگی انرژی را روی ساختار گراف، مانند میانگین درجه، توان درجه و واریانس درجه برای شبکه پراکنده‌ی مقیاس آزاد بررسی کردیم. نتایج حاکی از آن است که انرژی گراف، تابعی کم‌توان از میانگین درجه $\langle k \rangle$ است هنگامی که توان درجه γ ثابت است و نیز انرژی گراف تابعی کم‌توان از واریانس درجه D است هنگامی که $\langle k \rangle$ مقداری مشخص است. همچنین وابستگی انرژی گراف به توان درجه با افزایش مقدار N بیشتر و شدیدتر خواهد شد در حالی که وابستگی بر واریانس درجه کاملاً بر عکس است. بیان این نکته حائز اهمیت است که انرژی همواره به صورت خطی با اندازه سیستم در گراف‌های منتظم با مقیاس آزاد افزایش می‌یابد.



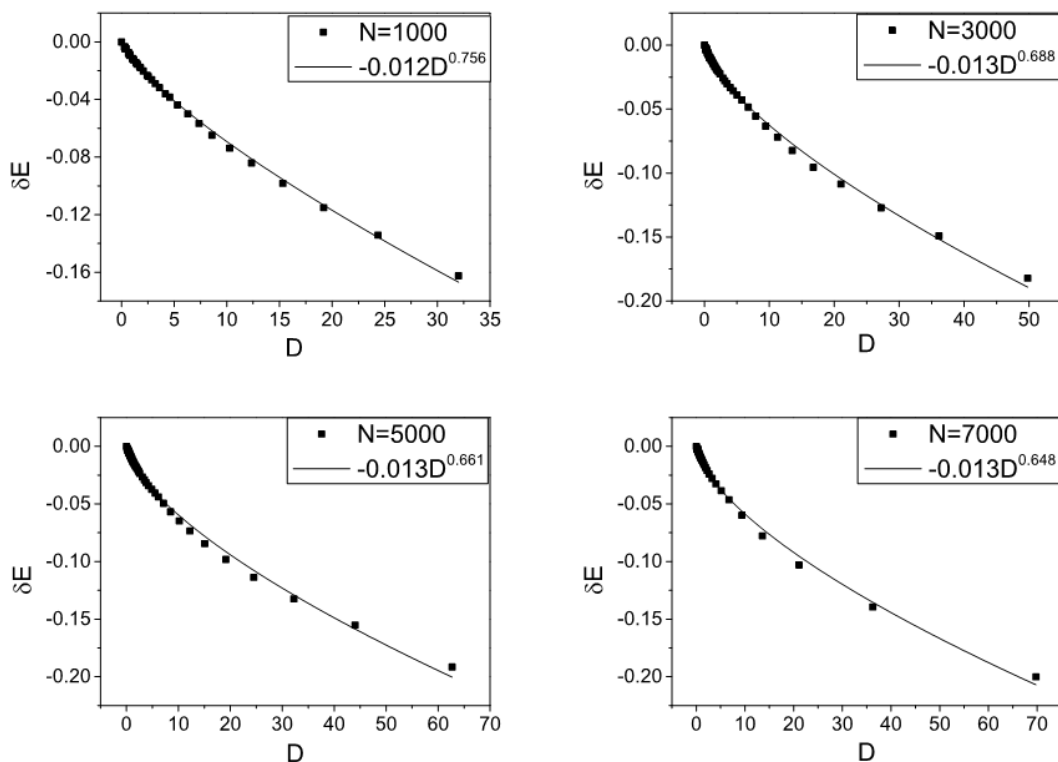
شکل ۴.۳: (a) وابستگی انرژی گراف E به درجه k برای مقادیر مختلف N را نشان می‌دهد. (b) نشان دهنده یک هم‌بستگی کم‌توان بین E و k هنگامی که k کوچک است، می‌باشد.



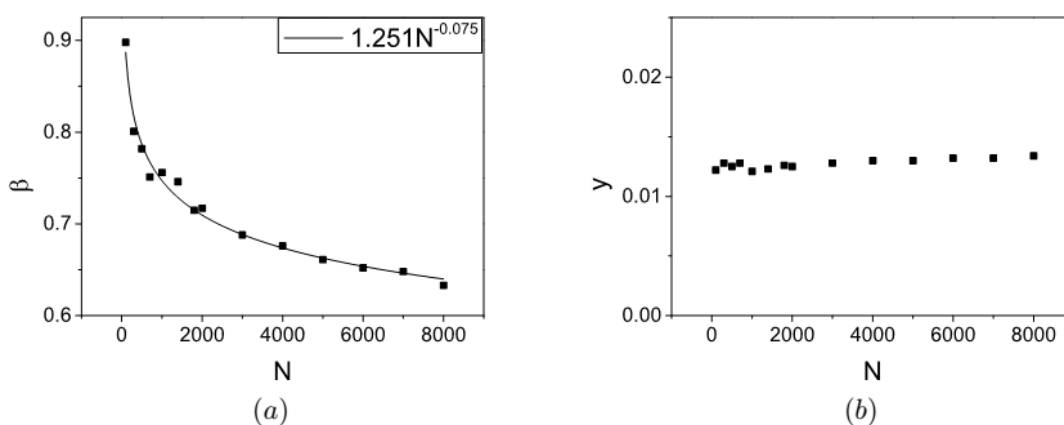
شکل ۳.۳: انرژی گراف نرمال شده به عنوان تابعی از میانگین درجه‌ی $\langle k \rangle$ برای موارد $\gamma = 2.5$ (مربع‌ها) و $\gamma = 6.0$ (دایره‌ها) با $N = 1000$ را نشان می‌دهد. خط ثابت یک خط مناسب کم‌توان است برای موردی که γ برابر با 2.5 می‌باشد.



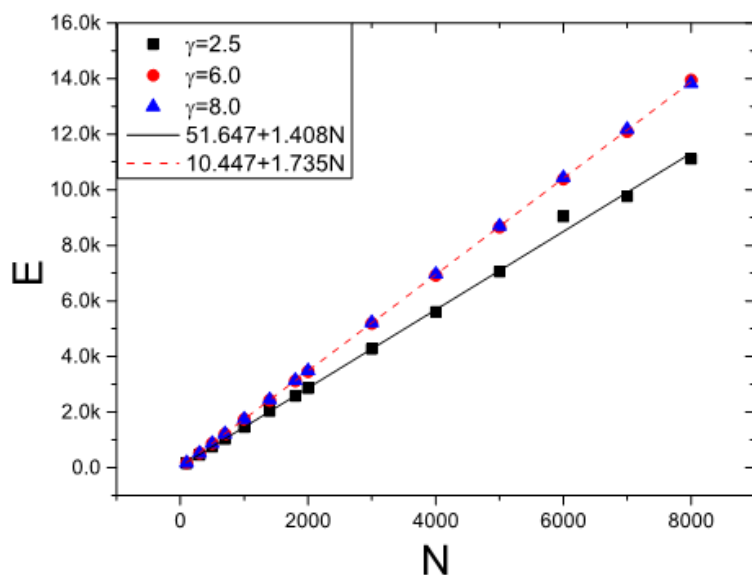
شکل ۴.۳: نشان‌دهنده توزیع انرژی گراف نرمال شده وابسته به γ برای چند مقدار مشخص از N . تصویر الحاقی بیانگر توزیع انرژی گراف قبل از نرمال شدن آن است.



شکل ۵.۳: تغییر نسبی ΔE به عنوان تابعی از D برای سیستم‌های با اندازه متفاوت و میانگین درجه $\langle k \rangle$.



شکل ۶.۳: (a) نشان دهنده توزیع توان β در معادله (۹.۳) با تغییر N برای میانگین درجه $\langle k \rangle$. (b) نشان دهنده وابستگی دیگر پارامتر γ در معادله (۹.۳) به N است. همان‌طور که روی شکل قابل مشاهده است، به سختی ارتباطی میان پارامتر γ و N وجود دارد.



شکل ۷.۳: توزیع انرژی گراف در تغییر اندازه سیستم N با میانگین درجه $\langle k \rangle = 4$ را نشان می‌دهد. مربع‌ها با $\gamma = 2/5$ ، هم‌چنین دایره‌ها و مثلث‌ها به ترتیب با $\gamma = 6/10$ و $\gamma = 8/10$ مطابقت دارند.

فصل ۴

بررسی برخی از گراف‌های هم‌انرژی، فراانرژی و فروانرژی

در این فصل به بررسی برخی از گراف‌های هم‌انرژی، فراانرژی و فروانرژی می‌پردازیم. در ابتدا یادآوری می‌کنیم که دو گراف غیریکریخت را هم‌طیف می‌نامند هرگاه دارای مقادیر ویژه یکسانی باشند. دو گراف غیریکریخت G_1 و G_2 را هم‌انرژی می‌نامند هرگاه $\mathcal{E}(G_1) = \mathcal{E}(G_2)$ به طوری که $\mathcal{E}(G)$ نشان‌دهنده انرژی گراف G می‌باشد. رامانه^۱ و هم‌کارانش در [۲۹] نشان دادند که اگر G_1 و G_2 گراف‌هایی منتظم از مرتبه یکسان باشند، آن‌گاه برای $k \geq 2$ ، گراف‌های $L^k(G_1)$ و $L^k(G_2)$ ، هم‌چنین گراف‌های $L^k(G_1)$ و $L^k(G_2)$ هم‌انرژی هستند، که $L(G)$ نشان‌دهنده گراف خطی G می‌باشد. در سال ۱۹۷۸ گاتمن^۲ حدس زد [۱۱] که از میان گراف‌های از مرتبه n ، گراف کامل K_n ماکزیمم انرژی را دارد. بعدها والیکار^۳ مفهوم جدیدی به نام گراف‌های فراانرژی را تعریف کرد [۳۶] که انرژی آن‌ها بزرگتر از انرژی گراف کامل است. گاتمن در [۱۴] ثابت کرد که برای هر $n \geq 8$ گراف‌های فراانرژی روی n رأس وجود دارد و هیچ گراف فراانرژی کمتر از ۸ رأس وجود ندارد.

یک گراف روی n رأس را فروانرژی می‌نامند هرگاه $\mathcal{E}(G)$ آن کمتر از مرتبه‌اش باشد، در غیر این صورت آن را غیرفروانرژی گویند. در سال ۲۰۰۷ گاتمن در [۱۷] ثابت کرد که اگر گراف G منتظم غیرتهی باشد، آن‌گاه گراف G غیرفروانرژی است. در این فصل تعدادی از خانواده

^۱Ramane

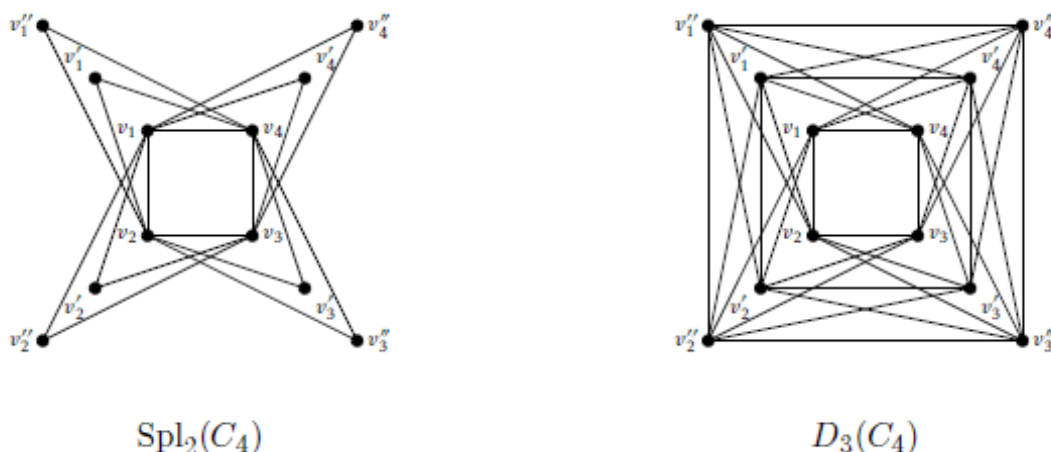
^۳Walikar

^۲Gutman

گراف‌های فرانرژی و فروانرژی را معرفی می‌کنیم.

گراف قطعه‌ای^۴ $S'(G)$ از گراف G از اضافه کردن رأس v' متناظر با v به طوری که v' مجاور است با هر رأسی که مجاور v است، حاصل می‌شود. گراف سایه‌ای^۵ $D_\gamma(G)$ از گراف همبند G به این صورت ساخته می‌شود که در ابتدا دو کپی از گراف G را که با G' و G'' نشان می‌دهیم در نظر بگیریم، سپس هر رأس u' در G' را به همسایه‌های رأس متناظر آن u'' در G'' متصل کنید. در [۳۴] ثابت شده است که برای هر گراف G همواره رابطه‌های $\mathcal{E}(S'(G)) = \sqrt{5}\mathcal{E}(G)$ و $\mathcal{E}(D_\gamma(G)) = 2\mathcal{E}(G)$ برقرار است.

گراف قطعه‌ای m ام، که با نماد $Spl_m(G)$ نمایش داده می‌شود، به این صورت از گراف G ساخته می‌شود که m رأس v_1, v_2, \dots, v_m برای هر رأس v اضافه شود به طوری که v_i برای هر $1 \leq i \leq m$ با هر رأس مجاور مجاور باشد. گراف سایه‌ای m ام، که با نماد $D_m(G)$ نمایش داده می‌شود، به این صورت از گراف همبند G ساخته می‌شود که m کپی G_1, G_2, \dots, G_m از G را در نظر گرفته، سپس هر رأس u در G_i را به همسایه‌های رأس متناظر آن در G_j برای $1 \leq i, j \leq m$ متصل کنید.



شکل ۱.۴: نمودار گراف‌های $Spl_2(C_4)$ و $D_3(C_4)$

۱.۴ گراف‌های فرانرژی و فروانرژی

قضیه ۱.۱.۴. [۳۳] رابطه زیر همواره برقرار است،

$$\mathcal{E}(Spl_m(G)) = \sqrt{1 + 4m}\mathcal{E}(G).$$

قضیه ۲.۱.۴. [۳۳] رابطه زیر همواره برقرار است،

$$\mathcal{E}(D_m(G)) = m\mathcal{E}(G).$$

قضیه ۳.۱.۴. [۳۵] گراف‌های $Spl_2(G)$ و $D_3(G)$ هم‌انرژی هستند.

^۴Splitting graph

^۵Shadow graph

$$A(\text{Spl}_2(C_4)) = \begin{matrix} & v_1 & v_2 & v_3 & v_4 & v'_1 & v'_2 & v'_3 & v'_4 & v''_1 & v''_2 & v''_3 & v''_4 \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v'_1 \\ v'_2 \\ v'_3 \\ v'_4 \\ v''_1 \\ v''_2 \\ v''_3 \\ v''_4 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

برهان. گیریم G گرافی از مرتبه n باشد. در این صورت گراف‌های $\text{Spl}_2(G)$ و $D_3(G)$ از مرتبه $3n$ هستند. بنابر قضیه‌های ۱.۱.۴ و ۲.۱.۴ داریم،

$$\mathcal{E}(\text{Spl}_2(G)) = \sqrt{1 + 4(2)\mathcal{E}(G)} = 3\mathcal{E}(G) = \mathcal{E}(D_3(G)).$$

□

مثال ۱.۱.۴. [۳۵] گراف‌های $\text{Spl}_2(C_4)$ و $D_3(C_4)$ را در نظر بگیرید.

می‌دانیم که $\mathcal{E}(C_4) = 4$. بنابر قضیه‌های ۱.۱.۴ و ۲.۱.۴ داریم

$$\mathcal{E}(\text{Spl}_2(C_4)) = 4\sqrt{1+8} = 12.$$

همچنین

$$\mathcal{E}(D_3(C_4)) = 3 \times 4 = 12,$$

بنابراین گراف‌های $\text{Spl}_2(C_4)$ و $D_3(C_4)$ هم‌انرژی هستند.

قضیه ۴.۱.۴. [۳۵] گراف $S'(K_n)$ فرانرژی است اگر و تنها اگر $n \geq 6$.

برهان. گراف کامل K_n روی n رأس را در نظر بگیرید. بنابراین $S'(K_n)$ گرافی روی $2n$ رأس است. می‌دانیم که انرژی گراف کامل روی $2n$ رأس برابر $2(2n-1)$ است. اکنون اگر $S'(K_n)$ فرانرژی است، آنگاه داریم،

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(S'(K_n)) > 2(2n-1) &\iff \sqrt{5}(\mathcal{E}(K_n)) > 2(2n-1) \\ &\iff \sqrt{5}(2(n-1)) > 2(2n-1) \\ &\iff n > \frac{\sqrt{5}-1}{\sqrt{5}-2} \\ &\iff n \geq 6. \end{aligned}$$

$$A(D_3(C_4)) = \begin{matrix} & v_1 & v_2 & v_3 & v_4 & v'_1 & v'_2 & v'_3 & v'_4 & v''_1 & v''_2 & v''_3 & v''_4 \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v'_1 \\ v'_2 \\ v'_3 \\ v'_4 \\ v''_1 \\ v''_2 \\ v''_3 \\ v''_4 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}.$$

□

مثال ۲.۱.۴. [۳۵] گراف‌های K_6 و $S'(K_6)$ را در نظر بگیرید.

بنابراین

$$\text{spec}(S'(K_6)) = \begin{pmatrix} \frac{-1+\sqrt{5}}{4} & \frac{-1-\sqrt{5}}{4} & \frac{5+\sqrt{5}}{4} & \frac{5-\sqrt{5}}{4} \\ 5 & 5 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

و از این رو

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(S'(K_6)) = 10\sqrt{5} &\Rightarrow \mathcal{E}(S'(K_6)) > 22 \\ &\Rightarrow \mathcal{E}(S'(K_6)) > \mathcal{E}(K_{12}), \end{aligned}$$

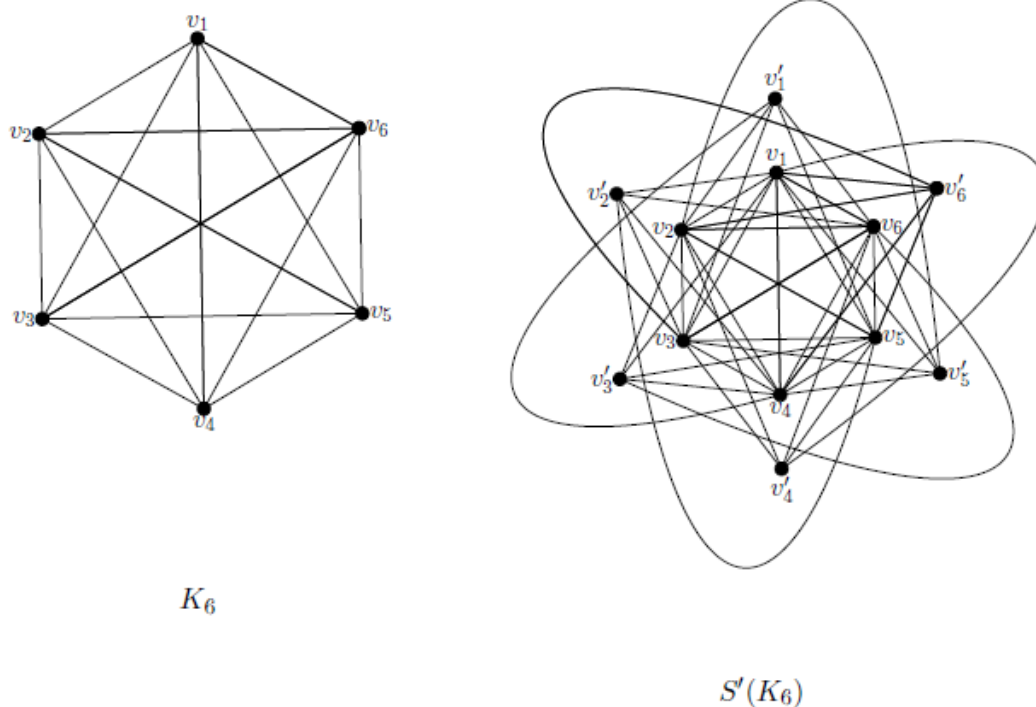
در نتیجه گراف $\mathcal{E}(S'(K_6))$ فرانرژی است. همچنین

$$\text{spec}(D_3(C_4)) = \begin{pmatrix} 6 & -6 & 0 \\ 1 & 1 & 10 \end{pmatrix}$$

و از این رو $\mathcal{E}(D_3(C_4)) = 12$. بنابراین گراف‌های $Spl_2(C_4)$ و $D_3(C_4)$ هم‌انرژی هستند.

نتیجه ۱.۱.۴. [۳۵] گراف‌های $D_3(S'(K_n))$ و $Spl_2(S'(K_n))$ برای $n \geq 9$ گراف‌هایی هم‌فرانرژی هستند (فرانرژی برابری دارند).

برهان. بنابر قضیه ۴.۱.۴، گراف $S'(K_n)$ از مرتبه $2n$ است. بنابراین $D_3(S'(K_n))$ از مرتبه $6n$ است. اثبات فوق نشان می‌دهد که گراف $D_3(S'(K_n))$ فرانرژی است اگر و تنها اگر $n \geq 9$.



شکل ۲.۴: نمودار گراف‌های K_6 و $S'(K_6)$

اگر $D_3(S'(K_n))$ گرافی فراانرژی باشد، آن‌گاه

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(D_3(S'(K_n))) > 2(\mathcal{E}_n - 1) &\iff 3\mathcal{E}(S'(K_n)) > 2(\mathcal{E}_n - 1) \\ &\iff 3\sqrt{5}(E(K_n)) > 2(\mathcal{E}_n - 1) \\ &\iff 3\sqrt{5}(2(n-1)) > 2(\mathcal{E}_n - 1) \\ &\iff n > \frac{3\sqrt{5} - 1}{3\sqrt{5} - 6} \\ &\iff n \geq 9. \end{aligned}$$

بنابراین برای $n \geq 9$ گراف $D_3(S'(K_n))$ فراانرژی است. در نتیجه بنابر قضیه ۳.۱.۴ گراف‌های $D_3(S'(K_n))$ و $Spl_3(S'(K_n))$ برای $n \geq 9$ فراانرژی برابری دارند. \square

قضیه ۵.۱.۴. [۳۵] گراف $D_m(K_{1,n})$ فروانرژی است.

برهان. گراف ستاره $K_{1,n}$ روی n رأس را در نظر بگیرید. در نتیجه $\mathcal{E}(K_{1,n}) = 2\sqrt{n}$. گراف

$$A(S'(K_6)) = \begin{matrix} & v_1 & v_2 & v_3 & v_4 & v_5 & v_6 & v'_1 & v'_2 & v'_3 & v'_4 & v'_5 & v'_6 \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ v'_1 \\ v'_2 \\ v'_3 \\ v'_4 \\ v'_5 \\ v'_6 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$D_m(K_{1,n})$ از مرتبه $m(n+1)$ است. هم‌چنین داریم

$$\begin{aligned} n > 1 &\Rightarrow (n-1)^2 > 0 \\ &\Rightarrow n^2 - 2n + 1 > 0 \\ &\Rightarrow n^2 + 2n + 1 > 4n \\ &\Rightarrow 4n < (n+1)^2 \\ &\Rightarrow 2\sqrt{n} < (n+1) \\ &\Rightarrow m(2\sqrt{n}) < m(n+1). \end{aligned}$$

بنابر قضیه ۲.۱.۴ داریم $\mathcal{E}(D_m(K_{1,n})) = m\mathcal{E}(K_{1,n}) = m(2\sqrt{n}) < m(n+1)$ از این رو گراف $D_m(K_{1,n})$ فروانرژی است. □

مثال ۳.۱.۴. [۳۵] گراف‌های $K_{1,4}$ و $D_2(K_{1,4})$ را در نظر بگیرید. بنابراین

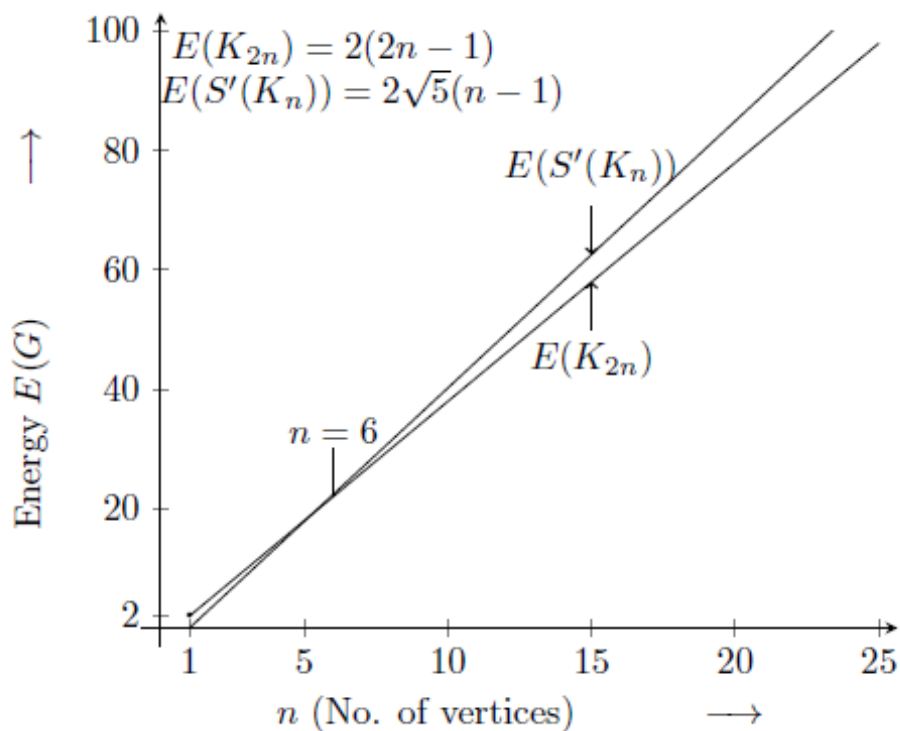
$$\text{spec}(D_2(K_{1,4})) = \begin{pmatrix} 4 & -4 & 0 \\ 1 & 1 & 8 \end{pmatrix}$$

و از این رو

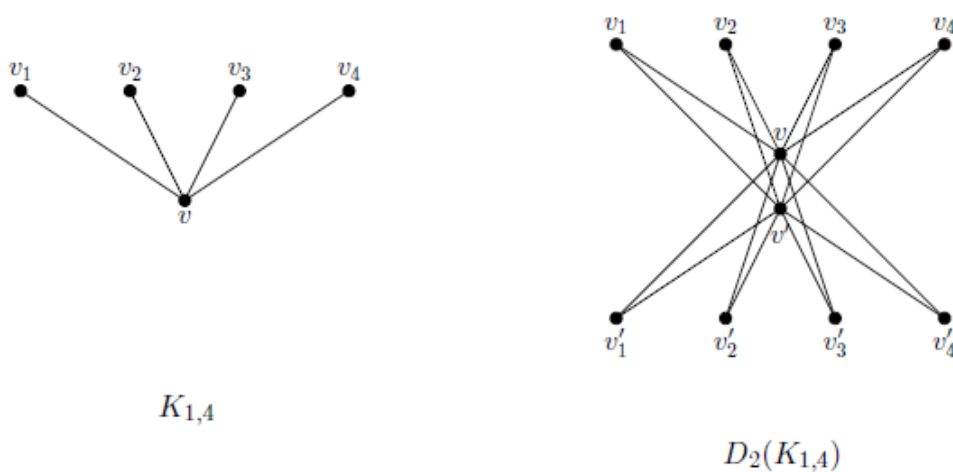
$\mathcal{E}(G)$ که نمودار آن نشان می‌دهد که $D_2(K_{1,n})$ فروانرژی است.

نتیجه ۲.۱.۴. [۳۵] گراف‌های $D_3(K_{1,n})$ و $Spl_2(K_{1,n})$ هم‌فروانرژی هستند (فروانرژی برابری دارند).

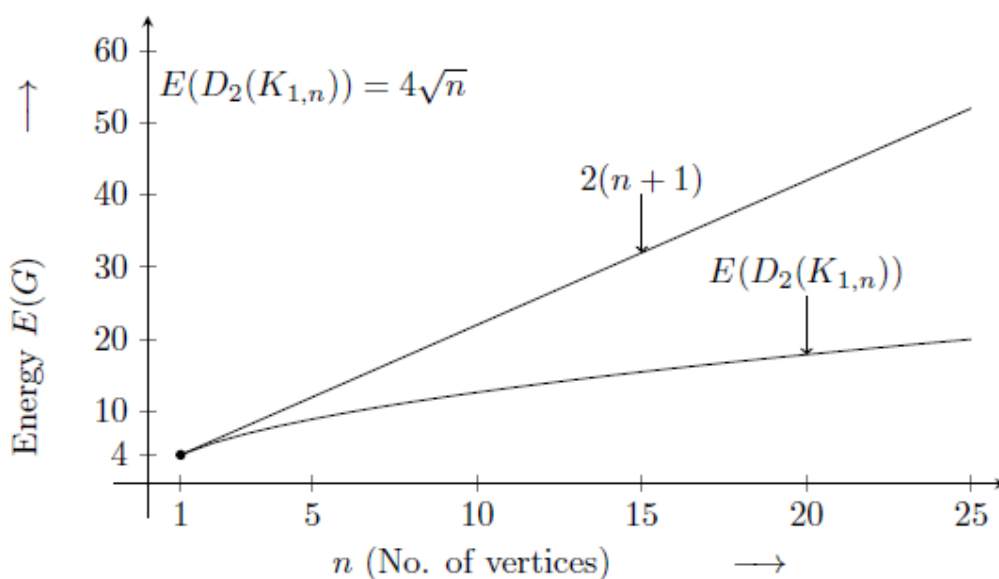
برهان. بنابر قضیه ۵.۱.۴ گراف $D_3(K_{1,n})$ فروانرژی است و بنابر قضیه ۳.۱.۴ گراف‌های $D_3(K_{1,n})$ و $Spl_2(K_{1,n})$ هم‌انرژی هستند. بنابراین گراف‌های $D_3(K_{1,n})$ و $Spl_2(K_{1,n})$ هم‌فروانرژی می‌باشند. □



شکل ۳.۴: مقایسه‌ی انرژی انرژی گراف‌های K_{2n} و $S'(K_n)$ برای تعداد رئوس مختلف



شکل ۴.۴: نمودار گراف‌های $K_{1,4}$ و $D_2(K_{1,4})$



شکل ۵.۴: نمودار تغییرات انرژی گراف $D_2(K_{1,n})$ بر حسب مرتبه‌ی گراف.

$$A(D_2(K_{1,4})) = \begin{matrix} & \begin{matrix} v & v_1 & v_2 & v_3 & v_4 & v' & v'_1 & v'_2 & v'_3 & v'_4 \end{matrix} \\ \begin{matrix} v \\ v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v' \\ v'_1 \\ v'_2 \\ v'_3 \\ v'_4 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

مراجع

- [۱] گرمالدی رالف. پ. (۱۳۷۹)، ”ریاضیات گسسته و ترکیبیاتی“ ترجمه محمدعلی رضوانی و بیژن شمس، انتشارات فاطمی، ۷۶۶ صفحه.
- [۲] کریشن ب. و رانگانتهان ک. (۱۳۸۶)، ”کتاب درسی نظریه گراف“ ترجمه بیژن طائری، جهاد دانشگاهی، ۲۹۰ صفحه.
- [3] Balakrishnan R. (2004), ”The Energy of a Graph” **Lin. Algebra Appl.** 387, 287–295.
- [4] Borovicanin B. and Gutman I. (2009), ”Application of Graph Spectra” **Zbornik Radova, Beograd**, 107–122.
- [5] Coulson C.A. OLeary B. and Mallion R.B. (1978), ”**Hückel Theory for Organic Chemists**”, Academic Press, London.
- [6] Cvetkovi'c D. and Gutman I. (1986) ”The Computer System Graph: A Useful Tool in Chemical Graph Theory” **J. Comput. Chem.** 7, 640–644.
- [7] Cvetkovi'c D, Rowlinson P. Simi'c S. (1997), **Eigenspaces of graphs**. Cambridge: Cambridge University Press.
- [8] Dewar M.J.S. and Jones R. (1969), ”**The Molecular Orbital Theory of Organic Chemistry**”, McGraw-Hill, New York.
- [9] Estrada E. and Knight P.A. (2015), ”**A First Course in Network Theory**”, Oxford University Press, Oxford, UK.
- [10] Estrada E. and Benzi M. (2017), ”What is the meaning of the graph energy after all?” **Discrete Applied Mathematics**, <http://dx.doi.org/10.1016/j.dam.2017.06.007>.
- [11] Gutman I. (1978), ”The energy of a graph” **Ber. Math.-Stat. Sect. Forschungszent. Graz** 103, 1–22.

- [12] Gutman I. (1986), "Mathematical Concepts in Organic Chemistry", Springer-Verlag, Berlin.
- [13] Gutman I. (1977), "Acyclic systems with extremal Hückel pi-electron energy" **Theor. Chim. Acta.** 45, 79–87.
- [14] Gutman I. (1999), "Hyperenergetic molecular graphs" **J. Serb. Chem. Soc.** 64, 199–205.
- [15] Gutman I. (2007), "Hypoenergetic molecular graphs" **Indian J. Chem.** 46, 1733–1736.
- [16] Gutman I. (1996), "On the energy of quadrangle-free graphs" **Coll. Sci. Papers Fac. Sci.Kragujevac** 18, 75–82.
- [17] Gutman I. Firoozabadi S.Z. Antonio J. and Rada J. (2007), "On the energy of regular graphs" **Math. Comput. Chem.** 57, 435–442.
- [18] Higham N.J. (2008), "Functions of Matrices: Theory and Computation", SIAM, USA.
- [19] Hosamani M. and Ramane S. (2016), "On Degree Sum Energy of a Graph", **European J. Pure Appl. Math.** 9(3), 340–345.
- [20] Koolen J.H. Moulton V. and Gutman I. (2000), "Improving the McClelland inequality for total π -electron energy" **Chem. Phys. Lett.** 320, 3, 213–216.
- [21] Koolen J.H. (2001), "Maximal energy graphs" **Adv. Appl. Math.** 26, 47–52.
- [22] Koolen J.H. and Moulton V. (2003), "Maximal energy bipartite graphs" **and Combinatorics.** 19, 131–135.
- [23] Jog S. R. and Kotambari R. (2016), "Degree Sum Energy of Some Graphs," **Annal. Pure Math.** 11(1), 17–27.
- [24] Kinkar C.K. and Gutman I. (2016), "Bounds for the energy of graphs," **Hacettepe J. Math. Stat.** 45(3), 695–703.
- [25] Li X. Shi Y.T. and Gutman I. (2012) "Graph Energy", Springer, New York.
- [26] McClelland B. (1971), "Properties of the latent roots of a matrix: The estimation of pi-electron energies" **J. Chem. Phys.** 54, 640–643.
- [27] Pena J.A. Mendoza L. and Rada J. (2005), "Comparing momenta and π -electron energy of benzenoid molecules" **Discr. Math.** 302, 77–84.

- [28] Rada J. and Tineo A. (2004). "Upper and lower bounds for the energy of bipartite graphs" **J. Math. Anal. Appl.** 289, 446–455.
- [29] Ramane H. S. Gutman I. Walikar H. B. and Halkarni S. B. (2005), "Equienergetic complement graphs" **Kragujevac J. Math.** 27, 67–74.
- [30] Ramane H.S. and Revankar D.S. and Zhou B. (2011), "Bounds for the eigenvalues of a distance matrix of a graph," **Math. Education**, No. 2.
- [31] Streitwieser A. (1961), "**Molecular Orbital Theory for Organic Chemists**", Wiley, New York.
- [32] So W. Robbiano M. Abreu N.M.M. and Gutman I. (2010), "Applications of the Ky Fan theorem in the theory of graph energy" **Lin. Algebra Appl.** 432, 2163–2169.
- [33] Vaidya S.K. and Popat K. M. (2017), "Energy of m-splitting and m-shadow graphs" **Far East Journal of Mathematical Sciences** 102, 1571–1578.
- [34] Vaidya S.K. and Popat K. M. (2017), "Some new results on energy of graphs" **MATCH Commun. Math. Comput. Chem.** 77, 589–594.
- [35] Vaidya S.K. and Popat K. M. (2020), "On equienergetic, hyperenergetic and hypoenergetic graphs," **Kragujevac Journal of Mathematics** 44(4), 523–532.
- [36] Walikar H. B. Ramane H. S. and Hampiholi P. (1999), "On the energy of a graph" in: Balakrishnan R. Mulder H. M. and Vijayakumar A. (Eds.), "Graph Connections" **Allied Publishers New Delhi** 120–123.
- [37] Yates K. (1978), "**Hückel Molecular Orbital Theory**", Academic Press, New York.
- [38] Zhou B. (2004), "On the energy of a graph" **Kragujevac J. Sci.** 26, 5–12.
- [39] Zhou B. Gutman I. Pena J.A. Rada J. and Mendoza L. (2007), "On spectral moments and energy of graphs" **MATCH Commun. Math. Comput. Chem.** 57, 183–191.
- [40] Zhu Y. Li W. Wang Q.A. and Cai X. (2015), "The dependence of graph energy on network structure" **Journal of Physics: Conference Series.** 604, 012024.

واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

Atom	اتم
Electron	الکترون
Energy	انرژی
Distance energy	انرژی فاصله
Cycle	دور
Ring	حلقه
Degree	درجه
Bipartite	دوبخشی
Vertex	رأس
Network	شبکه
Chemistry	شیمی
Spectrum	طیف
Fullerene	فولرن
Hyperenergetic	گراف‌های فراانرژی
Hypoenergetic	گراف‌های فروانرژی
Equienergetic	گراف‌های هم‌انرژی
Graph	گراف
Edge	یال
Matrix	ماتریس
Married	مزدوج
Molecule	مولکول
Adjacency matrix	ماتریس مجاورت
Eigenvalue	مقدار ویژه
Connected	همبند
Neighbour	همسایه
Overlapping	همپوشی

Isomorphic.....یکریخت

واژه‌نامه انگلیسی به فارسی

Atom	اتم
Adjacency matrix	ماتریس مجاورت
Bipartite	دوبخشی
Chemistry	شیمی
Connected	همبند
Cycle	دور
Degree	درجه
Distance energy	انرژی فاصله
Edge	یال
Eigenvalue	مقدار ویژه
Electron	الکترون
Energy	انرژی
Equienergetic graphs	گراف‌های هم‌انرژی
Fullerene	فولرن
Graph	گراف
Hyperenergetic graphs	گراف‌های فراانرژی
Hypoenergetic	گراف‌های فروانرژی
Isomorphic	یکریخت
Married	مزدوج
Matrix	ماتریس
Molecule	مولکول
Network	شبکه
Neighbour	همسایه
Overlapping	همپوشی
Ring	حلقه
Spectrum	طیف

Subgraph زیرگراف

Abstract

The concept of graph energy arose in the context of the study of conjugated hydrocarbons in chemistry, and it used to approximate the total π -electron energy of molecules. It is defined as the sum of the absolute values of eigenvalues of adjacency matrix assigned to a graph G .

In this thesis, first we provide a structural interpretation of the graph energy using the concept of matrix functions. In particular, we prove that the graph energy is given by the sum of the traces of the even powers of the adjacency matrix weighted in a specific way. Using this new representation, we find new bounds for the energy as sums of contributions of subgraphs.

Second, we investigate how the energy of a graph depends upon its underlying topological structure for regular and sparse scale free networks. Moreover, spectra and energies of some classes of graphs are calculated. Moreover, we study some classes of equienergetic, hyper energetic and hypoenergetic graph.

Keywords: Energy; Spectra; Conjugated molecules; matrix functions, topological structure, sparse scale free network; Hyperenergetic; Hypoenergetic; Equienergetic.



Faculty Of Mathematical Sciences

MSc Thesis in Graph and Combinatorics

The meaning of the graph energy and its dependence on network structure

By: Aliasghar Shokoohi Nik

Supervisors:

Dr. Abdollah Alhevaz

Dr. Meysam Alishahi

Advisor:

Prof. Ebrahim Hashemi

October 2019